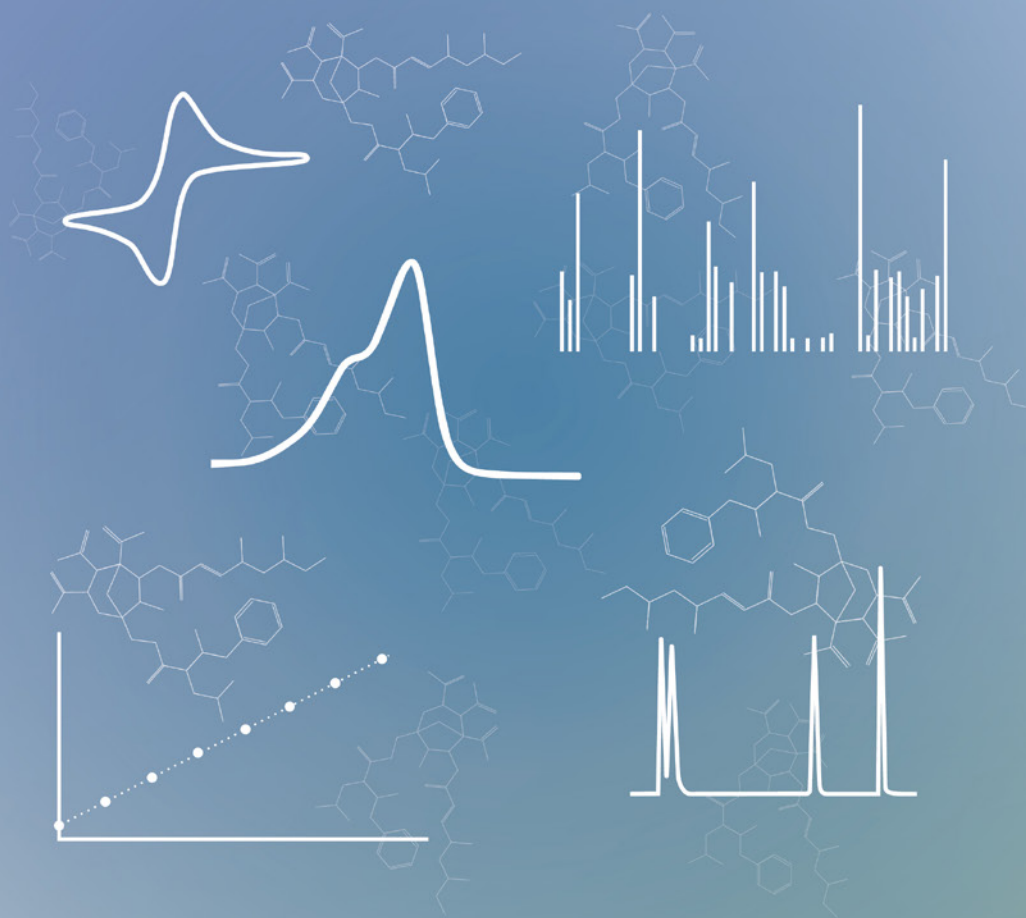


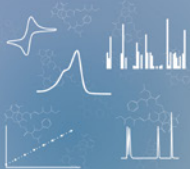
# XXIV Reunión de la SEQA

Sociedad Española de Química Analítica

LIBRO RESÚMENES



ZARAGOZA 1•3 JULIO 2024



# XXIV Reunión de la SEQA

Sociedad Española de Química Analítica



ZARAGOZA 1-3 JULIO 2024

## PATROCINADORES

### PATROCINADORES ESPECIALES



Cátedra Inycom  
Universidad Zaragoza



Inycom

### PATROCINADORES PLATINO



### PATROCINADORES ORO



### PATROCINADORES PLATA

ANÁLISIS VÍNICOS

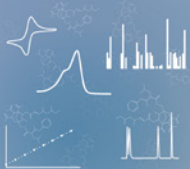


### OTROS PATROCINADORES



### PATROCINADORES DE PREMIOS





# XXIV Reunión de la SEQA

Sociedad Española de Química Analítica



ZARAGOZA 1-3 JULIO 2024

## BIENVENIDA

Queridos colegas,

La Sociedad Española de Química Analítica (SEQA) os da la bienvenida a su XXIV Reunión que en esta ocasión se celebra en Zaragoza. Retomada ya la organización tradicional de los eventos organizados por SEQA, se ha regresado a la distribución de la Reunión Científica y Reunión Docente en años alternos intentando cubrir ambos aspectos de nuestra disciplina de la forma más completa posible. Por ello, en 2023 llevamos a cabo la Reunión Docente en Toledo y hoy nos reunimos en Zaragoza para discutir aspectos de la investigación analítica, mucha y de calidad, desarrollada en nuestro país desde el último encuentro que tuvo lugar en Oviedo.

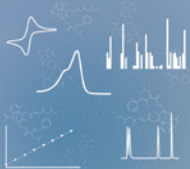
En esta, como en anteriores ediciones, la SEQA ha hecho un esfuerzo para incentivar la participación de nuestros socios más jóvenes porque consideramos que ellos son una apuesta por el futuro de nuestra sociedad, a través de la convocatoria de un centenar de becas de asistencia. Pero deseamos, además, que la SEQA sea para ellos, además de un lugar de encuentro, un foro dinámico que les proporcione información y formación continua a través de las actividades organizadas tanto por la Sociedad como por los Grupos Especializados o a través de los nuevos programas de ayudas para la asistencia a congresos, premios y becas. La Sociedad Española de Química Analítica nació con la misión de promover la química analítica a nivel nacional e internacional, mejorando las oportunidades profesionales, educando a sus miembros, fomentando la colaboración entre ellos, y difundiendo y transfiriendo su labor al sector productivo y a la sociedad. Por este motivo, nuestra misión solo se puede cumplir si creamos una comunidad diversa e inclusiva, labor en la que estamos volcados desde la Junta Directiva.

Respecto a las comunicaciones recibidas para la actual XXIV Reunión SEQA, estas muestran la creciente actividad de nuestra comunidad científica, así como una diversidad de campos de investigación que conforman un programa científico interesante y variado. Nos acompañan, en el apartado de conferenciantes invitados, figuras de renombre en el panorama nacional (Laura Lechuga, Félix Hernández, Ana M<sup>a</sup> García-Campaña y Javier Laserna) que ponen de manifiesto la rica capacidad investigadora que atesoramos. Pero, además, contamos con la inestimable presencia de ponentes extranjeros (Petra Dittrich, Laura Righetti y Elia Psillakis) que son referentes mundiales en sus diferentes áreas de especialización. Esperamos que el atractivo programa científico resulte interesante para todos vosotros y que el encuentro en Zaragoza vuelva a ser el foro ideal para el intercambio científico, pero también para la interacción personal entre diferentes generaciones de químicos analíticos.

Que esta reunión en Zaragoza sirva para estrechar aún más los lazos dentro de esta sociedad que contribuye al valor y riqueza de la Química en nuestro país formando grandes docentes e investigadores.

**María Montes Bayón**  
Presidenta de la SEQA

**Javier Galbán Bernal**  
Presidente del Comité Organizador



# XXIV Reunión de la SEQA

Sociedad Española de Química Analítica



ZARAGOZA 1-3 JULIO 2024

## COMITÉ CIENTÍFICO SEQA

### **Presidenta**

María Montes Bayón

### **Vicepresidenta**

Lourdes Ramos Rivero

### **Secretaria**

Beatriz Fernández García

### **Tesorero**

Miguel del Nogal Sánchez

### **Vocales**

Fernando Benavente More

Javier Galbán Bernal

Juan Francisco García Reyes

Antonia Garrido Frenich

José Manuel Herrero Martínez

José Luis Luque García

Soledad Muniategui Lorenzo

Arsenio Muñoz de la Peña Castrillo

Rosa del Carmen Rodríguez Martín-Doimeadios



# XXIV Reunión de la SEQA

Sociedad Española de Química Analítica



ZARAGOZA 1-3 JULIO 2024

## COMITÉ CIENTÍFICO GRUPO ESPECIACIÓN

### **Presidente**

Francisco Calderón Celis

### **Vicepresidenta**

Beatriz Gómez Gómez

### **Secretaria**

Elena María Peña Vázquez

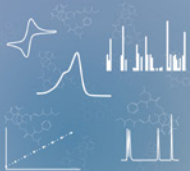
### **Vocales**

Francisco Laborda García

Tamara García Barrera

Ángeles Sahuquillo Estrugo

Rosa del Carmen Rodríguez Martín-Doimeadios



# XXIV Reunión de la SEQA

Sociedad Española de Química Analítica



ZARAGOZA 1-3 JULIO 2024

## COMITÉ ORGANIZADOR

### Presidente

Javier Galbán Bernal

---

Vicente L. Cebolla Burillo

Carmen Jarne Lardiés

Ángel López Molinero

Susana de Marcos Ruiz

Isabel Sanz Vicente

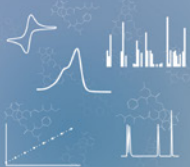
Jesús Anzano Lacarte

Vicente Ferreira González

Francisco Laborda García

Cristina Nerín de la Puerta

Martín Resano Ezcaray



# XXIV Reunión de la SEQA

Sociedad Española de Química Analítica



ZARAGOZA 1-3 JULIO 2024

## PONENCIAS

### PONENCIAS PLENARIAS



**Prof. Javier Laserna Vázquez**  
*Universidad de Málaga*



**Prof. Ana Mª García Campaña**  
*Universidad de Málaga*



**Prof. Petra S. Dittrich**  
*ETH Zürich*



**Prof. Laura Mª Lechuga Gómez**  
*CSIC – ICN2*



**Prof. Oliver Donard**  
*CNRS – Francia*

### PONENCIAS INVITADAS



**Prof. Félix Hernández Hernández**  
*Universitat Jaume I de Castelló*

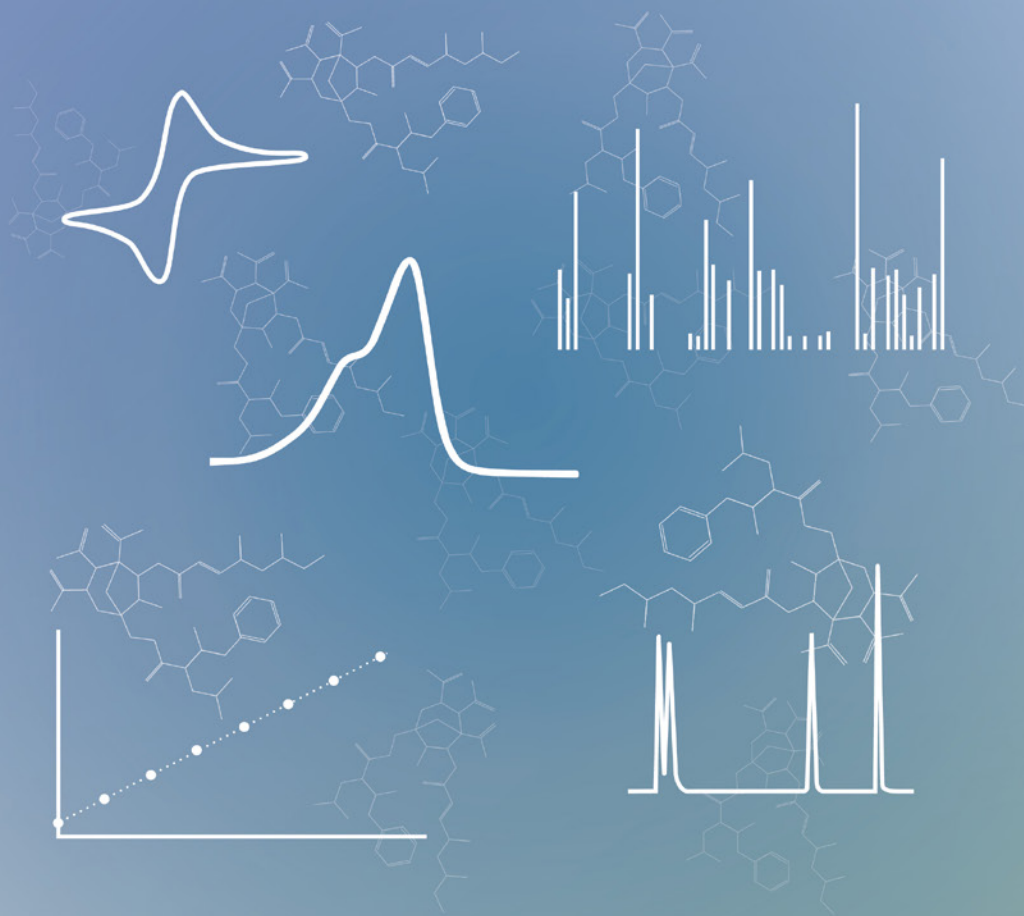


**Dr. Laura Righetti**  
*Wageningen University  
and Research*

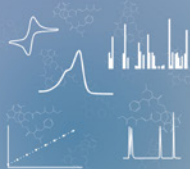


**Prof. Elia Psillakis**  
*Technical University of Crete*

# PROGRAMA



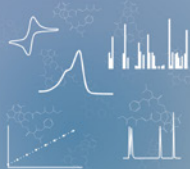




## VIII JORNADA DE ESPECIACIÓN Desafíos analíticos actuales en especiación química

### LUNES 1 DE JULIO

10:00-10:30	Recogida de documentación
10:30-10:45	<b>PRESENTACIÓN DE LA JORNADA DE ESPECIACIÓN</b> (Aula Magna) Francisco Calderón Celis (Presidente del Grupo de Especiación de la SEQA) María Montes Bayón (Presidenta de la SEQA) Javier Galbán Bernal (Presidente Comité local)
10:45-11:45	<b>CONFERENCIA PLENARIA</b> <b>Speciation challenges from 2D to 3D applied to environmental and food applications. A long journey</b> Olivier F.X. Donard. IPREM, CNRS/Université de Pau et des Pays de l'Adour, Francia <i>Moderadores: Francisco Calderón Celis, Rosa del Carmen Rodríguez Martín-Doimeadios</i>
11:45-12:15	<b>Pausa café</b> (Sala Amar y Borbón)
12:15-13:30	<b>SESIÓN COMUNICACIONES ORALES</b> (Aula Magna) Moderadores: Elena Peña Vázquez, Francisco Laborda García.
12:15	<b>EOR1.</b> Bioaccesibilidad in vitro de (nano)partículas de TiO <sub>2</sub> y SiO <sub>2</sub> presentes en productos de confitería. Citotoxicidad y efecto sobre la microbiota. <b>Elena Espada Bernabé</b> (Universidad Complutense de Madrid).
12:30	<b>EOR2.</b> Estrategias analíticas para el estudio de la actividad bactericida de iones plata y nanopartículas y sus efectos sinérgicos con antibióticos. <b>Isabel Abad Álvaro</b> (Universidad de Zaragoza).
12:45	<b>EOR3.</b> Antimonio en bebidas embotelladas en PET: estudios de migración. <b>Ángeles Sahuquillo Estrugo</b> (Universidad de Barcelona).
13:00	<b>EOR4.</b> Determinación de Hg, Se y especies de Se en productos procesados derivados de pescados y sus materias primas. Estudios de bioaccesibilidad y toxicidad mediante ensayos in vitro. <b>Tamara Fernández Bautista</b> (Universidad Complutense de Madrid).
13:15	<b>EOR5.</b> Caracterización de nanopartículas en muestras de orina y sangre mediante la técnica SP-ICP-MS. <b>Gabriel Fernández</b> (Universidad Ramón Llull, PerkinElmer Scientific).



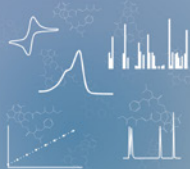
# XXIV Reunión de la SEQA

Sociedad Española de Química Analítica



ZARAGOZA 1-3 JULIO 2024

13:30-15:30	Comida
15:30-16:30	<b>SESIÓN COMUNICACIONES ORALES</b> (Aula Magna) Moderadores: Ángeles Sahuquillo Estrugo, Beatriz Gómez Gómez.
15:30	<b>EOR6.</b> Detección ultrasensible y cuantificación de compuestos de oxígeno en muestras complejas mediante GC-Comb-MS. <b>Montserrat Redondo Velasco</b> (Universidad de Oviedo).
15:45	<b>EOR7.</b> Caracterización de formas particuladas de mercurio en tejidos de animales acuáticos por espectrometría de masas con plasma de acoplamiento inductivo en modalidad de detección individual de partículas. <b>Marta Hernández Postigo</b> (Universidad de Castilla-La Mancha).
16:00	<b>EOR8.</b> Bioaccesibilidad y biodisponibilidad in vitro de nanopartículas de Ag y TiO <sub>2</sub> en algas marinas usando células Caco-2. <b>María Carmen Barciela Alonso</b> (Universidad de Santiago de Compostela).
16:15	<b>EOR9.</b> Metabolismo de especies de selenio en plantas mediante HPLC-ICP-MS y trazadores isotópicos múltiples. <b>Gustavo Moreno Martín</b> (Universidad Complutense de Madrid).
16:30-17:20	<b>ASAMBLEA DEL GRUPO DE ESPECIACIÓN DE LA SEQA</b>
17:20- 17:30	<b>ENTREGA DE PREMIOS</b>



# XXIV Reunión de la SEQA

Sociedad Española de Química Analítica



ZARAGOZA 1-3 JULIO 2024

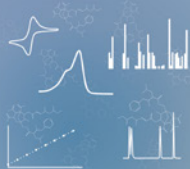
## XXIV REUNIÓN SEQA

### LUNES 1 DE JULIO

16:00-18:00	Recogida de documentación XXIV Reunión SEQA
18:00-18:30	<b>CEREMONIA DE APERTURA XXIV Reunión SEQA</b> (Aula Magna)
18.30-19:25	<b>CONFERENCIA PLENARIA-PL1</b> (Aula Magna) <b>Dispositivos Biosensores Nanofotónicos: herramientas avanzadas para el diagnóstico clínico descentralizado</b> Laura M. Lechuga. Instituto Catalán de Nanociencia y Nanotecnología (ICN2) CSIC, BIST y CIBER-BBN. Barcelona Moderadora: María Montes
19:30-21:00	Aperitivo de bienvenida

### MARTES 2 DE JULIO

9:00-9:55	<b>CONFERENCIA PLENARIA-PL2</b> (Aula Magna) <b>High-throughput analysis on microfluidic devices</b> Petra Dittrich. Department of Biosystems Science and Engineering, ETH Zürich, Switzerland Moderador: Jörg Bettmer
	<b>Comunicaciones orales (Sesión 1)</b> Aula Magna Moderador: Ángel Ríos
	<b>Comunicaciones orales (Sesión 2)</b> Sala Pilar Sinúes Moderadora: Rosario Pereiro
10:00-10:15	<b>O01</b> Evaluación de la cromatografía en contracorriente para aislar arsenozúcares presentes en algas. <b>José Fermín López Sánchez</b>
	<b>O10</b> Paper-based analytical devices for the analysis of glycoproteins and glycans. <b>Jesús Alberto Escarpa Miguel</b>
10:15-10:30	<b>O02</b> Determinación de elementos endógenos y proteínas diana en exosomas aislados del secretoma celular y suero de ratón empleando ICP-MS. <b>Jaime Martínez García</b>
	<b>O11</b> Detección fiable del estado mutacional de genes de relevancia en diagnóstico y pronóstico de cáncer empleando bioplataformas electroanalíticas de vanguardia. <b>Víctor Ruiz-Valdepeñas Montiel</b>



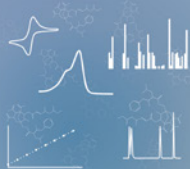
# XXIV Reunión de la SEQA

Sociedad Española de Química Analítica



ZARAGOZA 1-3 JULIO 2024

10:30-10:45	<b>O03</b> El Fe como elemento clave para el diagnóstico diferencial de ictus en exudado nasal: estudios básicos mediante análisis elemental, especiación y determinación de proteínas diana. <b>Lara Lobo Revilla</b>	<b>O12</b> Nuevos biodispositivos electroquímicos para mejorar el pronóstico oncológico analizando el metiloma de los miARNs. <b>Eloy Povedano Muñumel</b>
10:45-11:00	<b>O04</b> Determinación de plomo y sus isótopos en hormigón mediante HR-ICP-MS. <b>Ángela de la Hoz Nieto</b>	<b>O13</b> Cost-effective fully 3D printed on-drop electrochemical sensor: a comparative study with screen-printed sensors. <b>Agustín González Crevillén</b>
11:00-11:15	<b>O05</b> Espectrometría de masas elemental y molecular, un tándem para la cuantificación absoluta de (fosfo) proteínas. <b>Francisco Calderón Celis</b>	<b>O14</b> Sensor electroquímico selectivo hacia BPA en aguas residuales mediante polímeros de impresión molecular sobre óxido de grafeno magnético. <b>Antonio Jesús Ruiz Sánchez</b>
11:15-12:00	<b>Pausa café/pósters</b> (Salas Amar y Borbón y 13 Heroínas) <b>Pósters 1-94 y 200-202</b>	
12:00-12:45	<b>CONFERENCIA INVITADA-INV1</b> (Aula Magna) <b>The Circular Analytical Chemistry Opportunity</b> Elia Psillakis. School of Chemical and Environmental Engineering, Technical University of Crete, University Campus, 73100, Greece <i>Moderadora: Lourdes Ramos</i>	
12:45-13:00	<b>Presentación del Grupo Especializado en Preparación de Muestras</b> María Soledad Cárdenas	
	<b>Comunicaciones orales (Sesión 3)</b> <i>Aula Magna</i> <i>Moderadora: Soledad Rubio</i>	<b>Comunicaciones orales (Sesión 4)</b> <i>Sala Pilar Sinúes</i> <i>Moderadora: Susana de Marcos</i>
13:00-13:15	<b>O18</b> Tratamiento de muestra con nuevos dispositivos impresos en 3D: un mundo nuevo de posibilidades. <b>Enrique Javier Carrasco Correa</b>	<b>O28</b> Aplicación de enfoques ómicos avanzados para garantizar la autenticidad de tomillo: análisis fingerprinting mediante H-NMR y fusión de datos multitécnica (cromatografía-espectrometría de masas de alta resolución). <b>Araceli Rivera Pérez</b>



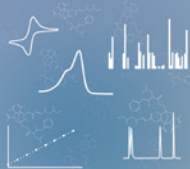
# XXIV Reunión de la SEQA

Sociedad Española de Química Analítica



ZARAGOZA 1-3 JULIO 2024

13:15-13:30	<b>O19</b> Development of an environmentally friendly dispersive liquid-liquid microextraction method using natural deep eutectic solvents for the determination of industrial chemicals in water samples. <b>Beatriz Gómez-Nieto</b>	<b>O29</b> Detección y cuantificación de fraudes en mieles adulteradas con jarabes mediante huellas generadas por HPLC-UV y Quimiometría. <b>Oscar Núñez</b>
13:30-13:45	<b>O20</b> Tratamiento de muestra acoplado a espectrometría de masas: diseño de interfases asequibles basadas en agujas. <b>Jaime Millán-Santiago</b>	<b>O30</b> Optimización de parámetros de adquisición de espectros LF-NMR altamente informativos para su utilización como huellas instrumentales no específicas en el desarrollo de métodos analíticos multivariable. <b>Alejandra Arroyo Cerezo</b>
13:45-14:00	<b>O21</b> Metal-Organic Frameworks for the microextraction of liver diseases biomarkers. <b>Idaira Pacheco-Fernández</b>	<b>O31</b> Canela verdadera: autenticación y detección de fraudes por HPLC-UV. <b>Clara Pérez-Ràfols</b>
14:00-14:15	<b>O22</b> Empleo de biodisolventes supramoleculares verdes para el cribado de contaminantes de materiales en contacto con alimentos mediante LC-QTOF. <b>Laura García Cansino</b>	<b>O32</b> Desarrollo de una estrategia no separativa para la determinación semicuantitativa de metabolitos de hidrocarburos aromáticos policíclicos en orina. <b>Ana Ballester Caudet</b>
14:15-15:45	Comida	
15:45-16:30	<b>CONFERENCIA INVITADA-INV2</b> (Aula Magna) <b>Comprehensive research of organic (micro)pollutants in the aquatic environment: role of chromatography-HRMS</b> Félix Hernández Hernández. Research Institute for Pesticides and Waters, University Jaume I, Castellón, Spain <i>Moderador: José Manuel Herrero</i>	
	<b>Comunicaciones orales (Sesión 5)</b> <i>Aula Magna</i> <i>Moderador: José Manuel Herrero</i>	<b>Comunicaciones orales (Sesión 6)</b> <i>Sala Pilar Sinúes</i> <i>Moderador: Arsenio Muñoz</i>
16:30-16:45	<b>O23</b> Retos analíticos para la determinación de aditivos plásticos no ftálicos en suelo y agua. <b>Raquel Capilla Flore</b>	<b>O33</b> Mejorando el diagnóstico basado en espectroscopía mediante modelado in silico del espectro infrarrojo de la orina. <b>Víctor Navarro Esteve</b>



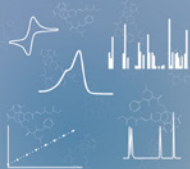
# XXIV Reunión de la SEQA

Sociedad Española de Química Analítica



ZARAGOZA 1-3 JULIO 2024

<b>16:45-17:00</b>	<b>O24</b> Natural deep eutectic solvent-based liquid-liquid micro-extraction for bisphenols extraction from water samples. <b>Iván Rubio Santos</b>	<b>O34</b> Caracterización de la selectividad en cromatografía de líquidos: aplicación del modelo rápido de Abraham a sistemas HILIC. <b>Xavier Subirats</b>
<b>17:00-17:15</b>	<b>O25</b> Nuevas estrategias de microextracción basadas en la dispersión de materiales magnéticos para el análisis de muestras biológicas de bajo volumen. <b>Alberto Chisvert</b>	<b>O35</b> Búsqueda de marcadores de rechazo para establecer las condiciones de almacenamiento y conservación óptimas de cebos proteicos para el control de vespa velutina. <b>Omaira de la Hera Fernández</b>
<b>17:15-17:30</b>	<b>O26</b> FREE-MetabOliva, un método sencillo de preparación de muestras para análisis no dirigidos de aceitunas: una prueba de concepto. <b>Carlos A. Ledesma Escobar</b>	<b>O36</b> Mejora en las predicciones de retención en cromatografía líquida utilizando columnas en serie: (i) uso de modelos globales. <b>Pau Peiró Vila</b>
<b>17:30-17:45</b>	<b>O27</b> Progress in the use of magnetic ionic liquids in sample preparation. <b>María José Trujillo Rodríguez</b>	<b>O37</b> A comprehensive study of the influence of user-defined data processing parameters for feature extraction using LC-HRMS-based non-target screening for environmental monitoring. <b>Ana B. Martínez Piernas</b>
<b>17:45-18:45</b>	<b>Pausa café/pósters</b> (Salas Amar y Borbón y 13 Heroínas) <b>Pósters 1-94 y 200-202</b>	
<b>18:45-19:00</b>	<b>OP1</b> (Aula Magna) Caracterización de nanopartículas de oro en matrices biológicas por Single Particle ICP-MS. <b>Meritxell Cabré Boqué (PerkinElmer Scientific)</b>	
	<b>Comunicaciones orales (Sesión 7)</b> <i>Aula Magna</i> <i>Moderadora: Yolanda Madrid</i>	<b>Comunicaciones orales (Sesión 8)</b> <i>Sala Pilar Sinúes</i> <i>Moderador: Alberto Escarpa</i>
<b>19:00-19:15</b>	<b>O06</b> Cuantificación de secuencias de miRNA en suero sanguíneo sin necesidad de amplificación empleando nanopartículas metálicas como marcas elementales y espectrometría de masas (ICP-MS). <b>Mario Corte Rodríguez</b>	<b>O15</b> Electrodo serigrafado flexible basado en quitosano y nanopartículas de oro para la determinación de analitos de interés clínico. <b>Concepción Rodríguez Oñate</b>



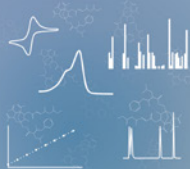
# XXIV Reunión de la SEQA

Sociedad Española de Química Analítica



ZARAGOZA 1-3 JULIO 2024

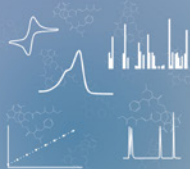
<b>19:15-19:30</b>	<b>O07</b> Single-Cell ICP-MS como herramienta analítica en estudios de neurotoxicidad. Evaluación del efecto protector de distintas especies de selenio frente a la toxicidad del mercurio en células de neuroblastoma humano (SH-SY5Y). <b>Beatriz Gómez Gómez</b>	<b>O16</b> Sensores wearable basados en microagujas para la monitorización in vivo de analitos de relevancia clínica. <b>Águeda Molinero-Fernández</b>
<b>19:30-19:45</b>	<b>O08</b> Envases de silicona de uso alimentario: migración de platino y riesgo de exposición. <b>Miguel Klaiber Aboitiz</b>	<b>O17</b> Detección de vesículas extracelulares: un enfoque rápido y de alta sensibilidad. <b>Clara Saweres Argüelles</b>
<b>19:45-20:00</b>	<b>O09</b> Estudio comparativo de diferentes metodologías para la caracterización del tamaño de micro/nano partículas mediante SP-ICP-MS. <b>Antonio Bazo</b>	
<b>20:00</b>	Visita guiada ZARAGOZA	



## MIÉRCOLES 3 DE JULIO

9:00-9:55	<b>CONFERENCIA PLENARIA-PL3</b> (Aula Magna) <b>Contaminantes emergentes en alimentos: estrategias analíticas alternativas para su detección y conexión con el exposoma</b> Ana M. García-Campaña. Grupo FQM-302 "Calidad en Química Analítica Alimentaria, Ambiental y Clínica", Universidad de Granada, Spain. <i>Moderadora: Cristina Nerín</i>	
10:00-10:15	<b>OP1</b> (Aula Magna) <b>OP2</b> Recent advances in speciation analysis by high-sensitivity SQ-ICP-MS. <b>Rui Santos (Inycom)</b>	
	<b>Comunicaciones orales (Sesión 9)</b> Aula Magna <i>Moderador: Juan Francisco Reyes</i>	<b>Comunicaciones orales (Sesión 10)</b> Sala Pilar Sinúes <i>Moderadora: Alegría Carrasco.</i>
10:15-10:30	<b>O38</b> Evaluación del contenido en residuos de pesticidas orgánicos en vinos procedentes de distintas denominaciones de origen de Galicia y La Rioja. <b>Victoria Fernández Fernández</b>	<b>O48</b> Analytical strategies to monitor 3,5- dihydroxycinnamic acid as urine biomarker of gluten intake. <b>Yolanda Moliner Martínez</b>
10:30-10:45	<b>O39</b> Estudio comparativo del consumo de sustancias adictivas en diferentes zonas de la comunidad de Madrid mediante el análisis de aguas residuales. <b>Emma Gracia Lor</b>	<b>O49</b> Desarrollo y aplicación de un método analítico para la determinación de productos finales de glicación avanzada en biofluidos humanos. <b>Ana Castillo Luna</b>
10:45-11:00	<b>O40</b> Desarrollo de una nueva metodología analítica para la determinación de betaínas y compuestos de amonio cuaternario en productos apícolas. <b>Beatriz Martín Gómez</b>	<b>O50</b> Análisis de saliva para el diagnóstico precoz del cáncer de pulmón: medición de niveles de expresión de hexanal y heptanal. <b>Juan L. Benedé</b>
11:00-11:15	<b>O41</b> Aplicación de técnicas cromatográficas para evaluar el efecto de la aromatización en la calidad del aceite de oliva virgen. <b>Enrique Jacobo Díaz Montaña</b>	<b>O51</b> Desarrollo de una metodología analítica mediante LC-MS/MS sensible y selectiva para la determinación de biomarcadores de estrés oxidativo (4H2N y MDA) en plasma seminal humano. <b>Manuel Alfaro Gómez</b>





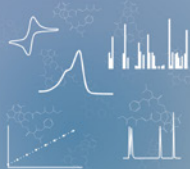
# XXIV Reunión de la SEQA

Sociedad Española de Química Analítica



ZARAGOZA 1-3 JULIO 2024

<b>11:15-11:30</b>	<b>O42</b> Evolución de los carbohidratos no estructurales de aguacates de las variedades bacon, fuerte y hass durante la maduración post-cosecha. <b>María Gemma Beiro Valenzuela</b>	<b>O52</b> Vesículas extracelulares como sistema transportador de fármacos para la terapia fotodinámica del cáncer de mama. <b>María Luisa Fernández Sánchez</b>
<b>11:30-12:15</b>	<b>Pausa café/pósters</b> (Salas Amar y Borbón y 13 Heroínas) <b>Pósters 95-199</b>	
<b>12:15-13:00</b>	<b>CONFERENCIA INVITADA-INV3</b> (Aula Magna) <b>Non-targeted Metabolomics to decipher plants and food chemical composition.</b> Laura Righetti. Laboratory of Organic Chemistry, Wageningen University. Wageningen Food Safety Research, Wageningen University & Research, Wageningen, The Netherlands <i>Moderadora: Antonia Garrido</i>	
	<b>Comunicaciones orales (Sesión11)</b> <i>Aula Magna</i> <i>Moderador: José Juan Santana</i>	<b>Comunicaciones orales (Sesión 12)</b> <i>Sala Pilar Sinúes</i> <i>Moderadora: Soledad Muniategui</i>
<b>13:00-13:15</b>	<b>O43</b> Combinación de SUPRAS y LC-HRMS para la Identificación de contaminantes de preocupación emergente en el agua de grifo de 12 países del mundo: distribución y evaluación preliminar del riesgo de exposición. <b>Luis Muñiz de Bustamante</b>	<b>O53</b> Mejora de la precisión en terapia fotodinámica antitumoral: desarrollo y evaluación bioanalítica de un nuevo nanosistema inteligente basado en Rh. <b>Alejandro García García</b>
<b>13:15-13:30</b>	<b>O44</b> Determinación de sustancias perfluoroalquiladas (PFAS) reguladas en agua de bebida de España y otros países según la directiva 2020/2184/EU. <b>Javier López Vázquez</b>	<b>O54</b> Identificación y cuantificación del perfil de glicosilación del anticuerpo monoclonal cetuximab mediante mapa peptídico (RP)UHPLC-HESI(ORBITRAP) MS/MS. <b>Natalia Navas Iglesias</b>
<b>13:30-13:45</b>	<b>O45</b> Synthesis, identification, and quantification of migrant oligo-esters from starch-based food contact materials. <b>David Rupérez Cebolla</b>	<b>O55</b> Nuevos nanosistemas inteligentes basados en selenio como herramienta frente al cáncer de mama: evaluación funcional mediante tecnologías ómicas. <b>María del Pilar Buendía Nacarino</b>
<b>13:45-14:00</b>	<b>O46</b> Estudio de la seguridad química del uso de vajillas desechables mediante el análisis de migración de volátiles y no volátiles. <b>Javier Blázquez-Martín</b>	<b>O56</b> Determinación de contaminantes orgánicos en células y su concentración biodisponible como metodología alternativa para predecir la bioacumulación. <b>Paloma de Oro Carretero</b>



# XXIV Reunión de la SEQA

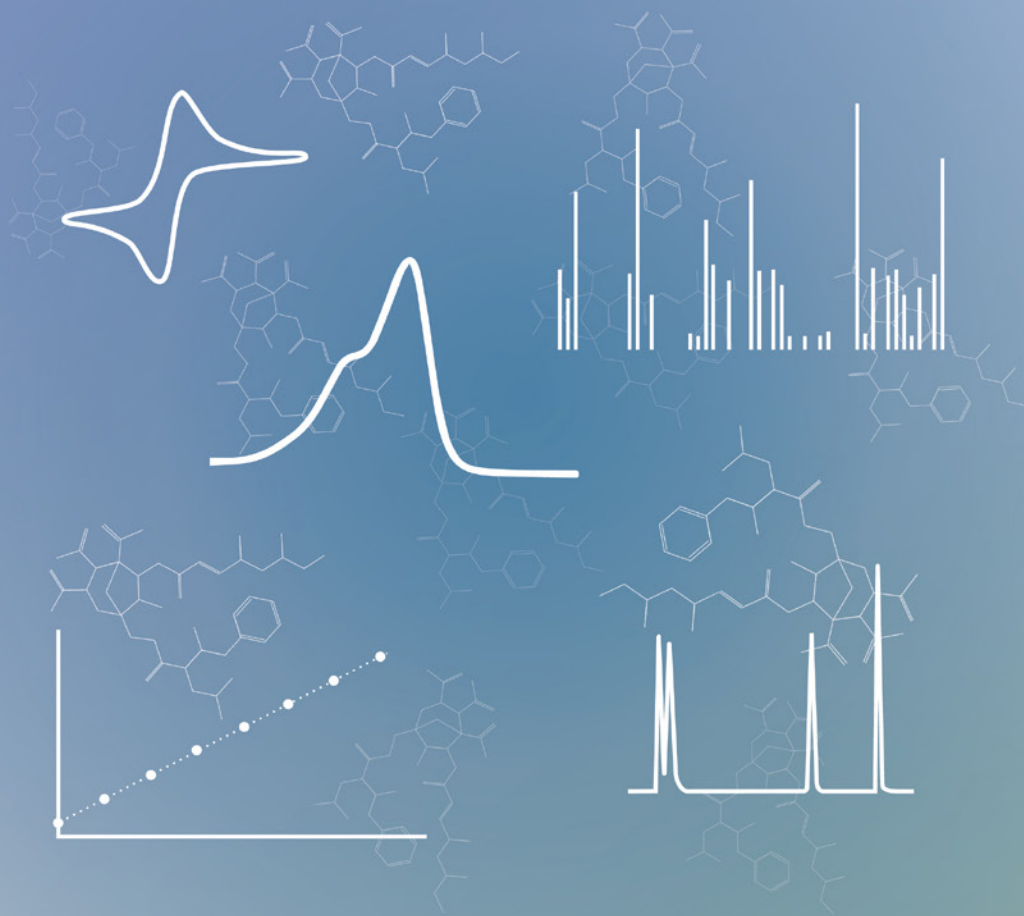
Sociedad Española de Química Analítica



ZARAGOZA 1-3 JULIO 2024

14:00-14:15	<b>O47</b> Determinación de contaminantes de preocupación emergente en muestras de moluscos y pescados como estrategia rápida de análisis de la costa portuguesa mediante cromatografía líquida y de gases acopladas a espectrometría de masas. <b>Sandra Méndez Martínez</b>	<b>O57</b> Utilización de precolumnas acopladas a espectrometría de masas para la determinación de compuestos biológicos endógenos y exógenos en matrices biológicas. <b>Ana María Casas Ferreira</b>
14:15-15:45	Comida	
15:45-16:45	<b>CONFERENCIA PLENARIA-PL4</b> (Aula Magna) <b>Chemical analysis in planetary exploration. The instrument suite of the NASA's MARS 2020 mission Perseverance rover</b> Javier Laserna. Department of Analytical Chemistry, University of Málaga, Málaga, Spain <i>Moderador: Martín Resano</i>	
	<b>Comunicaciones orales (Sesión 13)</b> Aula Magna <i>Moderador: Ángel López-Molinero</i>	
16:45-17:00	<b>OP3</b> (Aula Magna) No sólo de análisis vive el dato. <b>Esther Albertín (Inycom)</b>	
17:00-17:15	<b>O58</b> El papel actual de la espectrometría de la fluorescencia de rayos X en el campo de la química analítica: avances y nuevas aplicaciones ambientales e industriales. <b>Eva Marguá Grabulosa</b>	
17:15-17:30	<b>O59</b> Análisis ambiental de lodos de lagos glaciares mediante espectroscopía de descomposición inducida por láser. <b>Juan Buil García</b>	
17:30-17:45	<b>O60</b> Implementación de regresión multivariada para cuantificación de objetos de vidrio mediante FRX portátil. <b>Diego Ahumada</b>	
17:45-18:30	<b>Pausa café/pósters</b> (Salas Amar y Borbón y 13 Heroínas) <b>Pósters 95-199</b>	
18:30-19:45	<b>Asamblea general SEQA</b>	
19:45-20:00	<b>Ceremonia de clausura</b>	
21:00	<b>Cena del congreso y entrega de premios</b>	

# ÍNDICE DE RESÚMENES





## 1. JORNADA DE ESPECIACIÓN:

### Conferencia plenaria

**EPL1** - Speciation challenges from 2d to 3d applied environmental and food applications: a long journey. [Olivier F.X. Donard](#)

### Comunicaciones orales

**EOR1** - Bioaccesibilidad in vitro de (nano)partículas de TiO<sub>2</sub> y SiO<sub>2</sub> presentes en productos de confitería. Citotoxicidad y efecto sobre la microbiota. [Elena Espada Bernabé](#)

**EOR2** - Estrategias analíticas para el estudio de la actividad bactericida de iones plata y nanopartículas y sus efectos sinérgicos con antibióticos. [Isabel Abad Álvaro](#)

**EOR3** - Antimonio en bebidas embotelladas en PET: estudios de migración. [Angels Sahuquillo Estrugo](#)

**EOR4** - Determinación de Hg, Se y especies de Se en productos procesados derivados de pescados y sus materias primas. Estudios de bioaccesibilidad Y toxicidad mediante ensayos In Vitro. [Tamara Fernández Bautista](#)

**EOR5** - Caracterización de nanopartículas en muestras de orina y sangre mediante la técnica SP-ICP-MS. [Gabriel Fernández](#)

**EOR6** - Detección ultrasensible y cuantificación de compuestos de oxígeno en muestras complejas mediante GC-Comb-MS. [Montserrat Redondo Velasco](#)

**EOR7** - Caracterización de formas particuladas de mercurio en tejidos de animales acuáticos por espectrometría de masas con plasma de acoplamiento inductivo en modalidad de detección individual de partículas. [Marta Hernández Postigo](#)

**EOR8** - Bioaccesibilidad y biodisponibilidad in vitro de nanopartículas de Ag y TiO<sub>2</sub> en algas marinas usando células Caco-2. [M. Carmen Barciela Alonso](#)

**EOR9** - Metabolismo de especies de selenio en plantas mediante HPLC-ICP-MS y trazadores isotópicos múltiples. [Gustavo Moreno Martín](#)

## 2. XXIV REUNIÓN SEQA

### Conferencias plenarias

**PL1** - Dispositivos Biosensores Nanofotónicos: herramientas avanzadas para el diagnóstico clínico descentralizado. [Laura M. Lechuga Gómez](#)

**PL2** - High-throughput analysis on microfluidic device. [Petra S. Dittrich](#)

**PL3** - Contaminantes emergentes en alimentos: estrategias analíticas alternativas para su detección y conexión con el exosoma. [Ana M. García Campaña](#)

**PL4** - Chemical analysis in planetary exploration. The instrument suite of the NASA's MARS 2020 mission Perseverance rover. [Javier Laserna Vázquez](#)



## Conferencias invitadas

**INV1** - The circular analytical chemistry opportunity. [Elia Psillakis](#)

**INV2** - Comprehensive research of organic (micro)pollutants in the aquatic environment: role of chromatography-HRMS. [Félix Hernández Hernández](#)

**INV3** - Non-targeted Metabolomics to decipher plants and food chemical composition. [Laura Righetti](#)

## Conferencias orales

**O01** - Evaluación de la cromatografía en contracorriente para aislar arsenoazúcares presentes en algas. [José Fermín López Sánchez](#)

**O02** - Determinación de elementos endógenos y proteínas diana en exosomas aislados del secretoma celular y suero de ratón empleando ICP-MS. [Jaime Martínez García](#)

**O03** - El Fe como elemento clave para el diagnóstico diferencial de ictus en exudado nasal: estudios básicos mediante análisis elemental, especiación y determinación de proteínas. [Diana Lara Lobo Revilla](#)

**O04** - Determinación de plomo y sus isótopos en hormigón mediante HR-ICP-MS. [Ángela De La Hoz Nieto](#)

**O05** - Espectrometría de masas elemental y molecular, un tándem para la cuantificación absoluta de (fosfo) proteínas. [Francisco Calderón Celis](#)

**O06** - "Cuantificación de secuencias de miRNA en suero sanguíneo sin necesidad de amplificación empleando nanopartículas metálicas como marcas elementales y espectrometría de masas (ICP-MS). [Mario Corte Rodríguez](#)

**O07** - Single-cell ICP-MS como herramienta analítica en estudios de neurotoxicidad. Evaluación del efecto protector de distintas especies de selenio frente a la toxicidad del mercurio en células de neuroblastoma humano (SH-SY5Y). [Beatriz Gómez Gómez](#)

**O08** - Envases de silicona de uso alimentario: migración de platino y riesgo de exposición. [Miguel Klaiber Aboitiz](#)

**O09** - Estudio comparativo de diferentes metodologías para la caracterización del tamaño de micro/nano partículas mediante SP-ICP-MS. [Antonio Bazo](#)

**O10** - Paper-based analytical devices for the analysis of glycoproteins and glycans. [Jesús Alberto Escarpa Miguel](#)

**O11** - Detección fiable del estado mutacional de genes de relevancia en diagnóstico y pronóstico de cáncer empleando bioplataformas electroanalíticas de vanguardia. [Víctor Ruiz-Valdepeñas Montiel](#)

**O12** - Nuevos biodispositivos electroquímicos para mejorar el pronóstico oncológico analizando el metiloma de los miARNs . [Eloy Povedano Muñumel](#)

**O13** - Cost-effective fully 3D-printed on-drop electrochemical sensor: a comparative study with screen-printed sensors. [Agustín González Crevillén](#)

**O14** - Sensor electroquímico selectivo hacia BPA en aguas residuales mediante polímeros de impresión molecular sobre óxido de grafeno magnético. [Antonio Jesús Ruiz Sánchez](#)



- O15** - Electrodo serigrafado flexible basado en quitosano y nanopartículas de oro para la determinación de analitos de interés clínico. [Concepción Rodríguez Oñate](#)
- O16** - Sensores wearable basados en micro agujas para la monitorización in vivo de analitos de relevancia clínica. [Águeda Molinero-Fernández](#)
- O17** - Detección de vesículas extracelulares: un enfoque rápido y de alta sensibilidad. [Clara Saweres Argüelles](#)
- O18** - Tratamiento de muestra con nuevos dispositivos impresos en 3D: un mundo nuevo de posibilidades. [Enrique Javier Carrasco Correa](#)
- O19** - Development of an environmentally friendly dispersive liquid-liquid microextraction method using natural deep eutectic solvents for the determination of industrial chemicals in water sample. [Beatriz Gómez-Nieto](#)
- O20** - Tratamiento de muestra acoplado a espectrometría de masas: diseño de interfases asequibles basadas en agujas. [Jaime Millán-Santiago](#)
- O21** - Metal-Organic Frameworks for the microextraction of liver diseases biomarkers. [Idaira Pacheco-Fernández](#)
- O22** - Empleo de biodisolventes supramoleculares verdes para el cribado de contaminantes de materiales en contacto con alimentos mediante LC-QTOF. [Laura Garcí Cansino](#)
- O23** - Retos analíticos para la determinación de aditivos plásticos no ftálicos en suelo y agua. [Raquel Capilla Flores](#)
- O24** - Natural deep eutectic solvent-based liquid-liquid microextraction for bisphenols extraction from water samples. [Iván Rubio Santos](#)
- O25** - Nuevas estrategias de microextracción basadas en la dispersión de materiales magnéticos para el análisis de muestras biológicas de bajo volumen. [Alberto Chisvert](#)
- O26** - FREE-MetabOliva, un método sencillo de preparación de muestras para análisis no dirigidos de aceitunas: una prueba de concepto. [Carlos A. Ledesma Escobar](#)
- O27** - Progress in the use of magnetic ionic liquids in sample preparation. [María José Trujillo Rodríguez](#)
- O28** - Aplicación de enfoques ómicos avanzados para garantizar la autenticidad de tomillo: análisis fingerprinting mediante resonancia magnética nuclear de protón ( $^1\text{H}$  NMR) y fusión de datos multitécnica (cromatografía-espectrometría de masas de alta resolución). [Araceli Rivera Pérez](#)
- O29** - Detección y cuantificación de fraudes en mieles adulteradas con jarabes mediante huellas generadas por HPLC-UV y quimiometría. [Oscar Núñez](#)
- O30** - Optimización de parámetros de adquisición de espectros LF-NMR altamente informativos para su utilización como huellas instrumentales no específicas en el desarrollo de métodos analíticos multivariable. [Alejandra Arroyo Cerezo](#)
- O31** - Canela verdadera: autenticación y detección de fraudes por HPLC-UV. [Clara Pérez-Ràfols](#)
- O32** - Desarrollo de una estrategia no separativa para la determinación semicuantitativa de metabolitos de hidrocarburos aromáticos policíclicos en orina. [Ana Ballester Caudet](#)
- O33** - Mejorando el diagnóstico basado en espectroscopía mediante modelado in silico del espectro infrarrojo de la orina. [Víctor Navarro Esteve](#)
- O34** - Caracterización de la selectividad en cromatografía de líquidos: aplicación del modelo rápido de Abraham a sistemas HILIC. [Xavier Subirats](#)



- O35** - Búsqueda de marcadores de rechazo para establecer las condiciones de almacenamiento y conservación óptimas de cebos proteicos para el control de vespa velutina. [Omaira De La Hera Fernández](#)
- O36** - Mejora en las predicciones de retención en cromatografía líquida utilizando columnas en serie: (I) uso de modelos globales. [Pau Peiró Vila](#)
- O37** - A Comprehensive study of the influence of user-defined data processing parameters for feature extraction using LC-HRMS-based non-target screening for environmental monitoring. [Ana B. Martínez Piernas](#)
- O38** - Evaluación del contenido en residuos de pesticidas orgánicos en vinos procedentes de distintas denominaciones de origen de Galicia y La Rioja. [Victoria Fernández Fernández](#)
- O39** - Estudio comparativo del consumo de sustancias adictivas en diferentes zonas de la comunidad de Madrid mediante el análisis de aguas residuales. [Emma Gracia Lor](#)
- O40** - Desarrollo de una nueva metodología analítica para la determinación de betaínas y compuestos de amonio cuaternario en productos apícolas. [Beatriz Martín Gómez](#)
- O41** - Aplicación de técnicas cromatográficas para evaluar el efecto de la aromatización en la calidad del aceite de oliva virgen. [Enrique Jacobo Díaz Montaña](#)
- O42** - Evolución de los carbohidratos no estructurales de aguacates de las variedades bacon, fuerte y hass durante la maduración post-cosecha. [María Gemma Beiro Valenzuela](#)
- O43** - Combinación de SUPRAS Y LC-HRMS para la identificación de contaminantes de preocupación emergente en el agua de grifo de 12 países del mundo: distribución y evaluación preliminar del riesgo de exposición. [Luis Muñiz De Bustamante](#)
- O44** - Determinación de sustancias perfluoroalquiladas (pfas) reguladas en agua de bebida de España y otros países según La Directiva 2020/2184/EU. [Javier López Vázquez](#)
- O45** - Synthesis, identification, and quantification of migrant oligoesters from starch-based food contact materials. [David Rupérez Cebolla](#)
- O46** - Estudio de la seguridad química del uso de vajillas desechables mediante el análisis de migración de volátiles y no volátiles. [Javier Blázquez-Martín](#)
- O47** - Determinación de contaminantes de preocupación emergente en muestras de moluscos y pescados de la costa portuguesa mediante cromatografía líquida y de gases acopladas a espectrometría de masas. [Sandra Méndez Martínez](#)
- O48** - Analytical strategies to monitor 3,5- dihydroxycinnamic acid as urine biomarker of gluten intake. [Yolanda Moliner Martinez](#)
- O49** - Desarrollo y aplicación de un método analítico para la determinación de productos finales de glicación avanzada en biofluidos humanos. [Ana Castillo Luna](#)
- O50** - Análisis de saliva para el diagnóstico precoz del cáncer de pulmón: medición de niveles de expresión de hexanal y heptanal. [Juan L. Benedé](#)
- O51** - Desarrollo de una metodología analítica mediante LC-MS/MS Sensible y selectiva para la determinación de biomarcadores de estrés oxidativo (4H2N Y MDA) en plasma seminal humano. [Manuel Alfaro Gómez](#)
- O52** - Vesículas extracelulares como sistema transportador de fármacos para la terapia fotodinámica del cáncer de mama. [María Luisa Fernández Sánchez](#)
- O53** - Mejora de la precisión en terapia fotodinámica antitumoral: desarrollo y evaluación bioanalítica de un nuevo nanosistema inteligente basado en Rh. [Alejandro García García](#)

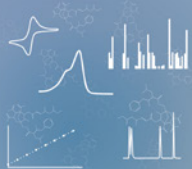


- O54** - Identificación y cuantificación del perfil de glicosilación del anticuerpo monoclonal cetuximab mediante mapa peptídico (RP)UHPLC-HESI(orbitrap)MS/MS. [Natalia Navas Iglesias](#)
- O55** - Nuevos nanosistemas inteligentes basados en selenio como herramienta frente al cáncer de mama: Evaluación funcional mediante tecnologías ómicas, [María Del Pilar Buendía Nacarino](#)
- O56** - Determinación de contaminantes orgánicos en células y su concentración biodisponible como metodología alternativa para predecir la bioacumulación. [Paloma De Oro Carretero](#)
- O57** - Utilización de precolumnas acopladas a espectrometría de masas como estrategia rápida de análisis para la determinación de compuestos endógenos y exógenos en matrices biológicas. [Ana María Casas Ferreira](#)
- O58** - El papel actual de la espectrometría de la fluorescencia de Rayos X en el campo de la Química Analítica: avances y nuevas aplicaciones ambientales e industriales. [Eva Marguí Grabulosa](#)
- O59** - Análisis ambiental de lodos de lagos glaciares mediante espectroscopía de descomposición inducida por láser. [Juan Buil García](#)
- O60** - Implementación de regresión multivariada para cuantificación de objetos de vidrio mediante FRX portátil. [Diego Ahumada](#)
- OP1** - Caracterización de nanopartículas de oro en matrices biológicas por single particle ICP-MS. [Meritxell Cabré Boqué](#)
- OP2** Recent advances in speciation analysis by high-sensitivity SQ-ICP-MS. [Rui Santos](#)
- OP3** No sólo de análisis vive el dato. [Esther Albertín](#)

## Posters

- P1** - Caracterización, clasificación y autenticación de productos cárnicos mediante huellas HPLC-UV y quimiometría. [Oscar Núñez](#)
- P2** - ¿Puede la impresión 3D proporcionar nuevos sistemas agitadores para mejorar la extracción en fase sólida dispersiva? [Clara Ochoa Estes](#)
- P3** - Nuevo sistema de extracción basado en disco rotativo impreso en 3D para el análisis de herbicidas. [Paula Molina Brotons](#)
- P4** - Purificación de extractos de hoja de olivo mediante resinas poliméricas para la recuperación de polifenoles. [Aina Mir Cerdà](#)
- P5** - Determinación de hormonas en aguas mediante dispositivos 3D modificados con redes metal-orgánicas. [Miguel Ángel Martínez Briones](#)
- P6** - Determinación Voltamperométrica de Eugenol, Cinamaldehído y Cumarina para la discriminación de especies de canela. [Nuria Serrano Plana](#)
- P7** - Discriminación de hierbas relajantes mediante una lengua electrónica voltamperométrica. [Nuria Serrano Plana](#)
- P8** - Fusión de datos cromatográficos y espectroscópicos para la autenticación de hierbas relajantes. [Clara Pérez-Ràfols](#)
- P9** - Extracción con líquidos presurizados y determinación GC/MS de contaminantes modelo en HDPE: aplicación al reciclaje de poliolefinas posconsumo utilizando limoneno. [María Teresa Tena](#)
- P10** - Green determination of regulated PAHs in edible oils. [Lourdes Ramos](#)
- P11** - Sistema de extracción en fase sólida basados en disco rotativo fabricados mediante impresión 3D con materiales sostenibles y modificados con redes metal-orgánicas. [Alejandro Gil Aparicio](#)





- P12** - Bioimágenes cuantitativas de la distribución de proteínas en células individuales mediante ablación láser acoplada a ICP-MS: Nanopartículas metálicas y rojo de Rutenio como marcadores. [Rosario Pereiro](#)
- P13** - Nanoagitación magnética para una transferencia de materia mejorada en medidas espectroelectroquímicas de reflexión. [José Manuel Díaz Cruz](#)
- P14** - Detección voltamperométrica de dopamina utilizando electrodos serigrafados de carbono con recubrimientos capa a capa de polímeros. [José Manuel Díaz Cruz](#)
- P15** - Deep eutectic solvents to extract anthocyanins from red grape skins: experimental and computational approaches for solvent selection. [María Teresa Tena](#)
- P16** - Uso De Dispositivos Basados En Papel Modificados Con Aptámeros Para La Extracción De Bisfenoles De Muestras Ambientales. [Alba Roselló Carrió](#)
- P17** - Evaluación Del Efecto De La Suplementación Con Zn En Proteínas Y Metales Diana En Secciones De Encéfalo Del Modelo Transgénico De Ratón APP/PS1 Mediante LA-ICP-MS. [Jaime Martínez García](#)
- P18** - Nuevas Estrategias Para La Detección Celular Mediante Single Cell ICP-MS: Determinación De Proteínas En Células De Müller Sometidas A Hipoxia. [Alicia Villa Vázquez](#)
- P19** - Efectos De La Suplementación Con Zn En El Metabolismo De Cu, En Suero Y Tejido Hepático, En Un Modelo Experimental De La Enfermedad De Alzheimer. [Marta Marina Latorre](#)
- P20** - Desarrollo De Nanosistemas Basados En Selenio Para El Tratamiento De Enfermedades Infecciosas: Un Enfoque Prometedor En La Lucha Contra La Tuberculosis. [Roberto Álvarez-Fernández García](#)
- P21** - Desarrollo de dispositivos 3D modificados con redes metal-orgánicas para el análisis de antidepressivos. [María Jesús Lerma García](#)
- P22** - "evaluación del contenido de amins biógenas y aminoácidos en chocolates a través de HPLC-MS/MS y técnicas quimiométricas". [Laura Morales Erazo](#)
- P23** - magnetic deep eutectic solvent versus deep eutectic solvent: a comparative study for determination of bisphenols in edible oil samples. [Cristina Zapater](#)
- P24** - Application of a sorbent based on graphene oxide modified with magnetic nanoparticles for the separation of organic contaminants in wastewater. [Ana B. Martínez Piernas](#)
- P25** - The use of deep eutectic solvents in molecularly imprinted polymers from the green analytical chemistry point of view. [Daniel Gallart Mateu](#)
- P26** - Desarrollo de aptasensores para la detección de toxinas marinas en el medioambiente. [Ana Isabel Pérez López](#)
- P27** - Modificación de papel con PVC-difenilamina como fase sorbente sostenible para la extracción de opioides en muestras de saliva. [Ana M. Pedraza-Soto](#)
- P28** - Papel modificado con ácido húmico como sorbente intercambiador catiónico asequible para el aislamiento de drogas básicas en muestras de saliva. [Carlos Calero-Cañuelo](#)
- P29** - Inmovilización de micropartículas de intercambio catiónico sobre papel para el aislamiento selectivo de opioides en muestras de saliva y orina. [Ana M. Pedraza-Soto](#)
- P30** - Análisis de la homeostasis del fósforo en streptomyces coelicolor mediante single cell y single particle ICP-MS. [Paula García Cancela](#)
- P31** - Estudiando la bioacumulación de nanopartículas metálicas en diferentes hongos silvestres comestibles. [Andrés Suárez Priede](#)



- P32** - Caracterización elemental de estructuras nanométricas individuales mediante ICP-MS: desde formas esféricas a nanotubos de hierro y nanobarras de platino. [Sara González Morales](#)
- P33** - Nanosistemas para el transporte de cisplatino: evaluación de la incorporación y distribución espacial en sistemas celulares complejos. [Lucía Gutiérrez Romero](#)
- P34** - Bioaccesibilidad elemental y nanopartículas endógenas en insectos de granja: en busca de alimentos sostenibles de calidad. [Andrés Suárez Priede](#)
- P35** - Trace level determination of 14 phthalates in edible oils by combination of solid-phase microextraction and gas chromatography-mass spectrometry. [Evaristo Ballesteros](#)
- P36** - Monitoring of the presence of benzophenones and derivatives in surface water samples by solid-phase extraction and gas chromatography mass-spectrometry. [Evaristo Ballesteros](#)
- P37** - Extracción en fase sólida de fluoroquinolonas mediante discos rotativos impresos en 3D con agitación dual. [Miriam Beneito Cambra](#)
- P38** - Detección de trazas de nueces y avellanas en alimentos procesados con inmunoplateformas amperométricas desechables. [María Pedrero](#)
- P39** - Extracción con fluidos presurizados de compuestos bioactivos en cáscaras de cacahuete para promover la valorización de residuos y la economía circular. [Ana María Ares Sacristán](#)
- P40** - Extracción ecosostenible de compuestos fenólicos de hojas de olivo: comparación de disolventes eutécticos profundos naturales y convencionales. [Javier Saurina](#)
- P41** - Desarrollo de un sorbente de afinidad en papel origami para la extracción de lisozima. [José Manuel Herrero Martínez](#)
- P42** - Extracción selectiva del ácido domoico mediante piezas impresas en 3D basadas en estructuras LEGO®. [José Manuel Herrero Martínez](#)
- P43** - Plumas de aves marinas como bioindicador de contaminación metálica. [María Estela del Castillo Busto](#)
- P44** - Biomonitorización de metales en orina de población adulta en la Comunidad Valenciana. [Carmen Sáez](#)
- P45** - El rol del catión y el anión en la cromatografía líquida acuosa con dodecilsulfato sódico y líquidos iónicos de imidazolio como reactivos de la fase móvil. [Carlos Josué Tereba Mamani](#)
- P46** - Estudiando la senescencia celular en cáncer colorrectal mediante inmunosensado electroquímico: un gran desafío para entenderlo y tratarlo. [María Pedrero](#)
- P47** - Determinación elemental e isotópica de boro por espectrometría de absorción molecular de alta resolución con cámara de grafito. [Flavio Venancio Nakadi](#)
- P48** - Evaluating antibiotic contamination in mediterranean olive grove soils using ultrasound-assisted extraction combined with solid-phase extraction and liquid chromatography-tandem mass spectrometry. [Andrés J. Rascón](#)
- P49** - Enhancing glycopeptide separation and identification: microseparation techniques coupled to mass spectrometry. [Laura Pont](#)
- P50** - Simple and low-cost auto-sampling system for wastewater monitoring. [Miguel Muñoz Bartual](#)
- P51** - Micro-solid phase extraction of pharmaceuticals and illicit drugs from wastewaters using monolith-coated syringe filters. [Miguel Muñoz Bartual](#)
- P52** - Empleo de materiales naturales modificados como sorbentes para microextracción en fase sólida de drogas y fármacos. [Patricia García Atienza](#)



- P53** - Nueva estrategia para la evaluación de CuONPs en alimentos de origen marino: hidrólisis enzimática asistida por ultrasonidos optimizada mediante análisis de superficies de respuesta y posterior monitorización mediante Sp-ICP-MS. [Ángel Ríos Castro](#)
- P54** - El empleo de medidas de ICP-MS de célula individual (SC-ICP-MS) en estudios de inmunoterapia. [Ángela de La Rosa Díaz](#)
- P55** - How excitation-emission matrices have revolutionised multi-way data analyses – a roadmap for multi-way calibration method developments. [Arsenio Muñoz de La Peña](#)
- P56** - El rol de la impresión 3D en la preparación de fases sorbentes planas y su aplicación en la etapa de preparación de muestra. [Francisco Antonio Casado-Carmona](#)
- P57** - Autenticación de café mediante HS-SPME-GC-MS y quimiometría. Aplicación a la detección y cuantificación de adulteraciones. [Nerea Núñez](#)
- P58** - Desarrollo de un biosensor basado en papel origami para la detección de  $\beta$ -Lactoglobulina en muestras alimentarias. [María Jesús Lerma García](#)
- P59** - Autenticación de café adulterado mediante FIA-ESI-MS y quimiometría. [Nerea Núñez](#)
- P60** - Influencia del catión/anión empleado como agente coacervante en la síntesis de BioSUPRAS de 1,2-Hexanodiol. [Noelia Caballero Casero](#)
- P61** - Síntesis de bioSUPRAS para la obtención de polifenoles a partir de plantas subutilizadas. [Noelia Caballero Casero](#)
- P62** - Near-infrared enhanced rhodium-based nanozyme for biofilm eradication via depropargylation. [Andrés Machuca Marcos](#)
- P63** - Nuevo biodisolvente supramolecular (BioSUPRAS) para la valorización de residuos de poda. [Alejandro Pulido Zurera](#)
- P64** - Uso de intercambiadores catiónicos débiles basados en serrín como fases sorbentes en la determinación de antidepresivos en saliva mediante espectrometría de masas. [Jaime Millán-Santiago](#)
- P65** - Cinta de aluminio recubierta con micropartículas de intercambio iónico y su combinación directa con espectrometría de masas ambiental. [Francisco Antonio Casado-Carmona](#)
- P66** - Egg white-assisted fast green synthesis of fluorescent copper nanoparticles: characterization and sensing applications. [Dimitrios Ziogkas](#)
- P67** - Desarrollo de nuevos biodisolventes supramoleculares para la valorización de residuos agroalimentarios. [María Loreto Lunar Reyes](#)
- P68** - Determinación de bisfenoles en fluido seminal mediante microextracción dispersiva por sorción sobre barra agitadora miniaturizada. [Andreu L. López-Juan](#)
- P69** - Tuning the properties of imprinted nanoparticles as antibody substitutes for bioanalysis: assessing the influence of the cross-linking degree and the peptide length used as template. [Alberto Gómez Caballero](#)
- P70** - Determinación de tetraciclinas en muestras ambientales sólidas mediante dispersión de matriz en fase sólida. [Noelia García Criado](#)
- P71** - Microextracción en fase sólida dispersiva en punta de pipeta con sorbentes magnéticos como potencial herramienta en el diagnóstico no invasivo de cáncer de mama. [Luis Miguel Moreno-Calleja](#)
- P72** - Separation of complex mixtures of duplex and triplex DNA structures by capillary electrophoresis and multivariate curve resolution. [Kanan Hatamli](#)



- P73** - Uso de redes metal-orgánicas en la determinación quimioluminiscente de peróxido de hidrógeno. [Natalia Piqueras García](#)
- P74** - Impulsando la miniaturización en el análisis clínico: determinación de bisfenoles en suero y orina empleando la microextracción dispersiva por sorción sobre barra agitadora miniaturizada. [Guillem Peris-Pastor](#)
- P75** - Determinación de sulfamidas en aguas basada en extracción en fase sólida magnética con adsorbentes comerciales incrustados. [Francisco Javier Guzmán Bernardo](#)
- P76** - Solid-phase synthesis of peptide imprinted nanoparticles targeting the SARS-CoV-2 spike protein as recognition elements for sensing. [Nora Unceta Zaballa](#)
- P77** - Solvent-assisted laser desorption coupled to flexible microtube plasma mass spectrometry for direct analysis of dried samples on paper. [Juan Francisco García Reyes](#)
- P78** - Metal-Organic Framework-coated glass vials: a step forward in analytical platforms. [Jorge Pasán](#)
- P79** - Monte Carlo peaks: generación aleatoria de bandas simuladas para la obtención de conjuntos de datos no dependientes de factores biológicos. [Jaume Bejar Grimalt](#)
- P80** - Microextracción en fase sólida dispersiva con MOFs comerciales y LC-MS/MS para la determinación de isoflavonas en bebidas de soja. [Myriam Bustamante Rangel](#)
- P81** - Chemometrical approach for the identification of the metabolism pathway of the synthetic cathinone  $\alpha$ -phip using upcyte human hepatocytes. [Francesc A. Esteve Turrillas](#)
- P82** - Optimización de un sensor electroquímico para la detección de bisfenol a utilizando polímeros de impresión molecular basados en óxido de grafeno magnético. [Lourdes Mena Herrera](#)
- P83** - Microextracción in-situ de benzofenonas en agua mediante cintas magnéticas híbridas basadas en la integración de dominios micro y nanométricos. [Rafael Lucena](#)
- P84** - Desarrollo de un dispositivo para la microextracción dispersiva por sorción sobre barra agitadora miniaturizada basado en placas de 96 posiciones: aplicación a la determinación de THC Y CBD en saliva de fumadores de marihuana. [Cristian Azorín](#)
- P85** - Real-Time Monitoring of ions at the Single-Cell Scale with potentiometric nanosensors. [Francisco Baños-Costa](#)
- P86** - Olive oil as plasticizer in polymeric ion-selective membranes for potentiometric measurements. [Francisco Baños-Costa](#)
- P87** - Desarrollos microfluidicos para la determinación eficiente y diferenciada de xantina e hipoxantina en el control de calidad de alimentos. [Ángel López Molinero](#)
- P88** - Vibrational spectroscopy-chemometrics tandem as green analytical tool for industry quality control. [Salvador Garrigues](#)
- P89** - Disolventes eutécticos profundos naturales (nades) como alternativa verde para la obtención de carotenoides a partir de residuos de tomate. [Rosa María Alonso Rojas](#)
- P90** - Desarrollo de una metodología quiral rápida por electroforesis capilar para la separación simultánea de los enantiómeros del fungicida Fenpropidin y su metabolito ácido. [Laura García Cansino](#)
- P91** - Biosensor electroquímico de grafeno inducido por láser para la detección de lactato. [Isabel Blasco Pascual](#)
- P92** - Plataforma multisensora biocompatible para detección de frescura de alimentos. [M<sup>a</sup> Angustias Torres-Molina Jiménez](#)



- P93** - Aplicaciones de las técnicas electroanalíticas en la caracterización de nanopartículas metálicas, microplásticos y en su interacción con contaminantes emergentes. [Juan Carlos Vidal Ibáñez](#)
- P94** - Extracción selectiva de mercaptanos, usando sales de Cu(I) en lechos de fase sólida. Aplicación a cinco mercaptanos polifuncionales en vino. [Ana Escudero Carra](#)
- P95** - A preliminary survey of the presence of organic micropollutants adsorbed onto microplastics from insular coasts. [José Juan Santana Rodríguez](#)
- P96** - Validación de un procedimiento analítico para identificar y cuantificar microplásticos y sus metales asociados. [José M. Andrade Garda](#)
- P97** - Análisis de azul de metileno en aguas con dispositivos colorimétricos in-situ empleando piezas impresas en 3D. [Roser Payà Pou](#)
- P98** - Acumulación y metabolización del antidepresivo venlafaxina y su metabolito principal O-Desmetilvenlafaxina en tres organismos marinos: *Holothuria Tubulosa*, *Anemonia Sulcata* y *Actinia Equina*. [Alberto Zafra Gómez](#)
- P99** - Bioacumulación de alteradores endocrinos químicos en la pared corporal del bioindicador marino *holothuria tubulosa*. Análisis mediante GC-MS/MS. [Alberto Zafra Gómez](#)
- P100** - Nuevo enfoque para la generación de la molécula caf utilizando libs: reacción en fase gaseosa. [Alicia García García](#)
- P101** - Redes metal orgánicas fluorescentes como alternativa a métodos convencionales para establecer la capacidad antioxidante en alimentos. [Enrique Javier Carrasco Correa](#)
- P102** - Presencia de arsénico en algas comestibles: evaluación de riesgos para la salud. [Dolores Barrón Bueno](#)
- P103** - Diseño de un método cinético para la determinación de vitamina C en cosméticos para el cuidado facial. [Vanesa Romero](#)
- P104** - Droplet luminescent Assays for fish freshness assessment using smartphone-based detection. [Nerea Villarino García](#)
- P105** - Elucidación del mecanismo de toxicidad asociado a la exposición a puntos cuánticos de perovskita de CsPbBr<sub>2</sub>I mediante metabolómica basada en Espectrometría de Masas. [Estefanía García Calvo](#)
- P106** - Desarrollo de metodología analítica para la determinación de aminas biógenas y aminoácidos en muestras de chocolate. [Laura Morales Erazo](#)
- P107** - Evaluación de diferentes alternativas de pre-procesamiento de espectros de fluorescencia de rayos X. [Diego Ahumada Forigua](#)
- P108** - Hacia un modelo global unificado de retención para predecir huellas cromatográficas de muestras medicinales no relacionadas. [Pau Peiró Vila](#)
- P109** - REefVOLUTION: Reef-Centered analytical tools for bioremediation in marine ecosystems. [Carlos Pagan-Galbarro](#)
- P110** - Estudio de la evolución de compuestos volátiles y eficacia antifúngica de un nuevo envase activo para fruta y verdura basado en aceites esenciales. [Esther Asensio Casas](#)
- P111** - Determination of cocaine in camouflaged samples by using a green methodology. [Daniel Gallart Mateu](#)
- P112** - Estudio de la variación de la forma del pico de sustancias polares en función del contenido de modificador y la temperatura: comparación de columnas de distinta naturaleza. [Juan José Baeza Baeza](#)



- P113** - Estudio de la elución de compuestos polares con fases móviles submicelares en función de la concentración de acetonitrilo y la temperatura. [Juan José Baeza Baeza](#)
- P114** - Determinación del alérgeno Ara H1 en alimentos mediante el uso de aptámeros fluorescentes. [Miriam Beneito Cambra](#)
- P115** - Evaluating commercial vs. open-source data processing methods in GC-orbitrap-HRMS untargeted metabolomics for food authentication: thyme as a case study. [Araceli Rivera Pérez](#)
- P116** - Detection and quantification of  $\beta$ -Casomorphin-5 and -7 in bovine milk hydrolysates by capillary electrophoresis-mass spectrometry. [Tahereh Tehrani](#)
- P117** - Green analytical method for simultaneous determination of phthalate esters, adipate, and halodiphenyl ether residues in honeys from different botanical origins by GC-MS. [Ana M. Ares Sacristán](#)
- P118** - Development and validation of different analytical methods for determining pesticides in bee products. [José Bernal Del Nozal](#)
- P119** - Authenticating bee pollen origin by using high performance liquid chromatography. [José Bernal Del Nozal](#)
- P120** - Evaluación de la seguridad de poliolefinas recicladas destinadas al contacto con alimentos. [Estela Pérez Bondía](#)
- P121** - Desarrollo y validación de una nueva metodología analítica para la determinación de ftalatos en polen de abeja. [Beatriz Martín Gómez](#)
- P122** - Modelización de la transición del comportamiento cromatográfico entre la cromatografía líquida de fase inversa convencional y las modalidades submicelar y micelar. [Carlos Josué Tereba Mamani](#)
- P123** - Análisis y cuantificación de drogas y medicamentos en polvo del interior de diferentes entornos públicos del sur de España. [Cristina De Dios Pérez](#)
- P124** - Parental obesity predisposes the offspring to exacerbated metabolic disturbances later in childhood. [Raúl González Domínguez](#)
- P125** - ¿Es el Bisfenol A asociado a microplásticos menos biodisponible que el Bisfenol A libre?. [Llucia Garcia-Moll](#)
- P126** - Evaluación del riesgo químico en envases para alimentación infantil. [Margarita Aznar Ramos](#)
- P127** - Estudio integral de la degradación de dos bioplaguicidas y de la toxicidad de sus metabolitos tras su aplicación en pepino. [Alba Reyes Ávila](#)
- P128** - Metabolomics investigation of the beneficial effect of acute seaweed consumption in modulating the metabolic stress induced by a mixed-meal challenge. [Raúl González Domínguez](#)
- P129** - Bioaccesibilidad oral in vitro de elementos traza y nanopartículas de ZnO en algas marinas. [María Carmen Barciela Alonso](#)
- P130** - Development of a HILIC-MS/MS method for the determination of highly polar anionic pesticides in soils. [David Moreno González](#)
- P131** - Análisis y evaluación de la bioaccesibilidad in vitro de las Aflatoxinas B1, B2, G1 Y G2 en leches vegetales. [Emma Gracia Lor](#)
- P132** - Evaluación de diferentes tratamientos para la extracción de ARNm encapsulado en nanopartículas lipídicas de la Vacuna Comirnaty® (Pfizer): Espectrofotometría UV Y DLS como técnicas de confirmación. [Pilar Baena Álvarez](#)



**P133** - Caracterización analítica de nanopartículas de ZnO como aditivo en la fabricación de hormigones ligeros y estudio de su distribución superficial mediante Rayos-X y Espectrometría de Masas. [Diego Panizo Martín](#)

**P134** - Acoplamiento de una precolumna HILIC con espectrometría de masas en tándem para la determinación rápida y sin derivatización de malondialdehído en orina. [Diego García-Gómez](#)

**P135** - Upcycling polyphenols from industrial olive oil waste (LIFE CYCLOPS Project). [Rubén Titos Guillén](#)

**P136** - “Efecto Caballo de Troya” en la exposición conjunta de nanoplásticos y contaminantes orgánicos. Evaluación de la absorción y toxicidad en células de Pez Cebra. [Paloma de Oro Carretero](#)

**P137** - Estudio de la composición polifenólica y la capacidad antioxidante de extractos de hojas de olivo de diversas variedades. [Aina Mir Cerdà](#)

**P138** - Determinación de biotoxinas marinas lipofílicas en moluscos bivalvos mediante LC-HRMS. [Alejandro García Juan](#)

**P139** - Estudio del metabolismo in vitro de las catinonas sintéticas 3-CMC Y 4-CMC. [María Garrigues Ruiz](#)

**P140** - Determinación de la radiopureza de materiales de construcción del detector de materia oscura (Ds-50) para el experimento ArDM mediante técnicas de espectrometría de masas. [Ana Barrado Olmedo](#)

**P141** - Development and application of a non-target screening strategy for the identification of organic contaminants in surface waters in the Guadalquivir river basin. [Alfonso Fernández García](#)

**P142** - Estudios de disipación y degradación de plastificantes no ftálicos en suelo. [Raquel Capilla Flores](#)

**P143** - Resistencia a cisplatino en células tumorales: caracterización de modelos celulares derivados de paciente utilizando herramientas bioanalíticas basadas en espectrometría de masas. [Carlos López Portugués](#)

**P144** - Comparación de sondas de marcaje elemental para anticuerpos y su empleo en estudios de cuantificación de biomoléculas. [Ángela De La Rosa Díaz](#)

**P145** Determination of tartaric acid in ancient pottery as wine marker. [Sonia Sentellas](#)

**P146** - Aplicación de la resina Macroporosa Lewatit S7968 a la recuperación y purificación de polifenoles procedentes de residuos agroalimentarios. [Sonia Sentellas](#)

**P147** - Estudio de diferentes muestreadores pasivos para la monitorización de contaminantes regulados y emergentes en el medio marino. [Javier López Vázquez](#)

**P148** - Evaluación de diferentes estrategias de purificación y aislamiento de ARNm encapsulado en nanopartículas lipídicas: Vacuna Comirnaty® como caso de estudio. [Pilar Baena Álvarez](#)

**P149** - Perspectivas para la valorización de residuos obtenidos durante la producción de aceite de oliva: Caracterización, Extracción, Purificación Y Aplicaciones. [Javier Saurina](#)

**P150** - Identificación de los metabolitos de la 1,3-Difenilguanidina y la 1,3-Di-O-Tolilguanidina mediante estudios de metabolismo in-vitro de hígado humano. [Rosario Rodil Rodríguez](#)

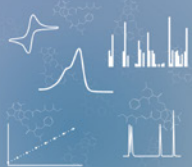
**P151** - Cloración de los fármacos antipsicóticos Amisulpride, Sulpiride Y Tiapride en aguas. [Rosario Rodil Rodríguez](#)

**P152** - Determinación y destino medioambiental de pesticidas asociados a plásticos de uso agrícola. [Victoria Fernández Fernández](#)



- P153** - Acoplamiento directo de una precolumna de protección a un espectrómetro de masas de alta resolución (Orbitrap) para la determinación de aminoácidos no derivatizados en orina. [Encarnación Rodríguez Gonzalo](#)
- P154** - Multideterminación de micotoxinas en alimentos sólidos y líquidos mediante disolventes supramoleculares combinados con LC-MS/MS. [Luis Muñiz de Bustamante](#)
- P155** - Release of heavy metals from microplastics during in vitro fish gastrointestinal digestion. [Eduardo Bolea Morales](#)
- P156** - Desarrollo de un método analítico para la determinación de citrinina en alimentos empleando UHPLC-MS/MS. [Olga Pardo Marín](#)
- P157** - Determinación de biomarcadores de estrés oxidativo en orina mediante UPLC-MS/MS. [Olga Pardo Marín](#)
- P158** - On-line aptamer affinity solid phase extraction capillary electrophoresis-mass spectrometry for the analysis of protein biomarkers at the intact level in biofluids and food. [Fernando Benavente](#)
- P159** - Nueva estrategia analítica para determinar revumenib en muestras clínicas complejas: Un prometedor quimioterapéutico en la lucha contra la leucemia mieloide aguda. [Rosa Carmen Rodríguez Martín-Doimeadios](#)
- P160** - Muestreo no invasivo en la determinación de biomarcadores de neuroblastoma en orina de bebé mediante CE-UV. [José Grau](#)
- P161** - Métodos colorimétricos para la determinación de clorato en medio acuoso. [Ainara Cirion](#)
- P162** - Detección de contaminantes persistentes, móviles y tóxicos en matrices acuosas mediante cromatografía de líquidos y espectrometría de masas de alta resolución. [Mauricio Perin](#)
- P163** - Determinación enantioselectiva de los principales antibióticos fluoroquinolonas y sus metabolitos en aguas residuales y superficiales. [Noelia García Criado](#)
- P164** - Desarrollo de un método para la detección (Screening) de contaminantes persistentes, móviles y tóxicos en muestras de polvo doméstico. [Mauricio Perin](#)
- P165** - Determinación de la calidad de los alimentos mediante el análisis de la ruta de degradación del ATP. [Javier Camacho-Aguayo](#)
- P166** - Profiling of olive oil phytosterols by liquid chromatography/time-of-flight mass spectrometry using different atmospheric-pressure ionization sources. [Irene Caño Carrillo](#)
- P167** - Test colorimétrico enzimático para la determinación de atropina utilizando un smartphone. [Mario Domínguez García](#)
- P168** - Estudio ecotoxicológico de un nanomaterial de plata usado como aditivo en piensos mediante técnicas basadas en la detección de células individuales. [María Sierra Jiménez García-Alcalá](#)
- P169** - Hacia un modelo global para la detección de la enfermedad renal diabética utilizando ATR-FTIR. [Víctor Navarro Esteve](#)
- P170** - Nuevo método de determinación de antimonio en aguas contaminadas mediante GFAAS. [Andrea Muñoz García](#)
- P171** - Uso de TXRF y  $\mu$ -XRF en estudios de laboratorio relacionados con la presencia y adsorción de metales en (micro)plásticos. [Eva Margui Garbulosa](#)
- P172** - Determination of synthetic cathinones in oral fluids using a molecular imprinting polymer and gas Chromatography-Mass spectrometry. [Francesc A. Esteve Turrillas](#)





**P173** - Desarrollo y validación de un método no separativo para la determinación simultánea de nucleósidos metilados en orina mediante inyección directa en un espectrómetro de masas en tándem (MS/MS) con triple cuadrupolo. [Myriam Bustamante Rangel](#)

**P174** - Extracción, preconcentración y determinación de arsénico en agua potable mediante GFAAS. [Álvaro Doblado Onieva](#)

**P175** - Control De Calidad Y Seguridad Alimentaria Basado En La Detección óptica De Aminas Biogénicas En Alimentos. [Inmaculada Ortiz Gómez](#)

**P176** - El reto de desarrollar un método multirresiduo para 250 plaguicidas por cromatografía de gases-espectrometría de masas de alta resolución en leche de origen animal y vegetal. [Marta Vargas Pérez](#)

**P177** - Determinación de DNA de sésamo basado en el empleo de nanopartículas de oro funcionalizadas y un software de análisis de color. [Inmaculada Ortiz Gómez](#)

**P178** - Aplicación de la desorción térmica y la cromatografía de gases con detección mediante espectrometría de masas en tándem para la identificación y cuantificación de microplásticos en matrices ambientales. [Laura Martín Pozo](#)

**P179** - Determinación de compuestos de silicio en aceite de pirólisis de plásticos mediante cromatografía y espectrometría de masas. [Francisco Calderón Celis](#)

**P180** - Determination of antioxidant activity (DPPH and ABTS methods) and total phenolic content (Folin-Ciocalteu and Fast Blue BB Assays) of different teas and infusions by digital image analysis. [Maidier Zugazua Ganado](#)

**P181** - Determinación de pesticidas Neonicotinoides en muestras alimentarias de origen vegetal mediante fluorescencia molecular fotoinducida. [Nielene María Mora Diez](#)

**P182** - Determinación de pesticidas Carbámicos mediante HPLC-DAD en muestras de agua de río y mosto. [Nielene María Mora Diez](#)

**P183** - Determinación conjunta de metabolitos endógenos procedentes de estrés oxidativo y nitrativo en orina mediante cromatografía líquida de modo mixto con espectrometría de masas en tándem. [Eliseo Herrero Hernández](#)

**P184** - Fluorescencia intrínseca de aminoácidos aromáticos para el análisis de biofármacos proteicos: Pembrolizumab y Vosoritida. [Natalia Navas Iglesias](#)

**P185** - Determinación de microplásticos en presencia de grandes cantidades de partículas empleando espectrometría IR mediante láser de cascada cuántica. [José Manuel Andrade Garda](#)

**P186** - Estudio de la seguridad alimentaria del uso de bolsas de hidratación de PUT mediante el análisis de migración de compuestos volátiles y no volátiles. [Carlos Jiménez Estremera](#)

**P187** - Estudio de la degradación de fármacos quirales en suelos tratados con lodos de depuradora o regados con agua residual. [Irene Aparicio](#)

**P188** - Acoplamiento de un material de acceso restringido (RAM) con espectrometría de masas en tándem para la determinación rápida en orina de metabolitos de retardantes de llama. [Gabriela Cristina Chango Lescano](#)

**P189** - Determinación enzimática simultánea de Hipoxantina y Xantina. [Isabel Sanz Vicente](#)

**P190** - Simbióticos productores de ácidos grasos de cadena corta para el tratamiento de la obesidad infantil. [Rosa María Alonso Rojas](#)

**P191** - Características analíticas de la determinación enzimática de xantina. Referencias para su implementación en el control de la calidad de alimentos. [Ángel López Molinero](#)



# XXIV Reunión de la SEQA

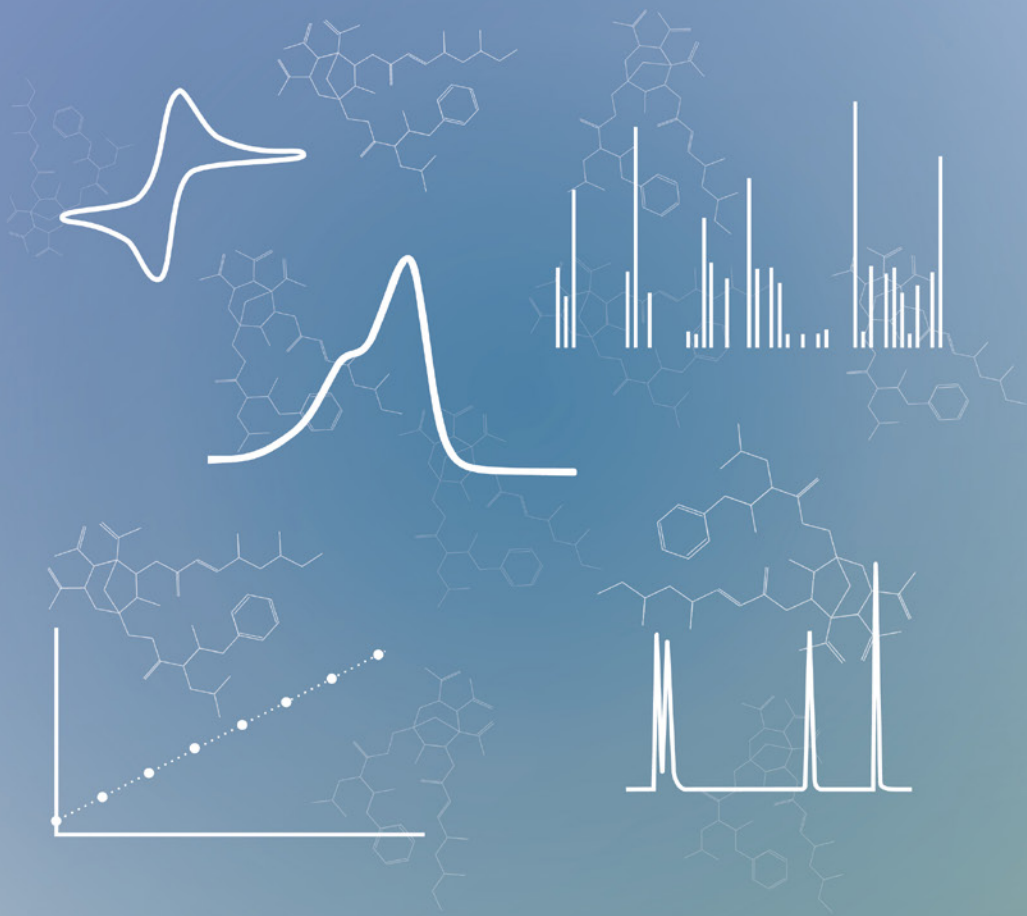
Sociedad Española de Química Analítica

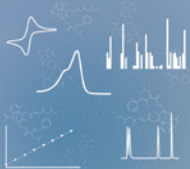


ZARAGOZA 1-3 JULIO 2024

- P192** - Determination of pharmaceutical and illicit drugs in wastewater by solid-phase extraction and Liquid Chromatography-Tandem Mass Spectrometry. [Miguel Muñoz Bartual](#)
- P193** - Perfil de compuestos volátiles en avispones y nidos para la diferenciación de colonias de vespa velutina. [Omaira de la Hera Fernández](#)
- P194** - Estudio estacional de la presencia de antibióticos en los puntos de La Red Natura 2000 del curso central del Río Tajo en Castilla-La Mancha. [Cristina De Los Reyes Ramos](#)
- P195** - Comparación del perfil fenólico de aceites de oliva vírgenes provenientes de olivares sometidos a distintos regímenes agronómicos. [Lucía Olmo García](#)
- P196** - Empleo de una aproximación no dirigida LC-IMS-MS para investigar el perfil metabólico de frutos de aguacate cultivados en diversas regiones de la Península Ibérica- [Maria Gemma Beiro Valenzuela](#)
- P197** - Estudio de la evolución cuantitativa de fitoquímicos de interés del mesocarpio del aguacate durante su maduración: Targeted LC-MS para comparar variedades hass, fuerte y bacon. [Alegría Carrasco Pancorbo](#)
- P198** - Estudio de las alteraciones del perfil lipídico durante el envejecimiento visual mediante espectrometría de masas de alta resolución. [Clara de Lorenzo González](#)
- P199** - Lipidómica y transcriptómica de la incorporación de ácido erúico en la biosíntesis de triacilglicerol durante la maduración de las semillas de Pennycress (*Thlaspi arvense*). [Vicente L. Cebolla Burillo](#)
- P200** - Ensayo de amplificación acoplado a nanopartículas de oro para detección de especies marinas. [Patricia Alcázar](#)
- P201** - Validation of different strategies of optical POCs for biomarkers of the quorum sensing system of *Staphylococcus aureus*. [Arantza Narváez](#)
- P202** - Design and electrochemical characterization of DNA-Ag-NCs as labels for immunoassays. [Arantza Narváez](#)

# RESÚMENES





## CONFERENCIA PLENARIA JORNADA ESPECIACIÓN

### EPL1

#### **Speciation challenges from 2d to 3d applied environmental and food applications: a long journey.**

Olivier F.X Donard

*IPREM CNRS, Hélioparc, Pau, 64000, France*

Atomic spectrometry delivers a 1 D information that is the concentration of the analytes in the detector. However, inorganic constituents are very seldom present in the matrix as free ions. They are often engaged under different molecular structures, inorganic complex, organometallic moieties, belong to large biomolecules or have specific spatial arrangements when dealing with solids. So inorganic concentrations are not enough to understand processes, toxicity and impacts of elements in the environment, to the biota or to unravel industrial processes. The concept of speciation allows to have a better understanding of their fate and impacts. There is also the need for a second dimension and a 3rd dimension to yield the concepts of speciation, in liquids and solids. Then we can see that reactions are not homogenous in different phases and we need to have a discretization of the information before we integrate it at larger scales for a global better understanding. We will ramble through the different analytical strategies to improve our understanding of fate and impacts of elements and their species in the environment, in food and solid-state materials for energy.



## CONFERENCIAS PLENARIAS REUNIÓN SEQA

### PL1

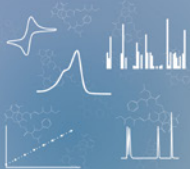
#### **Dispositivos Biosensores Nanofotónicos: herramientas avanzadas para el diagnóstico clínico descentralizado**

Laura M. Lechuga Gómez  
*Instituto Catalán de Nanociencia y Nanotecnología (ICN2)*  
*CSIC, BIST y CIBER-BBN*  
*Barcelona*

El diagnóstico en la era postpandemia (rápido, preciso, mínimamente invasivo y portátil) se configura como un área clave en la medicina del futuro donde el diagnóstico precoz de enfermedades tales como el cáncer o las infecciones, usando tan solo unas gotas de nuestra sangre u orina, es uno de sus principales desafíos.

Los nanobiosensores fotónicos son una de las mejores alternativas para abordar este desafío. Las principales ventajas de esta tecnología incluyen su tamaño reducido y su alta escalabilidad lo que permite una detección multiplexada y una producción a bajo coste. Esta tecnología es capaz de proporcionar análisis de muy alta sensibilidad, fiables y muy selectivos, sin necesidad de marcajes o pasos de amplificación, y con cortos tiempos de respuesta.

Nuestros biosensores nanofotónicos de última generación ya han demostrado sus excelentes capacidades de análisis mostrando límites de detección de biomarcadores clínicos a nivel pM-fM, directamente en fluidos corporales, en pocos minutos y en entornos descentralizados. Hemos demostrado la utilidad de esta tecnología nanofotónica para la identificación ultrasensible de bacterias patógenas y su perfil de resistencia a antibióticos, la monitorización de tratamientos con fármacos como antibióticos o anticoagulantes, el diagnóstico precoz de cáncer mediante biomarcadores epigénéticos o el diagnóstico precoz de Parkinson, entre otros muchos ejemplos.



## PL2

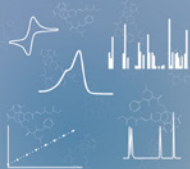
### High-throughput analysis on microfluidic devices

Prof. Petra Dittrich

*Department of Biosystems Science and Engineering, ETH Zürich, CH-4056 Basel/Switzerland*

Droplet microfluidics is a powerful method for high throughput analysis, e.g. for screening reaction conditions, synthesizing particles, or single-cell analysis and other bioanalytical tasks. We employ droplet-based methods on an open platform, which is conceptionally similar to a multi-well plate, however, has a massively increased density of wells and hence, throughput. Thousands of aqueous nL-droplets are deposited on a custom-made glass slide that has a defined hydrophilic-hydrophobic surface pattern. The droplets are covered by fluorinated oil and remain stable for several days. We can employ optical microscopy for droplet assessment as well as MALDI-MS imaging for analysis of the droplet composition. In this presentation, I will show selected examples how we utilized this platform in the context of high throughput analysis.

In addition, microfluidic solutions for single-cell analysis will be presented, particularly useful for characterization of secreted compounds, e.g. cytokines or extracellular vesicles. In this regard, a platform with 100 000 compartments was developed that facilitates the multiplexed analysis of signaling factors from single macrophages. This is achieved by co-encapsulating the cells and barcoded, magnetic beads in the compartments. The beads are functionalized to perform specific immunoassays for detecting and quantification of the cytokines.



## PL3

### **Contaminantes emergentes en alimentos: estrategias analíticas alternativas para su detección y conexión con el exposoma**

Ana M. García-Campaña

*Grupo FQM-302 “Calidad en Química Analítica Alimentaria, Ambiental y Clínica”, Depto. Química Analítica,  
Facultad de Ciencias, Universidad de Granada, 18071, Granada, Spain,  
amgarcia@ugr.es*

La Autoridad Europea de Seguridad Alimentaria (EFSA) define “riesgo emergente” para la salud humana, animal y/o vegetal como aquel ocasionado por un nuevo peligro o por una mayor susceptibilidad o exposición a un peligro conocido. El cambio climático, la actividad industrial y la modificación de las prácticas en agricultura y ganadería han favorecido su aparición. La identificación exitosa de riesgos emergentes en alimentos y medioambiente es uno de los principales objetivos para proteger la salud pública y para ello se requieren de herramientas analíticas avanzadas para la detección y control de estos compuestos de modo selectivo, preciso y con elevada sensibilidad.

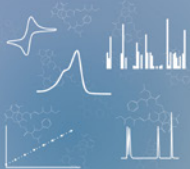
En esta comunicación se muestra el potencial de la Electroforesis Capilar (CE) y la Cromatografía Líquida de Interacción Hidrofílica (HILIC) acopladas a la espectrometría de masas (MS) como técnicas alternativas para el control de residuos de fármacos de uso veterinario en alimentos de origen animal, plaguicidas en muestras alimentarias y medioambientales o toxinas naturales, como micotoxinas emergentes o cianotoxinas, que pueden encontrarse en alimentos como cereales o suplementos nutricionales a base de cereales y plantas, o en aguas de embalses, vegetales regados con éstas o suplementos nutricionales a base de algas, respectivamente. Diferentes modos en CE, como la electroforesis capilar zonal (CZE), la cromatografía capilar electrocinética micelar (MEKC) o la modalidad de CE no acuosa (NACE) acopladas a la detección por MS se han empleado en combinación con estrategias eficaces y sostenibles de tratamiento de muestras implementando modos de preconcentración de los analitos en el propio capilar (in-line) para aumentar la sensibilidad, demostrando su validez en su aplicación a muestras reales.

Igualmente se demostrará que la espectrometría de movilidad iónica (IMS) incorporada a los flujos de trabajo de LC-MS proporciona una nueva dimensión en la identificación de estos compuestos, mediante la sección transversal de colisión (CCS), ayudando a la separación de compuestos estructuralmente similares y mejorando la selectividad y sensibilidad.

Finalmente, en un último paso se intenta evaluar la exposición a estos contaminantes mediante una aproximación exposómica, que implica la determinación de xenobióticos y/o sus metabolitos (biomarcadores de exposición) en fluidos biológicos, previo al estudio de la respuesta biológica asociada con la exposición a químicos (biomarcadores de efecto).

#### **Agradecimientos**

Proyecto de I+D+i /PID2021-127804OB-I00, financiado por MICIU/AEI/10.13039/501100011033/ y “FEDER/UE” y Proyecto B-AGR-202-UGR20 financiado por la Junta de Andalucía-Programa Operativo FEDER.



## PL4

### **Chemical analysis in planetary exploration. The instrument suite of the NASA's MARS 2020 mission Perseverance rover**

Javier Laserna

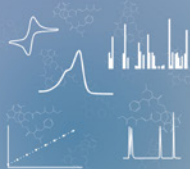
*Department of Analytical Chemistry, University of Málaga, Málaga, Spain*

Spacecrafts equipped with pioneering spectroscopic techniques have been used since the beginning of planetary exploration. Due to the broad number of possible scenarios, a large number of sensing principles, initially developed for laboratory use, had to be adapted not only to the extreme conditions of space, also to the autonomous operation by robotic systems in rovers or landers of largely differing operating characteristics.

Determination of composition of rocks and soils in Mars is central to one of the prime objectives of the NASA MARS 2020 mission - identify past environments capable of supporting microbial life. Context and fine-scale mineralogy, detailed imaging and characterization and detection of elements and organic constituents are the main focus of the ongoing campaign on Mars.

This talk will present an overview of the instrumental techniques on board the Perseverance rover, with emphasis on the SuperCam instrument. Measurement principles and characteristics of the instruments will be presented with a discussion of their capabilities.





## CONFERENCIAS INVITADAS REUNIÓN SEQA

### INV1

#### The Circular Analytical Chemistry Opportunity

Elia Psillakis

*School of Chemical and Environmental Engineering, Technical University of Crete, University Campus, 73100, Chania-Crete, Greece*

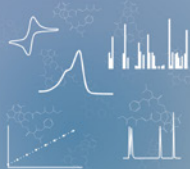
The use of analytical methods and techniques ensures the high quality, safety, and compliance of materials and products cycled back in circular economy systems. Despite this connection, the analytical chemistry sector still largely adheres to the linear “take-make-consume and dispose” model, requiring a continuous supply of resources and generating hazardous waste.

This contribution presents the new concept of circular analytical chemistry that aims to decouple analytical performance rates from resource consumption rates [1]. The concept is formulated in the form of twelve goals that facilitate the transition towards a resource-efficient, closed-loop, and waste-free analytical chemistry sector. These goals cover the entire lifecycle of products and build upon the knowledge gained from circular economy and chemistry principles, sustainability practices, and green analytical chemistry. Circular analytical chemistry goes beyond the greenness of analytical methods and targets the radical transformation of the entire production, consumption, and disposal system by establishing connections between post-use and production stages.

The alignment of analytical chemistry with the circular economy, along with the integration of sustainability considerations, is a crucial paradigm shift that is essential for the sector to support global efforts in protecting the environment and achieving sustainable development.

#### References:

- [1] E. Psillakis, F. Pena-Pereira, The twelve goals of circular analytical chemistry, *TrAC Trends Anal. Chem.* 175 (2024) 117686. <https://doi.org/10.1016/j.trac.2024.117686>.



## INV2

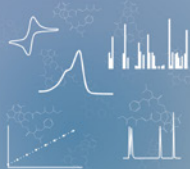
### **Comprehensive research of organic (micro)pollutants in the aquatic environment: role of chromatography-HRMS**

Félix Hernández Hernández

*Research Institute for Pesticides and Waters, University Jaume I, Castellón, Spain*

*felix.hernandez@uji.es*

The comprehensive investigation of hazardous compounds in aquatic environments poses a significant analytical challenge due to the vast number of compounds and their diverse physicochemical properties. One of the primary difficulties is the identification of the numerous organic micropollutants (OMPs) potentially present in the samples. Currently, one of the most effective approaches to address this challenge is the application of wide-scope screening using both gas chromatography (GC) and liquid chromatography (LC) coupled with high-resolution mass spectrometry (HRMS). This methodology enables the detection and identification of a broad range of OMPs with varying polarities and volatilities. This presentation provides a holistic overview of the analytical research on OMPs in aquatic environments, encompassing both targeted quantitative analysis (typically using tandem low-resolution MS) and qualitative screening utilizing HRMS. The critical role of HRMS in wide-scope screening is highlighted, and various strategies employing GC and LC coupled with HRMS are discussed, including target, suspect, and non-target screening. Illustrative examples are provided based on the availability of reference standards and the type of instrumentation used. Additionally, the presentation highlights the added value of ion mobility separation for compound identification. It concludes with a discussion on the investigation of metabolites and transformation products (TPs) in aquatic environments, a prominent and challenging analytical area due to the vast number of TPs, their widespread occurrence, and the complexities involved in their identification aggravated by the lack of analytical reference standards.



## INV3

### Non-targeted Metabolomics to decipher plants and food chemical composition.

Laura Righetti<sup>1,2</sup>

*1. Laboratory of Organic Chemistry, Wageningen University, 6708 WE Wageningen, The Netherlands*

*2. Wageningen Food Safety Research, Wageningen University & Research, P.O. Box 230, 6700 AE Wageningen, The Netherlands*

*[laura.righetti@wur.nl](mailto:laura.righetti@wur.nl)*

In the last decade, the applicability of metabolomics to food science and nutrition research has strongly emerged. Indeed, nowadays, advanced analytical tools permit the simultaneous analysis of hundreds of metabolites, allowing a better characterization of small molecules (up to 1200 Da), therefore, the composition of complex plant matrices can be in-depth investigated.

However, one of the major bottlenecks of the non-targeted metabolomics workflow is the annotation step. Indeed, on average, only 5% of the aligned features can be annotated, while the 95% remains unknowns, limiting our view of the metabolome. Furthermore, even when these metabolites are annotated, their quantification relies on a limited and costly set of standards, constraining our understanding of food components.

In this talk, I will present two case studies where we applied approaches to i) improve the identification of metabolites and ii) to obtain quantitative data without standards. In particular, to improve feature annotation in wild edible plants, we applied Feature-Based Molecular Networking (FBMN)<sup>1</sup> and machine learning approaches (e.g. MS2Quant)<sup>2</sup> to semi-quantify all the detected features.

By adopting these approaches, we can attain a more comprehensive depiction of the molecules present in food and accurately quantify them.

[1] Proc Natl Acad Sci U S A 2012, 109 (26). <https://doi.org/10.1073/pnas.1203689109>

[2] Anal. Chem. 2023, 95, 33, 12329–12338, <https://doi.org/10.1021/acs.analchem.3c01744>



## COMUNICACIONES ORALES JORNADA ESPECIACIÓN

### EOR1

#### **Bioaccesibilidad in vitro de (nano) partículas de TiO<sub>2</sub> y SiO<sub>2</sub> presentes en productos de confitería. Citotoxicidad y efecto sobre la microbiota.**

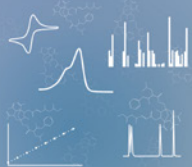
**Elena Espada Bernabé, Ángela García García, Beatriz Gómez Gómez, Gustavo Moreno Martín, Yolanda Madrid**

*Universidad Complutense de Madrid, Madrid, España*

#### **Resumen**

La detección de material nanoparticulado en aditivos alimentarios como E171 (TiO<sub>2</sub>) y E551 (SiO<sub>2</sub>) ha suscitado un gran interés entre los organismos reguladores europeos debido a su posible impacto negativo en la salud humana. Esta preocupación ha llevado a una creciente necesidad de realizar estudios sobre la bioaccesibilidad y citotoxicidad de estas (nano)partículas, así como su posible efecto sobre bacterias constitutivas de la microbiota intestinal [1]. El objetivo de este trabajo ha sido evaluar la bioaccesibilidad de las (nano)partículas de TiO<sub>2</sub> y/o SiO<sub>2</sub> presentes en productos de confitería mediante la aplicación de una digestión gastro-intestinal in vitro, así como la determinación de la citotoxicidad (línea celular Caco-2) e impacto sobre la microbiota de los extractos gastro-intestinales obtenidos. Mediante el empleo de ICP-MS en modo convencional se calcularon los porcentajes de bioaccesibilidad, que variaron desde 18-45% para TiO<sub>2</sub> y 26-78% para SiO<sub>2</sub>, dependiendo de la matriz alimentaria. El empleo de spICP-MS permitió la determinación de la concentración y distribución de tamaño de las partículas estudiadas, no observándose diferencias significativas a lo largo del proceso gastrointestinal. La toxicidad de los extractos gastrointestinales obtenidos sobre el epitelio intestinal, se determinó mediante un ensayo de citotoxicidad (MTT) exponiendo las células Caco-2 de carcinoma colorrectal humano a los extractos gastrointestinales. Los resultados reflejaron un descenso de la viabilidad del 76% al 37%, debido principalmente a la matriz alimentaria y no a la presencia de TiO<sub>2</sub> y/o SiO<sub>2</sub> particulado. En esta misma línea, se realizaron ensayos de viabilidad sobre bacterias representativas de la microbiota como *Lactobacillus plantarum*, *Lactobacillus rhamnosus* y *Escherichia coli*. Tras su exposición a concentraciones de TiO<sub>2</sub> (50-500mg L<sup>-1</sup>) y/o SiO<sub>2</sub> (50-400mg L<sup>-1</sup>) acordes con los niveles de ingesta diaria admisible, la viabilidad bacteriana se vio afectada significativamente en el caso de la exposición a 500mg L<sup>-1</sup> TiO<sub>2</sub> sobre *E.coli*. y 200-500mg L<sup>-1</sup> TiO<sub>2</sub> sobre *L. rhamnosus*. Finalmente, la acumulación de ambos elementos (en forma particulado e iónico) por parte de las bacterias se estudió mediante spICP-MS. Previamente se optimizaron las condiciones de separación del pellet bacteriano y el medio de cultivo. Las condiciones óptimas para ambas (nano)partículas y todas las especies bacterianas fueron 3000rpm durante 3 minutos, al obtenerse porcentajes de recuperación del 65±3% TiO<sub>2</sub> y 99±7% SiO<sub>2</sub> y una deposición del pellet bacteriano alrededor del 80% en todos los casos.

**Referencias** [1] T. Stalder et al. *Toxicol* 481 (2022) 153353 Agradecimientos Ministerio de Ciencia e Innovación (PID2020-114714RB-I00), Comunidad de Madrid (CT4/21-CT5/21).



## EOR2

### Estrategias analíticas para el estudio de la actividad bactericida de iones plata y nanopartículas y sus efectos sinérgicos con antibióticos.

Isabel Abad Alvaro<sup>1</sup>, Ana C. Giménez Ingalaturre<sup>1</sup>, Mariam Bakir<sup>1</sup>, Pilar Goñi<sup>2</sup>,  
Francisco Laborda<sup>1</sup>

1. Grupo de Espectroscopía Analítica y Sensores (GEAS), Instituto Universitario de Investigación en Ciencias Ambientales de Aragón (IUCA), Universidad de Zaragoza, Zaragoza, España

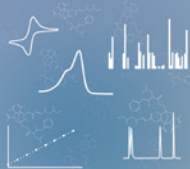
2. Grupo de Agua y Salud Ambiental, Instituto Universitario de Investigación en Ciencias Ambientales de Aragón (IUCA), Zaragoza, España

#### Resumen

La resistencia a antimicrobianos es uno de los mayores retos de salud pública que afecta a la eficacia de los antibióticos. Los compuestos de plata son conocidos por su efecto bactericida, siendo su forma nanoparticulada una estrategia alternativa para reducir el consumo de antibióticos y luchar contra la resistencia antimicrobiana. Este trabajo se centra en el estudio del efecto bactericida de nanomateriales de base plata, así como los efectos sinérgicos que pueden surgir tras su combinación con antibióticos convencionales. El objetivo analítico se basa en el desarrollo y aplicación de diferentes métodos para identificar y cuantificar el contenido de las distintas especies de plata presentes en bacterias individuales previamente incubadas con nanomateriales de plata y antibióticos. La técnica de detección de células individuales mediante espectrometría de masas con plasma de acoplamiento inductivo (SC-ICP-MS) permitió la cuantificación de la plata total internalizada o adsorbida por las bacterias durante los cultivos microbiológicos. Para determinar la forma química de la plata que había interactuado con las bacterias se realizó una digestión alcalina para su posterior estudio mediante detección de partículas individuales (SP-ICP-MS) y cromatografía hidrodinámica (HDC). Los resultados demostraron que la plata interactuaba con las bacterias en su forma disuelta y nanoparticulada. Asimismo, se combinó un antibiótico convencional con Ag(I) o nanopartículas de plata (AgNPs) para estudiar los posibles efectos sinérgicos de ambas combinaciones frente a bacterias. La dosis de antibiótico se redujo 8-12 veces para las combinaciones con Ag(I) y 4-8 veces con AgNPs, manteniendo el efecto bactericida del antibiótico. Para determinar la biodistribución de la plata se realizó una digestión enzimática con lisozima. La plata intracelular se cuantificó por SC-ICP-MS. La plata estaba principalmente internalizada en las bacterias incubadas con Ag(I), mientras que en las incubadas con AgNPs, sólo el 45% de la plata captada estaba internalizada. La detección de especies de plata en bacterias expuestas a plata permitió sugerir los mecanismos de acción bactericida asociados a AgNPs. Un mecanismo combinado ión-partícula sería responsable del efecto bactericida de AgNPs de 10 nm, mientras que sólo los iones actuarían para AgNPs de 60 nm.

#### Agradecimientos

Este trabajo ha sido financiado por el Ministerio de Ciencia e Innovación, el Fondo Europeo de Desarrollo Regional [proyecto PID2021-123203OB-I00 (AEI/FEDER)] y el Departamento de Ciencia, Universidad y Sociedad del Conocimiento del Gobierno de Aragón (E29\_23R). ACG agradece al Gobierno de Aragón por su contrato predoctoral. IA agradece al Ministerio de Universidades/NextGenerationEU por su contrato María Zambrano.



## EOR3

### Antimonio en bebidas embotelladas en PET: estudios de migración.

Angeles Sahuquillo Estrugo<sup>1,2</sup>, Sergio Carneado Moreno<sup>1</sup>, José Fermín López Sánchez<sup>1,2</sup>

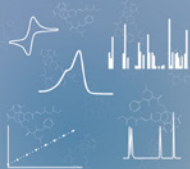
1. Secció de Química Analítica. Dep. Enginyeria Química i Química Analítica. Facultat de Química. Universitat de Barcelona. Barcelona, Spain, Barcelona, España

2. Institut de Recerca de l'Aigua. Universitat de Barcelona (IdRA-UB), Barcelona, España

#### Resumen

El uso de polietileno tereftalato (PET) para el envasado de alimentos ha crecido rápidamente en las últimas décadas. El trióxido de antimonio es el catalizador más importante utilizado en el proceso de polimerización del PET y, de acuerdo a distintas investigaciones, tanto Sb(III) como Sb(V) pueden estar presentes en la superficie del PET y pasar de éste a los alimentos por migración [1]. El objetivo de este trabajo ha sido estudiar los factores que afectan la migración de antimonio desde el PET a bebidas envasadas en él, tanto para contenidos totales como para la determinación de especies, considerando variables como el tipo de plástico, factores cinéticos como tiempo y temperatura, y tipo de matriz (agua y zumos). Para el estudio llevado a cabo en zumos, y dado que la complejidad de la matriz puede conllevar la presencia de especies de antimonio diferentes a las que se encuentran en aguas por la formación de complejos con los ácidos mayoritarios (ácidos cítrico y málico), se optimizó previamente el método de análisis desarrollado para aguas y basado en HPLC-ICP-MS [2]. A continuación, se estudiaron el efecto de la temperatura y el tiempo de almacenamiento en zumos de piña y melocotón, considerando temperaturas de almacenamiento de 4 a 60 °C y tiempos de almacenamiento de hasta 30 días. El estudio simultáneo del tipo de PET del envase (forma, color, espesor) y el posible efecto de la matriz se llevó a cabo mediante experimentos de migración cruzada en tres muestras de agua de baja mineralización y dos muestras de zumo. Para ello, cada una de las matrices se almacenó en su propio envase y en el de todas las demás muestras. Los resultados obtenidos han puesto de manifiesto que, respecto a los factores cinéticos que afectan la migración de antimonio del PET, la temperatura es la variable principal, ya que cuanto mayor es la temperatura durante el almacenamiento de muestra, más antimonio migra hacia la solución, siendo el Sb(III) la principal especie observada durante todo el experimento de migración. Adicionalmente, los experimentos de migración cruzada indicaron que el comportamiento de la migración del antimonio sólo puede explicarse considerando tanto la composición de la matriz (contenido) como las características del envase (PET).

[1] W. Shotyk, M. Krachler, B. J.Chen, J. Environ. Monit., 8 (2006) 288–292. [2] S. Carneado, E. Hernández-Nataren, J. F. López-Sánchez, A. Sahuquillo. Food Chem., 166 (2015) 544–550.



## EOR4

### Determinación de Hg, se y especies de Se en productos procesados derivados de pescados y sus materias primas. Estudios de bioaccesibilidad y toxicidad mediante ensayos in vitro

**Tamara Fernández Bautista**, Beatriz Gómez Gómez, Emma Gracia Lor, Teresa Pérez Corona, Yolanda Madrid Albarrán

*Departamento de Química Analítica, Facultad de Ciencias Químicas,  
Universidad Complutense de Madrid, Madrid, España*

#### Resumen

Los productos procesados basados en surimi constituyen una fuente de consumo de proteínas de pescado asequible y versátil, contribuyendo además a la aportación de ácidos grasos omega-3. Aunque, generalmente, los beneficios en la salud humana derivados del consumo de pescado superan los riesgos asociados, no hay información disponible acerca de estos productos procesados, cada vez más consumidos, en relación al mercurio (Hg) y al efecto protector del selenio (Se) frente a este. Es por ello que, en este trabajo, se determinaron las relaciones molares de Se:Hg y el parámetro Selenium Health Benefit Value (HBVSe), así como las especies de Se presentes en productos procesados (palitos de cangrejo, gulas y tallarines de salmón) y sus correspondientes materias primas (abadejo, merluza y salmón de piscifactoría) obtenidas de tres líneas de producción. En todos los casos se obtuvieron relaciones molares Se:Hg > 1 y HBVSe > 0, lo que indica que estos productos podrían no tener consecuencias negativas para la salud en relación a la exposición a Hg. Los estudios de especiación mediante HPLC-ICP-MS y HPLC-ESI-MS/MS revelaron la presencia de SeMeSeCys y SeMet en todas las muestras, manteniéndose la integridad de las mismas a lo largo de las líneas de producción. Además, mediante la aplicación de un proceso gastrointestinal in vitro se obtuvieron valores de bioaccesibilidad para el Se y el Hg inferiores al 40 %. En estos extractos gastrointestinales también se identificaron las especies SeMeSeCys y SeMet, lo que sugiere su estabilidad durante el proceso de digestión in vitro. Por último, no se observó citotoxicidad tras la exposición de células Caco-2 a los extractos gastrointestinales.

**Agradecimientos:** Ministerio de Ciencia e Innovación (PID2020-114714RB-100), Comunidad de Madrid y fondos europeos FSE y FEDER (S2018/BAA-4393, AVANSECAL-II CM). Angulas Aguinaga y Grupo Nueva Pescanova.

**Referencias:** [1] T. Fernández-Bautista et al., Food Chem. 435 (2024) 137544 [2] F. Ferraris et al., Food Chem. Toxicol. 154 (2021) 112331 [3] M. Gochfeld, & J. Burger, Environ. Sci. & Pollut. 28 (2021) 18407–18420



## EOR5

### Caracterización de nanopartículas en muestras de orina y sangre mediante la técnica SP-ICP-MS

Gabriel Fernández<sup>1</sup>, Meritxell Cabré<sup>1,2</sup>, Esther Gonzalez<sup>1</sup>, Jordi Abellà<sup>1</sup>, Ariadna Verdaguer<sup>1</sup>

1.IQS - Universidad Ramón Llull, Barcelona, España

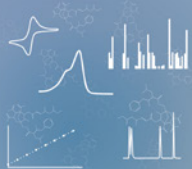
2.PerkinElmer Scientific Spain, Tres Cantos, España

#### Resumen

La nanoteragnosis es la aplicación y el desarrollo de estrategias en nanomedicina para el diagnóstico y el tratamiento, tanto de forma secuencial como simultánea, de enfermedades. En muchos casos conlleva el uso de nanopartículas. Por lo tanto, precisa de herramientas analíticas que permitan caracterizar dichas nanopartículas en su medio de aplicación, como por ejemplo en fluidos biológicos. Entre ellas se encuentra la técnica Single-Particle ICP-MS (SP-ICP-MS), que permite obtener información del tamaño y la concentración de nanopartículas inorgánicas, así como la concentración del metal disuelto [1]. Los laboratorios clínicos, para el análisis de metal total, emplean un diluyente de carácter alcalino conocido como diluyente clínico, para diluir fluidos como sangre y orina y así, realizar análisis de rutina. Entre las principales ventajas del uso de diluyente clínico se encuentra la lisis de eritrocitos, un paso crucial en la preparación de la muestra para garantizar una extracción eficaz de los analitos diana. Además, al ser una dilución alcalina, evita la precipitación, disminuyendo el riesgo de obstrucción del nebulizador durante el análisis. También contribuye a mitigar el efecto memoria y a minimizar las interferencias espectrales y de matriz, mejorando la precisión y fiabilidad de las mediciones posteriores [2]. El objetivo del presente trabajo es la puesta a punto de un método para la caracterización de nanopartículas de Au (AuNPs) en sangre y orina por SP-ICP-MS, y estudiar el efecto del uso de diluyente clínico en dicha caracterización. Para ello, se ha estudiado el efecto del diluyente clínico en la estabilidad de AuNPs patrón durante 10 días, así como el límite de detección del tamaño de nanopartículas, la exactitud y la precisión del método en sangre y orina. Además, se ha comprobado la eficiencia de este método en la caracterización de NP utilizadas en el desarrollo de tratamientos nanoteragnósticos ((Au+CeO<sub>2</sub>)@mSiO<sub>2</sub>). En este sentido, se ha estudiado su estabilidad en diluyente clínico, así como la exactitud y precisión del método en orina y sangre para estas nanopartículas.

**Referencias** (1) F. Laborda et. al., Anal Chem (2013), 5, 2270-2278 (2) Y. Lu, M. Kippler, F. Harari et. al., Clin Biochem 48 (2015), 140-147





## EOR6

### Detección ultrasensible y cuantificación de compuestos de oxígeno en muestras complejas mediante CG-Comb.MS

Montserrat Redondo Velasco<sup>1</sup>, Javier García Bellido<sup>1</sup>, Laura Freije<sup>2</sup>, Gaetan Burnens<sup>2</sup>, Mariella Moldovan<sup>1</sup>, Brice Bouysiere<sup>3</sup>, Pierre Giusti<sup>4</sup>, Jorge Ruiz Encinar<sup>1</sup>

*1. Universidad de Oviedo, Oviedo, España*

*2. Total Energies, Feluy, Bélgica*

*3. Universidad de Pau, Pau, Francia*

*4. Total Energies, Harfleur, Francia*

#### Resumen

En esta comunicación se presenta un detector selectivo de Cromatografía de Gases (GC) que permite la cuantificación precisa de compuestos volátiles que contienen oxígeno, en muestras complejas a nivel de ultratrazas, sin necesidad de patrones específicos. Esta metodología implica el uso de oxígeno isotópicamente enriquecido con oxígeno-18 como gas de combustión en un horno a 800 °C. Esto permite la detección del oxígeno natural presente en los compuestos individuales separados por GC, incorporándolo en las especies volátiles formadas después de la combustión y su posterior degradación a <sup>16</sup>O (m/z 16) en la fuente de ionización.

La señal no específica que se genera debido a la abundancia de <sup>16</sup>O en el gas de combustión (y a la contaminación residual del aire) se compensa por la señal m/z 12 originada por la degradación del CO<sub>2</sub> en la fuente de ionización. Con dicha metodología se obtiene un límite de detección de 28 pg de O<sub>2</sub> inyectado, el más bajo obtenido para cualquier detector de GC. Este límite de detección apenas empeora a 55 y 214 pg de O cuando el compuesto que contiene oxígeno co-eluye parcial o completamente con un compuesto más abundante presente en la matriz. La equimolaridad, linealidad y forma del pico también están evaluadas obteniendo resultados muy satisfactorios.

Estos resultados fueron validados mediante el análisis de un material de referencia (SRM) que arrojó una exactitud entre 99-103 % y una precisión con %RSD menores del 4%. La robustez se comprobó añadiendo a una muestra de diesel hidrotratado diez compuestos con oxígeno en su estructura a niveles bajos de concentración. A pesar de la complejidad de la muestra, cada compuesto con oxígeno se pudo discriminar de la matriz y cuantificar con precisión, con una recuperación media del 102 ± 9%. Además, el método se aplicó con éxito en una muestra de bioaceite de madera para determinar la concentración de diferentes compuestos con oxígeno presentes de manera natural en la misma.

**Agradecimientos:** Esta investigación ha sido respaldada por el Ministerio de Ciencia e Innovación de España con el proyecto (PID2019-109698GB-I00) y por la beca de investigación predoctoral MRV (PRE2020-095538).



## EOR7

### **Caracterización de formas particuladas de mercurio en tejidos de animales acuáticos por espectrometría de masas con plasma de acoplamiento inductivo en modalidad de detección individual de partículas.**

**Marta Hernández Postigo, María Jiménez Moreno, Rosa Del Carmen Rodríguez Martín-Doimeadios**

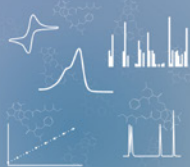
*Universidad de Castilla-La Mancha, Toledo, España*

#### **Resumen**

Tradicionalmente las formas de mercurio más estudiadas han sido el mercurio inorgánico y el metilmercurio debido a su impacto tanto ambiental como en la salud humana. Sin embargo, la conversión del mercurio en formas particuladas, como las nanopartículas de HgSe (HgSeNPs), posiblemente constituya uno de los mecanismos clave de detoxificación en animales acuáticos que hasta ahora apenas ha sido investigado [1]. De este modo, se necesita obtener información fiable sobre esta nueva especie de Hg lo cual es un reto actual de la química analítica, y por ello se hace necesario disponer de metodologías capaces de llevar a cabo su adecuada determinación. En este contexto, la espectrometría de masas con plasma de acoplamiento inductivo en modalidad de detección individual de partículas (SP-ICP-MS) se presenta como una alternativa interesante para proporcionar información sobre la concentración, composición y tamaño de las HgSeNPs de manera simultánea, así como su especiación [2]. Además, en estos análisis la preparación de la muestra se convierte en una etapa clave que también requiere de una especial atención debido a los posibles riesgos de recuperaciones no cuantitativas o disolución de las NPs. En este estudio, se ha desarrollado una metodología analítica basada en SP-ICP-MS para determinar y caracterizar HgSeNPs en tejidos de animales acuáticos. Se han evaluado los parámetros críticos de SP-ICP-MS, así como el tratamiento posterior de datos para conseguir resultados óptimos. Además, se han estudiado diferentes metodologías de preparación de muestra y extracción de HgSeNPs de estos tejidos al ser una etapa crucial para las determinaciones de NPs metálicas por SP-ICP-MS. Por lo tanto, el potencial de la técnica de SP-ICP-MS para el análisis de formas particuladas del mercurio combinado con una adecuada extracción se presenta como una herramienta útil para estudios de especiación en animales acuáticos proporcionando información relevante sobre los mecanismos de detoxificación y sus implicaciones para la salud ambiental.

**Bibliografía:** [1] K. El Hanafi, B. Gómez-Gómez, Z. Pedrero et al. *Anal Chim Acta* 1250 (2023) 340952. [2] F. Laborda, A. C. Gimenez-Ingalaturre, E. Bolea et al. *Spectrochim Acta Part B At Spectrosc*, 159 (2019) 105654.

**Agradecimientos:** Los autores agradecen la financiación del Ministerio de Ciencia e Innovación (PID2022-138761NB-I00), la Junta de Comunidades de Castilla-La Mancha (SBPLY/23/180225/000153) y el Plan Propio de Investigación de la Universidad de Castilla-La Mancha (2022-GRIN-34415), con cofinanciación FEDER. Marta Hernández-Postigo agradece a la Unión Europea (Fondos Next Generación EU) por su contrato predoctoral (2023-INVGO-11947).



## EOR8

### Bioaccesibilidad y biodisponibilidad in vitro de nanopartículas de Ag y TiO<sub>2</sub> en algas marinas usando células Caco-2

**Maria Carmen Barciela Alonso**<sup>1</sup>, Juan José López Mayán<sup>1</sup>, Elena Peña Vázquez<sup>1</sup>, Raquel Domínguez González<sup>1</sup>, Antonio Moreda Piñeiro<sup>1</sup>, Pablo Taboada Antelo<sup>2</sup>, Pilar Bermejo Barrera<sup>3</sup>

*1. Grupo de Elementos Traza, Espectroscopia y Especiación (GETEE), Instituto de Materiales (iMATUS), Departamento de Química Analítica, Nutrición y Bromatología, Facultad de Química, Avenida das Ciencias, s/n, Universidade de Santiago de Compostela, 15782, Santiago De Compostela, España*

*2. Grupo de Física de Coloides y Polímeros, Instituto de Materiales (iMATUS), Departamento de Física de Partículas, Facultad de Física, Rúa Xosé María Suárez Núñez, s/n, Universidade de Santiago de Compostela, 15782, Santiago De Compostela, España*

*3. Grupo de Elementos Traza, Espectroscopia y Especiación (GETEE), Instituto de Materiales (iMATUS), Departamento de Química Analítica, Nutrición y Bromatología. Facultad de Química. Universidade de Santiago de Compostela. Avenida das Ciencias, s/n. 15782, Santiago De Compostela, España*

#### Resumen

El uso extensivo de nanomateriales, como son el caso de las nanopartículas (NPs) de Ag y TiO<sub>2</sub> hace que estas se liberen constantemente al medio marino, donde pueden tener efectos perjudiciales para la biota. De hecho, los efectos de bioacumulación en algas comestibles han sido previamente demostrados. Garantizar la seguridad alimentaria es un reto y, por tanto, son necesarios estudios de bioaccesibilidad y biodisponibilidad que nos permitan conocer la transformación que sufren las nanopartículas al ser ingeridas a través de la dieta. En este estudio se evaluó la bioaccesibilidad y biodisponibilidad in vitro del contenido total de Ag y Ti, así como del contenido nanoparticulado de Ag y TiO<sub>2</sub> en muestras de algas comestibles. Se seleccionaron muestras de algas rojas (*Palmaria Palmata*) y verdes (*Ulva* sp.), tanto crudas como cocinadas, ambas expuestas durante 28 días a 1,0 mg L<sup>-1</sup> de AgNPs (15 nm), y de TiO<sub>2</sub>NPs (5 y 25 nm). Para estudiar la bioaccesibilidad, las muestras fueron sometidas a procesos de digestión gastrointestinal simuladas in vitro, y para evaluar la biodisponibilidad se llevó a cabo un estudio de transporte celular a través de cultivos celulares de células Caco-2 simulando el lumen intestinal y el torrente sanguíneo. Se empleó el plasma de acoplamiento inductivo acoplado a espectrometría de masas (ICP-MS) para la determinación del contenido total de Ag y Ti en las muestras digeridas, las fracciones bioaccesibles, así como en las fracciones apicales y basolaterales. Por otra parte, para la determinación del contenido de Ag y TiO<sub>2</sub>NPs se empleó el modo de detección individualizada de nanopartículas (SP-ICP-MS). Además, el contenido de AgNPs y TiO<sub>2</sub>NPs presentes en las células Caco-2 se verificó mediante el modo de detección individualizada de células (SC-ICP-MS). Los porcentajes de bioaccesibilidad obtenidos variaron entre el 22 y el 98% en el caso de AgNPs, y entre el 17 y el 81% en el caso de TiO<sub>2</sub>NPs. La presencia de nanopartículas detectada en las células Caco-2 varió entre el 6 y el 20%.

**Agradecimientos** Los autores desean agradecer el apoyo financiero del Ministerio de Economía y Competitividad (proyecto INNOVANANO, referencia RT2018-099222-B-100), Unión Europea (INTERREG Atlantic Area, proyecto NANOCULTURA, referencia EAPA590/2018), y Xunta de Galicia (Consolidación 2022, Grupo de Referencia Competitiva, Referencia ED431C\_2022/29).



## EOR9

### **Título cambiar a: Metabolismo de especies de selenio en plantas mediante HPLC-ICP-MS y trazadores isotópicos múltiples.**

**Gustavo Moreno Martín**, Marina Rodríguez Marín, Yolanda Madrid Albarrán  
*Universidad Complutense de Madrid, Madrid, España*

#### **Resumen**

El selenio es un elemento beneficioso para las plantas que actúa como agente antioxidante y prooxidante vegetal, y confiere tolerancia frente a diferentes estreses abióticos como el que ejercen diferentes metales/metaloideos tóxicos [1]. El empleo de trazadores isotópicos múltiples de selenio permitiría comparar de manera simultánea el efecto de distintas especies sobre diferentes factores como la absorción, translocación y especiación [2].

En este trabajo se han utilizado dos trazadores isotópicos estables de selenio ( $^{76}\text{SeMet}$  y  $^{77}\text{selenito}$  ( $^{77}\text{Se}$ )) y SeNPs para evaluar de manera conjunta sus transformaciones metabólicas tras su exposición a la especie *Spinacia oleracea*. Para este propósito las plantas se cultivaron en medio hidropónico utilizando perlita como sustrato y disolución Hoagland 0.5 como nutriente. La aplicación del selenio se realizó vía foliar enriqueciendo la disolución nutritiva con 1.5 mg Se/L en forma de  $^{77}\text{Se}$ , SeNPs y  $^{76}\text{SeMet}$ . Después de 45 días de tratamiento, las plantas se recolectaron, pesaron y dividieron en raíz y parte aérea con el fin de determinar cambios en los pigmentos fotosintéticos, la acumulación de selenio procedente de cada especie, la distribución de las especies y el efecto del selenio en la incorporación de metales esenciales como Fe, Zn, Cu y Mo. Las medidas espectrofotométricas mediante UV-Vis mostraron diferencias significativas en el contenido total de clorofila ((1200 ± 80) mg/Kg), pero no en el de carotenos ((380 ± 40) mg/Kg) con respecto al control. Las medidas por IDA-ICP-MS de los extractos digeridos permitieron conocer el contenido total de selenio acumulado, siendo la SeMet y el selenito las especies que la planta incorpora con mayor facilidad. La biotransformación de las diferentes formas químicas de selenio suplementadas se evaluó mediante HPLC-ICP-MS utilizando dos mecanismos de separación (intercambio aniónico, PRP-X100, y fase inversa, C18) previa extracción enzimática con proteasa XIV. A través de este método se comprobó que todas las fuentes de selenio se transformaron mayoritariamente en SeMet en la parte aérea y que su transporte a la raíz procedía mayoritariamente de la  $^{76}\text{SeMet}$ . Para su confirmación, los extractos se analizaron por HPLC-ESI-MS/MS. Finalmente, el efecto del selenio sobre diferentes metales esenciales mostró un aumento en el contenido de Zn y Fe en las plantas tratadas.

#### **Agradecimientos:**

Ministerio de Ciencia e Innovación (PID2020-114714RB-I00).

#### **Bibliografía:**

- [1] M. Hasanuzzaman, M.H.M.B. Bhuyan, A. Raza, et al. EBB. 178 (2020) 104170.
- [2] P. Di Tullo, A. Versini, M. Bueno, et al. Anal. Bioanal. Chem. 407 (2015) 9029-9042.



## COMUNICACIONES ORALES REUNIÓN SEQA

O01

### Evaluación de la cromatografía en contracorriente para aislar arsenozúcares presentes en algas

Alba Morales Rodríguez<sup>1,2,3</sup>, Àngels Sahuquillo Estrugo<sup>1,4</sup>, Cristina Minguillón Llombart<sup>2</sup>, Dolores Barrón Bueno<sup>2,3</sup>, **José Fermín López Sánchez**<sup>1,4</sup>

*1. Departament d'Enginyeria Química i Química Analítica. Universitat de Barcelona, Barcelona, España*

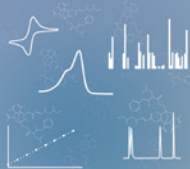
*2. Departament de Nutrició, Ciències de l'Alimentació i Gastronomia. Campus de l'Alimentació de Torribera. Universitat de Barcelona, Santa Coloma De Gramenet, España*

*3. Institut de Recerca en Nutrició i Seguretat Alimentària. Universitat de Barcelona (INSA-UB), Santa Coloma De Gramenet, España*

*4. Institut de Recerca de l'Aigua. Universitat de Barcelona (IdRA-UB), Barcelona, España*

#### Resumen

Los arsenozúcares son la especie predominante de arsénico en la mayoría de las algas. El análisis de estos compuestos se ve obstaculizado por la falta de estándares de calibración necesarios para su identificación y cuantificación inequívocas. Esto afecta a la disponibilidad de información fiable sobre su potencial toxicidad, que es escasa y controvertida. Teniendo en cuenta el potencial de la cromatografía en contracorriente (CPC) como técnica de separación preparativa que se ha aplicado para aislar numerosos compuestos naturales, el objetivo de este trabajo es investigar la viabilidad de la CPC para el aislamiento y purificación de arsenozúcares a partir de extractos acuosos de algas. Para evaluar la distribución de las especies de As se han estudiado varios sistemas de disolventes bifásicos. Dadas las características físicas de estos compuestos, se ha considerado la presencia de ácidos fuertes, la formación de pares iónicos y la presencia de sales a fuerzas iónicas elevadas. El sistema 1-BuOH/EtOH/ (NH<sub>4</sub>)<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>, sat./agua en una relación de volumen 0,2:1:1:1 origina constantes de distribución de analitos adecuadas que permiten la separación requerida. El contenido total de arsénico y la especiación de arsénico de las soluciones eluidas de la CPC se analizaron mediante ICP-MS y LC-ICP-MS, respectivamente. Utilizando el sistema solvente 1-BuOH/EtOH/ (NH<sub>4</sub>)<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>, sat./agua se logró obtener los tres arsenozúcares con una pureza de 98,7%, 90,4% y 96,1% para PO<sub>4</sub>-Sug, SO<sub>3</sub>-Sug y SO<sub>4</sub>-Sug, respectivamente. Estos resultados son comparables a los obtenidos cuando se aplicó la cromatografía de intercambio iónico a escala preparativa.



## O02

### Determinación de elementos endógenos y proteínas diana en exosomas aislados del secretoma celular y suero de ratón empleando ICP-MS

Jaime Martínez García<sup>1</sup>, Héctor González Iglesias<sup>2</sup>, Beatriz Fernández<sup>1</sup>, Rosario Pereiro<sup>1</sup>

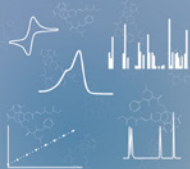
*1. Universidad de Oviedo, Oviedo, España*

*2. Instituto de productos lácteos de Asturias (IPLA-CSIC), Villaviciosa, España*

#### Resumen

Las enfermedades neurodegenerativas (EN) representan un grave problema de salud pública en la sociedad envejecida actual. La etiología de las EN es muy compleja y, como consecuencia, las terapias disponibles contra EN son limitadas, además de que los biomarcadores fiables conocidos actualmente son escasos. En particular, existe la necesidad de identificar biomarcadores de estas enfermedades en estadios iniciales de degeneración, para lograr un diagnóstico temprano y conseguir que el daño producido sea mínimo. Uno de los campos de estudio en biomedicina más prometedores de los últimos años es el estudio de la actividad secretora celular. Las células secretan vesículas extracelulares (VEs) que sirven como mecanismo de comunicación intercelular, clave en la señalización celular y con posibles implicaciones en las EN, por lo que considerar estas VEs como objeto de estudio puede ser crucial en la identificación de biomarcadores candidatos. Estas VEs son liberadas liberadas al torrente sanguíneo, por lo que analizar el suero como fluido de referencia es una opción prometedora, por tratarse de una fuente importante de biomarcadores, y la extracción de suero ser mínimamente invasiva. Este trabajo presenta una metodología secuencial para la determinación de metales endógenos y proteínas diana en VEs aisladas del secretoma de células neuroepiteliales en cultivo y de suero sanguíneo de ratón. Tras la evaluación de diferentes estrategias para la purificación de las VEs, el método seleccionado fue la centrifugación diferencial a 100.000xg y 4 grados centígrados. En una primera etapa se ha evaluado el contenido de Fe, Cu y Zn en VEs procedentes de células neuroepiteliales de la retina en condiciones control y sometidas a estrés pro-inflamatorio. A continuación, se profundizó en la determinación de proteínas diana de EVs en muestras de suero de ratón, como modelo animal. Dado que los niveles de proteínas específicas presentes en VEs son muy reducidos, la detección debe ser lo más sensible posible. Con este fin, se desarrollaron inmunoensayos competitivos empleando inmunosondas marcadas con nanopartículas (NPs) metálicas e ICP-MS. Como prueba de concepto, el inmunoensayo se ha desarrollado con la proteína genérica de VEs CD81, empleando inmunosondas marcadas con NPs de oro. Dicha metodología será posteriormente aplicada a VEs de un modelo animal de neurodegeneración.

**Agradecimientos:** Proyectos PID2022-137319OB-C21 y PID2022-137319OB-C22 (MCIN/AEI/10.13039/501100011033/) y beca Severo Ochoa (Ref. BP21-041) – Principado de Asturias



## O03

### **El Fe como elemento clave para el diagnóstico diferencial de ictus en exudado nasal: estudios básicos mediante análisis elemental, especiación y determinación de proteínas**

**Lara Lobo Revilla<sup>1</sup>**, Marta Marina Latorre<sup>1</sup>, Héctor González Iglesias<sup>2</sup>, Carmen Garía Cabo<sup>3</sup>, Estefanía Costa Rama<sup>1</sup>, María Teresa Fernández Abedul<sup>1</sup>, Rosario Pereiro García<sup>1</sup>

*1. Universidad de Oviedo, Oviedo, España*

*2. Instituto de Productos Lácteos-CSIC, Villaviciosa, España*

*3. Hospital Universitario Central de Asturias, Oviedo, España*

#### **Resumen**

El ictus, considerado como segunda causa de muerte en el mundo [1], ocurre cuando el flujo sanguíneo en el cerebro disminuye, ya sea debido a un coágulo de sangre (ictus isquémico) o a la rotura de un vaso (ictus hemorrágico). Es bien sabido que el cerebro está altamente inmunoprotegido por la barrera hematoencefálica, por lo que el acceso a información directa del mismo está muy limitado. De hecho, para el correcto diagnóstico de esta patología se recurre a técnicas de neuroimagen en los hospitales. Esos equipos no se encuentran en todos los centros sanitarios, lo que puede suponer un retraso en el diagnóstico y, por ende, en la aplicación de medidas terapéuticas que son diferentes en función del tipo de ictus. En este contexto, la búsqueda de biomarcadores directos de esta patología supone un gran desafío. En la actualidad hay un interés cada vez mayor en el análisis de fluidos biológicos con toma de muestra no invasiva. En el caso del ictus y teniendo en cuenta la existencia de un sistema de drenaje linfático entre los vasos sanguíneos cerebrales y las fosas nasales, el empleo de exudado nasal para diagnóstico diferencial ofrece grandes posibilidades; de hecho, ya se ha puesto en evidencia diferencias en la concentración de Fe en exudado nasal al comparar pacientes diagnosticados de ictus isquémico con ictus hemorrágico [2]. Estas diferencias son atribuibles a su vez a diferencias en los niveles de proteínas asociadas al Fe. Así, en este trabajo y con el objetivo de ahondar en el rol del Fe en la búsqueda de posibles marcadores del ictus en exudado nasal, se ha empleado por un lado un método basado en cromatografía líquida acoplada a ICP-MS para estudiar posibles alteraciones a nivel de especies y también se ha determinado el contenido de hierro total en este fluido mediante ICP-MS. Además, se han determinado las concentraciones de cuatro ferroproteínas (ferritina, lactoferrina, transferrina y ferroportina) mediante kits ELISA, todo ello con cantidades de exudado nasal entre 10-40 mg.

**Bibliografía:** [1] E. S. Donkor, Stroke res. treat., 2018, Article ID 3238165, 10 pages. [2] C. García-Cabo, P. Llano-Suarez, L. Benavente-Fernandez et al, Clin. Chem. Lab. Med., 58 (2019) 847-853.

**Agradecimientos:** Se agradece la financiación del proyecto PID2022-137222OB-I00 del Ministerio de Ciencia e Innovación. M.M. agradece al Principado de Asturias la ayuda Severo Ochoa (PA-23-BP22-183).



## O04

### Determinación de plomo y sus isótopos en hormigón mediante HR-ICP-MS

Ángela De La Hoz Nieto<sup>1</sup>, Fernando Jiménez Barredo<sup>1,2</sup>, Ana Isabel Barrado Olmedo<sup>3</sup>,  
Altug Hasözbeğ<sup>2</sup>, Estefanía Conde Vilda<sup>3</sup>, Marta Fernandez Diaz<sup>3</sup>, Jose Manuel Cobo<sup>3</sup>,  
Rebeca López Serna<sup>1</sup>, Enrique Barrado Esteban<sup>1</sup>

1. Departamento de Química Analítica, Facultad de Ciencias, Universidad de Valladolid., Valladolid, España

2. Centro Nacional de Investigación sobre la Evolución Humana. P. Sierra de Atapuerca, 3, 09002, Burgos, España

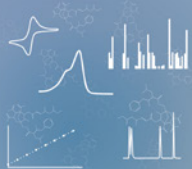
3. CIEMAT, Centro de Investigaciones Energéticas, Medioambientales y Tecnológicas, Madrid., Madrid, España

#### Resumen

El hormigón es uno de los materiales de construcción más utilizados desde las primeras civilizaciones, debido a su bajo coste de producción y a la alta resistencia mecánica que brinda. Estos materiales han evolucionado desde la prehistoria, resaltando los avances durante el antiguo Imperio Romano [1], el comienzo de uso del cemento Portland y el uso de distintos tipos de agregados [2]. La desventaja del cemento Portland es el impacto medioambiental que genera debido a la cantidad de CO<sub>2</sub> que se libera en su producción [3]; lo que le hace ser objeto de estudio permanentemente, explorando alternativas para reducir su huella de carbono, a la vez que se conservan sus propiedades técnicas. Por otro lado, la adición de óxidos de plomo al hormigón incrementa su densidad y resistencia a la compresión, por lo que puede ser añadido para determinados usos. Dada la toxicidad del plomo, es necesario conocer su capacidad de movilización y liberación al medio ambiente. El objetivo principal de este estudio es desarrollar un método para la determinación de plomo en hormigón y arcilla expandida, para poder elucidar la movilidad del plomo en estos materiales. Se sometieron los distintos materiales de referencia a diferentes tratamientos (agua, HAcO, HNO<sub>3</sub>, agua regia, digestión total con HF). Mediante HR-ICP-MS se determinó el contenido en plomo y sus relaciones isotópicas, ya que podrían ser empleadas como indicadores de actividades antropogénicas. El límite de detección es 0,2 pg.g<sup>-1</sup>, con sensibilidad 1,5E6 cps/ng.mL<sup>-1</sup>. Los resultados obtenidos muestran una movilidad parcial del Pb en agua caliente. Por otro lado, el tratamiento ácido, incluso débil, conduce a su disolución prácticamente total, con recuperaciones superiores al 95 % para todos los materiales analizados. En cuanto a las relaciones isotópicas se encontraron valores de 208Pb/204Pb=36,08-39,50; 206Pb/204Pb=17,60-19,75; 207Pb/204Pb=14,84-15,97; con desviación respecto a materiales de referencia de menos del 5 %. La cuantificación del contenido en Pb de estos materiales y su identificación a través de las relaciones isotópicas, puede conducir a la determinación del origen de este elemento en el medio ambiente. El uso de técnicas de gran sensibilidad como el HR-ICP-MS permite el análisis de cantidades muy reducidas de muestra, como podrían ser partículas de polvo.

[1] L.M. Seymour et al. Science Advances 9, 2023 [2] J. Elsen, M. Jackson, & E. Ruiz-Agudo, Elements, 18(5), (2022), 301-307. [3] K. L. Scrivener, V. M. John, & E. M. Gartner, Cement and Concrete Research, 114, (2018), 2–26.





## O05

### **Espectrometría de masas elemental y molecular, un tándem para la cuantificación absoluta de (fosfo) proteínas.**

**Francisco Calderón Celis**, Alicia Jiménez Nosti, Lucía Suárez Fernández, Ana Soldado Cabezuelo, Jorge Ruiz Encinar

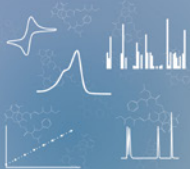
*Universidad de Oviedo, Oviedo, España*

#### **Resumen**

La cuantificación absoluta de proteínas y fosfoproteínas mediante espectrometría de masas (MS) está limitada por la naturaleza inherentemente no cuantitativa de la técnica. La falta de correlación absoluta entre la intensidad y la abundancia de los iones moleculares requiere estándares específicos o estrategias de marcaje isotópico para una cuantificación precisa. Sin embargo, el gran número de estándares necesarios en el análisis de muestras complejas hace que la cuantificación absoluta a gran escala sea un desafío [1]. Los recientes avances tecnológicos y metodológicos logrados en la espectrometría de masas elemental (ICP-MS) han permitido la cuantificación absoluta de proteínas y fosfoproteínas a través de sus heteroátomos, S y P [2,3]. La combinación de ICP-MS con ESI-MS ha demostrado ser una aproximación exitosa para cuantificar proteínas de forma absoluta sin necesidad de estándares específicos. La medida genérica de S con ICP-MS ha dado paso al desarrollo de estrategias híbridas de MS elemental/molecular, aplicadas en el análisis proteómico top-down. Esto ha permitido la caracterización cuantitativa de estándares de proteínas usados en ensayos biológicos [4], así como a la identificación y cuantificación absoluta de proteomas relativamente sencillos, con decenas de proteínas [5]. Por otro lado, la detección simultánea de S y P ha permitido la cuantificación absoluta y genérica de proteínas fosforiladas basadas en la medida del S y la determinación del grado de fosforilación global basado en la relación P/S [3]. La combinación de esta metodología con nuevas estrategias de enriquecimiento de fosfoproteínas ha permitido la caracterización cuantitativa de fosforilación en proteínas, incluso cuando son subestequiométricas.

[1] F. Calderon Celis et al. *Mass Spec. Rev.* 2018, 37, 715. [2] F. Calderon Celis et al. *Chem. Commun.* 2018, 54, 904. [3] F. Calderon Celis et al. *Anal. Chem.* 2019, 91, 1105. [4] S. Escudero et al. *Anal. Chim. Acta.* 2023, 1251, 341002. [5] J. Calvete et al. *J. Prot. Res.* 2021, 20, 5068.

Los autores agradecen el apoyo económico del Ministerio de Ciencia e Innovación (PID2020-117282RB-I00 y PID2022-142323NB-I00), financiados por MCIN/AEI/10.13039/501100011033/ y por "ERDF A way of making Europe".



## O06

### **Cuantificación de secuencias de miRNA en suero sanguíneo sin necesidad de amplificación empleando nanopartículas metálicas como marcas elementales y espectrometría de masas (ICP-MS)..**

**Mario Corte Rodríguez<sup>1,2</sup>, Sara González Morales<sup>1,2</sup>, Carlos López Portugués<sup>1,2</sup>,  
María Montes Bayón<sup>1,2</sup>**

*1. Universidad de Oviedo, Oviedo, España*

*2. Instituto de Investigación Sanitaria del Principado de Asturias (ISPA), Oviedo, España*

#### **Resumen**

Los microRNA (miRNA) son secuencias cortas de ARN no codificante de cadena sencilla de entre 18 y 24 nucleótidos. Se sabe que desempeñan un papel crucial en la expresión génica, dando lugar tanto a la sobreexpresión como a la inhibición de ciertos genes. Los cambios en la expresión de secuencias concretas de miRNAs están involucrados en muchas enfermedades, como la diabetes, el cáncer e incluso enfermedades cardiovasculares o neurológicas. Pero la expresión de los miRNAs también puede verse alterada en respuesta a cambios fisiológicos, como el ejercicio físico, el estrés o la dieta. Tradicionalmente, la determinación de miRNAs se lleva a cabo mediante técnicas de amplificación (rt-qPCR), hibridación (microarrays) y secuenciación. Sin embargo, las deficiencias que estas técnicas presentan, principalmente desde el punto de vista cuantitativo, hacen necesario el desarrollo de metodologías que permitan cuantificar secuencias concretas de miRNAs de manera absoluta. En este trabajo, se presenta una nueva estrategia analítica para el análisis sensible y específico de secuencias de miRNA en suero humano.[1] Esta se basa en la doble hibridación del miRNA analito con una sonda de captura unida a una micropartícula magnética y una de detección con una nanopartícula de oro que es detectada mediante single particle ICP-MS en un número proporcional a la concentración del miRNA en la muestra. Esta estrategia evita el uso de pasos de amplificación y no necesita la determinación de la estequiometría de las sondas. La validación se ha llevado a cabo mediante la determinación en muestras de suero sanguíneo reales de miR-16-5p, un biomarcador de ejercicio físico. [2] Se ha comprobado la concordancia de los resultados mediante rt-qPCR, con límites de detección que permiten la diferenciación del miRNA estudiado entre personas deportistas y sedentarias.

[1] S. González-Morales, C. López-Portugués, M. Fernández-Sanjurjo, et al., (enviado).

[2] M. Fernández-Sanjurjo, P. Pinto-Hernández, A. Dávalos et al., Eur. J. Sport Sci. (2024)



## O07

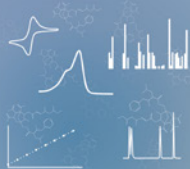
### **Single-cell ICP-MS como herramienta analítica en estudios de neurotoxicidad. Evaluación del efecto protector de distintas especies de selenio frente a la toxicidad del mercurio en células de neuroblastoma humano (SH-SY5Y).**

**Beatriz Gómez Gómez**, Tamara Fernández Bautista, Jana Merino Sánchez, Yolanda Madrid Albarrán  
*Universidad Complutense de Madrid, Madrid, España*

#### **Resumen**

El selenio (Se) es un elemento esencial con propiedades antioxidantes el cuál ejerce efecto protector frente a importantes neurotóxicos ambientales como el mercurio (Hg). Sin embargo, aún no se conoce con exactitud los mecanismos a través de los cuales el Se actúa frente a los efectos neurotóxicos del Hg. Para ello, es indispensable el empleo de distintas técnicas (bio)analíticas, así como el uso de modelos in vitro basados en líneas celulares. En este sentido, la técnica single-cell ICP-MS (scICP-MS) puede ser clave en estos estudios ya que permite determinar la acumulación de neurotóxicos y agentes neuroprotectores a nivel de célula individual [1]. En este trabajo se evalúa la técnica scICP-MS como herramienta analítica para estudiar el efecto protector de distintas especies de Se (Se(IV), SeMeSeCys, SeMet y SeNPs) frente a la citotoxicidad inducida por Hg (Hg(II) y MeHg+) empleando como modelo la línea celular de neuroblastoma humano SH-SY5Y. Para ello, primeramente, mediante el ensayo MTT se evaluó la influencia de las distintas especies de Se en la citotoxicidad inducida por el Hg (II) y MeHg+ a diferentes concentraciones (1.5-70  $\mu\text{M}$ ) y tiempos de exposición (24 o 48 h), por separado y conjuntamente. Los resultados evidenciaron que la viabilidad celular descendió por debajo del 60% cuando los cultivos celulares se expusieron a 25  $\mu\text{M}$  Hg (II) y 3  $\mu\text{M}$  MeHg+. Sin embargo, solamente se observó un aumento de la viabilidad celular cuando se incubó conjuntamente MeHg+ con SeMeSeCys y SeMet. Finalmente, se llevó a cabo la determinación de los niveles de Hg acumulados por célula individual en presencia y ausencia de las distintas especies de Se mediante scICP-MS. Los resultados indicaron una disminución de hasta más de un 50 % en la cantidad máxima de Hg acumulado por célula individual cuando la SeMet (50  $\mu\text{M}$ ) fue añadida con el MeHg+ (1.5  $\mu\text{M}$ ), al igual que el Se(IV) (10 y 25  $\mu\text{M}$ ) con el Hg(II) (10 y 25  $\mu\text{M}$ ). Paralelamente, se determinó el contenido medio de Se y Hg por ICP-MS previa digestión ácida. En este caso no se pudieron observar diferencia entre los niveles medios de Hg acumulado en presencia de Se. Estos resultados demuestran la importancia de incluir la técnica de scICP-MS en los estudios de neurotoxicidad.

**Agradecimientos** Ministerio de Ciencia e Innovación (PID2020-114714RB-100), Comunidad de Madrid y fondos europeos FSE y FEDER (S2018/BAA-4393, AVANSECAL-II CM). Referencias [1] B. Gómez-Gómez et al., Trends Anal. Chem. 174 (2024) 117661



## O08

### Envases de silicona de uso alimentario: migración de platino y riesgo de exposición

**Miguel Klaiber Aboitiz**, Estefanía Moreno-Gordaliza, M. Dolores Marazuela Lamata,  
M. Milagros Gómez-Gómez

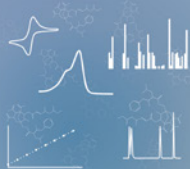
*Universidad Complutense de Madrid, Madrid, España*

#### Resumen

El empleo de envases de silicona reutilizables de uso alimentario ha aumentado notablemente en los últimos años. En la fabricación de estas siliconas se emplean habitualmente catalizadores de platino, que quedan atrapados en la matriz polimérica. La liberación de estos residuos de platino durante el contacto con los alimentos podría constituir un riesgo para la salud. En este estudio se evaluó la presencia y liberación de Pt en envases comerciales de silicona aptos para cocinado y calentamiento de alimentos. Para ello, se realizaron ensayos de migración empleando simulantes alimentarios, de acuerdo con las recomendaciones del JRC (EU) para ensayos en siliconas de uso alimentario [1]. El estudio se ha completado con ensayos que simulan condiciones domésticas de uso cotidiano, como el empleo de horno microondas. Mediante análisis por ICPMS se han encontrado cantidades de Pt del orden de 2-0.5 mg/kg en envases para cocinado y vasos infantiles de silicona. Estos envases liberan cantidades significativas de Pt durante su uso repetido, siendo más altas con simulantes lipofílicos y temperaturas y tiempos de contacto mayores. El calentamiento en horno microondas también muestra migraciones de Pt significativas. El análisis de los extractos por SEM-EDX mostró la liberación de micropartículas de silicona de 5-20  $\mu\text{m}$ , en la línea de lo observado anteriormente en tetinas de biberones [2]. Por otro lado, la especiación de Pt mediante single particle-ICPMS y ultrafiltración no detectó nanopartículas de Pt por encima de 10 nm en los extractos; aunque sí mostró cantidades significativas de Pt soluble. Por lo tanto, el uso continuado de estos recipientes podría suponer un riesgo para el consumidor.

**Bibliografía** [1] G. Beldi, C. Senaldi, P. Robouch, et al. Testing conditions for kitchenware articles in contact with foodstuffs: plastics, metals, silicone and rubber, paper and board, Publications Office of the European Union (2023). [2] E. Moreno-Gordaliza, M. D. Marazuela, M.M. Milagros Gómez-Gómez. Risk assessment of silver and microplastics release from antibacterial food containers under conventional use and microwave heating. *Food Chem.* 420 (2023) 136097.

**Agradecimientos** Este trabajo ha sido financiado por el Ministerio de Ciencia e Innovación (PID2020-116067RB-100/AEI/10.13039/50110001103) y la Comunidad Autónoma de Madrid con fondos FEDER (PB2018/BAA-4393).



## O09

### Estudio comparativo de diferentes metodologías para la caracterización del tamaño de micro/nano partículas mediante SP-ICP-MS

Antonio Bazo, Eduardo Bolea-Fernández, María Teresa Aramendía, Martín Resano  
*Universidad de Zaragoza, Zaragoza, España*

#### Resumen

La espectrometría de masas con ionización por plasma de acoplamiento inductivo y detección en modo de partícula individual (SP-ICP-MS) es una técnica ampliamente empleada en la actualidad para la caracterización de dispersiones de nanopartículas, dada la gran cantidad de información que puede proporcionar en este ámbito. Sin embargo, el tratamiento de datos de SP-ICP-MS, necesario para la obtención de las distribuciones de masa y tamaño de dispersiones de micro/nano partículas resulta todavía complejo.<sup>1</sup> En este sentido, se han propuesto diferentes estrategias en la literatura con el fin de facilitar este proceso y/o mejorar la calidad de los resultados analíticos. Estos métodos generalmente utilizan el área (intensidad) de los eventos como señal analítica;<sup>2</sup> sin embargo, los últimos avances en instrumentación han permitido la adquisición de información temporal ultrarrápida (*dwell times* de hasta 10  $\mu$ s), lo que permite utilizar también con precisión la anchura (duración) de dichos eventos para procesar los resultados.<sup>3</sup>

En el presente trabajo se compararán los diferentes métodos existentes para la obtención de las distribuciones en masa y tamaño a partir de datos de SP-ICP-MS, atendiendo tanto a su exactitud como a su precisión. Las comparativas se llevarán a cabo para dispersiones de partículas nanométricas de Au entre 20 y 70 nm (diámetro nominal), así como nano y micrométricas de SiO<sub>2</sub> entre 100 y 1000 nm. Esto permitirá evaluar la actuación de los distintos métodos en diferentes rangos de masa y para nanopartículas de distinta composición.

<sup>1</sup> M. Resano, M. Aramendía, E. García-Ruiz, et al. Chem. Sci. 13 (2022) 4436-4473

<sup>2</sup> B. Moreira-Álvarez, L. Cid-Barrio, F. Calderón-Celis, et al. Anal. Chem. 95 (2023) 10430-10437

<sup>3</sup> I. Kálomista, A. Kéri, D. Ungor, et al. J. Anal. At. Spectrom. 32 (2017) 2455-2462



## O10

### Paper-based analytical devices for the analysis of glycoproteins and glycans.

Jesús Alberto Escarpa Miguel<sup>1</sup>, Silvia Dorte Herranz<sup>1</sup>, Agustín González Crevillén<sup>2</sup>

1. Universidad de Alcalá, Alcalá De Henares (madrid), España

2. Universidad Nacional a Distancia, Madrid, España

#### Resumen

(Microfluidic) paper-based analytical devices (PADs) are an attractive technology for developing novel sensing approaches with diagnostic purposes due to their potential use as point-of-care (POC) and point-of-need (PON) applications [1]. PADs offer portability, operational simplicity, biocompatibility, cost-effectiveness, flexibility, lightness, miniaturization, disposability, low-waste generation, customization, multiplexed analysis, minimal reagent consumption, and spatial control of fluids via capillary forces without external driving forces in microchannels and chambers. In this talk, two relevant applications will be presented and discussed. On the one hand, transferrin (Tf) is a biomarker of diseases related to iron metabolism in the body, such as iron deficiency (anemia) or iron overload (brain damage induced by ischemia), among others since it is responsible for transporting iron in the body. Given the importance of monitoring body iron, transferrin saturation (TSAT) defined as the ratio between transferrin-bound iron (Tf-bound iron), and transferrin total iron-binding capacity (TIBC), is considered an important biomarker of body iron status stored as indicated above [2]. On the other hand, lactose, which is the main carbohydrate in milk and dairy products, can be considered a relevant compound with high significance in the health field since more than 70% of the world population suffers from lactose intolerance [3]. To this end, simple, fast, portable, disposable, sensitive, and tailored (micro)-PADs with colorimetric and/or electrochemical detection were developed in two scenarios: (i) TSAT assessment in samples from ischemic stroke patients [4], and (ii) total sugar content in milk [5]. The results were satisfactory since these (micro)-PADs showed excellent reliability during the analysis of clinical and food samples. Also, in the frame of the analysis of glycoproteins and glycans, which is still carried out in centralized laboratories equipped with benchtop equipment, the potency of these devices for on-site applications is envisioned.

**References** [1] E. Noviana, T. Ozer, C.S. Carrell, et al. *Chem. Rev.* 121 (2021) 11835–11885. [2] M.E. Elsayed, M.U. Sharif, A.G. Adv. *Clin. Chem.* 75 (2016) 71–97. [3] A.E. Ratajczak, A. Zawada, A.M. Rychter, et al. *Nutrients* 13 (2021) 1329. [4] S. Dorte, N. DeGregorio-Rocasolano, M. Millan, et al. *Anal. Chem.* 95 (2023) 12391–12397. [5] S. Dorte, A.G. Crevillen, A. Escarpa, et al. *Sensors Actuators B Chem.* 398 (2024) 134704.

**Acknowledgments** The financial support of grant number PID2020-118154GB-I00 funded by MCIN/AEI/ 10.13039/501100011033 and the Community of Madrid grant number Y2020/NMT6312 (NEURO-CHIP-CM) are gratefully acknowledged.



## O11

### Detección fiable del estado mutacional de genes de relevancia en diagnóstico y pronóstico de cáncer empleando bioplataformas electroanalíticas de vanguardia.

Ravery Sebuyoya<sup>1,2</sup>, Alejandro Valverde<sup>3</sup>, Ludmila Moranova<sup>1</sup>, Johana Strmiskova<sup>1,2</sup>, Roman Hrstka<sup>1</sup>, **Víctor Ruiz-Valdepeñas Montiel**<sup>3</sup>, José M. Pingarrón<sup>3</sup>, Rodrigo Barderas<sup>4</sup>, Susana Campuzano<sup>3</sup>, Martin Bartosik<sup>1</sup>

1. Centro de Investigación de Oncología Molecular Aplicada, Instituto Oncológico Memorial de Masaryk, Brno, República Checa

2. Centro Nacional de Investigación Biomolecular, F. de Ciencias, Universidad de Masaryk, Brno, República Checa

3. Departamento de Química Analítica, F. de Ciencias Químicas, Universidad Complutense de Madrid, Madrid, España

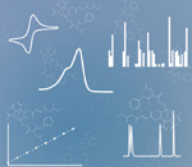
4. Programa de Enfermedades Crónicas (UFIEC), Instituto de Salud Carlos III, Madrid, España

#### Resumen

A pesar de ser modificaciones sutiles en el genoma, las mutaciones puntuales en el ADN desempeñan un papel crucial en la regulación de la función génica, aparición de enfermedades o procesos infecciosos. Su implicación en el inicio y progresión de enfermedades como el cáncer es innegable y su estudio es vital para comprender el trasfondo genético de la enfermedad. En este contexto, algunas de las mutaciones en cáncer son recurrentes y consideradas impulsoras oncogénicas. Por ello, su investigación ofrece oportunidades únicas para comprender las distintas rutas del cáncer y desarrollar estrategias de diagnóstico precisas y tratamientos personalizados. Sin embargo, la detección de mutaciones sigue siendo un desafío, ya que actualmente solo se puede realizar mediante métodos sofisticados, tediosos y de aplicación centralizada, como la secuenciación de nueva generación o PCR. Conscientes de esta necesidad, hemos desarrollado una bioplataforma amperométrica para la mutación más recurrente validada, V600E del gen BRAF, que se sabe afecta a la eficiencia de la terapia en cáncer colorrectal, melanoma o cáncer de pulmón. Dicha plataforma combina de manera sinérgica el empleo de: i) estrategias de biosensado sobre  $\mu$ -soportes magnéticos y detección amperométrica sobre electrodos serigrafados multiplexados, para el análisis sencillo, rápido y de bajo coste, ii) la amplificación isoterma mediante círculo rodante (RCA), como técnica altamente sensible y selectiva y iii) sondas de tipo LNA para mejorar la especificidad. Además, para asegurar un diagnóstico preciso y evitar falsos negativos, se implementó un enfoque de doble confirmación mediante la detección simultánea del gen salvaje (wt) y del mutado (mut). La aplicabilidad de la plataforma dual -wt/mut-RCA demostró potencial para discriminar tan sólo un 1% del gen mutado en modelos sintéticos y proporcionó resultados muy prometedores y consistentes con los obtenidos por secuenciación en el análisis del estado mutacional del gen BRAF en líneas celulares de cáncer y en tejidos tumorales de pacientes con cáncer colorrectal o melanoma [1]. Las características únicas de esta bioplataforma, inspirada en la simplicidad de los medidores de glucosa y con resolución de un único nucleótido en entornos biológicos reales, la ofrece como una herramienta bioanalítica empoderada, de configuración versátil, y fácilmente trasladable a la interrogación simultánea de distintas modificaciones puntuales, para promover la investigación genética y el diagnóstico preciso y personalizado fuera de los laboratorios de investigación.

**Agradecimientos:** NU21-08-00078, LX22NPO5102-EXCELES, LM2023033-BBMRI.cz, MMCI,00209805, PID2019-103899RB-I00, S2018/NMT-4349, PI20CIII/00019-AES-ISCIII.

**Referencias:** [1] R. Sebuyoya, A. Valverde, L. Moranova, et al., Sens. Actuators B. Chem. 394 (2023) 134375.



## O12

### Nuevos biodispositivos electroquímicos para mejorar el pronóstico oncológico analizando el metiloma de los miARNs

**Eloy Povedano Muñumel<sup>1</sup>**, Victor Ruiz-Valdepeñas Montiel<sup>1</sup>, Ravery Sebuyoya<sup>2,3</sup>, Rebeca-Magnolia Torrente Rodríguez<sup>1</sup>, María Garranzo-Asensio<sup>4</sup>, Ana Montero-Calle<sup>4</sup>, José Manuel Pingarrón Carrazón<sup>1</sup>, Rodrigo Barderas Manchado<sup>4</sup>, Martin Bartosik<sup>2</sup>, Susana Campuzano Ruiz<sup>1</sup>

*1. Universidad Complutense de Madrid, Madrid, España*

*2. Centro de Investigación de Oncología Molecular Aplicada, Instituto Oncológico Memorial de Masaryk, Brno, República Checa*

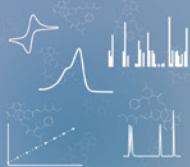
*3. Centro Nacional de Investigación Biomolecular, Universidad de Masaryk, Brno, República Checa*

*4. Instituto de Salud Carlos III, Madrid, España*

#### Resumen

Actualmente acontece un cambio de paradigma en medicina, evolucionando desde el diagnóstico y tratamiento tradicional y generalizado hacia un enfoque moderno, que permita administrar la terapia más eficaz para cada paciente en el momento oportuno, denominado medicina de precisión. A pesar del incesante avance en el diagnóstico y comprensión de muchas enfermedades, su identificación, generalmente en estadios avanzados, se asocia a pronósticos desalentadores, debido a la imposibilidad de aplicar a tiempo tratamientos oportunos, eficaces y con menos efectos secundarios. Por tanto, la búsqueda de nuevas metodologías que permitan tanto el descubrimiento de nuevos marcadores como su determinación temprana es de urgente necesidad. En este sentido, las bioplataformas electroquímicas se consideran herramientas analíticas muy atractivas y prometedoras, capaces de aportar soluciones novedosas y eficientes a los retos clínicos actuales, con enormes posibilidades para consolidarse como sistemas avanzados para el descubrimiento, determinación y evaluación rápida, sensible e in-situ de biomarcadores de diversa naturaleza biológica para el diagnóstico, pronóstico y seguimiento de enfermedades. Hoy en día, identificar el perfil epigenético de una enfermedad está adquiriendo considerable relevancia clínica por su implicación en el inicio y evolución de patologías altamente prevalentes y mortales como el cáncer. Aunque existen bioplataformas para la detección individual de biomarcadores epigenéticos, como los miARNs y eventos de metilación, hasta la fecha no se ha explorado el papel ni el efecto conjunto de ambas epimarcas. Conscientes de su relevancia, hemos desarrollado las primeras bioplataformas electroquímicas para la determinación simultánea del contenido total de miARN-let-7a y su fracción metilada-m<sup>6</sup>A, por su importancia en el diagnóstico y pronóstico del cáncer colorrectal (CCR)[1]. Las bioplataformas desarrolladas mostraron características analíticas y operacionales muy atractivas para la determinación rápida, sensible y selectiva de ambas dianas y se aplicaron, con resultados muy prometedores, al análisis del ARN total extraído de células cancerosas con distinto potencial metastásico, y de tejidos de pacientes diagnosticados con CCR en diferentes estadios, aportando pruebas pioneras de la importancia biológica del metiloma de los miARNs en el diagnóstico y estadificación del CCR. Además, gracias a su versatilidad y compatibilidad con determinaciones multiplexadas, estas bioplataformas podrían diseñarse a la carta para detectar simultáneamente distintas metilaciones en el mismo miARN o la misma metilación en diferentes miARNs para esclarecer y potenciar la importancia del metiloma del miARN en el pronóstico oncológico. PID2019-103899RB-I00 y PID2022-136351OB-I00-(MCIN/AEI/10.13039/501100011033-FEDER); PI20CIII/00019 y PI23CIII/00027-(AES-ISCI-FEDER); NU21-08-00078-(ICIS); LX22NPO5102-(INIC-EXCELES-UE); BBMRI.cz-(No.LM2023033); MHCZ-DRO-(MMCI-00209805); INVESTIGO-CMA-(CT19/23-INVM-55/E.Povedano). [1]E.Povedano, V.Ruiz-Valdepeñas Montiel, R.Sebuyoya et al., Anal. Chem., 96(11)(2024)4580-4588. Back cover featured.





## O13

### Cost-effective fully 3d-printed on-drop electrochemical sensor: a comparative study with screen-printed sensors

Agustín González Crevillén<sup>1</sup>, Olga Monago Maraña<sup>1</sup>, Nadia Aouladtayib Boulakjar<sup>1</sup>, Antonio Zapardiel Palenzuela<sup>1</sup>, Amabel García Domínguez<sup>2</sup>, Jorge Ayllón Pérez<sup>2</sup>, Álvaro Rodríguez Prieto<sup>2</sup>, Juan Claver Gil<sup>2</sup>, Ana María Camacho López<sup>2</sup>

*1. Department of Analytical Sciences, Universidad Nacional de Educación a Distancia (UNED), Las Rozas, España*

*2. Department of Manufacturing Engineering, Universidad Nacional de Educación a Distancia (UNED), Madrid, España*

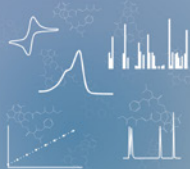
#### Resumen

3D-printing technology allows analysts to design and fabricate easily novel tailored-shaped (bio) sensing devices, boosting the development of low-cost portable analytical devices for point-of-care testing (POCT) and for on-site analysis [1]. In this sense, there are some excellent examples of fully 3D-printed electrochemical sensors in the literature [2-4] by fused filament fabrication (FFF). However, these sensors were designed containing big electrochemical cells (mL range) and/or employing a large amount of material for their fabrication, which increases the cost per unit and decrease manufacturing throughput. These drawbacks make them unattractive for commercial purpose, because current commercial on-drop screen-printed electrodes (SPE) need less than 100  $\mu\text{L}$  of sample and the price is lower than 2 €/unit. In this work, a 3D-printed on-drop electrochemical sensor (3D-PES) for on-site food analysis was fully manufactured by FFF. Carbon black/polylactic acid filament was employed, and the design and several printing parameters were optimized to yield the maximum electroanalytical performance using the minimal material. Print speed and extrusion width showed a critical influence on the electroanalytical performance of 3D-PES. Under optimized conditions, the fabrication procedure offered excellent reproducibility, speed (<3 min/unit), and costs (<0.01 €/unit in cost material). The 3D-PES was successfully applied to the determination of phloridzin in apple juice, providing an adequate limit of detection of 2.2  $\mu\text{M}$ , showing good precision (RSD=7.1%) and accuracy (recovery  $111 \pm 20\%$ ). Furthermore, the analytical performance of 3D-PES was compared to an equivalent commercial SPE, yielding similar precision but lower accuracy and sensitivity than SPE. However, 3D-PES provides interesting features such as renewability, biodegradability, low-cost, and the possibility of being manufactured near the point of need, some of which meets several demands of Green Chemistry and Sustainable Development. This green approach is a promising alternative for manufacturing disposable and portable electroanalytical devices, opening new possibilities not only in on-site food analysis but also in POCT.

**References** [1] J. Muñoz, M. Pumera, *TrAC* 128 (2020)115933.

[2] E.M. Richter, D.P. Rocha, R.M. Cardoso, et al., *Anal Chem* 91 (2019) 12844–12851. [3] R.D. Crapnell, E. Bernalte, A.G.M. Ferrari, M.J. et al., *ACS Meas.Sci. Au* 2 (2022) 167–176. [4] H.A. Silva-Neto, M. Santhiago, L.C. Duarte, et al., *Sens. Act. B Chem* 349 (2021) 130721.

**Acknowledgments** This work was supported by UNED-Santander 2022 grant (2022V/ITEMP/003), and by the Project PLEC2021-007750 financed by MCIN and by NextGenerationEU/ PRTR (MCIN/AEI/10.13039/501100011033).



## O14

### Sensor electroquímico selectivo hacia BPA en aguas residuales mediante polímeros de impresión molecular sobre óxido de grafeno magnético

**Antonio Jesús Ruiz Sánchez**, Lourdes Mena Herrera, Pablo Montoro Leal, Rebeca Jimenez Pérez, Ana Belén Martínez Piernas, Irene Sánchez Trujillo, María Del Mar López Guerrero, Elisa Vereda Alonso

*Universidad de Málaga, Málaga, España*

#### Resumen

El bisfenol A (BPA) es un compuesto orgánico ampliamente utilizado en la producción de plásticos y resinas; el cual se libera fácilmente de estos productos y que puede afectar a la salud humana al ser un disruptor endocrino [1]. Dada su relevancia y riesgos, y gracias a las propiedades electroactivas del BPA, este se ha estudiado en sectores como la alimentación, medio ambiente y sistemas biológicos mediante el empleo de sensores electroquímicos [2] [3]. En nuestra investigación más reciente, hemos desarrollado un sensor electroquímico avanzado basado en polímeros de impresión molecular. Para el desarrollo del sensor se ha utilizado un polímero de pirrol sobre óxido de grafeno magnético (MGO), empleando BPA como plantilla molecular. Láminas de óxido de grafeno obtenido mediante procedimientos mecanoquímicos se funcionalizan covalentemente con nanopartículas magnéticas de hierro recubiertas de sílice. Sobre este MGO, el pirrol se polimeriza en presencia de BPA, formando una estructura única que, tras la eliminación del BPA mediante sencillas técnicas de lavado y decantación magnética, permite el reconocimiento y selección de moléculas de BPA en presencia de otros contaminantes de estructura similar. Las propiedades magnéticas de este material permiten una modificación rápida y fácil de las superficies de los electrodos de carbono serigrafados. Nuestros resultados muestran una alta sensibilidad ( $LOD < 10^{-10}$  M) y selectividad en la detección de BPA, incluso en matrices reales de agua residual. El trabajo desarrollado hasta ahora en nuestro laboratorio permite por tanto la detección de BPA a muy bajas concentraciones y ofrece nuevas herramientas para combatir su presencia en el medio ambiente mediante el uso de electrodos desechables de bajo costo y una metodología rápida y sencilla para la modificación de las superficies sensoras. Este trabajo ha sido cofinanciado con los Proyectos del Ministerio de Ciencia e Innovación PID2021-126794OB-100 y del Plan Propio de la Universidad de Málaga B4-2023-19 (UMA-Andalucía-TECH).

**Referencias:** [1] L. Dinu Gugoasa. J. Electrochem. Soc. (2020) 167 037506 [2] D. Pei, A.-Y. Zhang, X.-Q. Pan, et al. Analytical Chemistry (2018) 90 (5), 3165-3173 [3] S. Tajik, H. Beitollahi, F. Nejad, et al. Sensors, (2020), 3364-3382.



## O15

### **Electrodos serigrafados flexibles basados en quitosano y nanopartículas de oro para la determinación de analitos de interés clínico.**

**Concepción Rodríguez Oñate**, Pablo Galindo Santiago, Miguel Maria Erenas,  
Alfonso Salinas Castillo, Ignacio De Orbe Payá, Luis Fermín Capitán Vallvey  
*Universidad de Granada, Granada, España*

#### **Resumen**

Año tras año, se ha puesto de manifiesto la importancia del estudio y monitorización de marcadores de interés clínico debido al impacto que tienen en la evolución de algunas enfermedades. A pesar de la investigación sobre estos temas, existen algunos retos a superar como la especificidad del reconocimiento, la miniaturización, la detección rápida o los problemas con los sistemas multiplexados. En este sentido, los nanomateriales presentan características interesantes en la química de reconocimiento para la fabricación de sensores y biosensores. En este trabajo, presentamos el desarrollo de un sensor basado en quitosano y nanopartículas de oro para la determinación de ácido úrico utilizando electrodos serigrafados.

El ácido úrico, producto del metabolismo de la purina, es un marcador de relevante importancia en el diagnóstico de enfermedades cardiovasculares o renales como la gota. Unos niveles elevados de este analito en el cuerpo pueden provocar hiperuricemia, razón por la que recientemente se han desarrollado numerosos dispositivos con la finalidad de monitorizarlo en fluidos humanos como el sudor o la sangre [1].

El quitosano se presenta como un material de fácil obtención y con naturaleza de polisacárido. Esta estructura, derivada de la quitina, permite diversas aplicaciones como el desarrollo de membranas, geles o películas utilizando diversos métodos. En los últimos años, su empleo en el desarrollo de dispositivos de uso clínico ha aumentado gracias a la biocompatibilidad que presenta el polímero. Por otro lado, el empleo de nanopartículas metálicas es de gran utilidad en el desarrollo de dispositivos electroquímicos gracias a las características de amplificación que confieren en la detección de analitos con propiedades redox [2].

Los electrodos serigrafados son un método de preparación de dispositivos miniaturizados de interés analítico y presentan un amplio abanico de ventajas. Estos dispositivos son fácilmente modificables mediante diferentes técnicas, aumentando así su selectividad para el procedimiento deseado. Para el desarrollo del sensor se han preparado en el laboratorio electrodos serigrafados, que posteriormente han sido modificados por electrodeposición, drop casting y por serigrafía, con quitosano y nanopartículas de oro, con la finalidad de seleccionar la metodología óptima. Los resultados obtenidos permiten el desarrollo de un sensor electroquímico basado en quitosano y nanopartículas de oro con potencial aplicación a la determinación de ácido úrico.

#### **Referencias**

- [1] Z. Hsine, S. Blili, R. Milka, et al. ABC 412 (2020) 4433-4446.
- [2] J. Elliott, J. Duay, O. Simoska, et al. Anal. Chem. 89 (2017) 1267-1274.



## O16

### Sensores wearable basados en micro agujas para la monitorización in vivo de analitos de relevancia clínica

Águeda Molinero-Fernández, Gastón A. Crespo, María Cuartero  
UCAM-SENS, Universidad Católica San Antonio de Murcia,  
UCAM HiTech Avda. Andres Hernandez Ros 1, 30107, Murcia, España

#### Resumen

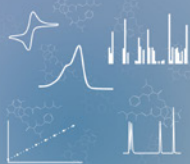
En la actualidad, los sensores *wearable* están liderando un cambio de paradigma en la atención médica, la cual está cada vez más enfocada en un seguimiento personalizado y descentralizado del paciente. La nueva tendencia en dispositivos *wearable* integra sensores cada vez más sofisticados, como sensores basados en microagujas, que pueden proporcionar información bioquímica cada vez más amplia, y completa, en tiempo real, y mejorando el bienestar del paciente con un mínimo grado de invasión.[1]

En esta presentación mostramos nuevos sensores basados en microagujas para la determinación de analitos clínicamente relevantes y que están presentes en el líquido intersticial: i) electrolitos, ii) gases, y iii) biomoléculas.[2–4] En primer lugar, sus características analíticas se demuestran en configuración *in vitro*. Posteriormente, la capacidad de los sensores para realizar medidas intradérmicas se evalúa mediante la determinación del analito de interés en pieles acondicionadas con concentraciones conocidas de este. Estas medidas intradérmicas *ex vivo* son validadas mediante la extracción del líquido intersticial y su posterior análisis utilizando una técnica analítica alternativa (ej. cromatografía iónica). Finalmente, los sensores se emplean para la monitorización de los analitos de interés en animales, y las medidas intradérmicas son también validadas. Hay que destacar que esta tarea no es sencilla y se realiza en base a diferentes estrategias dependiendo del tipo de analito, normalmente incluyendo no solo el análisis de muestras de líquido intersticial, pero también de sangre.

Los sensores de microagujas que se presentan en este trabajo son unas herramientas analíticas muy valiosas para el seguimiento *in situ* de un amplio espectro de condiciones clínicas. Convenientemente, la versatilidad de esta tecnología hace factible su extensión a otros analitos, así como los protocolos de validación podrían extrapolarse a otros sensores de microagujas para medidas intradérmicas. En todo caso, los resultados obtenidos con los sensores *wearable* desarrollados apuntan a la veracidad la hipótesis de partida de nuestra línea de investigación: que el líquido intersticial se puede utilizar como proxy de las concentraciones en sangre y por lo tanto, su análisis cumplirá los mismos objetivos.

#### Referencias

- [1] J. J. García-Guzmán, C. Pérez-Ràfols, et al. *TrAC, Trends Anal. Chem.* **2021**, 135, 116148.
- [2] A. Molinero-Fernandez, Q. Wang, et al. *ACS Sens.* **2023**, 8, 1, 158-166.
- [3] Q. Wang, A. Molinero-Fernandez, et al. *Anal Chem.* **2022**, 94, 34, 11856-11864.
- [4] A. Molinero-Fernandez, Q. Wang, et al. *ACS Sens.* **2024**, 9, 1, 361–370.



## O17

### DetECCIÓN DE VESÍCULAS EXTRACELULARES: UN ENFOQUE RÁPIDO Y DE ALTA SENSIBILIDAD

Clara Saweres Argüelles<sup>1</sup>, Alberto Sánchez Calvo<sup>1</sup>, Baihui Wang<sup>1</sup>, Esther Serrano Pertierra<sup>2</sup>, Gemma Gutiérrez Cervelló<sup>3</sup>, María Matos González<sup>3</sup>, María Carmen Blanco López<sup>4</sup>

*1. Departamento Química Física y Analítica, Instituto de Biotecnología de Asturias, Universidad de Oviedo, Oviedo, España*

*2. Departamento de Bioquímica y Biología Molecular, Instituto de Biotecnología de Asturias, Universidad de Oviedo, Oviedo, España*

*3. Departamento de Ingeniería Química y Tecnología del Medioambiente, Instituto de Biotecnología de Asturias, Universidad de Oviedo, Oviedo, España*

*4. Departamento de Química Física y Analítica, Instituto de Biotecnología de Asturias, Universidad de Oviedo, Oviedo, España*

#### Resumen

Las vesículas extracelulares (VE) son una fuente prometedora de biomarcadores de diagnóstico, pronóstico y seguimiento en una gran variedad de enfermedades. No obstante, aún no se han estandarizado los procedimientos de aislamiento y posterior análisis para el estudio de las VE en el ámbito clínico [1]. Además, la cuantificación de VE continúa siendo un reto; a pesar de disponer de varias técnicas para su caracterización y/o cuantificación (NTA, AF4, ELISA, etc.), ninguna de ellas permite una caracterización completa debido a la heterogeneidad de tamaño y a la complejidad intrínseca de las muestras biológicas. Por otra parte, algunas de ellas requieren equipos muy caros y personal cualificado para su manejo. En este sentido, es necesario disponer de métodos que permitan cuantificar y caracterizar estas vesículas mediante dispositivos rápidos, sensibles y económicos. Por esto, nuestro grupo de investigación ha desarrollado un inmunoensayo de flujo lateral (LFIA) para biomarcadores en EVs. Aunque la principal limitación del LFIA es su baja sensibilidad, esta puede mejorarse utilizando diferentes enfoques. En este trabajo, utilizando anti-CD9 como anticuerpo de captura y anti-CD63 de detección en un LFIA formato sándwich, se demostró que diferentes nanopartículas mejoraban la sensibilidad de un ensayo que requiere sólo 1  $\mu\text{L}$  de VE recién aisladas utilizando un kit comercial. Por un lado, se alcanzó un LOD de  $3.19 \times 10^4 \text{ EV}/\mu\text{L}$  midiendo la fluorescencia de la señal de Eu NPs. Por otro lado, se utilizaron LFIA electroquímicos basados en Au NPs de dos formas diferentes: i) modificando químicamente las Au NPs y midiendo de la señal obtenida y ii) amplificando la señal con plata, cuya reducción es catalizada por el oro. Con este acoplamiento electroquímico se obtuvieron LODs de 39 y 26  $\text{EV}/\mu\text{L}$ . Así, se desarrollaron tres métodos rápidos, asequibles y fáciles de usar para cuantificar las VE, una nueva fuente de biomarcadores para el diagnóstico no invasivo, el pronóstico y monitorización de enfermedades, así como un sistema de administración de fármacos para terapias personalizadas. [1] Serrano-Pertierra, E., Oliveira-Rodríguez, M., Matos, M., Gutiérrez, G., Moyano, A., Salvador, M., Rivas, M., Blanco-López, M.C. *Biomolecules* 10 (2020) 284.

#### Agradecimientos

Este trabajo ha sido financiado por el Ministerio de Ciencia e Innovación (PID2020-119087RB-I00) y cofinanciado por la Consejería de Educación y Ciencia del Principado de Asturias (AYUD/2021/52132). Clara Saweres-Argüelles agradece su beca FPU22/00762 del Ministerio de Ciencia, Innovación y Universidades.



## O18

### Tratamiento de muestra con nuevos dispositivos impresos en 3D: un mundo nuevo de posibilidades

**Enrique Javier Carrasco Correa**<sup>1</sup>, María Vergara Barberán<sup>1</sup>, Miriam Beneito Cambra<sup>1</sup>, María Jesús Lerma García<sup>1</sup>, Ernesto Francisco Simó Alfonso<sup>1</sup>, José Manuel Herrero Martínez<sup>1</sup>, Manuel Miró<sup>2</sup>  
*1. Grupo CLECEM, Dpto. Química Analítica, Universitat de València, Burjassot, València, España*  
*2. Grupo FI-TRACE, Dpto. Química, Universitat de les Illes Balears, Palma, España*

#### Resumen

La impresión 3D ha despertado un gran interés en el ámbito de la Química Analítica debido a su capacidad para crear estructuras nuevas que otras tecnologías no pueden lograr fácilmente o tienen un coste de fabricación elevado. Aunque hay muchas tecnologías disponibles, las más comunes son el modelado por deposición fundida, la estereolitografía, la impresión con tinta fotopolimérica y la sinterización selectiva por láser, cada una con sus pros y contras. Todas estas técnicas se basan en la creación de estructuras mediante adición de capas sucesivas de material, aunque difieren en la forma en la que se generan estas capas. Es por ello que en los últimos años, la cantidad de investigaciones sobre el uso de la impresión 3D ha aumentado exponencialmente, y el campo de la preparación de muestras se está constantemente nutriendo de esta tecnología [1]. En esta comunicación, se explorarán las aplicaciones de la impresión 3D en el desarrollo de dispositivos innovadores para la preparación de muestras, tanto en la extracción en fase sólida como en la extracción líquido-líquido. Se presentarán ejemplos destacados desarrollados en los grupos de investigación CLECEM y FI-TRACE para ilustrar las diversas posibilidades disponibles. Estos ejemplos se centrarán en mostrar nuevos dispositivos para aplicaciones de disco rotativo, electromembranas, sistemas sostenibles basados en materiales ecológicos, o sistemas con múltiples opciones (extracción y sensado) y otras alternativas interesantes. Además, se ofrecerán recomendaciones sobre cómo seleccionar la técnica de impresión 3D más adecuada para las necesidades comunes en el área de la preparación de muestras.

[1] F. Li, M.R. Ceballos, S.K. Balavandy, J. Fan, M.M. Khataei, Y. Yamini, F. Maya, J. Sep. Sci. 43 (2020) 1854-1866.

**Agradecimientos:** Agencia Española de Investigación (AEI/10.13039/501100011033) del Ministerio de Ciencia e Innovación (MICINN) por el proyecto PID2021-125459OB-I00 y a la Generalitat Valenciana (GV) por los proyectos CIAICO/2022/183, INVEST/2022/117, INVEST/2022/425 e IN-NEST/2022/299. Red Nacional para la Innovación en las Técnicas de Tratamiento de Muestras Miniaturizadas (RED2022-134079-T) concedida por el MICINN. Este estudio forma parte del programa de Materiales Avanzados y recibió apoyo del MICINN con financiamiento de la Unión Europea Next Generation EU (PRTR-C17.11) y de la GV.



## O19

### Development of an environmentally friendly dispersive liquid-liquid microextraction method using natural deep eutectic solvents for the determination of industrial chemicals in water sample

Beatriz Gómez-Nieto<sup>1,2</sup>, Antigoni Konomi<sup>2</sup>, Georgios Gkotsis<sup>2</sup>, Maria Christina Nika<sup>2</sup>, Nikolaos Thomaidis<sup>2</sup>

1. *Grupo de Investigación de Sensores y Especiación Metálica (GISEM), Departamento de Química Analítica y Análisis Instrumental, Facultad de Ciencias, Universidad Autónoma de Madrid, Madrid, España*

2. *Laboratory of Analytical Chemistry, Department of Chemistry, National and Kapodistrian University of Athens, Athens, Grecia*

#### Resumen

The pollution of water resources by industrial, agricultural, and/or urban discharges has become a significant global environmental problem. Therefore, the control of water resources is extremely important to ensure the protection of both the biota that inhabit them and human health. Considering the usually low concentration levels of contaminants that need to be monitored and the need to avoid matrix effects in the analytical measurement, it is necessary to use sample preparation protocols to isolate and preconcentrate the analytes of interest from the rest of the components present in the samples. Dispersive liquid-liquid microextraction (DLLME) is one of the most widely used extraction methods due to its simplicity, cost-effectiveness, and low extractant consumption (in the order of microliters) and waste generation. To enhance the sustainability of analytical methods and to adhere fully to the principles of Green Analytical Chemistry, current research is focused on the replacement of the organic extractants commonly used in DLLME with alternative non-toxic extractant solvents, such as Natural Deep Eutectic Solvents (NADES). In the framework of the present study, substantial efforts have been invested to develop and optimize a simple and environmentally friendly sample treatment method for the extraction and preconcentration of different families of industrial chemicals (benzotriazoles, parabens, and sunscreens) in water samples using NADES as the extraction medium. To develop this method, different hydrophobic NADES composed of water-insoluble monoterpenes (such as menthol and/or thymol) and non-polar fatty acids (such as caprylic, capric, and/or lauric acid) were prepared and evaluated. Moreover, the impact of the experimental variables that can influence the extraction efficiency of the target contaminants (such as the pH and ionic strength of the water sample, ratio of sample volume to NADES volume, and extraction temperature and time) were investigated using a multivariate method. Finally, the main analytical figures of merit of the method, such as accuracy and extraction precision, were estimated and the applicability of the method was evaluated in real wastewater samples from the main wastewater treatment plants of Athens, Greece. The environmental impact of the developed method was evaluated using the Analytical GREENness Preparation (AGREEprep) metric.

**Acknowledgements** Gómez-Nieto thanks to the José Castillejo International Mobility Stays for Young Researchers 2023 grants for the financial support received to conduct her research at the NKUA. She extends her gratitude to TrAMs group and professor Thomaidis for their outstanding assistance and for providing the necessary facilities to complete this investigation.



## O20

### Tratamiento de muestra acoplado a espectrometría de masas: diseño de interfases asequibles basadas en agujas

**Jaime Millán-Santiago, Rafael Lucena, Soledad Cárdenas**

*Grupo de investigación Affordable and Sustainable Sample Preparation, Departamento de Química Analítica, Universidad de Córdoba, Córdoba, España*

#### Resumen

El escenario ideal para el análisis de muestras complejas consiste en su dilución y posterior análisis en lo que se conoce como técnica dilute-and-shoot. Sin embargo, esta modalidad representa un desafío en términos de sensibilidad, selectividad y compatibilidad de la muestra con la técnica instrumental utilizada, generalmente espectrometría de masas. Por lo tanto, el desarrollo de una etapa de tratamiento de muestra resulta imprescindible para preconcentrar los analitos, minimizar los interferentes y garantizar la compatibilidad instrumental. Las técnicas cromatográficas que se suelen utilizar en bioanálisis ralentizan la frecuencia de análisis. Una alternativa para disminuir el tiempo de análisis consiste en el acoplamiento directo del tratamiento de muestra a la espectrometría de masas ambiental (AIMS). Una de las modalidades de AIMS, denominada substrate-spray mass spectrometry (SSMS), consiste en el uso de un dispositivo que permite la formación del electrospray (ESI) que contiene a los analitos tras aplicar un alto voltaje y añadir un disolvente orgánico que permite eluir e ionizarlos. Se ha descrito el uso de diferentes materiales en SSMS, como papel, palillos de madera, papel de aluminio y agujas. Las agujas son dispositivos asequibles que presentan una cavidad interna que permite el flujo de muestras líquidas y disolventes a través de ellas, además de la posibilidad de albergar fases sorbentes en su interior. De esta manera, pueden actuar como dispositivos emisores de ESI y como dispositivos de extracción al mismo tiempo. Por ello, el grupo de investigación ha desarrollado diferentes prototipos de interfases en AIMS basadas en el uso de agujas modificadas con diferentes fases sorbentes en su interior, incluyendo agujas hipodérmicas [1,2] y agujas romas [3,4]. En esta comunicación se presentarán estas propuestas indicando sus ventajas e inconvenientes en el análisis de muestras biológicas.

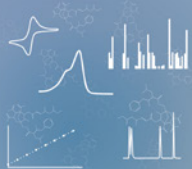
#### Agradecimientos

La investigación desarrollada en este trabajo ha sido posible gracias al proyecto PID2020-112862RB-I00 financiado por MICIU/AEI/ 10.13039/501100011033 (Feder “Una manera de hacer Europa”). J. Millán-Santiago agradece al Ministerio de Universidades por la ayuda predoctoral FPU19/01488.

#### Referencias

[1] C. Vejar-Vivar, J. Millán-Santiago, C. Mardones, R. Lucena, S. Cárdenas. *Talanta*, 249 (2022) 123693. [2] J. Millán-Santiago, R. Lucena, S. Cárdenas. *J. Pharm. Anal.* 13 (2023) 1346–1352. [3] J. Millán-Santiago, R. Lucena, S. Cárdenas. *Anal. Chim. Acta.* 1297 (2024) 342376. [4] J. Millán-Santiago, R. Lucena, S. Cárdenas. Enviado a *Advances in Sample Preparation*.





## O21

### Metal-Organic Frameworks for the microextraction of liver diseases biomarkers

**Idaira Pacheco-Fernández**, Iulia Dragan, Hélder A. Santos  
*University Medical Center Groningen, Groningen, Países Bajos*

#### Resumen

Non-alcoholic fatty liver disease (NAFLD) is the most common liver disorder worldwide that may lead to other chronic liver diseases and cancer. Its diagnosis and prognosis involve a liver biopsy that entails certain unavoidable risks and errors. Thus, the determination of biomarkers in biological fluids, particularly metabolites, is one of the most promising alternatives to these invasive procedures. Several studies have identified branched amino acids and fatty acids in blood plasma as potential biomarkers of the different stages of NAFLD, from steatosis to cirrhosis [1]. However, there are a lot of inconsistencies between the results, mainly because of the different sample preparation and analytical techniques used and the low concentrations at which these compounds are present in the samples. Thus, there is a need to develop a simple, selective and sensitive analytical method for a reliable diagnosis of NAFLD. Microextraction techniques are very simple and present high preconcentration capability and clean-up features for sample preparation. Their performance mainly relies on the nature of the extraction phase, with only a few commercially available. The main limitation of these phases is their lack of selectivity and low stability, which hampers their implementation in challenging clinical analysis. Metal-organic frameworks (MOFs) are reticular materials that have attracted much attention in the field because of their high surface area and synthetic tunability, which lead to high extraction efficiency and tailored selectivity. However, they have been barely explored in bioclinical applications or in the metabolomics field [2]. In this work, different MOFs are evaluated in a microextraction procedure for the determination of branched amino acids and small peptides in blood plasma samples. The study aims to systematically study the influence of MOF composition, topology and functionalization on the extraction capacity and selectivity. Four compounds are used as model biomarkers and determined by LC and fluorescence detection. Furthermore, the MOF is combined with a polymer to create a hybrid extraction phase with anti-fouling properties that can be incorporated in a microextraction device to facilitate the practical aspects of the analysis and develop a platform that can be easily implemented in the monitoring and diagnosis of NAFLD.

I. Pacheco-Fernández acknowledges financial support European Union's Horizon Europe 2021 Research and Innovation Programme for her Marie Skłodowska-Curie Grant No. 101059391. [1] M. Masoodi, A. Gastaldelli, T. Hyötyläinen, et al. *Nat. Rev. Gastroenterol. Hepatol.* 18 (2021) 835. [2] A. Gutiérrez-Serpa, I. Pacheco-Fernández, J. Pasán, et al. *Separations* 6 (2019) 47.



## O22

### Empleo de biodisolventes supramoleculares verdes para el cribado de contaminantes de materiales en contacto con alimentos mediante LC-QTOF.

Laura García Cansino<sup>1</sup>, María Ángeles García<sup>1</sup>, Noelia Caballero Casero<sup>2</sup>, María Luisa Marina<sup>1</sup>, Soledad Rubio<sup>2</sup>

1. Universidad de Alcalá, Alcalá De Henares, España

2. Universidad de Córdoba, Córdoba, España

#### Resumen

La Autoridad Europea de Seguridad Alimentaria (EFSA) ha autorizado el uso de varios compuestos orgánicos para la fabricación de materiales en contacto con alimentos (FCM), ya que les confieren determinadas propiedades como filtros UV, opacidad, estabilizadores de la luz, etc. Además de este grupo de sustancias añadidas intencionadamente (IAS), los FCMs pueden contener otros compuestos químicos que no han sido añadidos intencionadamente (non-intentionally added substances, NIAS), resultantes de reacciones de degradación o impurezas. El principal objetivo de este trabajo ha sido la identificación tanto de IAS como de NIAS en los FCMs.

Para realizar la extracción de los diferentes contaminantes en FCMs, se ensayaron varios disolventes supramoleculares (SUPRASs) sintetizados a partir de diferentes moléculas anfífilas y distintas condiciones de coacervación. Una vez seleccionado el SUPRAS, se optimizaron las condiciones de extracción, eligiendo un 10% de 1-decanol, un 20% de etanol y un 70% de agua como composición óptima del SUPRAS y un tiempo de extracción de 15 min. Los procesos de extracción y tratamiento de datos se desarrollaron a partir de las señales de los compuestos marcados isotópicamente, así como de la evaluación de los parámetros analíticos del método. Las características detectadas se filtraron por comparación con una lista de compuestos sospechosos. A continuación, se anotaron e identificaron las características en función de la precisión de la masa (diferencia de masa inferior a 5 ppm), el patrón isotópico, los espectros MS/MS, etc., comparando con las bases de datos de espectros de masas (por ejemplo, MassBank). Por último, se llevó a cabo el análisis de 16 envases alimentarios diferentes, clasificados según el tipo de material, así como si procedían de material reciclado o no. Se identificaron 26 compuestos con niveles de confianza que oscilaban entre 2 y 4, siendo los retardantes de llama los compuestos con mayor presencia en las muestras analizadas.

#### Agradecimientos

Este trabajo ha sido financiado por MCIN/AEI/10.13039/501100011033 [número de subvención PID 2020-113743RB-I00]. N. Caballero-Casero agradece la subvención IJC2020-044941-I financiada por el MICIU/AEI/10.13039/501100011033 y por la Unión Europea NextGenerationEU/PRTR. L.G.C. agradece a la Universidad de Alcalá su contrato predoctoral FPI.



## O23

### Retos analíticos para la determinación de aditivos plásticos no ftálicos en suelo y agua

**Raquel Capilla Flores**, Rosalía López Ruíz, Francisco Javier Egea González,  
Roberto Romero González, Antonia Garrido Frenich  
*Universidad de Almería, Almería, España*

#### Resumen

La creciente preocupación por los aditivos plásticos (APs) radica en su capacidad para migrar desde los materiales plásticos hasta los entornos circundantes, incluyendo suelo y agua. Hasta la fecha, la mayoría de los estudios de APs se basan en los ftalatos, pero debido a sus efectos adversos sobre la salud y el medio ambiente, algunos han sido restringidos y otros han sido clasificados como sustancias muy preocupantes según la normativa REACH. Por ello, según la Recomendación 2019/794 los ftalatos están siendo sustituidos por APs menos tóxicos, los denominados aditivos plásticos no ftálicos (APNFs) [1]. Actualmente, los estudios publicados se basan en el control de un escaso número de APNFs, destacando la ausencia de información sobre su presencia en matrices de suelo y agua. Por ello, en este trabajo se han desarrollado nuevos métodos para la determinación de un amplio número de APNFs en dichas matrices. Debido a las diferentes características fisicoquímicas de los APNFs en estudio, se emplearon complementariamente la cromatografía de gases (GC) y de líquidos (LC) acopladas a espectrometría de masas de alta resolución (HRMS). Los métodos de extracción para suelo se basaron en la extracción sólido-líquido, mientras que para agua se han empleado métodos menos contaminantes como son la microextracción en fase sólida (en GC) y extracción líquido-líquido asistida con sales (en LC) debido al poco volumen de disolvente empleado (2 ml). Dichos métodos fueron optimizados y validados, con límites de cuantificación comprendidos entre 10 – 40 µg/kg para suelo y 0,01 – 0,5 µg/L para agua, logrando extraer satisfactoriamente un total de 28 y 25 APNFs, respectivamente. Se analizaron muestras de suelo (n = 11) y de agua (n = 15), siendo 1 hidroxiciclo hexil fenil cetona, HCPK (29,1 – 67,4 µg/kg) y 2,2,4 trimetil 1,3 pentanodiol diisobutirato, TXIB (39,9 – 51,5 µg/kg) los compuestos más frecuentemente detectados y a mayores concentraciones en suelo. Mientras que en agua fueron HCPK (0,93 – 4,5 µg/L), TXIB (3,4 – 9,0 µg/L) y acetiltributil citrato, ATBC (0,06 – 12,0 µg/L). Por tanto, se confirma la presencia de APNFs en muestras de suelo y agua, detectándose a mayores concentraciones en suelo, lo que destaca la importancia del estudio de APNFs.

Esta publicación forma parte del proyecto PID2022-137122OB-I00, financiado por MICIU/AEI/10.13039/501100011033/ y FEDER, UE. Además, agradezco la subvención FPU21/00858, financiada por MICIU/AEI/10.13039/501100011033 y ESF+. [1] European Commission. COMMISSION RECOMMENDATION 2019/794.



## O24

### Natural deep eutectic solvent-based liquid-liquid microextraction for bisphenols extraction from water samples

Iván Rubio Santos, Javier Rayos Hurtado, Irene Ortega Lara, Miguel Ángel Aguirre Pastor, Lorena Vidal Martínez, Antonio Canals Hernández  
*Universidad de Alicante, Alicante, España*

#### Resumen

Recently, there has been increased interest in the use of natural deep eutectic solvents (NADES) in microextraction processes, in part due to their components are originated from nature, their low toxicity, low vapor pressure, high thermal stability, simplicity of synthesis at room temperature, high purity and low cost [1]. On the other hand, bisphenols (BPs) are a series of synthetic organic compounds that include several analogous structures such as bisphenol A (BPA), bisphenol S (BPS), bisphenol AP (BPAP), bisphenol AF (BPAF), bisphenol F (BPF), among others. These compounds are employed in the plastic industry for food containers and packaging materials, and coatings on metal cans and bottle tops. Therefore, BPs can migrate from food packaging and there has been growing concern about BPs release into environmental matrices (i.e., surface waters). The aim of this study is to develop a new method for determining 5 bisphenols (i.e., BPS, BPA, BPAP, BPAF and BPF) in water samples using a NADES. Decanoic acid:DL-menthol in a molar ratio of 1:2 is used as an environmentally friendly extractant for separation and preconcentration of BPs using dispersive liquid-liquid microextraction before liquid chromatography coupled with a diode array detector (LC-DAD). The method has been evaluated under optimized conditions (i.e., NADES volume, 50  $\mu$ L; sample pH, 7; extraction time, 3 min; centrifugation speed, 2000 rpm; and centrifugation time, 2 min), obtaining good linearity with correlation coefficients ranging between 0.993 and 0.999 ( $N = 8$ ). The relative standard deviation evaluated range from 4 and 19%, and the detection limits are between 1.5 and 3.5  $\mu$ g/L. The recovery tests evaluated for different water samples provide relative recoveries between 70 and 118%. In addition, a migration study has been carried out with polycarbonate bottles. Finally, the greenness of the method has also been evaluated.

**Acknowledgements** The authors would like to thank the Spanish Ministry of Science and Innovation (PID2021-126155OB-I00), the Regional Government of Valencia (Spain) (CIPROM/2021/062) for the financial support; and Ministry of Science and innovation for granting the Spanish Network of Excellence in Sample Preparation (RED2018-102522-T). This article is based upon work from the Sample Preparation Study Group and Network, supported by the Division of Analytical Chemistry of the European Chemical Society. Iván Rubio also thanks "Vicerrectorado de Investigación" of the University of Alicante for his fellowship (UAFPU22-23).

**References** [1] A. Santana-Mayor, R. Rodríguez-Ramos, A. Herrera-Herrera A, et al. *TrAC, Trends Anal. Chem.* 134 (2021)116108.



## O25

### Nuevas estrategias de microextracción basadas en la dispersión de materiales magnéticos para el análisis de muestras biológicas de bajo volumen

**Alberto Chisvert**, Juan L. Benedé, José Grau, Cristian Azorín, Guillem Peris-Pastor, Andreu L. López-Juan, Luis Miguel Moreno-Calleja  
*GICAPC, Departamento de Química Analítica, Facultad de Química, Universidad de Valencia, Burjassot-Valencia, España*

#### Resumen

Las técnicas de microextracción convencionales han permitido llevar a cabo de manera eficiente la extracción de biomarcadores en el análisis de muestras de fluidos biológicos. Sin embargo, estas técnicas frecuentemente se ven limitadas cuando no se dispone de grandes volúmenes de muestra como suele ocurrir en el caso de algunos fluidos biológicos, ya sea debido a la propia naturaleza del mismo (saliva, líquido folicular, líquido cefalorraquídeo, entre otros), a la persona en estudio (recién nacidos o pacientes inmunodeprimidos), o al propio contexto (restos en el análisis forense). A esta limitación hay que añadir la necesidad de disponer de resultados lo antes posible, además de procesar un gran número de muestras. Finalmente, no se debe obviar el riesgo biológico que presenta este tipo de muestras, así como la necesidad de evitar la contaminación cruzada en el tratamiento de muestras sucesivas. En esta comunicación se resumen nuestros logros más recientes, relacionados con el desarrollo de nuevas estrategias de microextracción que satisfacen las demandas comentadas anteriormente. Nuestro punto de partida ha sido la técnica denominada microextracción dispersiva por sorción sobre barra agitadora (SBSDME), desarrollada por nuestro grupo de investigación hace diez años [1] y que, a diferencia de la extracción en fase sólida dispersiva (DSPE) convencional, integra la dispersión y recuperación del sorbente magnético en un solo dispositivo. Recientemente, hemos conseguido miniaturizar esta técnica (mSBSDME) para ser aplicable a muestras de bajo volumen al reducir el dispositivo de extracción, lo que también permite tratar varias muestras simultáneamente como consecuencia de la reducción del espacio físico [2], y se ha aplicado con éxito a la determinación de diferentes biomarcadores en diferentes tipos de fluidos biológicos, como saliva, fluido folicular, fluido seminal y suero.

#### Agradecimientos

Los autores agradecen al Ministerio de Ciencia e Innovación la financiación recibida a través del proyecto PID2020-118924RB-I00 (MCIN/AEI/10.13039/501100011033).

#### Referencias

[1] J.L. Benedé, A. Chisvert, D.L. Giokas, A. Salvador, J. Chromatogr. A 1362 (2014) 25–33 [2] C. Azorín, J.L. Benedé, A. Chisvert, Anal. Chim. Acta 1238 (2023) 340627.



## O26

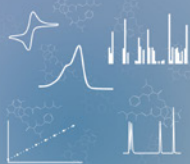
### **FREE-MetabOliva, un método sencillo de preparación de muestras para análisis no dirigidos de aceitunas: una prueba de concepto**

**Carlos A. Ledesma Escobar**, Enrique C. Cabanas Garrido, Feliciano Priego Capote  
*Universidad de Córdoba, Córdoba, España*

#### **Resumen**

Recientemente, los consumidores de aceite de oliva aprecian, además de su valor saludable establecido por la EFSA [1], sus características organolépticas, ambas dadas por el perfil de fenoles, ácidos grasos y volátiles. Por esta razón, es necesario desarrollar métodos poco invasivos que ayuden a manifestar de forma temprana las características de los aceites. Por ello, hemos desarrollado un método rápido, fiable, eficaz y sencillo para la caracterización de aceitunas en etapas tempranas de maduración con un número de muestras reducido. El método consiste en el deshuesado manual de las aceitunas individualmente sobre una jeringa provista con un filtro (0.22  $\mu\text{m}$ ), en la cual se recoge el hueso y el zumo de estas. La aceituna deshuesada, se coloca en un vial (20 mL) y se introduce una fibra de SPME en el intersticio del hueso, después de 10 min de extracción, la fibra se introduce en GC-MS para analizar los volátiles. Por otro lado, al hueso y zumo recogidos en la jeringa se les agrega un disolvente y se filtran inmediatamente, el lavado obtenido se separa en dos alícuotas, la primera se analiza directamente mediante LC-QTOF MS/MS, para obtener el perfil de fenoles y la segunda se metila para analizar el perfil de ácidos grasos por GC-MS. Para este estudio, se seleccionaron aceitunas de 6 variedades del banco de germoplasma de la Universidad de Córdoba, cada una de estas a 6 estadios de maduración, de las cuales se muestrearon 8 aceitunas de diferentes partes del árbol en cada caso (288 aceitunas en total). Los resultados mostraron que este método permite obtener el perfil de compuestos volátiles, principalmente compuestos derivados de la LOX, responsables de las notas aromáticas, productos de degradación y terpenos, con una variabilidad entre muestras del mismo grupo menor al 20%, para el perfil de fenoles y ácidos grasos, la variabilidad fue menor del 10%. Respecto a los ácidos grasos, se detectaron los 6 principales (C16:0, C16:1, C18:0, C18:1, C18:2 y C18:3), mientras que para la fracción fenólica se identificaron 20 compuestos, destacando oleuropeína y otros derivados de hidroxitirosol, además de ácidos triterpénicos (maslínico y oleanólico). Estos resultados demuestran que esta prueba de concepto puede ser útil para detectar las características de los frutos en etapas tempranas, con miras a adecuar las prácticas agroindustriales para obtener aceites de oliva de alta calidad.

[1] Reglamento de la Comisión Europea (UE) 432/2012



## O27

### Progress in the use of magnetic ionic liquids in sample preparation

María José Trujillo Rodríguez<sup>1,2</sup>, Raúl González Martín<sup>1,2</sup>, Jared L. Anderson<sup>3</sup>, Juan H. Ayala<sup>1</sup>,  
Verónica Pino<sup>1,2,4</sup>

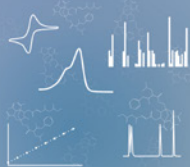
1. *Laboratorio de Materiales para Análisis Químico (MAT4LL), Departamento de Química, Unidad Departamental de Química Analítica, Universidad de La Laguna (ULL), San Cristóbal De La Laguna, España*
2. *Unidad de Investigación de Bioanalítica y Medio Ambiente, Instituto Universitario de Enfermedades Tropicales y Salud Pública de Canarias (IUETSP), Universidad de La Laguna (ULL), San Cristóbal De La Laguna, España*
3. *Department of Chemistry, Iowa State University, Ames, Iowa, Estados Unidos*
4. *Centro de Investigación Biomédica en Red de Enfermedades Infecciosas (CIBERINFEC), Instituto de Salud Carlos III, Madrid, España*

#### Resumen

Magnetic ionic liquids (MILs) are an interesting class of materials with interest in analytical microextraction. In these techniques, MILs are in general implemented as extraction solvents, thus exploiting properties derived from their ionic liquid character. Among these properties, it is important to point out their negligible vapor pressure, their ability to interact with polar and non-polar organic compounds, ions, and biomolecules, and their modulable solubility and viscosity [1]. Another important feature is their inherent magnetism, what allows their manipulation and isolation during microextraction with the aid of external magnetic fields. Traditional MILs consisted of typical ionic liquid cations combined with iron(III) based anions like tetrachloroferrate(III). These MILs presented certain drawbacks, including possible hydrolysis in aqueous media. For that reason, efforts have been directed to other generations of MILs with improved stability, adequate viscosity and thermal stability, and high magnetic susceptibility. The objective of this talk is to give an overview on these new types of MILs and their possibilities in analytical microextraction. Attention is paid to novel MILs based on metal-cations, that can be used for in situ dispersive microextraction [2], and bimetallic MILs based on two metal ions in the cation and anion, that have shown impressive magnetic susceptibility [3].

**References** [1] R. González-Martín, E. Lodoso-Ruiz, M.J. Trujillo-Rodríguez, et al. *J. Chromatogr. A* 1685 (2022) 463577. [2] M.J. Trujillo-Rodríguez, J.L. Anderson, *J. Chromatogr. A* 196 (2019) 420. [3] R. González-Martín, S. Jullakan, M.J. Trujillo-Rodríguez, et al. *Anal. Chim. Acta* 1301 (2024) 342448.

**Acknowledgments** Projects ref. PID2020-115004RB-I00, funded by MCIN/AEI; ref. PID2022-137822NA-I00, funded by MCIN/AEI/10.13039/501100011033 and the European Regional Development Fund (ERDF); ref. 2021ECO11 of Fundación CajaCanarias; and ref. CHE-2203891, funding from the Chemical Measurement and Imaging Program at the National Science Foundation. R.G.-M. thanks the Spanish Ministry of Universities for his FPU fellowship. M.J.T.-R. thanks her current Ramón y Cajal contract (ref. RYC2021-032502-I), funded by MCIN/AEI/10.13039/501100011033 and the European Union «NextGenerationEU»/PRTR. Authors thank the Spanish Network for Sustainable Sample Preparation (RED2022-134079-T), funded by MCIN/AEI.



## O28

### Aplicación de enfoques ómicos avanzados para garantizar la autenticidad de tomillo: análisis fingerprinting mediante resonancia magnética nuclear de protón ( $^1\text{H}$ NMR) y fusión de datos multitécnica (cromatografía-espectrometría de masas de alta resolución)

Araceli Rivera Pérez, Roberto Romero González, Antonia Garrido Frenich  
*Universidad de Almería, Almería, España*

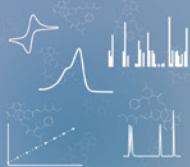
#### Resumen

Las propiedades del tomillo están estrechamente relacionadas con su composición química, la cual depende de diversos factores (p. ej. condiciones climáticas o postcosecha), dando lugar a un perfil metabolómico único y característico que refleja la autenticidad del producto. En este estudio [1] se ha aplicado por primera vez un enfoque metabolómico no destructivo basado en la obtención de “huellas dactilares” (análisis fingerprinting de compuestos mayoritarios) de tomillo mediante espectroscopia de resonancia magnética nuclear de protón (Proton Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy,  $^1\text{H}$  NMR). El análisis fingerprinting se combinó con el análisis estadístico multivariante para diferenciar muestras de tomillo en base al origen geográfico (España, Polonia y Marruecos), así como para garantizar la trazabilidad del producto en base a la técnica de procesado (diferenciación entre la hierba esterilizada y no esterilizada), abordándose el estudio del efecto de la esterilización en la composición del tomillo, dado el aumento de su uso para garantizar la seguridad alimentaria de los condimentos comercializados en Europa [2]. El análisis discriminante de los datos de  $^1\text{H}$  NMR ha permitido desarrollar modelos estadísticos ( $R^2\text{Y} = 0,920\text{-}0,990$ ;  $Q^2 = 0,875\text{-}0,978$ ) que revelaron seis y siete compuestos marcadores clave geográficos y de procesado, respectivamente, tales como timol, ácido clorogénico y algunos carbohidratos (p. ej. sacarosa). Además, por primera vez en estudios metabolómicos de tomillo, se ha aplicado la fusión de datos de nivel medio de tres técnicas analíticas complementarias para obtener una visión sinérgica y complementaria sobre el “foodoma” de estudio:  $^1\text{H}$  NMR (análisis de compuestos mayoritarios), así como cromatografía de gases y de líquidos acoplada a espectrometría de masas de alta resolución (análisis del perfil volátil y no volátil, respectivamente). Dichos estudios han revelado un total de 62 metabolitos obtenidos del estudio geográfico y 60 compuestos derivados del estudio del procesado (tales como monoterpenoides, alquenilbencenos, aminoácidos, ácidos grasos, ácidos fenólicos, etc.) que se proponen como marcadores de la región de producción, así como para conocer si la matriz de estudio ha sido sometida a un proceso de esterilización.

**Agradecimientos:** ARP agradece al MCIN/AEI/10.13039/501100011033 y al “Fondo Social Europeo (FSE) invierte en tu futuro” su apoyo financiero (FPU18/05133). Además, se agradece la colaboración de “Sabater Spices” (Murcia, España) como proveedor de las muestras.

**Referencias:** [1] A. Rivera-Pérez, R. Romero-González, A. Garrido Frenich. *Food Chem.* 420 (2023) 136156. [2] CBI. Which trends offer opportunities or pose threats on the European spices and herbs market? <https://www.cbi.eu/market-information/spices-herbs/trends> (acceso: abril 2024).





## O29

### Detección y cuantificación de fraudes en mieles adulteradas con jarabes mediante huellas generadas por HPLC-UV y quimiometría

Carla Egido<sup>1</sup>, Javier Saurina<sup>1,2</sup>, Sònia Sentellas<sup>1,2,3</sup>, **Oscar Núñez**<sup>1,2,3</sup>

*1. Departamento de Ingeniería Química y Química Analítica, Universitat de Barcelona, Barcelona, España*

*2. Instituto de Investigación en Nutrición y Seguridad Alimentaria de la Universitat de Barcelona (INSA-UB), Santa Coloma de Gramenet, España*

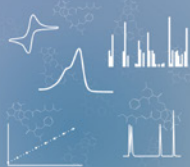
*3. Serra Hùnter Fellow, Departament de Recerca i Universitats, Generalitat de Catalunya, Barcelona, España*

#### Resumen

La miel es un producto natural producido por las abejas muy apreciado por la sociedad como edulcorante natural debido a sus beneficios para la salud. En cuanto a tipologías, se clasifican en mieles florales (producidas a partir del néctar de flores), y mieles de mielada (a partir de secreciones vegetales ricas en azúcar). La miel es susceptible de adulteración debido a su composición variable, la cual depende de las diferentes condiciones de producción, y su similitud con muchos adulterantes (productos a base de jarabe). En abril de 2023, la Unión Europea publicó un estudio revelando que el 46% de las mieles importadas eran susceptibles de estar adulteradas con jarabes, destacando incluso que los métodos actuales basados en detección de marcadores azucarados no eran eficientes para confirmar dicha adulteración [1]. En este trabajo se ha desarrollado un método no dirigido de HPLC-UV para la detección y cuantificación de fraudes en mieles adulteradas con jarabes [2]. Para ello, se han analizado 155 mieles de diferentes variedades botánicas y 30 jarabes de diferente naturaleza (fibra, agave, maíz, arroz, caña de azúcar, arce y glucosa), algunos de ellos comercializados con aromas de miel. Se ha utilizado un tratamiento de muestra muy sencillo consistente en la disolución de la muestra en agua y dilución 1:1 con metanol. Las huellas obtenidas mediante HPLC-UV se han utilizado como descriptores químicos para clasificar y autenticar mieles mediante métodos quimiométricos. En esta línea, se ha logrado una excelente capacidad de discriminación y clasificación de las mieles frente a los jarabes (tasa de clasificación del 100 %), mediante análisis discriminante de mínimos cuadrados parciales (PLS-DA). La capacidad del método propuesto para detectar y cuantificar niveles de adulteración de jarabe hasta un 15% se ha evaluado utilizando regresión de mínimos cuadrados parciales (PLS), estudiando tres casos de adulteración en miel. Se han preparado mezclas usando muestras de miel de la misma variedad botánica, pero de diferente origen geográfico, con jarabes de azúcar de diferentes fuentes vegetales, manteniendo atributos de color similares para simular prácticas fraudulentas reales. A pesar de la alta variabilidad introducida intencionadamente en los modelos PLS, se han obtenido muy buenos resultados, con errores de predicción en validación interna y externa inferiores al 12,8% y 19,7%, respectivamente.

[1] T. Ždiniaková, C. Loerchner, O. De Rudder et al. Publications Office of the European Union (2023)

<https://doi.org/10.2760/184511> [2] C. Egido, J. Saurina, S. Sentellas, O. Núñez, Food Chemistry 436 (2024) 137758



## O30

### Optimización de parámetros de adquisición de espectros LF-NMR altamente informativos para su utilización como huellas instrumentales no específicas en el desarrollo de métodos analíticos multivariable

**Alejandra Arroyo Cerezo**, Ángel Fernández Crespo, Esteban A. Roca Nasser,  
Ana M. Jiménez Carvelo, Luis Cuadros Rodríguez  
*Universidad de Granada, Granada, España*

#### Resumen

La resonancia magnética nuclear convencional de alta frecuencia de campo (HF-NMR) es una técnica analítica que ofrece amplias ventajas respecto a otras, especialmente en lo que respecta a la caracterización, detección e incluso cuantificación de sustancias que se encuentran en concentraciones bajas. Sin embargo, su uso para el análisis de alimentos es aún reducido, lo que puede estar motivado por la inversión económica que supone, y los requerimientos de espacio y mantenimiento a nivel instrumental. Como alternativa, los equipos NMR de baja frecuencia de campo (LF-NMR) y alta resolución, que operan en el rango entre 20 y 100 MHz, solventan las desventajas comentadas, ya que apenas requiere mantenimiento, son equipos de sobremesa que precisan menos espacio, permite realizar medidas a temperatura ambiente utilizando disolventes no deuterados, o incluso sin disolvente, y en menor tiempo. Los espectros LF-NMR recogen información química característica del material medido, por lo que podrían ser considerados como huellas instrumentales no específicas para su uso en el desarrollo de aplicaciones analíticas no dirigidas. Sin embargo, esto requiere una previa optimización de las condiciones experimentales que permitan obtener espectros con alta calidad informativa. Precisamente el cómo medir 'a priori' esta cualidad representa un reto no resuelto en la Química Analítica actual. En esta comunicación, se presenta por primera vez la propuesta de utilizar la medida de la cantidad de información mediante el cálculo de las entropías de Shannon y de Rényi, métricas derivadas de la teoría de la información. Este estudio presenta la optimización de los parámetros de adquisición de espectros en un equipo LF-NMR 100 MHz mediante diseño de experimentos (DoE). Para ello, se ha aplicado el método Taguchi, que permite la optimización a la vez que minimiza la variabilidad con el mínimo número de experimentos. Este método se basa en la robustez, ya que busca una configuración óptima haciéndola insensible a variaciones en algún/os factores, denominados factores de ruido. Los parámetros estudiados como factores de control fueron: número de barridos, retardo de barrido, ángulo de pulso, pre-barridos y número de puntos. Los factores de ruido fueron la temperatura ambiental y el momento del análisis, y se llevó a cabo la optimización mediante el estudio de dos respuestas: tiempo de adquisición y calidad del espectro.

**Agradecimientos** A.A.C al Ministerio de Universidades por la ayuda predoctoral (FPU20/04711). A.M.J.C. agradece la ayuda (RYC2021-031993-I) financiada por MCIN/AEI/501100011033 y Unión Europea NextGenerationEU/PRTR. Proyecto CPP2021-008672 financiado por MCIN/AEI/501100011033 y Unión Europea NextGenerationEU/PRTR.



## O31

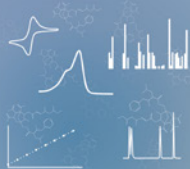
### Canela verdadera: autenticación y detección de fraudes por HPLC-UV

**Clara Pérez-Ràfols**, Josep Pages-Rebull, Gemma Sagristà, Núria Serrano, José Manuel Díaz-Cruz  
*Universitat de Barcelona, Barcelona, España*

#### Resumen

La canela es una especia muy apreciada por gastronomías de todo el mundo. Una de las variedades más conocidas es la canela de Ceilán (también conocida como “canela verdadera”), que se obtiene de *Cinnamomum zeylanicum*, una variedad originaria de Sri Lanka y el sur de la India, y es responsable del característico sabor suave y dulce de la canela. Además, la canela de Ceilán tiene muchas propiedades beneficiosas para la salud, ya que es rica en compuestos fenólicos y aromáticos como el eugenol y el cinamaldehído. Sin embargo, el mayor precio de la canela de Ceilán la hace más vulnerable a la sustitución o adulteración por variedades de canela más económicas, siendo la canela casia la más frecuente. La canela casia (*Cinnamomum aromaticum*) es originaria principalmente del sur de China y Birmania, y presenta un olor y sabor ligeramente diferentes. Sin embargo, desde el punto de vista de la salud, la principal preocupación es el mayor contenido de cumarina que se encuentra en la canela casia, ya que puede provocar efectos hepatotóxicos si se consume en cantidades superiores a 0,1 mg/Kg de peso corporal. Por ello, es necesario desarrollar técnicas sencillas y rápidas para detectar adulteraciones totales o parciales en la canela. En este trabajo se presenta un método analítico basado en cromatografía de líquidos con detección UV-vis para la detección de fraudes en canela en polvo comercial. El método desarrollado se basa en la determinación de 4 biomarcadores característicos: eugenol, cinamaldehído, cumarina y ácido cinámico. Los datos obtenidos se han analizado por regresión de mínimos cuadrados parciales (PLS). En términos generales, la concentración de eugenol determinada fue mucho mayor en la canela de Ceilán, mientras que la cumarina estuvo presente principalmente en la canela casia. Se encontraron grandes concentraciones de cinamaldehído y ácido cinámico en ambas variedades de canela. Es importante destacar que el contenido de estos 4 compuestos permitió no sólo la discriminación entre la canela de Ceilán y la canela casia, sino también la detección y cuantificación de adulteraciones parciales. Este método fue probado con éxito con varias mezclas preparadas en el laboratorio utilizando diferentes muestras comerciales consideradas ‘puras’ de casia o de Ceilán, así como con muestras comerciales con un porcentaje declarado de ambas variedades de canela.

**Agradecimientos:** Este trabajo cuenta con el apoyo económico del proyecto PID2019-107102RB-C22 financiado por MCIN/AEI/10.13039/501100011033, y PID2022-136709OB-C22 financiados por AEI/10.13039/501100011033/Unión Europea NextGenerationEU/PRTR.



## O32

### Desarrollo de una estrategia no separativa para la determinación semicuantitativa de metabolitos de hidrocarburos aromáticos policíclicos en orina

**Ana Ballester Caudet**, Samuel García García, Miguel Del Nogal Sánchez,  
Encarnación Rodríguez Gonzalo, José Luis Pérez Pavón  
*Universidad de Salamanca, Salamanca, España*

#### Resumen

Se propone una estrategia rápida y no separativa basada en espectrometría de masas para la determinación semicuantitativa de biomarcadores derivados de la exposición a Hidrocarburos Policíclicos Aromáticos (PAHs) en muestras de orina [1]. Concretamente, se han analizado cinco metabolitos hidroxilados (OH-PAHs): 2-naftol, 1-acenaftenol, 2-hidroxifluoreno, 9-fenantrol y 1-hidroxipireno. Tras someterlos a hidrólisis enzimática y posterior extracción líquido-líquido, se obtuvieron las señales de perfil mediante inyección directa del extracto en un vaporizador de temperatura programada acoplado a un espectrómetro de masas de cuadrupolo sencillo a través de un tubo de sílice fundida desactivado (PTV-qMS). En base a experiencia previa en el análisis de PAHs en saliva [2], se ha desarrollado un método con un tiempo de análisis de 6,6 minutos por muestra que permite la determinación semicuantitativa de los OH-PAHs mediante calibración multivariante (PLS) y diseño de experimentos con muestras de orina libres de analitos y enriquecidas con varios niveles de concentración no correlacionados. Los modelos de calibración multivariante proporcionan resultados satisfactorios para el conjunto de muestras de validación externa, con errores que oscilan entre el 30% y el 33% para todos los analitos, excepto para el 1-acenaftenol que proporcionó un error del 39%. La repetibilidad y reproducibilidad, expresadas como desviación estándar relativa (RSD), se encuentran entre 8-16 % y 11-18 %, respectivamente, con un LOD multivariante del orden de 300 µg L<sup>-1</sup>. Este nivel de concentración se corresponde con individuos que sufren exposición ocupacional. Por lo tanto, el método podría emplearse como una potencial herramienta de análisis de biomarcadores de exposición a PAHs con capacidad para discriminar entre individuos expuestos y no expuestos. La metodología puede emplearse como etapa de cribado para identificar aquellas orinas que muestren altas concentraciones de los biomarcadores (sujetos expuestos) de las que no (sujetos no expuestos). Solamente aquellas muestras con altas concentraciones de OH-PAHs requerirían un análisis cromatográfico adicional como etapa de confirmación [3,4], reduciéndose considerablemente el tiempo y coste del análisis.

#### Agradecimientos:

Este trabajo fue apoyado financieramente por el Ministerio de Economía y Competitividad de España (Proyecto No. PID2021-127679NB-I00). Bibliografía: [1] L. Campo, F. Rossella, et al, *Toxicol. Lett.* 192 (2010) 72-78 [2] P. Martín Santos, M. del Nogal Sánchez, et al, *Talanta* 192 (2019) 69-78 [3] K. Nguyen, M. Pitiranggon, et al, *J. Chromatogr. B* 1192 (2022) 123113-1, 123113-8 [4] S. García-García, H. Matilla-González, et al, *Int. J. Environ. Res. Public Health* 19 (2022) 13089-1, 13089-12



## O33

### Mejorando el diagnóstico basado en espectroscopía mediante modelado in silico del espectro infrarrojo de la orina.

Víctor Navarro Esteve<sup>1</sup>, Jaume Béjar Grimalt<sup>1</sup>, Ángel Sánchez Illana<sup>1</sup>, Miguel De La Guardia<sup>1</sup>, Salvador Garrigues<sup>1</sup>, Hugh J. Byrne<sup>2</sup>, David Pérez Guaita<sup>1</sup>

1. *Departamento de Química Analítica Universitat de València, Burjassot, España*

2. *Technological University, Dublin, Irlanda*

#### Resumen

La espectroscopía IR es una herramienta prometedora para la detección temprana de la enfermedad renal crónica (ERC). Para ser trasladada al escenario clínico, la metodología ha de ser capaz de determinar la ratio albúmina-creatinina (RAC) en la orina con un sistema de extracción de proteínas simple y un espectrómetro portátil capaz de ofrecer resultados en menos de 30 minutos, lo cual es extremadamente desafiante ya que hay varias variables que ajustar en la metodología analítica. Primero, el paso de extracción de proteínas es crucial para la cuantificación de albúmina, pero puede diluir la creatinina. Además, se ha de lograr un compromiso entre la sensibilidad para predicciones precisas con la portabilidad para aplicaciones de detección eficientes. Lograr una optimización multiparamétrica para todos los parámetros es inalcanzable debido al alto número de experimentos necesarios, ya que harían falta mediciones en conjuntos de calibración y validación para cada conjunto de parámetros bajo estudio. En lugar de esto, sugerimos construir un modelo in silico de espectros de orina, facilitando una optimización multiparamétrica a través de simulaciones. Los espectros se simularon agregando las contribuciones específicas de los componentes de la orina. La distribución de su concentración se utilizó para simular miles de espectros de pacientes con ERC y sanos bajo diferentes condiciones experimentales, incluyendo el instrumento de medición (p.ej. fijo y portátil), el tiempo de medida y los parámetros de preconcentración (p.ej. volúmenes y pasos de limpieza). Se registraron los errores de predicción simulados obtenidos por regresiones de mínimos cuadrados parciales (PLS, por sus siglas en inglés) para los diferentes parámetros experimentales. La simulación indicó que más pasos de limpieza mejorarán la precisión para la predicción de proteínas, pero aumentarán el error para la predicción de creatinina, debido a la dilución de compuestos no proteicos. Para un nivel de ruido típico obtenido usando el espectrómetro FTIR portátil Spectrum 2 y con un dispositivo de preconcentración sin necesidad de lavado, se puede obtener un error razonable tanto para la creatinina como para las proteínas. Los resultados indicaron que la simulación de espectros puede servir como una herramienta valiosa para ajustar metodologías diagnósticas basadas en análisis espectroscópico.

#### Agradecimientos

V.NE agradece la ayuda PRE2021-098833 financiada por MICIN/AEI/10.13039/501100011033 y el FSE+. Ayuda JDC2022-049354-I financiada por MCIN/AEI/10.13039/501100011033 y por la "Unión Europea NextGenerationEU/PRTR". Ayuda RYC2019-026556-I y PID2020-119326RA-I00 financiada por MCIN/AEI/10.13039/501100011033. Estudio financiado por el Instituto de Salud Carlos III (ISCIII) mediante el proyecto PI23/00135 y cofinanciado por la Unión Europea.



## O34

### Caracterización de la selectividad en cromatografía de líquidos: aplicación del modelo rápido de Abraham a sistemas HILIC

Xavier Subirats, Martí Rosés

*Universitat de Barcelona, Barcelona, España*

#### Resumen

La cromatografía de líquidos, en cualquiera de sus modalidades, es la técnica de separación más utilizada para la resolución de problemas analíticos. Encontramos en el mercado distintos soportes cromatográficos (partículas de sílice total o superficialmente porosas, monolíticas, poliméricas...) y una amplia gama de tamaños de columnas y fases enlazadas, lo que aumenta significativamente las oportunidades de separación, pero también representa un reto de eficiencia en el desarrollo de metodología analítica. En este contexto son de suma importancia, junto con la experiencia del usuario, las herramientas para la caracterización de sistemas cromatográficos. El modelo de parámetros de solvatación de Abraham, basado en relaciones lineales de energía libre, proporciona información sobre el efecto en la retención cromatográfica de distintas propiedades del soluto, como las interacciones basadas en dipolaridad y polarizabilidad, acidez y basicidad por puente de hidrógeno, y el volumen molecular del soluto [1]. En este trabajo se ha utilizado una evolución del modelo de Abraham que permite caracterizar el comportamiento de sistemas cromatográficos mediante la inyección de cuatro alquilcetonas lineales y la determinación de los factores de selectividad de cuatro pares de compuestos cuidadosamente seleccionados [2]. El estudio incluye una significativa diversidad de columnas HILIC y fases móviles con un 90-95% de modificador orgánico. Han sido caracterizadas columnas monolíticas de sílice no derivatizada y con fases enlazadas diol, de partícula completamente porosa con funcionalización zwitteriónica (sulfobetaína y fosforilcolina), diol y aminopropilo, y de partícula superficialmente porosa con fases enlazadas pentahidroxi y pentafluorofenilo. Entre los disolventes orgánicos estudiados se encuentra el habitual acetonitrilo, pero también metanol, etanol e isopropanol, como potenciales sustitutos de menor toxicidad para la salud y el medio ambiente. En todos los sistemas HILIC estudiados se ha observado una disminución de la retención cromatográfica al aumentar el volumen molecular del soluto, debido a la mayor cohesión de las capas acuosas que actúan como fase estacionaria en relación con la fase móvil de alto contenido en disolvente orgánico. Por el contrario, las interacciones por puente de hidrógeno favorecen la partición con la fase estacionaria, en especial la basicidad por puente de hidrógeno del soluto cuando el eluyente contiene acetonitrilo.

**Referencias:** [1] M. H. Abraham. *Chem. Soc. Rev.* 22 (1993) 73-83. [2] L. Redón, M.S. Beiranvand, X. Subirats et al. *Anal. Chim. Acta* 1277 (2023) 341672.



## O35

### Búsqueda de marcadores de rechazo para establecer las condiciones de almacenamiento y conservación óptimas de cebos proteicos para el control de vespa velutina

**Omaira De La Hera Fernández, Rosa Maria Alonso Rojas**

*Universidad del País Vasco (UPV/EHU), Leioa, España*

#### Resumen

La especie invasora *Vespa velutina nigrithorax* (Lepelletier 1836), comúnmente conocida como avispon asiático, fue introducida por error en Europa en 2004. El primer avistamiento en la península ibérica fue en Navarra en 2010, asentándose en pocos años en gran parte de la península.

Su presencia fuera de su hábitat constituye una amenaza a nivel económico y medioambiental, ya que es una especie depredadora de fruta y de insectos, en especial de la *Apis mellifera* (abeja de la miel).

Se han desarrollado diferentes métodos de control, basados en la detección y eliminación de nidos y en el trapeo de los avispones y en la reducción de su impacto en los colmenares. Dentro del último grupo se encuentran los cebos proteicos con biocida, que además reducir la presión en el colmenar, inactiva los nidos durante varios días, permitiendo a las abejas forrajear. Este método ha demostrado ser económico, simple y efectivo[1].

Sin embargo, dada su composición presentan un tiempo de uso limitado. La oxidación de sus componentes, la actividad enzimática y los microorganismos, dan lugar a la formación de compuestos de deterioro[2]. Estos son los responsables de cambios de color y textura, y de la aparición olores desagradables, produciendo el rechazo del cebo por los avispones.

Considerando las necesidades de los apicultores, y de la empresa productora de los cebos, el objetivo de este trabajo se centra en determinar las condiciones de almacenamiento y conservación óptimas de los cebos. Para ello, se realizaron ensayos en el colmenar de atracción/rechazo de cebos mantenidos en diferentes condiciones de almacenamiento. Así mismo se obtuvieron los perfiles de compuestos volátiles de estos cebos mediante SPME-GC-MS y se llevó a cabo un tratamiento de los datos mediante diferentes herramientas estadísticas y quimiométricas (ANOVA, PCA y PLS-DA), con el fin de identificar posibles marcadores de rechazos. En base a estos hallazgos se han podido proponer las condiciones de almacenamiento y conservación que garanticen la eficacia de los cebos proteicos como método de control.

#### Agradecimientos

Los autores agradecen al Departamento de Educación del Gobierno Vasco por su financiación (proyectos PUE 2018\_1\_0007, PUE 2021\_1\_008 e IT1673-22)

#### Bibliografía

- [1] J. F. Barandika, O. de la Hera, R. Fañanas, et al *Animals*, 13, (2023) 1-15
- [2] G. Duflos, V. M. Coin, M. Cornu, et al. *J Sci Food Agric*, 86 (2006) 600–611
- [3] J. Wu, J. Cao, J. Chen et al. *Food Chem*, 412 (2023) 1-10



## O36

### Mejora en las predicciones de retención en cromatografía líquida utilizando columnas en serie: (I) uso de modelos globales

**Pau Peiró Vila**, Anna Jia Llácer Mateu, María Blázquez Mateu, María Celia García Álvarez-Coque, José Ramón Torres Lapasió  
*Universitat de València, Burjassot, España*

#### Resumen

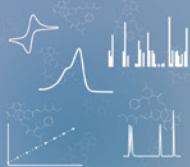
La predicción de cromatogramas a partir de muestras que contienen cientos de constituyentes presenta un desafío e interés únicos, especialmente en casos donde estos constituyentes son desconocidos o no se dispone de estándares [1]. Recientemente, introdujimos y validamos un método para optimizar las condiciones de separación utilizando modelos globales de retención (MGRs) en cromatografía líquida. Estos modelos, debidamente ajustados, tienen una calidad predictiva comparable a la de los modelos de retención convencionales, que se ajustan para un único soluto cada vez [2-5]. Los MGR describen simultáneamente el comportamiento de un conjunto de solutos, utilizando parámetros característicos de cada soluto, junto a otros comunes que describen los efectos combinados de columna y disolvente. Dada su naturaleza, los MGR no pueden predecir cambios en el orden de elución en columnas aisladas [2]. Sin embargo, cuando se acoplan en serie dos o más columnas de diferente naturaleza utilizando conectores de volumen muerto cero, y los solutos pasan sucesivamente de una columna a otra durante la elución, se producen desajustes asociados a las diferencias de composición que experimenta cada soluto en cada columna acoplada. La investigación presentada explora y verifica la hipótesis de que estos desajustes pueden ser predichos con los modelos globales, y que sus consecuencias dotarán a estos modelos con la capacidad de anticipar cambios significativos en la selectividad e incluso inversiones en el orden de elución. Se consideró la separación de extractos de melisa como caso de estudio, utilizando un diseño experimental de gradientes de un nodo y 16 picos de referencia. Se evalúa comparativamente la calidad predictiva de los modelos individuales y globales, explorando la magnitud de los cambios en la selectividad, utilizando tres columnas de diferente naturaleza química y selectividad. Se demuestra que la combinación de columnas con diferentes mecanismos de retención proporciona nuevas oportunidades de resolución y una mayor utilidad práctica a los MGR, dando lugar a predicciones de una elevada calidad.

**Agradecimientos:** PID2019-106708GB-I00, MCIN/AEI/ 10.13039/501100011033. Pau Peiró-Vila agradece la beca predoctoral ACIF 2021/262, Generalitat Valenciana.

#### Referencias

[1] A. Gisbert-Alonso, J.A. Navarro-Huerta, J.R. Torres-Lapasió, M.C. García-Alvarez-Coque, Global retention models and their application to the prediction of chromatographic fingerprints, *J. Chromatogr. A* 1637 (2021) 461845. [2] T. Álvarez-Segura, J.R. Torres-Lapasió, C. Ortiz-Bolsico, M.C. García-Álvarez-Coque, Stationary phase modulation in liquid chromatography through the serial coupling of columns. *Anal. Chim. Acta* 923 (2016) 1–23.





## O37

### **A Comprehensive study of the influence of user-defined data processing parameters for feature extraction using LC-HRMS-based non-target screening for environmental monitoring.**

**Ana B. Martínez Piernas**<sup>1,2</sup>, Torsten C. Schmidt<sup>3,4</sup>, Gerrit Renner<sup>3,4</sup>

*1. Analytical Chemistry Research Group (FQM323), Department of Physical and Analytical Chemistry, University of Jaén, Campus Las Lagunillas edif. B3, 23071, Jaén, España*

*2. Department of Analytical Chemistry, Faculty of Sciences, University of Málaga, 29071, Málaga, España*

*3. Instrumental Analytical Chemistry, University of Duisburg-Essen, Universitätsstr. 5, 45141, North Rhine-Westphalia, Essen, Alemania*

*4. Centre for Water and Environmental Research (ZWU), University of Duisburg-Essen, Universitätsstr. 2, D-45141, NRW, Essen, Alemania*

#### **Resumen**

While several thousand substances have been detected in the environment, the quantity of chemical contaminants in production and use suggests that they represent only the tip of the iceberg. The new developments of analytical techniques combining liquid chromatography coupled with high-resolution mass spectrometry (LC-HRMS) and non-target screening (NTS) strategies have enabled identifying and monitoring of numerous unknown organic contaminants in environmental systems. Nevertheless, the massive volume of data to be processed using NTS approaches prohibits manual inspection and interpretation of detailed spectral information. Instead, advanced software and algorithms are required to automate data processing. These tools rely on initial parameters, e.g., intensity threshold, set by the user, which may unintentionally influence the final interpretation of the results. In this context, some studies have underscored discrepancies between different algorithms, including the probable impact of user-defined parameters on final results [1, 2]. This work evaluates the functionality and impact of processing parameters on the resulting features in an NTS workflow developed using MZmine3 for identifying unknown contaminants in environmental waters. The strategy involved sequential optimization for each parameter of the NTS workflow's main steps (extraction ion chromatograms, smoothing, peak characterization, and alignment). Overlapping, missing, and duplicate features in the final feature lists were examined to assess each parameter's performance and impact on the features' characterization (*m/z*, retention time, and intensity). The results revealed that *m/z* tolerance parameters in all steps significantly influenced the results of features, thus implying an increased number of false positives and flimsy identifications. Furthermore, it could be demonstrated that some parameters unintentionally "interact" with each other, which hampers individual parameter optimization. A strategy based on robust features among sample replicates was developed to prioritize relevant features and reduce the impact and uncertainty of user-defined parameters on feature information. The results indicated that robust features represented 20 % of the features across the data set.

**References** [1] L.L. Hohrenk, F. Itzel, N. Baetz, J. Tuerk, M. Vosough, T.C. Schmidt, *Anal. Chem.* 2020, 92, 1898–1907. [2] G. Renner, M. Reuschenbach, *ABC.* 2023, 415, 4111–4123.

**Acknowledgments:** A.B.M.P. acknowledges the Regional Government of Andalucía and Fondo Social Europeo for her postdoctoral research fellowship (ref. DOC\_01319), as well as the Spanish Ministry of Science, Innovation, and Universities for funding through the José Castillejo Mobility Program (ref. CAS21/00111).



## O38

### Evaluación del contenido en residuos de pesticidas orgánicos en vinos procedentes de distintas denominaciones de origen de Galicia y La Rioja.

Victoria Fernández Fernández<sup>1</sup>, Pilar Blanco Camba<sup>2</sup>, María Soledad Andrades<sup>3</sup>, María Ramil Criado<sup>1</sup>, Isaac Rodríguez Pereiro<sup>1</sup>

- 1. Departamento de Química Analítica, Nutrición y Bromatología. Instituto de Investigación del Medio Acuático para Una Salud Global (iARCUS). Universidade de Santiago de Compostela. Rúa Constantino Candeira, 5. 15782 – Santiago de Compostela, Santiago De Compostela, España*
- 2. Estación de Viticultura e Enoloxía de Galicia (EVEGA-AGACAL). Ponte San Clodio s/n, 32428 – Leiro (Ourense), Ourense, España*
- 3. Departamento de Agricultura y Alimentación. Universidad de La Rioja. C/Madre de Dios, 51. 26006-Logroño., Logroño, España*

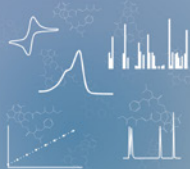
#### Resumen

La viticultura es un importante sector socio-económico en España, que está entre los primeros productores mundiales de vino. La calidad de los vinos es un parámetro a optimizar con el fin de obtener el mayor rendimiento posible y un producto premium para los consumidores. En este sentido, cada día la sociedad pide cultivos más ecosostenibles y respetuosos con el medioambiente. Aun así, el uso de diferentes fitosanitarios en el cultivo de la vid es una práctica extendida y común para tratar enfermedades como la botritis, el mildiu o el oidio. Los pesticidas aplicados al suelo y a la vid pueden incorporarse a la uva y al proceso de elaboración del vino, llegando incluso a estar presentes en el producto final, dependiendo de lo que se conoce como factor de procesado (PF). Los niveles de estos residuos en vino, por tanto, han de ser conocidos y analizados, con la finalidad de preservar la calidad del vino, poder llevar a cabo su exportación y prever posibles efectos adversos para la salud del consumidor. Aunque en la actualidad no existe una regulación europea de estos residuos en vino, sí existe la recomendación de que no excedan la décima parte de los MRLs (máximo residue limits) para uva [1]. En este trabajo se ha llevado a cabo el análisis de más de 100 vinos de la D. O. Rioja (en tres subzonas) y más de 100 procedentes de Galicia (de 5 D. O. diferentes de la región) en las distintas añadas de 2020 a 2023 para determinar el contenido en 52 pesticidas. Para ello se ha empleado la extracción en fase sólida (SPE) como método de purificación de la matriz de vino y la cromatografía de líquidos acoplada a espectrometría de masas (LC-MS/MS) como método de determinación. El objetivo principal del trabajo fue valorar el espectro residual de vinos distintos y de distinta procedencia geográfica, con condiciones climáticas distintas. Se identificaron los fitosanitarios detectados más frecuentemente y sus niveles de concentración, así como su evolución en diferentes anualidades.

**Referencias:** 1. T. Pazzirota, L. Martin, M. Mézcua, C. Ferrer, A.R. Fernandez-Alba Food Addit. Contam. Part A Chem. Anal. Control Expo. Risk Assess., 30 (2013), pp. 1752-1760

#### Agradecimientos

Proyecto TED2021-129962B-C42 financiado por el Ministerio de Ciencia e Innovación de España, a través del programa UE Next Generation, Proyecto AC2021E-02 financiado por la Consellería do Medio Rural—Xunta de Galicia y ED431C2021/06, de la Xunta de Galicia, cofinanciado por el programa EU FEDER.



## O39

### Estudio comparativo del consumo de sustancias adictivas en diferentes zonas de la comunidad de Madrid mediante el análisis de aguas residuales

Emma Gracia Lor<sup>1</sup>, Natalia Melones Peña<sup>1</sup>, Susana Torrado Del Rey<sup>2</sup>, Azara Pérez Valenciano<sup>2</sup>,  
María Justina Martín Gutiérrez<sup>2</sup>

1. *Departamento de Química Analítica, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Complutense de Madrid, Madrid, España*

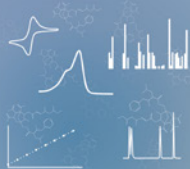
2. *Laboratorio de Salud Pública de Madrid, Subdirección General de Salud Pública. Madrid Salud. Ayuntamiento de Madrid, Madrid, España*

#### Resumen

El mercado de drogas ilegales, nuevas sustancias psicoactivas (NPS) y benzodiazepinas, con o sin receta, se ha incrementado considerablemente en los últimos años en España. Para poder evaluar el impacto que representa su consumo, cuyo uso continuado genera adicción, es necesario disponer de datos precisos y actualizados sobre su uso. En este trabajo se ha aplicado la metodología de análisis de aguas residuales para ampliar la información existente sobre los hábitos de consumo de la población. En concreto, se ha llevado a cabo un estudio comparativo del consumo de 18 sustancias adictivas, incluyendo 11 drogas ilegales, 3 NPS y 4 benzodiazepinas, en diferentes zonas de la Comunidad de Madrid. Las muestras se tomaron en ocho estaciones depuradoras de aguas residuales (EDAR) del 12 al 18 de diciembre de 2023 (56 muestras en total). Todas ellas proceden de núcleos urbanos, pero presentan características sociodemográficas y socioeconómicas diversas. Su análisis se ha llevado a cabo utilizando un método analítico optimizado basado en una etapa de tratamiento de la muestra mediante SPE seguido de la determinación por HPLC-MS/MS. Ocho de los compuestos analizados se cuantificaron en todas las muestras. La heroína y 6-acetilmorfina fueron los únicos analitos que no se detectaron en ninguna de las EDAR. Nuestros datos reflejan que, en la Comunidad de Madrid, la cocaína, el cannabis, la anfetamina, la metanfetamina y el MDMA son las sustancias ilegales más consumidas, al igual que ocurre a nivel nacional [OEDA, 2023]. Los datos de NPS mostraron un consumo diverso, pues la ketamina se detectó en todas las muestras mientras que la mefedrona únicamente en tres de las EDAR. En cuanto a las benzodiazepinas, dos de ellas (lorazepam y lormetazepam) estaban presentes en todas las muestras. Asimismo, este estudio ha permitido comparar el consumo según el día de la semana. Mediante el empleo de herramientas quimiométricas se ha investigado si existen diferencias significativas de consumo (expresado en mg/día/1000 habitantes) entre las poblaciones investigadas. Estas diferencias se han intentado relacionar con indicadores como el porcentaje de gente joven que vive en cada población o datos económicos de cada zona investigada.

#### Agradecimientos

Madrid Salud y Delegación del Gobierno para el Plan Nacional sobre Drogas, financiado por la Unión Europea – NextGeneration EU (EXP2022/008817). Bibliografía: Observatorio Español de las Drogas y las Adicciones (OEDA). Informe 2023. Alcohol, tabaco y drogas ilegales en España. Ministerio de Sanidad. Delegación del Gobierno para el Plan Nacional sobre Drogas; 2023. 270 p.



## O40

### Desarrollo de una nueva metodología analítica para la determinación de betaínas y compuestos de amonio cuaternario en productos apícolas

**Beatriz Martín Gómez**, Silvia Valverde Bastardo, María Teresa Martín Gómez,  
Ana María Ares Sacristán, José Bernal Del Nozal  
*Universidad de Valladolid, Valladolid, España*

#### Resumen

Las betaínas son moléculas zwitteriónicas derivadas de aminoácidos que presentan un átomo con carga negativa en un grupo carboxilo y un átomo de nitrógeno cuaternario con carga positiva, este último no adyacente al átomo con carga negativa. Además, es importante destacar que muchos compuestos de amonio cuaternario pueden ser considerados formalmente como betaínas aunque carezcan de un grupo carboxilo. Estas moléculas se encuentran en una gran diversidad de organismos, desde plantas hasta animales, y, por ende, se encuentran presentes en productos apícolas como la miel y el polen de abeja. Su presencia en productos apícolas no solo los convierte en posibles biomarcadores del origen botánico y geográfico de dichos productos, sino que también contribuye significativamente a su valorización, gracias a sus reconocidos beneficios para la salud [1,2]. En este estudio, se han desarrollado métodos analíticos para la detección y cuantificación de nueve betaínas y compuestos de amonio cuaternario en productos apícolas destacables por abordar un gran número de betaínas en comparación con estudios similares en otros alimentos. Se ha empleado cromatografía líquida de ultra alta resolución acoplada a espectrometría de masas (UHPLC-MS/MS) con una columna de interacción hidrofílica (HILIC). Además, para el tratamiento de muestra, se ha priorizado el uso de técnicas compatibles con la Química Analítica Blanca, buscando un equilibrio entre la selección de disolventes respetuosos con el medio ambiente y tratamientos de muestra con pocas etapas, la practicabilidad y la eficacia. Los métodos analíticos desarrollados se han validado siguiendo la guía EURACHEM, y se han aplicado al análisis de muestras reales de productos apícolas.

#### Agradecimientos

La comunicación es parte de la actuación "PID2022-141679OR-C33", financiada por MICIU/AEI /10.13039/501100011033 y por FEDER, UE. Beatriz Martín-Gómez expresa su agradecimiento al Ministerio de Ciencia, Innovación y Universidades de España por la concesión de un contrato FPU (FPU22/02334). Los autores del trabajo agradecen a P. Álvarez su colaboración.

**Bibliografía:** [1] A. M. Ares, L. Toribio, M.J. Nozal et al. *Microchem. J.* 157 (2020) 105000. [2] A. M. Ares, M. T. Martín, J. A. Tapia et al. *Food Res. Int.* 160 (2022) 111698.



## O41

### Aplicación de técnicas cromatográficas para evaluar el efecto de la aromatización en la calidad del aceite de oliva virgen

Enrique Jacobo Díaz Montaña<sup>1</sup>, María Barbero López<sup>2</sup>, Ramón Aparicio Ruiz<sup>1</sup>, Ana Lobo Prieto<sup>1</sup>, Noelia Tena Pajuelo<sup>1</sup>, Diego L. García González<sup>2</sup>, María Teresa Morales<sup>1</sup>

*1. Universidad de Sevilla, Sevilla, España*

*2. Instituto de la Grasa (CSIC), Sevilla, España*

#### Resumen

La oxidación de los lípidos presentes en los alimentos es un proceso que influye directamente en su calidad, especialmente en el caso del aceite de oliva virgen (AOV). La duración y las condiciones de almacenamiento son factores cruciales que dan lugar a la aparición de defectos sensoriales y la pérdida de propiedades nutricionales. Una práctica habitual desde la época romana consiste en la adición de hierbas aromáticas al aceite de oliva para preservar el aceite durante más tiempo y mantener sus propiedades saludables. La aplicación de técnicas analíticas para la determinación de compuestos volátiles y fenólicos, responsables del flavor y de las propiedades antioxidantes, permite evaluar el grado de oxidación del AOV. El objetivo de este estudio fue determinar la concentración de compuestos volátiles y fenólicos, así como evaluar las propiedades sensoriales de AOV y de AOV aromatizado con romero (ROO) y albahaca (BOO). Las muestras se almacenaron durante seis meses a una temperatura controlada ( $15.7 \pm 3.6$  °C) y bajo exposición a  $500 \pm 100$  lx de luz blanca durante 12 horas al día. Se realizaron análisis triplicados para determinar parámetros de calidad, las concentraciones de compuestos volátiles y fenólicos, y propiedades sensoriales. Los resultados indicaron que la adición de hierbas aromáticas no solo retrasó la oxidación del aceite, sino que también permitió distinguir las muestras aromatizadas debido a la migración de compuestos de las hierbas al aceite. El aroma de las muestras BOO se asoció principalmente con un aumento en la concentración de compuestos como  $\beta$ -pineno, ocimeno y 1,8-cineol, mientras que para las muestras ROO, se observó una mayor presencia de canfeno,  $\beta$ -mirceno,  $\alpha$ -terpinoleno, limoneno y 1,8-cineol. El análisis mediante cromatografía líquida (HPLC-DAD) reveló cambios en el perfil fenólico, observándose una menor alteración oxidativa en los aceites aromatizados en comparación con el AOV. A lo largo del almacenamiento, se observó una disminución en la concentración de fenoles, con excepción del tirosol y el hidroxitirosol. En conclusión, la adición de hierbas aromáticas ejerció un efecto antioxidante, especialmente a partir del tercer mes de almacenamiento, prolongando así la vida útil del AOV y cambiando su perfil sensorial.



## O42

### Evolución de los carbohidratos no estructurales de aguacates de las variedades bacon, fuerte y hass durante la maduración post-cosecha

María Gemma Beiro Valenzuela<sup>1</sup>, Romina P Monasterio<sup>1</sup>, Irene Serrano García<sup>1</sup>,  
Elena Hurtado Fernández<sup>2</sup>, José Jorge González Fernández<sup>3</sup>, José Ignacio Hormaza<sup>3</sup>

1.Universidad de Granada, Granada, España

2.Universidad Loyola, Sevilla, España

3.Instituto de Hortofruticultura Subtropical y Mediterránea (IHSM), Algarrobo, España

#### Resumen

El aguacate es una fruta climatérica, que alcanza la madurez fisiológica (*maturation*) en el árbol, y la madurez de consumo (*ripening*) unos días después de haber sido recolectado. Esta última etapa involucra el reblandecimiento del mesocarpio y la mejora de las propiedades organolépticas e implica modificaciones catabólicas y anabólicas que requieren un gasto energético significativo. A diferencia de la mayoría de frutas, donde predominan los azúcares C6 como la glucosa, la fructosa y la sacarosa, el aguacate emplea azúcares C7 como la manoheptulosa o el perseitol como fuente de energía durante la maduración.

El objetivo de este trabajo ha sido examinar las fluctuaciones cuantitativas de los carbohidratos no estructurales en el mesocarpio del aguacate de las tres variedades predominantes en España (*Bacon*, *Fuerte* y *Hass*) a lo largo de la maduración post-cosecha. Con este fin, se ha empleado un método HILIC-MS que ha permitido estudiar la evolución del perfil de azúcares del aguacate en cuatro estados de maduración (recién recolectado, madurez intermedia, madurez de consumo y sobremaduro).

Este estudio mostró que en la fruta inmadura, independientemente de la variedad, los azúcares C7 son el grupo principal de carbohidratos, mientras que los azúcares C6 están presentes en pequeñas cantidades. A medida que la fruta iba madurando, se observó una disminución significativa en la concentración de heptosas, especialmente en las variedades *Fuerte* y *Hass*, mientras que la glucosa, la fructosa y la sacarosa aumentaron, convirtiéndose los azúcares C6 en los carbohidratos predominantes en el mesocarpio maduro. Además, se encontraron diferencias estadísticamente significativas en el contenido de heptosas en las distintas variedades durante la maduración, siendo *Bacon* la que presentaba diferencias más notables en comparación con *Fuerte* y *Hass*.

Estos resultados resaltan el papel crítico de los azúcares C7 como fuente de energía durante la maduración del aguacate y los azúcares C6 como un factor clave para el control de la calidad post-cosecha. Además, este estudio no solo ofrece una comprensión más profunda de la fisiología del aguacate, sino que destaca la importancia de considerar las diferencias o peculiaridades varietales en la producción y el tratamiento posterior a la recolección.



## O43

### **Combinación de SUPRAS Y LC-HRMS para la identificación de contaminantes de preocupación emergente en el agua de grifo de 12 países del mundo: distribución y evaluación preliminar del riesgo de exposición.**

**Luis Muñiz De Bustamante**, Noelia Caballero Casero, Soledad Rubio Bravo  
*Universidad de Córdoba, Córdoba, España*

#### **Resumen**

La continua sobreproducción de productos químicos supone la liberación de miles de compuestos al medioambiente. Muchos estudios han puesto de manifiesto la presencia de decenas de miles de contaminantes orgánicos en los efluentes de aguas residuales. Para estos compuestos, en su mayoría desconocidos, la información química y toxicológica es limitada, por lo que se les conoce como contaminantes emergentes (EC). Los efluentes de aguas residuales son descargados en diferentes masas de agua, alcanzando así los EC el ciclo del agua y distribuyéndose a escala global. Dado que el agua potable se obtiene a través de tratamientos no eficaces para la eliminación de muchos de los EC, éstos pueden estar presentes en el agua de grifo. La elevada precisión de masas alcanzada por la espectrometría de masas de alta resolución (HRMS) permite la identificación de compuestos desconocidos, como los EC, sin la necesidad de estándares analíticos. Para llevar a cabo la identificación de EC mediante aproximaciones no dirigidas con HRMS se requieren tratamientos de muestra que permitan la multiextracción de compuestos no relacionados estructuralmente en un amplio intervalo de polaridad. Sin embargo, las técnicas de extracción tradicionales basadas en disolventes orgánicos están limitadas por la polaridad del disolvente y requieren etapas de purificación. En esta investigación se propone el uso de disolventes supramoleculares (SUPRAS) para la extracción de EC a partir de agua de grifo, y su identificación mediante LC-HRMS. Con este fin, se ha desarrollado una metodología no dirigida de análisis de detección de sospechosos para la identificación de EC en 53 muestras de agua de grifo de 12 países. En las muestras analizadas se identificaron 31 EC pertenecientes a productos de cuidado personal, estimulantes, filtros UV, tensioactivos, productos químicos industriales, plastificantes y productos de limpieza. Se semicuantificaron los EC identificados con un nivel de confianza superior a 2B y se realizó una evaluación preliminar del riesgo de exposición. Algunos compuestos identificados mostraron valores de cociente de riesgo (RQ) superiores a 1, indicando un riesgo potencial para la salud humana. Estos resultados demuestran que la combinación de SUPRAS y el análisis de sospechosos es una estrategia efectiva para descubrir nuevos contaminantes y fuentes de exposición para humanos.

Los autores agradecen la ayuda PID2020-113743RB-I00 financiada por MICIU/AEI/10.13039/501100011033. L. Muñiz-Bustamante agradece la ayuda PRE2021-096892, financiada por MICIU/AEI/10.13039/501100011033 y por FSE Invierte en tu futuro. N. Caballero-Casero agradece la ayuda IJC2020-044941-I financiada por MICIU/AEI/10.13039/501100011033 y por Unión Europea NextGenerationEU/PRTR.



## O44

### Determinación de sustancias perfluoroalquiladas (pfas) reguladas en agua de bebida de España y otros países según La Directiva 2020/2184/EU

Javier López Vázquez<sup>1</sup>, Rosa Montes<sup>1</sup>, Rosario Rodil<sup>1</sup>, José Ángel Martínez Pontevedra<sup>2</sup>,  
María Teresa Pena<sup>2</sup>, José Benito Quintana<sup>1</sup>

1. *Universidad de Santiago de Compostela, Santiago De Compostela, España*

2. *Applus, A Coruña, España*

#### Resumen

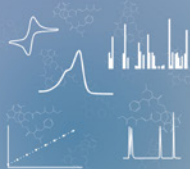
Las sustancias per- y poli-fluoroalquiladas (PFAS) constituyen una familia de sustancias químicas sintéticas fabricadas durante más de 70 años por su carácter anfílico y su persistencia, que las hacen muy atractivas para diversas aplicaciones [1]. Sin embargo, se han convertido en un problema importante para el medio ambiente debido a las dificultades para su eliminación y que pueden constituir una amenaza para la salud humana, debido a su potencial presencia en agua potable. Recientemente, la Directiva 2020/2184/UE [2] reguló la presencia de 20 PFAS (C4-C13, tanto carboxilatos como sulfonatos) en el agua potable. Esta normativa estipula que la suma de las concentraciones de estos 20 PFAS debe ser inferior a 100 ng/L. Por lo tanto, en este trabajo perseguimos dos objetivos principales. El primero es desarrollar una metodología capaz de alcanzar límites de cuantificación (LOQs) que sean el 30% del valor indicado en la directiva como suma (es decir, 30 ng/L). Por lo tanto, para la suma de los 20 congéneres el LOQ para cada compuesto debería ser  $\leq 1,5$  ng/L. El segundo objetivo es aplicar el método a muestras reales para cuantificar su presencia en el agua de bebida y comparar con el límite establecido en la reciente directiva [2]. El método desarrollado consiste en una extracción en fase sólida con cartuchos Oasis® de intercambio aniónico débil y posterior análisis por cromatografía líquida acoplada a la espectrometría de masas en tándem (LC-MS/MS), mediante el uso de una columna de retardo. Esto proporcionó unos LOQs  $\leq 0,3$  ng/L, con buenas recuperaciones (70-120%) y precisión (RSD  $\leq 19\%$ ) determinadas a 3 niveles de concentración para las PFAS (1, 10 y 100 ng/L). Por último, se aplicó el método analítico a 46 muestras de agua (11 de agua embotellada, 23 de agua del grifo española y 12 de agua del grifo de otros países). Se detectaron 10 PFAS diferentes en las muestras, con una frecuencia de detección en el rango 2-91% y concentraciones que oscilaban entre 0,1 y 20,1 ng/L para cada PFAS individual. En todos los casos se cumplieron las normas de la Directiva 2020/2184/UE.

#### Agradecimientos

Agilent por la cesión del LC-MS/MS. A diversos colegas por el suministro de muestras. Xunta de Galicia (ED431C 2021/06) y Agencia Estatal de Investigación -MCIN/AEI/10.13039/501100011033 (ref. PID2020-117686RB-C32 y TED2021-129200B-C41 a través de fondos NextGenerationEU/PRTR) por la financiación.

**Referencias** [1] OECD. Series on Risk Management 39 (2018) 1-24. [2] EC. Official Journal of the European Union 435 (2020) 1-62.





## O45

### Synthesis, identification, and quantification of migrant oligoesters from starch-based food contact materials

David Rupérez Cebolla<sup>1,2</sup>, Matthieu Rivière<sup>2</sup>, Jacques Lebreton<sup>2</sup>, Margarita Aznar<sup>1</sup>,  
Filomena Silva<sup>1,3,4</sup>, Arnaud Tessier<sup>2</sup>, Ronan Cariou<sup>5</sup>, Cristina Nerín<sup>1</sup>

1. Universidad de Zaragoza, Zaragoza, España

2. Nantes Université, CNRS, CEISAM, UMR 6230, Nantes, Francia

3. ARAID – Agencia Aragonesa para la Investigación y el Desarrollo, Zaragoza, España

4. Faculty of Veterinary Medicine, University of Zaragoza, Zaragoza, España

5. Oniris, INRAE, LABERCA, F-44300, Nantes, Francia

#### Resumen

Oligomers are structurally diverse compounds consisting of relatively few repeating monomer units coming from incomplete polymerisation or polymer degradation [Shi et al., 2023]. Their ability to migrate into foodstuffs along with recent studies about their bioavailability and toxicity have raised concerns about the lack of standards needed to perform the very much demanded analytical and toxicological studies [Cariou et al., 2022; Nerin et al., 2013]. In this work, migration samples of three starch-based biopolymers films intended for the packaging of fruits and vegetables were analysed according to European Regulation 10/2011. As determined by UPLC-MS(QTOF), oligoesters were the main non-intentionally added substances (NIAS) identified in the food simulant samples. A stepwise synthesis approach was used to synthesise and isolate eleven of these cyclic and linear oligoesters ranging from 2 to 8 monomers based on adipic acid, 1,4-butanediol, isophthalic acid and propylene glycol monomers. Characterization of the oligoester standards was achieved by <sup>1</sup>H and <sup>13</sup>C NMR as well as high resolution mass spectrometry. As determined by UPLC-MS(Orbitrap), this stepwise synthesis protocol yielded an overall high purity of over 98 %. These standards were then used to unequivocally identify for the first time the oligoesters in the migration extracts of the three starch-based films by comparing their UPLC-MS/MS spectra, and to semi-quantify or fully quantify these migrant oligoesters as NIAS migrants. Oligoester quantification results deemed safe only one out of the three starch-based films according to their threshold of toxicological concern concept (TTC). Nevertheless, since TTC is a theoretical approach, new toxicological assays should be performed in these compounds in order to have experimental toxicological values. The work herein described contributes towards the unaddressed oligomers knowledge gap and opens the door for their use in comprehensive toxicological risk assessments, as well for absorption, distribution, metabolism, excretion, and toxicity (ADMET) studies.

Cariou, R., Rivière, M., Hutinet, S., Tebbaa, A., Dubreuil, D., Mathé-Allainmat, M., Lebreton, J., Le Bizec, B., Tessier, A., & Dervilly, G. *J. Hazard. Mater.*, 435, 2022. Nerin, C., Alfaro, P., Aznar, M., & Domeño, C. *Anal. Chim. Acta*, 775, 2013, 14–24. Shi, C., Wang, M., Wang, Z., Qu, G., Jiang, W., Pan, X., & Fang, M. *J. Environ. Health*, 1(4), 2023, 228–235.



## O46

### Estudio de la seguridad química del uso de vajillas desechables mediante el análisis de migración de volátiles y no volátiles

Javier Blázquez-Martín<sup>1,2</sup>, Carlos Jiménez Estremuera<sup>3,4</sup>, Cristina Nerín De La Puerta<sup>3,4</sup>,  
Celia Domeño Recalde<sup>3</sup>

*1. Universidad de La Rioja, Logroño, España*

*2. Centro Nacional de Tecnologías del Envase, Logroño, España*

*3. Universidad de Zaragoza, Zaragoza, España*

*4. Instituto de Investigación en Ingeniería de Aragón, Zaragoza, España*

#### Resumen

En la sociedad actual, bien por comodidad o por la variedad de productos comercializados, cada vez se utiliza más vajilla desechable en eventos, especialmente en fiestas infantiles. Su principal característica es que toda la superficie entra en contacto con el alimento (frio o caliente) y la mayor parte de las veces está recubierta por imágenes impresas con diferentes motivos y multitud de colores para resultar más atractiva.

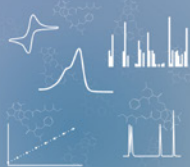
Para garantizar la seguridad durante su uso se debe cumplir la legislación europea que dicta el Reglamento (UE) n°10/2011 [1] sobre materiales plásticos destinados a entrar en contacto con alimentos y la norma UNE-EN 14338:2004 [2], dedicado a papel y cartón. Por ello, es necesario identificar sustancias presentes en el material que puedan migrar al alimento y ser un riesgo para el consumidor mediante los ensayos de migración que marca la legislación. Las nuevas técnicas analíticas permiten afrontar este trabajo con garantías de éxito.

En esta investigación, hemos estudiado la migración de sustancias desde nueve platos desechables fabricados con cartón, poliestireno (PS) y polipropileno (PP). Las migraciones se llevaron a cabo con cuatro simulantes alimentarios: etanol al 10 y al 95%, ácido acético al 3% y Tenax, durante 10 días a 40°C. Los extractos de los simulantes fueron analizados por SPME-GC/MS y UPLC-QTOF-MS para identificar y cuantificar sustancias migrantes volátiles y no volátiles, respectivamente. La identificación se llevó a cabo con el software MS-Dial, por comparación con librerías espectrales. Finalmente, la toxicidad de cada compuesto fue consultada para evaluar los posibles riesgos toxicológicos derivados del uso de estos platos.

[1] Commission Regulation (EC) No 10/2011 of 14 January 2011 on plastic materials and articles intended to come into contact with food, Off. J. Eur. Union (2011). <http://data.europa.eu/eli/reg/2011/10/oj>

[2] UNE. (2004). Papel y cartón para contacto alimentario. Condiciones para la determinación de la migración en papel y cartón utilizando óxido de polifenileno modificado (MPPO) como simulante (UNE-EN 14338:2004)

[3] Aznar, M., Domeño, C., & Nerin, C. (2023). Determination of volatile migrants from breast milk storage bags. *Food Packaging and Shelf Life*, 40, 101196.



## O47

### Determinación de contaminantes de preocupación emergente en muestras de moluscos y pescados de la costa portuguesa mediante cromatografía líquida y de gases acopladas a espectrometría de masas

**Sandra Méndez Martínez**<sup>1</sup>, Daylin López Castillo<sup>1</sup>, Javier López Vázquez<sup>1</sup>, Rosa María Montes Goyanes<sup>1</sup>, Joana Raimundo Pimenta<sup>2</sup>, Miguel Caetano<sup>2</sup>, Clara Patrícia Andrade Lopes<sup>2</sup>, Cátia Figueiredo<sup>2</sup>, Teresa Neuparth<sup>3</sup>, Marlene Pinheiro<sup>4</sup>, Néelson Alves<sup>4</sup>, Ricardo Capela<sup>3</sup>, Susana Barros<sup>3</sup>, Hugo Morais<sup>3</sup>, Miguel Santos<sup>4</sup>, José Benito Quintana<sup>1</sup>, M<sup>o</sup> Del Rosario Rodil Rodríguez<sup>1</sup>

1. *Instituto de Investigación del Medio Acuático para una Salud Global (iARCUS), Santiago De Compostela, España*

2. *Instituto Português del Mar y la Atmósfera (IPMA) y Centro Interdisciplinar de Investigación Marina y Ambiental (CIMAR/CIIMAR), Matosinhos, Portugal*

3. *Centro Interdisciplinar de Investigación Marina y Ambiental (CIMAR/CIIMAR), Matosinhos, Portugal*

4. *Centro Interdisciplinar de Investigación Marina y Ambiental (CIMAR/CIIMAR) y Departamento de Biología, Facultad de Ciencias (FCUP), Oporto, Portugal*

#### Resumen

La presencia de contaminantes de preocupación emergente (CECs) en el medio marino ha suscitado un gran interés en la comunidad científica en los últimos años debido fundamentalmente a su potencial de bioacumulación y persistencia en el medio lo que favorece su transferencia en la cadena alimentaria suponiendo un riesgo para la salud de los consumidores. Por ello es imprescindible la identificación de los CECs presentes en diferentes compartimentos del medio marino a la hora de desarrollar estrategias de control. El objetivo de este estudio, enmarcado dentro del proyecto CEIC (contaminantes en especies comerciales de la costa portuguesa), es la identificación de CECs en muestras de peces y moluscos en diferentes puntos de la costa portuguesa. Una vez tomadas las muestras, los diferentes tejidos y especies fueron liofilizados y sometidos a diferentes procedimientos de preparación de muestra basados en dispersión de la matriz en fase sólida (MSPD) [1,2]. Los extractos obtenidos se analizaron mediante cromatografía líquida y de gases acoplada a espectrometría de masas de alta resolución (LC-ESI-HRMS y GC-EI-HRMS) para un análisis cualitativo. Los resultados permitieron la identificación de un total de 192 CECs utilizando librerías de compuestos de alta [3] y baja resolución (NIST). La mayoría de las sustancias detectadas fueron reactivos industriales. Entre ellos, se detectaron diversas sustancias perfluoroalquiladas (PFAS); sustancias especialmente preocupantes en el medio ambiente debido a su elevado carácter persistente. Posteriormente, se aplicó una metodología analítica basada en LC acoplada a espectrometría de masas en tándem en un sistema triple cuadrupolo para la obtención de resultados cuantitativos de concentración de estos PFAS en las muestras; obteniendo concentraciones ligeramente superiores a las encontradas en la literatura (rangos de entre el límite de cuantificación a 25.27 ng/g).

**Agradecimientos** Los autores agradecen el soporte financiero de la Xunta de Galicia (ED431C2021/06) y de la Agencia Estatal de Investigación MCIN/AEI/10.13039/501100011033 (ref. PID2020-117686RB-C32) y al CEIC, "Contaminantes en especies comerciales de la costa portuguesa", fundado por el programa MAR2020, IPMA, MAR-01.04.02-FEAMP-0012.

**Referencias** [1] V. Castro, R. Montes, J.B. Quintana, et al., *Talanta*. 208 (2020) 120470. [2] E. Villaverde-de-Sáa, C. Valls-Cantenys, J. B. Quintana, et al., *J. Chromatogr. A*, 1300 (2013) 85-94. [3] V. Castro, J.B. Quintana, J. López-Vázquez, et al., *Anal Bioanal Chem.*, 414 (2022) 6327-6340.



## O48

### Analytical strategies to monitor 3,5- dihydroxycinnamic acid as urine biomarker of gluten intake

**Yolanda Moliner Martínez<sup>1</sup>**, Camila Soto<sup>1</sup>, Sergio Boquera Solaz<sup>1</sup>, Maria Roca<sup>2</sup>,  
Carmen Ribes Koninckx<sup>2,3</sup>, Pilar Campins Falcó<sup>1</sup>

*1.Universidad de Valencia, Valencia, España*

*2.IISLaFe, Valencia, España*

*3.Hospital Universitario y Politécnico La Fe, Valencia, España*

#### Resumen

The development of analytical methodologies to determine biomarkers towards improved diagnostics and treatments through a more personalized medicine has become a significant area of research. Celiac disease is a systemic autoimmune disorder induced by the ingestion of gluten (Glu) proteins present in different cereals. To date, a gluten free diet (GFD) is the method to prevent and treat the potential complications. Nevertheless, voluntary or involuntary transgressions take place and unfortunately, can result in persistent symptoms and, hence ineffective therapies. In this context, dietary biomarkers and analytical strategies that reflect Glu intake and monitor GFD compliance are of substantial interest [1]. The aim of this contribution will be to detail some innovative analytical strategies recently developed in our laboratory to monitor 3,5-DHCA as urine biomarker of gluten intake. Based on the pre-screening colorimetric assay using the Fast Blue (FB) doped-PDMS membrane [2], different separation/detection strategies are presented in order to achieve satisfactory analytical performance in terms of sensitivity, precision, selectivity and sustainability. The sensing colorimetric performance of the FB doped-PDMS membranes has been combined with IT-SPME-CapLC-DAD, DART-MS and HPTLC-image analysis as three different approaches to develop tools ranging from laboratory analysis to in situ analysis. The features of the three approaches will be compared in terms of selectivity, confirmation performance and analytical sustainability to detect dietary transgressions to the GFD with the objective to improve the celiac disease monitoring. Overall our work contributes to the advance of knowledge about celiac disease, which still remains an important challenge to our society.

**References** [1] S. Husby, S.Koletzko, I. Korponay-Szabó, et al. *Pediatr Gastroenterol Nutr* 70 (2020)141-156. [2]L. Hakobyan, M.C.Prieto-Blanco, M. Roca Llorens et al. *Sens Actuators B* 345 (2021) 130333.

#### Acknowledgements.

Authors acknowledge EU and the Gobierno de España MCI-AEI (PID2021-124554NB-I00) and to the Generalitat Valenciana (PROMETEO Program 2020/078 and EU FEDER- Generalitat Valenciana (ID-FEDER/2018/049). AK-Gluten Detect financed by University of Valencia in the VLC-Biomed Program.



## O49

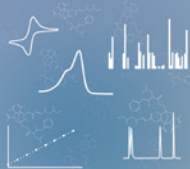
### Desarrollo y aplicación de un método analítico para la determinación de productos finales de glicación avanzada en biofluidos humanos

Ana Castillo Luna, Feliciano Priego Capote, Mónica Calderón Santiago  
*Universidad de Córdoba, Córdoba, España*

#### Resumen

Los productos finales de glicación avanzada (AGEs) son un grupo heterogéneo de compuestos que pueden encontrarse en el organismo de forma endógena y exógena. Estos se generan a partir de la reacción de Maillard, la cual implica una reacción de glicación no enzimática entre azúcares reductores y moléculas con grupos amino libres como péptidos, proteínas, etc. La relevancia bioquímica de los AGEs y sus niveles puede ser de interés en el estudio de trastornos metabólicos, así como en otras patologías relacionadas con la inflamación y el estrés oxidativo, incluidas enfermedades neurodegenerativas y cardiovasculares, diabetes mellitus tipo 2. Numerosas investigaciones han confirmado que, una elevada concentración de AGEs en nuestro organismo aumenta la predisposición a padecer enfermedades crónicas como insuficiencia renal, Alzheimer, entre otras [1]. Previamente, se han desarrollado diversos métodos analíticos para detectar y cuantificar dichos compuestos. No obstante, la mayoría de ellos están diseñados para determinar AGEs de forma individual o, bien, varios AGEs con naturaleza química similar como por ejemplo ocurre con el glioxal y metilglioxal. Sin embargo, no existe un único método analítico que englobe a los principales AGEs (glioxal, metilglioxal, 3-deoxiglucosona, N $\epsilon$ -carboxietil-lisina, N $\epsilon$ -carboximetil-lisina, pentosidina, arg-piramidina y pirralina). Por este motivo, en esta investigación se ha desarrollado un método que permite la detección y cuantificación de todas estas especies mediante LC-MS/MS. Para ello, se han optimizado dos reacciones de derivatización consecutivas a temperaturas específicas y en condiciones de oscuridad. Como derivatizantes, se ha empleado m-o-fenilenediamina y ácido 2,4,6-trinitrobencenosulfónico. El primer derivatizante se utilizó para la determinación de glioxal, metilglioxal y 3-deoxiglucosona, mientras que el segundo se empleó para aumentar la sensibilidad y selectividad en la detección del resto de compuestos. Además, la adición de ambos derivatizantes permitió una mejora en la separación cromatográfica de los analitos de interés. El sistema analítico está completamente automatizado y el único pretratamiento manual de las muestras consiste en una precipitación de proteínas con acetonitrilo previa a las sucesivas derivatizaciones. El método optimizado se aplicó a varias muestras de biofluidos humanos (suero, plasma, orina y saliva). Gracias al desarrollo de este método analítico, se han podido detectar y cuantificar concentraciones de estos analitos en el orden de magnitud de ng/mL-pg/mL en las diferentes muestras de biofluidos con niveles de precisión y exactitud competitivos [1,2].

[1] C. Hashimoto, Y. Iwaihara, S.J. Chen, et al. *Analytical chemistry* (2013) 85(9), 4289-4295. [2] J.L. Scheijen, & C.G. Schalkwijk. *Clinical chemistry and laboratory medicine* (2014) 52(1), 85-91.



## O50

### **Análisis de saliva para el diagnóstico precoz del cáncer de pulmón: medición de niveles de expresión de hexanal y heptanal**

**Juan L. Benedé<sup>1</sup>**, María Cabanes-Germán<sup>1</sup>, Jose Grau<sup>1</sup>, Francisco Aparisi<sup>2</sup>,

Guillermo Suay-Montagud<sup>2</sup>, Alba Ortiz-Gracia<sup>2</sup>, Óscar Juan-Vidal<sup>2</sup>, Alberto Chisvert<sup>1</sup>

1. GICAPC, Departamento de Química Analítica, Facultad de Química, Universidad de Valencia, Burjassot-Valencia, España

2. Servicio de Oncología Médica, Unidad de Biomarcadores y Medicina de Precisión (UBYMP), Instituto de Investigación Sanitaria La Fe (IISLAFE), Valencia, España

#### **Resumen**

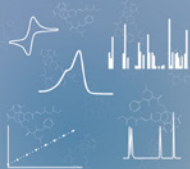
El cáncer de pulmón, si bien es uno de los tipos de cáncer con mayor incidencia y mortalidad, puede tratarse con garantías basadas en una detección precoz [1]. En este sentido, los biomarcadores son de suma importancia ya que pueden proporcionar información para la evaluación de factores de riesgo. En los últimos años, se ha demostrado que diferentes aldehídos endógenos son indicadores tempranos del cáncer de pulmón [2] al ser subproductos de la oxidación de lípidos celulares causada por altos niveles de radicales libres relacionados con algunas enfermedades, incluido el cáncer. El uso de saliva como herramienta de diagnóstico es un enfoque factible ya que el muestreo de saliva es indoloro, fácil y no invasivo. En esta comunicación se presenta un método analítico para la determinación de dos aldehídos endógenos (hexanal y heptanal) en muestras de saliva. El método se basa en la microextracción magnética por adsorción en espacio de cabeza (M-HS-AME) seguida del análisis por cromatografía de gases-espectrometría de masas (GC-MS) [3]. El método se aplicó, en una primera fase, a un grupo reducido de enfermos de cáncer de pulmón avanzado, obteniéndose niveles altamente expresados de hexanal y heptanal respecto a voluntarios sanos. Posteriormente, se ha aplicado a una cohorte amplia con nódulos pulmonares solitarios en estudio por sospecha de cáncer de pulmón, con el fin de relacionar los niveles de estos aldehídos con el estadio tumoral, alteraciones moleculares, variables clínicas basales, etc. En esta comunicación se presentan y discuten los resultados obtenidos de esta potencial herramienta enfocada en lograr un diagnóstico precoz de cáncer de pulmón y fácil a través de la detección selectiva de personas de alto riesgo.

#### **Agradecimientos**

Los autores agradecen al Ministerio de Ciencia e Innovación la financiación recibida a través del proyecto PID2020-118924RB-I00 (MCIN/AEI/10.13039/501100011033), y a la Sociedad Española de Oncología Médica por la beca concedida

#### **Referencias**

[1] D. Marzorati, L. Mainardi, G. Sedda, R. Gasparri, L. Spaggiari, P. Cerveri, *Journal of Breath Research* 13 (2019) 034001 [2] J. Moskovitz, M. Bin Yim, P.B. Chock, *Arch. Biochem. Biophys.* 397 (2002) 354–359 [3] C. Azorín, A.L. López-Juan, F. Aparisi, J.L. Benedé, A. Chisvert, *Anal. Chim. Acta* 1271 (2023) 341435



## O51

### Desarrollo de una metodología analítica mediante LC-MS/MS Sensible y selectiva para la determinación de biomarcadores de estrés oxidativo (4H2N Y MDA) en plasma seminal humano

**Manuel Alfaro Gómez**<sup>1,2</sup>, Juan Carlos Moreno Arroyo<sup>1</sup>, Alejandro Jurado Campos<sup>2</sup>, Pedro Javier Soria Meneses<sup>2</sup>, Vidal Montoro Angulo<sup>2</sup>, Ana Josefa Soler Valls<sup>2</sup>, José Julián Garde López-Brea<sup>2</sup>, María Del Rocío Fernández Santos<sup>1,2</sup>, Virginia Rodríguez Robledo<sup>1,2</sup>

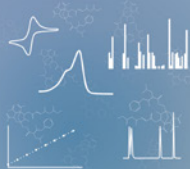
1. *Facultad de Farmacia, Universidad de Castilla la Mancha, Albacete, España*

2. *SaBio IREC (CSIC-UCLM-JCCM), Campus Universitario, Albacete, España*

#### Resumen

Los espermatozoides son altamente sensibles al daño oxidativo por la alta proporción de ácidos grasos poliinsaturados en su membrana lipídica. Las especies reactivas del oxígeno atacan dicha membrana provocando la peroxidación lipídica, proceso en el que se producen reacciones en cadena que generan productos como el malondialdehído (MDA) y el 4-hidroxi-2-nonenal (4H2N) [1]. Ambos compuestos son biomarcadores útiles para el estudio de la peroxidación lipídica asociada al daño oxidativo. Nuestro objetivo es desarrollar una novedosa metodología analítica específica y sensible usando LC-MS/MS para la determinación y cuantificación simultánea en muestras de plasma seminal humano de MDA y 4H2N, normalmente analizados mediante kits comerciales basados en técnicas colorimétricas. Para ello, se ha utilizado un equipo Agilent 1260 InfinityHPLC acoplado a 6460 Triple Quadrupole Mass Agilent con interfase ESI. La separación de los analitos se realizó por elución isocrática a 0,4 mL min<sup>-1</sup> con columna ZORBAX-Eclipse-XDB-C18. La fase móvil utilizada fue una mezcla 20:80 (v/v) de 0,1 % ácido fórmico (A) y acetonitrilo (B). Condiciones para la ESI: temperatura del gas de secado 300 °C, flujo de gas 13 L min<sup>-1</sup> y presión del nebulizador 35 psi. Modo MRM-dynamic con ionización positiva para MDA m/z [235]<sup>+</sup> → [143]<sup>+</sup>; [235]<sup>+</sup> → [159]<sup>+</sup>, [235]<sup>+</sup> → [189]<sup>+</sup>; y negativa para 4H2N [335]<sup>-</sup> → [163]<sup>-</sup>, [335]<sup>-</sup> → [165]<sup>-</sup>, [335]<sup>-</sup> → [167]<sup>-</sup>, siendo la primera, la correspondiente a la transición cuantitativa y las dos últimas las cualitativas, respectivamente. Los parámetros cromatográficos y de detección mediante espectrometría de masas han sido cuidadosamente optimizados, así como las condiciones de estabilidad de los analitos previamente derivatizados con 2,4-dinitrofenilhidrazina (DNPH) para su análisis por LC-MS/MS. Además, se estudió el uso del modo MRM-dynamic, que nos permitió la determinación simultánea en modo positivo y negativo mediante ventanas de detección en un tiempo de análisis de 15 minutos. El tratamiento y purificación de la muestra se realizó mediante extracción en fase sólida (SPE) optimizando, para ello, cada una de las etapas del proceso. El método propuesto ha sido validado en términos de precisión, exactitud, linealidad y límites de detección, y finalmente aplicado a plasma seminal humano, muestras biológicas que no han sido analizadas previamente usando este tipo de metodología instrumental. Los resultados obtenidos nos permiten determinar de manera simultánea, precisa y sensible MDA y 4H2N en plasma seminal, de forma que pueda relacionarse su concentración con la calidad del semen y por tanto con procesos asociados a infertilidad.

[1] C. Ritchie, Edmund Y. Ko, *Andrologia*.(2021); 53:e13581.



## O52

### Vesículas extracelulares como sistema transportador de fármacos para la terapia fotodinámica del cáncer de mama

**María Luisa Fernández Sánchez**, Andrea L. Larraga Urdaz, Marta Valledor Llopis,  
Francisco Ferrero Martín, José Manuel Costa Fernández  
*Universidad Oviedo, Oviedo, España*

#### Resumen

La terapia fotodinámica (PDT) utiliza fotosensibilizadores (PS) para generar especies de oxígeno altamente reactivas (ROS), y ha demostrado ser muy eficaz para el tratamiento de varias enfermedades, incluido el cáncer [1]. Sin embargo, la eficacia terapéutica de la PDT es limitada y puede presentar efectos secundarios, en gran parte debido a la acumulación no específica de PS más allá del tejido afectado. Durante la última década, se han desarrollado nanomateriales modificables para orientar la captación a un tipo específico de blanco celular o tisular, incrementando su eficiencia al tiempo que reducen los efectos no deseados de los PS. Sin embargo, la citotoxicidad generada por los nanomateriales sintéticos y/o sus productos de degradación sigue siendo un problema importante para las aplicaciones biomédicas. Las vesículas extracelulares (VEs), un tipo de nanopartículas liberadas por las células, están surgiendo como un sistema natural de administración de fármacos ya que presentan una inmunogenicidad y biocompatibilidad potencialmente bajas. En esta comunicación se presentarán los resultados de un estudio orientado a evaluar la eficiencia de encapsulación del fármaco hidrosoluble Fotoenticine® en VEs.

Por otra parte, la eficacia de este tratamiento depende en gran medida de la activación exitosa del fotosensibilizador con la luz adecuada. Por ello hemos desarrollado un equipo comercialmente versátil capaz de controlar los parámetros de luz (frecuencia, potencia, modo pulsado y continuo) utilizando una matriz de LED [2]. La eficacia del equipo desarrollado para la fotoactivación del fotoencine encapsulado en VEs para el tratamiento fotodinámico del cáncer de mama se ha evaluado *in vitro* en la línea MCF-7.

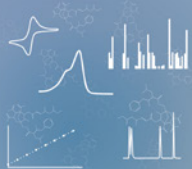
[1] Czarnecka-Czapczyńska M, Aebisher D, Oleś P, Sosna B, Krupka-Olek M, Dynarowicz K, Latos W, Cieślak G, Kawczyk-Krupka A. The role of photodynamic therapy in breast cancer A review of *in vitro* research. *Biomed Pharmacother.* 2021;144:112342. doi: 10.1016/j.biopha.2021.112342.

[2] Andrea L. Larraga-Urdaz, Adrián Vizcaíno, Marta Valledor, Francisco Ferrero, Juan Carlos Campo, Alberto López, J.M. Costa-Fernández, María Luisa Fernández-Sánchez, An affordable automated LED array system for optimizing photodynamic therapy protocols, *Biosensors and Bioelectronics: X*, Volume 14, 2023, 100383.

#### Agradecimientos

Este proyecto ha sido financiado por el Ministerio de Ciencia, Innovación y Universidades (PID2020-117282RB-I00 and PID2022-142323NB-I00) y el Instituto de Salud Carlos III (PI21/01177).





## O53

### Mejora de la precisión en terapia fotodinámica antitumoral: desarrollo y evaluación bioanalítica de un nuevo nanosistema inteligente basado en Rh

Alejandro García García<sup>1</sup>, Andrés Machuca Marcos<sup>1</sup>, Sonia Castillo Lluva<sup>2</sup>, Blanca González Ortiz<sup>3</sup>,  
Jose Luis Luque García<sup>1</sup>

*1. Departamento de Química Analítica, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Complutense de Madrid, Madrid, España*

*2. Departamento de Bioquímica y Biología Molecular, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Complutense de Madrid, Madrid, España*

*3. Departamento de Química en Ciencias Farmacéuticas, Facultad de Farmacia, Universidad Complutense de Madrid, Instituto de Investigación Sanitaria Hospital 12 de Octubre (i+12), Madrid, España*

#### Resumen

El cáncer es actualmente la segunda causa de muerte en todo el mundo. Además, las terapias existentes para abordar esta enfermedad presentan ciertas limitaciones, como la gran cantidad de efectos secundarios. Así, es necesario el desarrollo de nuevas estrategias más efectivas, como la terapia fotodinámica (PDT), que consiste en la combinación de un agente fotosensibilizante (PS) con la radiación electromagnética para inducir efectos citotóxicos que conduzcan a las células malignas a la muerte celular [1]. A diferencia de los PS empleados habitualmente, como moléculas orgánicas poco solubles, las nanopartículas constituyen una prometedora alternativa al ser fácilmente funcionalizables para aumentar su selectividad hacia los tejidos tumorales. En particular, las nanopartículas metálicas han demostrado su potencial aplicación clínica en la terapia contra el cáncer mediante PDT. La aplicación de nanopartículas de rodio (RhNPs) en el campo de la biomedicina tiene un corto recorrido. No obstante, ya se ha demostrado su potencial como PS en PDT frente a células tumorales. Se ha comprobado que, en combinación con NIR, estas nanopartículas son capaces de generar ROS en el interior celular induciendo estrés oxidativo y comprometiendo la viabilidad de células HeLa [2]. En vista de los prometedores resultados obtenidos con estas nanopartículas, en este trabajo se ha llevado a cabo el diseño, síntesis y caracterización analítica y biofuncional de un nuevo nanosistema híbrido que posibilita la vectorización de las RhNPs hacia las células tumorales. Este sistema se basa en la vehiculización de RhNPs mediante nanopartículas de sílice mesoporosa (MSNs) de mayor tamaño y decoradas con un ligando de vectorización como la proteína transferrina (Tf). El sistema RhNPs-MSNs-Tf se ha caracterizado mediante las técnicas TEM y DLS, XEDS, ATR-FTIR y TGA. Asimismo, se ha confirmado la capacidad del nanosistema para generar ROS en disolución en combinación con NIR mediante métodos espectroscópicos, así como la internalización selectiva del sistema mediante la detección y cuantificación de Rh intracelular empleando técnicas de TEM e ICP-MS, respectivamente. Finalmente, se han desarrollado estudios de viabilidad celular en la línea celular HeLa, demostrando la capacidad citotóxica fotoinducida del nanosistema RhNPs-MSNs-Tf. En conclusión, los resultados obtenidos en esta investigación confirman la exitosa síntesis de un nuevo nanosistema híbrido como posible PS para PDT. Además, este sistema mejora las características terapéuticas y la selectividad hacia los tejidos tumorales que presentan las RhNPs.

[1] Kwiatkowski S. et al., *Biomed. Pharmacother.* 2018. 106. 1098-1107. [2] Machuca A. et al., *Chem. Eur. J.* 2020. 26. 7685-7691.



## O54

### Identificación y cuantificación del perfil de glicosilación del anticuerpo monoclonal cetuximab mediante mapa peptídico (RP)UHPLC-HESI(orbitrap)MS/MS

Alicia Torres García<sup>1,2</sup>, Anabel Torrente Lopez<sup>2,3</sup>, Jesus Hermosilla Fernández<sup>2,3</sup>, Antonio Salmerón García<sup>4,3</sup>, José Cabeza Barrera<sup>4,3</sup>, **Natalia Navas Iglesias**<sup>2,3</sup>

1.FIBAO, Granada, España

2.Universidad de Granada, Granada, España

3.Ibs.Granada, Granada, España

4.Hospital Universitario Clínico San Cecilio, Granada, España

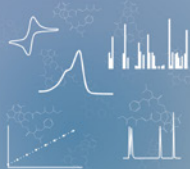
#### Resumen

Los anticuerpos monoclonales terapéuticos constituyen actualmente un importante grupo de fármacos biotecnológicos, en continuo crecimiento, para el tratamiento de una gran variedad de enfermedades de amplia difusión, que va desde las oncológicas hasta las autoinmunes, incluyendo el Alzheimer, la Covid19 etc. Cetuximab, principio activo del medicamento biotecnológico Erbitux® (Merck Farma), está indicado para el tratamiento del cáncer colorrectal metastásico, con expresión del receptor del factor de crecimiento epidérmico (EGFR), con gen RAS de tipo nativo y para el tratamiento de cáncer de células escamosas de cabeza y cuello. Actúa bloqueando el EGFR inhibiendo así el crecimiento anormal de las células cancerosas y reduciendo el tamaño de la metástasis. Desde su aprobación en junio de 2004, es uno de los medicamentos biotecnológicos más usados a nivel mundial, del cual no se ha introducido en el mercado ningún biosimilar. Esto se atribuye a su complejo patrón de glicosilación que no ha podido ser replicado [1], por lo que se mantienen como medicamento innovador en el mercado si la alternativa de biosimilar. Esta complejidad deriva de la presencia de un segundo sitio de N-glicosilación en la posición N88 en la región Fab, además del conservado en la posición N-299 en el dominio CH2 de la porción Fc de su estructura. El control del patrón de glicosilación es un atributo crítico de la calidad que debe ser controlado para asegurar la calidad del medicamento, así como las variaciones entre lotes. En este trabajo se identifica y cuantifica el patrón de glicosilación de cetuximab (Erbitux® 5 mg/mL) a partir del análisis del mapa peptídico obtenido tras la digestión de cetuximab con tripsina y posterior análisis mediante cromatografía de líquidos de fase reversa acoplada por ionización electro espray con calentamiento a espectrometría de masas de alta resolución y masa exacta ((RP)UHPLC-HESI(ORBITRAP)MS/MS). El análisis de los mapas peptídicos se realizó mediante el programa bioinformático BioPharmaFinder ver 3.0 (Thermo Fisher). Se identificaron los dos puntos de glicosilación, así como el patrón en cada uno de ellos, corroborándose la complejidad asociada a la glicosilación en la posición N88 en la región Fab.

#### Agradecimientos

Financiado Proyecto FIS: PI-17/00547 (Instituto Carlos III, Ministerio de Economía y Competitividad, España), esto implica que ha sido financiado por Fondos de Desarrollo Regional (FEDER. Al Servicio de Farmacia del Hospital Universitario Clínico San Cecilio (Granada), por la amable cesión de las muestras de Erbitux®.

[1] E. Douez, et. Al. Pharm Biomed Anal (2023) 115544.



## O55

### Nuevos nanosistemas inteligentes basados en selenio como herramienta frente al cáncer de mama: Evaluación funcional mediante tecnologías ómicas

María Del Pilar Buendía Nacarino, Roberto Álvarez Fernández, Sonia Castillo Lluva,  
Blanca Gonzalez Ortiz, José Luis Luque García  
*Universidad Complutense de Madrid, Madrid, España*

#### Resumen

Actualmente, el cáncer de mama supone la principal causa de muerte en mujeres entre 20 y 59 años y la segunda en mayores de 60 años. En este tipo de cáncer, el pronóstico varía notablemente según el tipo de tumor. Mientras el tipo luminal A con receptores de estrógeno positivos (ER+) tiene el mejor pronóstico, ya que responde a terapia hormonal, el triple negativo (ER-, PR-, HER2-) conlleva un peor tratamiento por no poder tratarse con terapias dirigidas. Por otro lado, el principal problema de los tratamientos quimioterapéuticos actuales se asocia a las altas concentraciones de fármacos empleadas, generando así resistencia, y los efectos secundarios asociados a la interacción de los fármacos con tejidos sanos. En el presente trabajo se propone el diseño de dos nanosistemas, MSN-TMX-Tf-SeNPs y Ag@MSN-Tf-SeNPs, como agentes antitumorales frente al cáncer de mama. Ambos nanosistemas tienen una estructura compuesta por nanopartículas mesoporosas de sílice (MSN), empleadas como vehículo para el transporte de nanopartículas de selenio (SeNPs), las cuales han demostrado la capacidad de disminuir la proliferación de células cancerígenas [1]. A su vez, su superficie se funcionaliza con transferrina (Tf), para dirigir selectivamente los nanosistemas hacia las células tumorales, que generalmente sobreexpresan los receptores de esta proteína [2, 3]. Por último, para aumentar la eficacia antitumoral del nanosistema se busca un efecto sinérgico con nanopartículas de plata (AgNP) (para tumores triple negativos) o tamoxifeno (TMX) (para tumores tipo luminal A). En esta comunicación, se detalla la síntesis de ambos nanosistemas, así como su caracterización mediante diferentes técnicas analíticas como TEM, EDS o IR, entre otras. Además, se aborda la evaluación funcional de ambos nanosistemas mediante herramientas bioanalíticas y, finalmente, se profundiza en sus mecanismos moleculares de acción mediante la integración de tecnologías ómicas basadas en espectrometría de masas como la proteómica y metabolómica.

[1] H. Estevez, J. Garcia, J. Luque, et al. Col. 122 (2014) 184-193 [2] G. Aragonese, J. Serrano, I. Martinez, et al. In. Ch. Fr. 11 (2021) 2697-2712 [3] S. Montalvo, G. Aragonese, L. García, et al. Nan. 10 (2019) 4531-4545



## O56

### **Determinación de contaminantes orgánicos en células y su concentración biodisponible como metodología alternativa para predecir la bioacumulación**

**Paloma De Oro Carretero**, Jon Sanz Landaluze

*Departamento de Química Analítica. Facultad de Ciencias Químicas.*

*Universidad Complutense de Madrid, Madrid, España*

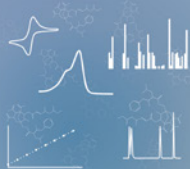
#### **Resumen**

El factor de bioconcentración (BCF) de una sustancia química se considera un parámetro fundamental para evaluar sus propiedades ecotoxicológicas. El método oficial para su estimación utiliza gran cantidad de peces adultos [1]. Actualmente, hay un gran interés en desarrollar ensayos alternativos in vitro con células para reducir la experimentación animal. Sin embargo, es bastante difícil encontrar correlaciones in vitro-in vivo. Una de las razones es porque, normalmente, estos ensayos se basan en cálculos con la concentración nominal, la cual no es la misma que la concentración biodisponible para las células ( $C_{free}$ ), debido a pérdidas y retenciones en el sistema in vitro [2]. Este inconveniente es aún más pronunciado en contaminantes orgánicos debido a sus propiedades hidrofóbicas y volátiles. Además, estos ensayos no suelen completarse con mediciones de la concentración debido a la gran dificultad que presenta (muestras y concentraciones muy pequeñas). En este estudio, se ha desarrollado una metodología basada en la determinación analítica de la concentración de contaminantes orgánicos como los PAHs (fenantreno) en el interior de las células y en el medio celular, la posterior aplicación de un modelo de distribución química [3] para calcular la  $C_{free}$  y un ajuste toxicocinético para estimar el valor de BCF. Además, se ha realizado simultáneamente un estudio cinético de la formación de los metabolitos mayoritarios (OH-PAHs). El protocolo analítico desarrollado se basa en una extracción miniaturizada asistida con sonda de ultrasonidos, seguida de una determinación mediante GC-MS y LC-FL y una previa derivatización con MTBSTFA para los metabolitos. Los resultados obtenidos mostraron una fuerte correlación de los BCF in vitro obtenidos con células de pez cebra (ZF4 y ZFL) y los BCF in vivo en peces reportados en la literatura. Además, el método analítico desarrollado es rápido, sencillo, efectivo y de bajo coste; por lo que dicha metodología es una alternativa prometedora para predecir el BCF sin experimentación animal.

**Referencias** [1] OECD305.Guidelines for the Testing of Chemicals (2012). [2] Proença S. et al. Toxicol. in Vitro 73 (2021). [3] Fischer F.C. et al. Chem. Res. Toxicol. 30 (2017) 1197–1208.

#### **Agradecimientos**

Apoyo financiero del Ministerio de Ciencia e Innovación [PID 2020 114714 RB 100]. Contrato predoctoral [PRE2021/097956]. Facilitación de las células ZFL de Nerea Roher y Marlid Garcia-Ordoñez del Instituto de Biotecnología y Biomedicina (Barcelona, España). Universidad Complutense por el apoyo al grupo de investigación "Determinación de Trazas, Especiación y Proteómica.



## O57

### Utilización de precolumnas acopladas a espectrometría de masas como estrategia rápida de análisis para la determinación de compuestos endógenos y exógenos en matrices biológicas

**Ana María Casas Ferreira**, María Teresa Fernández Del Campo García, Miguel Del Nogal Sánchez, Iria González Mariño, Diego García Gómez, Encarnación Rodríguez Gonzalo, José Luis Pérez Pavón  
*Universidad de Salamanca, Salamanca, España*

#### Resumen

El desarrollo de métodos de análisis rápidos y fiables sigue siendo un campo de gran interés dentro de la química analítica actual. Dentro de esta línea, la utilización del análisis por inyección en flujo acoplado a espectrometría de masas (FIA-MS) representa una alternativa muy interesante. La instrumentación es sencilla, pudiéndose utilizar dispositivos basados en cromatógrafos de líquidos en los que se elimina la columna cromatográfica, con lo cual los analitos son inyectados de forma automatizada en una fase portadora y son transferidos sin separación a la fuente de ionización [1]. A pesar del gran potencial de FIA-MS, su uso presenta algunos inconvenientes, tales como efectos de supresión iónica debido a la ausencia de una etapa de separación previa a la detección, así como la posible presencia de especies isobáricas que pueden impedir la cuantificación de los analitos de interés cuando no hay iones específicos para estos. Una alternativa sencilla para minimizar estos problemas es la utilización de precolumnas para realizar una etapa rápida de fraccionamiento de baja resolución previa a la detección por MS [2-5]. Los tiempos de análisis son similares a los requeridos en FIA-MS, obteniéndose mejoras muy significativas tanto en la sensibilidad como en la selectividad del análisis. En este trabajo se muestra una línea de investigación desarrollada por nuestro grupo donde se utiliza esta estrategia de análisis para determinaciones rápidas y fiables de compuestos endógenos y exógenos en matrices biológicas. En concreto, se ha propuesto la determinación de (i) poliaminas [2], (ii) aminoácidos [3,5], (iii) malodialdehído y (iv) metabolitos de plastificantes [4] y de (v) hidrocarburos policíclicos aromáticos en orina. Se ha evaluado la utilización de analizadores de masas de baja y alta resolución (triple cuadrupolo y Orbitrap), así como el uso de precolumnas de distinta naturaleza (C18, HILIC, intercambio catiónico y aniónico). Del resultado del trabajo realizado, se señalan tanto las ventajas como desventajas encontradas, con las soluciones propuestas y se proponen futuras estrategias de trabajo.

#### Financiación

PID2021-127679NB-I00, CTQ2017-87886-P, SA111P20 y SA055P17.

[1] S.C. Nanita, L.G. Kaldon, *Anal. Bioanal. Chem.* 408 (2016) 23-33. [2] M.T. Fernández-del-Campo-García, A.M. Casas-Ferreira, E. Rodríguez-Gonzalo et al. *Microchem J.* 158 (2020) 105223. [3] M.T. Fernández-del-Campo-García, A.M. Casas-Ferreira, E. Rodríguez-Gonzalo et al. *Microchem J.* 172 (2022) 106914. [4] I. González-Mariño, A.M. Casas-Ferreira, M. del Nogal Sánchez et al. *J. Chrom. A* 1690 (2023) 463788. [5] M.T. Fernández-del-Campo-García, A.M. Casas-Ferreira, E. Rodríguez-Gonzalo et al. *Microchem J.* 196 (2024) 109663.



## O58

### El papel actual de la espectrometría de la fluorescencia de Rayos X en el campo de la Química Analítica: avances y nuevas aplicaciones ambientales e industriales

Eva Marguí Grabulosa<sup>1</sup>, Ignacio Queralt Mitjans<sup>2</sup>

1. Universidad de Girona, Girona, España

2. IDAEA-CSIC, Barcelona, España

#### Resumen

En los últimos años, el avance conceptual de la química analítica verde ha avanzado paralelamente con esfuerzos para incorporar nuevas herramientas analíticas de bajo coste para detección o cuantificación de elementos o compuestos químicos. En este sentido, el papel de las técnicas de estado sólido como la espectrometría de fluorescencia de rayos X (XRF), que permiten el análisis no invasivo (o con un mínimo tratamiento de muestra) de muestras sólidas, no debería ser ignorado. Los avances tecnológicos han hecho posible la comercialización de instrumentación XRF de sobremesa y/o portátil que ofrece extrema simplicidad de operación en un diseño de bajo coste. Desafortunadamente, este tipo de sistemas XRF presentan algunas debilidades principalmente relacionadas con la limitada sensibilidad para la determinación de elementos traza y ultratrazo. En este contexto, el uso de métodos de tratamiento de muestra sencillos, efectivos y de vanguardia, así como el desarrollo de estrategias de cuantificación y herramientas quimiométricas, pueden ser herramientas útiles para mejorar y optimizar las prestaciones analíticas de estos sistemas. Aunque la comunidad científica especializada en técnicas XRF está desarrollando y publicando procedimientos, protocolos y métodos valiosos para obtener resultados analíticos fiables, el uso de la XRF en muchos campos aún está limitado debido a una falta de métodos estándar reconocidos y materiales de referencia aptos para tal propósito. Desde 2019 se han financiado diferentes iniciativas a nivel internacional para hacer frente a estos retos [1-2]. En esta comunicación se presenta el uso potencial de métodos basados en XRF para afrontar algunos desafíos analíticos en temática medioambiental e industrial. Se incluirán aspectos como la determinación de impurezas elementales y especies metálicas en extractos de agua industriales, así como el análisis de productos farmacéuticos, microplásticos, material particulado atmosférico, sedimentos, muestras biológicas, entre otros [3-4]. En cada caso se evaluarán las ventajas y limitaciones de la técnica respecto a otras técnicas espectroscópicas de referencia.

**Referencias** [1] COST ACTION CA18130, ENFORCE TXRF, European Network for Chemical Elemental Analysis by Total Reflection X-ray Fluorescence (<https://enforcetxrf.eu/>), 2019-2023. [2] COST INNOVATIVE GRANT IG18130, AIR-CAL, Air particulate reference material for elemental quantification and calibration procedures (<https://enforcetxrf.eu/ig18130/>), 2024-2025. [3] E.Marguí, B.Zawisza, R.Sitko. Trends in Analytical Chemistry 53(2014)73-83. [4] E.Marguí, I.Queralt, E.de Almeida, Chemosphere 303(2022)135006.

**Agradecimientos** El trabajo se enmarca en las tareas del proyecto PID2021-127326OB-I00, financiado por MCIN/AEI/10.13039/501100011033 y del programa COST Innovators Grant (Action IG18130)



## O59

### **Análisis ambiental de lodos de lagos glaciares mediante espectroscopía de descomposición inducida por láser**

Juan Buil García<sup>1</sup>, Marta Portero Hernández<sup>1</sup>, Cristina Alvarez<sup>1</sup>, Javier Del Valle Melendo<sup>2</sup>, Cesar Marina Montes<sup>3</sup>, Jesus Manuel Anzano Lacarte<sup>1</sup>

1. Universidad de Zaragoza, Zaragoza, España

2. Centro universitario de la defensa, Zaragoza, España

3. Universidad de Almería, Almería, España

#### **Resumen**

Los lagos glaciares, conocidos como “ibones” en ciertas regiones de España, representan ecosistemas de inestimable valor, pero lamentablemente, también son extremadamente vulnerables a la contaminación humana<sup>1</sup>. Por lo tanto, deben realizarse periódicamente controles ambientales para conocer y prevenir el impacto humano en estos entornos naturales. El estudio se ha centrado en la caracterización de lodos, pertenecientes a diferentes ibones del Pirineo aragonés, empleando diferentes técnicas: LIBS, ICP-MS, XRD y FESEM-XEDS.

Mediante LIBS se detectaron los elementos mayoritarios: Al, Ca, Fe, K, Mg, Mn, Na y Si y minoritarios: Li y Cu. Estos resultados se refrendaron a través de un análisis por ICP-MS. Además, se exploró la viabilidad del uso de LIBS como una técnica cuantitativa mediante la metodología de “*Calibration-Free*”<sup>2</sup>. Finalmente se obtuvo información sobre las estructuras cristalinas presentes mediante XRD y FESEM-XEDS, determinando que las estructuras más comunes eran el cuarzo y la moscovita.

Finalmente se realizó un estudio estadístico utilizando coeficientes de correlación PCA y Pearson. Este análisis reveló correlaciones y dependencias lineales entre diversos elementos, lo que evidenció posibles similitudes en sus fuentes de origen. Para determinar el grado de influencia antropogénica en los lagos se calculó el Factor de Enriquecimiento.

#### **Referencias**

- (1) Zaharescu, D. G.; Hooda, P. S.; Soler, A. P.; Fernandez, J.; Burghelea, C. I. *Science of the Total Environment* 2009, 407 (11), 3546-3553.
- (2) Lasheras, R. J., Paules, D., Escudero, M., Anzano, J., Legnaioli, S., Pagnotta, S., & Palleschi, V. (2020). *Spectrochimica Acta Part B-Atomic Spectroscopy*, 171. 105918, 1-8.



## O60

### Implementación de regresión multivariada para cuantificación de objetos de vidrio mediante FRX portátil

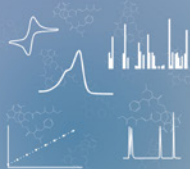
**Diego Ahumada**, Georgios Magkanas, José Francisco Garcia, Javier Saurina

*Departamento de Ingeniería Química y Química Analítica, Universitat de Barcelona, E08028, Barcelona, España*

#### Resumen

El uso generalizado de espectrómetros portátiles de fluorescencia de rayos X (FRX) en campos como la arqueología y la ciencia del patrimonio, se enfrenta a desafíos significativos en los procesos de identificación y cuantificación. Estos desafíos han dado lugar a varios enfoques, que incluyen desde el uso de la técnica solo para identificar, hasta el empleo de los modelos de calibración integrados en los equipos, de alcance limitado, especialmente con muestras complejas. En este contexto, los coeficientes de influencia han surgido como una solución destacada para abordar la complejidad de las muestras, particularmente en arqueología y ciencia del patrimonio. En este enfoque, se construye una calibración empírica que se basa en el análisis de materiales de referencia y en una regresión lineal múltiple compleja que tiene en cuenta los efectos entre elementos consecuencia de la composición de la matriz. Este trabajo presenta los resultados de la implementación de la regresión lineal multivariada utilizando coeficientes de influencia para la cuantificación de elementos en muestras de vidrio. Se empleó un espectrómetro portátil (Elio, XGLAB) con un tubo de rayos X de ánodo de rodio, ventana de berilio de 12.5  $\mu\text{m}$  y detector de deriva de silicio (área activa: 25 mm<sup>2</sup>, resolución energética: 135 eV en la línea  $K\alpha$  de manganeso). Se analizaron más de 30 materiales de referencia, con concentraciones de unos 20 elementos que varían de menos del 0.01 % al 90 %. El pre procesamiento de los espectros se realizó en el software estadístico R, y la selección de variables se llevó a cabo mediante tres diferentes aproximaciones. La validación de los modelos se realizó empleando el método k-fold y muestras de vidrio caracterizadas por espectrometría de masas por plasma acoplado inductivamente (ICP-MS). Los resultados obtenidos mostraron que la selección de las variables mediante un algoritmo genético permitió obtener resultados iguales o similares a los obtenidos mediante el método exhaustivo, con una reducción significativa del costo computacional. Por otro lado, con el método de regresión paso a paso (stepwise regression) solo en un caso se logró un modelo adecuado. Durante el proceso de validación de los modelos, se obtuvo una capacidad predictiva aceptable, evidenciada por bajos RMSE y valores de R<sup>2</sup> entre 0.89 y 0.95. Al aplicar estos modelos en la cuantificación de muestras caracterizadas por ICP, aunque se observaron anomalías en las concentraciones estimadas, se obtuvieron resultados lo suficientemente exactos para aplicarlos en ciencia del patrimonio.





## OP1

### Caracterización de nanopartículas de oro en matrices biológicas por single particle ICP-MS

**Meritxell Cabré Boqué**<sup>1,2</sup>, Gabriel Fernández Rodríguez<sup>1</sup>, Esther González Menéndez<sup>1</sup>,  
Jordi Abellà Iglesias<sup>1</sup>, Ariadna Verdaguer Ferrer<sup>1</sup>  
*1. IQS - Universitat Ramón Llull, Barcelona, España*  
*2. PerkinElmer Scientific Spain, Tres Cantos, España*

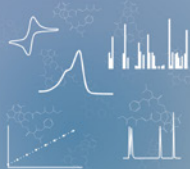
#### Resumen

Los avances tecnológicos están dando lugar a nuevas prácticas en el diagnóstico y tratamiento de enfermedades, conocidas como nanoteragnosis. Mediante el uso de nanopartículas (NPs), se puede llevar a cabo un diagnóstico precoz y menos invasivo, así como una terapia focalizada específicamente a la zona afectada, sin dañar las células circundantes [1]. En los últimos años, se ha desarrollado la técnica Single-Particle ICP-MS (SP-ICP-MS) para caracterizar nanopartículas inorgánicas que se pueden emplear en tratamientos nanoteragnósticos. Esta técnica proporciona datos sobre el tamaño y la concentración de dichas nanopartículas, así como la concentración de elementos disueltos [2]. Esto permite obtener información sobre aspectos como su biodisponibilidad, su transporte dentro del cuerpo, así como su excreción y biotransformación una vez dentro del organismo. En este contexto, es importante disponer de métodos robustos para la caracterización de nanopartículas en este tipo de matrices. Por este motivo, en este estudio se pretende desarrollar un método para caracterizar nanopartículas inorgánicas en fluidos biológicos y tejidos, garantizando la preservación de la integridad de las NPs en todo momento. Con este fin, se ha estudiado la viabilidad de emplear soluciones alcalinas para la caracterización de nanopartículas de oro en matrices biológicas. Se ha optimizado el proceso de digestión alcalina utilizando hidróxido de tetrametilamonio (TMAH) en hígados de pollo dopados con nanopartículas, y se ha investigado el comportamiento de éstas en estas condiciones. Además, se ha llevado a cabo la evaluación de la exactitud y precisión del método, tanto para el tamaño como la concentración de las nanopartículas, obteniéndose resultados satisfactorios. Como parte del estudio, se ha evaluado la biodistribución de las nanopartículas mediante el examen de diversos tejidos de animales de experimentación sometidos a tratamientos nanoteragnósticos.

#### Agradecimientos

Los autores desean expresar su gratitud por el apoyo financiero recibido del Plan de Doctorado Industrial del Departamento de Investigación y Universidades de la Generalitat de Catalunya, 2021\_DI\_109.

**Referencias** (1) X. Y. Wong et. al., ACS Nano (2020), 14, 2585-2627 (2) F. Laborda et. al., Anal Chem (2013), 5, 2270-2278



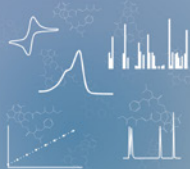
## OP2

### Recent advances in speciation analysis by high-sensitivity SQ-ICP-MS

**Rui Santos**<sup>1</sup>, Rodrigo Galazzi<sup>2</sup>, Sebastian Faßbender<sup>3</sup>, Franz Lehmann<sup>3</sup> and Maximilian Schüssler<sup>3</sup>

<sup>1</sup>*Analytik Jena Porto, Application Lab., University of Porto, Rua do Campo Alegre 687, 4169-007 Porto, Portugal;* <sup>2</sup>*Analytik Jena Brazil, Application Lab., University of Campinas, Avenida Albert Einstein, 901, 13083-852 Campinas, São Paulo, Brazil;* <sup>3</sup>*Analytik Jena GmbH+Co. KG, Konrad-Zuse-Str. 1, 07745 Jena, Germany*

This abstract highlights recent advancements in speciation analysis, focusing on the detection and quantification of elemental species such as As, Cr, and Hg in various sample types including environmental, food, textiles, toys, and clinical matrices. The research utilized a robust analytical approach combining high-performance liquid chromatography (HPLC) with an inductively coupled plasma mass spectrometer (ICP-MS), resulting in accurate and reliable data acquisition. Method development was conducted following ISO standards to ensure the validity and traceability of the results obtained. Validation of the developed methods included analysis of reference materials, further enhancing confidence in the accuracy of the analytical approach employed. This research contributes to expanding our understanding of speciation analysis techniques while adhering to established international standards. The application of these advanced methodologies allows for comprehensive monitoring and assessment of elemental species within diverse sample matrices.



## OP3

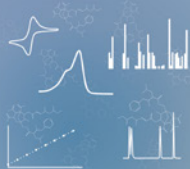
### “No solo de análisis vive el dato”

Esther Albertín

*Instrumentación y Componentes*

En los últimos años ha habido un creciente interés en la aplicación de la inteligencia artificial (IA) en el laboratorio, especialmente en química analítica y bioquímica, lo cual se evidencia evidenciado por el incremento desde 2015 en el número de publicaciones científicas y patentes relacionadas tanto con los flujos de trabajo -análisis y procesado de resultados obtenidos – como para la creación y mejora de dispositivos. [Z.Baum, X.Yu et al. J. Chem. Inf. Model 2021, 61, 7, 3197–3212] La IA está siendo aplicada para dar soporte en métodos de análisis como la resonancia magnética nuclear, la espectroscopía de masas, de rayos X, en microscopía electrónica y en cromatografía. [R.Houhou ,T.Bocklitz Anal Sci Adv. 2021; 2: 128–141]. El preprocesado de los resultados de los análisis (tratamiento de artefactos) está en continua mejora aplicando técnicas de machine learning y deep learning bien a series de datos, como a las imágenes. Por ejemplo, redes neuronales (CNNs) se están utilizando para clasificar e interpretar datos de espectroscopía [J. Workman, H.Mark Spectroscopy ,2023 ,38 -6: 10–15]. No solo hay nuevas aplicaciones sobre los datos y en laboratorio, también en dispositivos de campo, analizadores portables, y en la automatización de los procesos de laboratorio.

Para aprovechar el gran potencial que los métodos de machine learning tienen en el campo de la química analítica es necesario superar algunos retos, como los relacionados con el sesgo o la gran intensidad de datos necesarios (los modelos de IA pueden requerir gran cantidad de datos experimentales para ser entrenados, lo que consume mucho tiempo relacionado con la obtención de datos experimentales). [N. Artrith, K.T Butler, FX. Coudert, et al. 2021. Nat. Chem.13 , 505–508] Es preciso que se desarrollen las capacidades y la colaboración entre expertos en las disciplinas relacionadas (ciencia de datos, química, ingeniería, desarrolladores e implementadores de software...) para asegurar el éxito e implantación de proyectos y productos en los que la IA realmente sea útil y aplicable en el campo de la química analítica, trabajando hacia la operacionalización de la inteligencia artificial en aspectos tan críticos, más allá del rendimiento de los modelos, como la calidad y gestión de los datos, la automatización en la obtención de datos, la privacidad, la repetibilidad y generalización de los modelos de IA, entre otros.



## COMUNICACIONES POSTER REUNIÓN SEQA

P001

### Caracterización, clasificación y autenticación de productos cárnicos mediante huellas HPLC-UV y quimiometría

Nil Aijon<sup>1</sup>, Oscar Núñez<sup>1,2,3</sup>

*1. Departamento de Ingeniería Química y Química Analítica, Universitat de Barcelona, Barcelona, España*

*2. Instituto de Investigación en Nutrición y Seguridad Alimentaria de la Universitat de Barcelona (INSA-UB), Santa Coloma de Gramenet, España*

*3. Serra Hünter Fellow, Departament de Recerca i Universitats, Generalitat de Catalunya, Barcelona, España*

#### Resumen

Entre los factores que utiliza la sociedad a la hora de seleccionar un alimento, además de las propiedades organolépticas, se consideran su seguridad y si cumple o no su finalidad nutricional. Pero cada vez se empiezan a considerar más aspectos relacionados con su autenticidad, ante posibles adulteraciones y fraudes, como su origen (indicación geográfica), prácticas de producción (orgánica o ecológica), o aspectos éticos y religiosos (bienestar animal, alimentos Halal y Kosher). Aunque el análisis genético puede resolver aspectos de autenticación en productos cárnicos si se trata de diferenciar entre especies animales, los factores comentados anteriormente no pueden resolverse genéticamente. En este sentido, la metabolómica surge como una estrategia que podría solucionar estos casos de fraude alimentario, ya que se centra en el análisis de los metabolitos (primarios o secundarios) presentes en los alimentos, y estos no dependerán únicamente de la especie animal (Genotipo) sino también de todos los factores externos (Fenotipo), como estrés, alimentación, zona de producción, etc., que han afectado al animal hasta llegar al producto alimenticio final que se consume. En ese trabajo se ha evaluado la capacidad de un método metabolómico no-dirigido de HPLC-UV para la clasificación y autenticación de productos cárnicos. Se analizaron 200 muestras de carne incluyendo carnes blancas (pollo, pavo, pato y codorniz) y rojas (ternera, cordero, cerdo y conejo). Además, en el caso de las muestras de cordero se analizaron de dos orígenes geográficos diferentes (Cataluña y Aragón), y en las de pollo de dos sistemas de producción diferentes (ecológica y convencional). Se llevó a cabo una extracción simple de los metabolitos (ultrasonidos con agua), y los extractos se analizaron con el método no-dirigido HPLC-UV propuesto, utilizando las huellas cromatográficas como descriptores químicos para el análisis quimiométrico mediante PLS-DA. La capacidad de la metodología propuesta para clasificar y autenticar las 8 tipologías de carne mediante PLS-DA fue excelente, con valores de sensibilidad y especificidad superiores al 95.0% y al 95.7%, respectivamente, y errores de clasificación inferiores, en la mayoría de casos, al 0.4% (2% tan solo en las muestras de codorniz). La clasificación mediante PLS-DA fue perfecta (ratios de clasificación del 100%) al considerar muestras de carne blancas o rojas, independientemente. El método resultó ser también excelente en la autenticación del origen geográfico de las muestras de cordero y del sistema de producción (ecológico vs. convencional) en las muestras de pollo, con errores PLS-DA de clasificación inferiores al 2.3% y del 0%, respectivamente.



## P002

### ¿Puede la impresión 3D proporcionar nuevos sistemas agitadores para mejorar la extracción en fase sólida dispersiva?

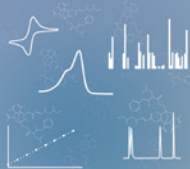
**Clara Ochoa Estesó**, Alba Roselló Carrió, María Jesús Lerma García,  
Enrique Javier Carrasco Correa

*Grupo CLECEM, Dpto Química Analítica, Universitat de València, Burjassot-València, España*

#### Resumen

La extracción en fase sólida dispersiva (dSPE) se ha establecido como una herramienta importante en Química Analítica debido a su simplicidad, eficacia y bajo coste. El proceso es muy sencillo: para la carga se dispersa una cantidad conocida de material poroso (MP) en una muestra líquida y se agita magnéticamente; después se realizan las etapas de lavado y elución, siendo necesario centrifugar entre etapas para separar el sobrenadante del MP. Por lo tanto, la optimización para mejorar las condiciones de extracción es de vital importancia. Dicha optimización se centra en parámetros como el tiempo y velocidad de agitación, temperatura, cantidad y tipo de MP, etc. Sin embargo, pocos estudios se centran en optimizar el diseño del agitador, ya que este puede afectar a la dispersión del MP, así como al contacto de este con los analitos. Por lo tanto, la forma del mismo debería de incluirse como un parámetro más a optimizar. Sin embargo, la variedad de agitadores comerciales está limitada, por lo que el uso de la impresión 3D para crear nuevos diseños de agitadores puede ser una alternativa interesante para mejorar las prestaciones de la dSPE. En este trabajo, se ha realizado un análisis comparativo de diferentes tipos de agitadores para evaluar su efecto en la capacidad de carga de un MP. Para ello, se ha evaluado la retención mediante dSPE de antiinflamatorios usando una red metal orgánica (MOF) como MP con varios agitadores comerciales. Los resultados se han relacionado con parámetros extraídos de cálculos de dinámica de fluidos (e.g. energía cinética turbulenta o su dispersión, entre otros). Los modelos encontrados se han usado para predecir el comportamiento de nuevos agitadores diseñados mediante impresión 3D, y los que han mostrado mejores resultados en las simulaciones se han evaluado experimentalmente. Los resultados demuestran que el agitador es un factor importante y que la impresión 3D, gracias a la capacidad de crear geometrías complejas y adaptadas, ofrece un valor añadido a la dSPE.

**Agradecimientos:** Agencia Española de Investigación (AEI/10.13039/501100011033) del Ministerio de Ciencia e Innovación (MICINN) por el proyecto PID2021-125459OB-I00 y a la Generalitat Valenciana (GV) por los proyectos CIAICO/2022/183, INVEST/2022/117, INVEST/2022/425 e INNEST/2022/299. Red Nacional para la Innovación en las Técnicas de Tratamiento de Muestras Miniaturizadas (RED2022-134079-T) concedida por el MICINN. Este estudio forma parte del programa de Materiales Avanzados y recibió apoyo del MICINN con financiamiento de la Unión Europea Next Generation EU (PRTR-C17.11) y de la GV.



## P003

### **Nuevo sistema de extracción basado en disco rotativo impreso en 3D para el análisis de herbicidas**

**Paula Molina Brotons**, Roser Payà Pou, Ernesto Francisco Simó Alfonso,  
Enrique Javier Carrasco Correa

*Grupo CLECEM, Dpto. Química Analítica, Universitat de València, Burjassot, Valencia, España*

#### **Resumen**

Uno de los principales motivos de contaminación en el medioambiente es el empleo de pesticidas y herbicidas. En concreto, son preocupantes aquellos que tienen prohibido su uso pero que se permite en caso de situaciones de emergencia. Dentro de estos se encuentra la familia de los viológenos, que son básicamente aminas cuaternarias. En concreto, los más empleados son el paraquat, diquat y etilviológeno que son herbicidas empleados en el control de malezas, mientras que el mepiquat actúa retrasando el crecimiento vegetal, inhibe la germinación en cultivos de algodón, trigo y arroz. Pese a su uso, la mayor preocupación reside en su elevada toxicidad para algas, peces y otros organismos acuáticos, además de presentar efectos nocivos agudos en los seres humanos tras su exposición crónica. Esto es debido a la capacidad de formar radicales libres que pueden causar estrés oxidativo pudiendo afectar a como se almacena y libera el hierro en el organismo. Por ello es necesario desarrollar métodos sencillos para analizar estos compuestos tanto en el medioambiente como en alimentos. Sin embargo, uno de los problemas asociado al análisis de estos herbicidas es que suelen encontrarse en el medioambiente en bajas concentraciones, por lo que es necesario desarrollar sistemas de extracción que permitan altos factores de preconcentración. En este trabajo, se propone la fabricación de un nuevo disco rotativo impreso en 3D con cadenas retráctiles modificadas covalentemente con una red metal orgánica (MOF) como sistema de extracción en fase sólida. Esta geometría innovadora está diseñada de manera que posee una superficie de absorción elevada y puede trabajar con grandes volúmenes de carga y altos factores de preconcentración. Además, elimina pasos tediosos como centrifugar y evaporar. El MOF, a base de zirconio, permite extraer los analitos mediante interacciones electrostáticas para su posterior análisis por cromatografía de líquidos acoplado a detectores UV y evaporativo de luz dispersada. Finalmente, el método de extracción optimizado se aplicó al análisis de muestras medioambientales y alimentarias.

#### **Agradecimientos**

Agencia Española de Investigación (AEI/10.13039/501100011033) del Ministerio de Ciencia e Innovación (MICINN) por el proyecto PID2021-125459OB-I00 y a la Generalitat Valenciana (GV) por los proyectos CIAICO/2022/183, INVEST/2022/117, INVEST/2022/425 e INNEST/2022/299. Red Nacional para la Innovación en las Técnicas de Tratamiento de Muestras Miniaturizadas (RED2022-134079-T) concedida por el MICINN. Este estudio forma parte del programa de Materiales Avanzados y recibió apoyo del MICINN con financiamiento de la Unión Europea Next Generation EU (PRTR-C17.11) y de la GV.



## P004

### Purificación de extractos de hoja de olivo mediante resinas poliméricas para la recuperación de polifenoles

**Aina Mir Cerdà**<sup>1,2</sup>, Mercè Granados<sup>1,2</sup>, Javier Saurina<sup>1,2</sup>, Sonia Sentellas<sup>1,2,3</sup>

*1. Departamento de Ingeniería Química y Química Analítica, Universitat de Barcelona, Barcelona, España*

*2. Instituto de Investigación en Nutrición y Seguridad Alimentaria, Barcelona, España*

*3. Programa Serra Húnter, Generalitat de Catalunya, Barcelona, España*

#### Resumen

La industria alimentaria genera una cantidad considerable de residuos sólidos y líquidos durante los procesos de producción de alimentos. En el caso concreto de las frutas y hortalizas, los residuos consisten principalmente en pieles, semillas, hojas y tallos, y en ellos se concentra una cantidad importante de compuestos bioactivos, como los polifenoles. Este estudio se ha centrado en la extracción de polifenoles a partir de hojas de olivo, uno de los residuos que se generan en gran volumen durante la producción de aceite de oliva. Los Natural Deep Eutectic Solvents (NaDES), reconocidos como disolventes verdes, han demostrado extraer muy eficazmente compuestos fenólicos de las hojas de olivo y son una buena alternativa a los disolventes orgánicos convencionales. No obstante, los extractos obtenidos deben purificarse antes de utilizarse en sectores como el farmacéutico, alimentario o cosmético, pero hasta el momento existe muy poca información sobre purificación de extractos NaDES. En este trabajo se ha investigado la purificación de estos extractos mediante las resinas PuroSorb PAD900 y Macronet MN202, ambas de poliestireno-divinilbenceno pero con distinta porosidad. Para evaluar el comportamiento de estos sorbentes frente a extractos de NaDES (cloruro de colina:glicerol, 1:5, 30% agua), se ha seguido el proceso de sorción y desorción mediante cromatografía de líquidos con detección ultravioleta-visible o espectrometría de masas en tándem, además de determinar la capacidad antioxidante mediante el ensayo FRAP (Ferric Reducing Antioxidant Power). A partir de los resultados obtenidos, puede concluirse que globalmente la resina PuroSorb PAD900 es más eficaz para la preconcentración de polifenoles, mientras que la resina Macronet MN202 ofrece mejores prestaciones para la recuperación de compuestos polares de menor tamaño, como el 3-hidroxitirosol. El proceso permite reducir el contenido de azúcares y obtener un preconcentrado de polifenoles libre de NaDES.



## P005

### **Determinación de hormonas en aguas mediante dispositivos 3d modificados con redes metal-orgánicas**

**Miguel Ángel Martínez Briones**, María Vergara Barberán, María Jesús Lerma García,  
José Manuel Herrero Martínez

*Grupo CLECEM, Dpto. Química Analítica, Universitat de València, Burjassot, Valencia, España*

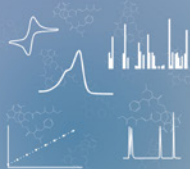
#### **Resumen**

En los últimos años, se ha observado un incremento notable de contaminantes hormonales en aguas medioambientales, lo que representa una amenaza para los seres vivos y el ecosistema. Por ello, es necesario el desarrollo de métodos analíticos eficaces, de bajo coste y sostenibles que permitan la determinación de estos analitos. Habitualmente, estos métodos suelen incluir una etapa de tratamiento de muestra con el fin de extraer y preconcentrar dichas especies facilitando su posterior determinación. En este sentido, las redes metal-orgánicas (MOFs) han sido empleadas como sorbentes porosos en el área del tratamiento de muestra, debido a sus prometedoras propiedades como su gran área superficial, tamaño de poro y funcionalidad sintonizable, etc. Sin embargo, el uso de estos materiales en forma de polvo en la modalidad de extracción en fase sólida dispersiva (dSPE), junto con su rigidez y capacidad de moldeado, conlleva ciertas limitaciones en cuanto a sus aplicaciones prácticas. En los últimos años, la impresión 3D ha atraído considerable atención en varios campos debido a sus ventajas, como el fácil manejo, su capacidad para fabricar formas complejas y diseños personalizados a bajo coste. En concreto, el modelado por deposición fundida (FDM) es una de las técnicas de impresión más utilizadas debido a su alta versatilidad (amplia gama de materiales termoplásticos), bajo coste y rapidez. En este trabajo se propone el desarrollo de un dispositivo 3D modificado con MOFs para la extracción de estrógenos (estrón, estradiol, etinilestradiol y estriol) presentes en aguas medioambientales. Para ello, se realizó estudio preliminar, en dSPE, con el fin de seleccionar el MOF que proporcionaba los mejores resultados de retención. A continuación, se investigó la incorporación (generación in situ) de dicho material sobre la superficie externa de las piezas impresas, así como se procedió a su caracterización. Seguidamente, se optimizaron las variables de extracción, así como los parámetros analíticos del método. El procedimiento propuesto se aplicó a la determinación de los diferentes estrógenos en aguas medioambientales.

#### **Agradecimientos**

Agencia Española de Investigación (AEI/10.13039/501100011033) del Ministerio de Ciencia e Innovación (MICINN) por el proyecto PID2021-125459OB-I00 y a la Generalitat Valenciana (GV) por los proyectos CIAICO/2022/183 y CIGE/2023/69. Red Nacional para la Innovación en las Técnicas de Tratamiento de Muestras Miniaturizadas (RED2022-134079-T) concedida por el MICINN. Este estudio forma parte del programa de Materiales Avanzados y recibió apoyo del MICINN con financiamiento de la Unión Europea Next Generation EU (PRTR-C17.I1) y de la GV.





## P006

### Determinación Voltamperométrica de Eugenol, Cinamaldehído y Cumarina para la discriminación de especies de canela

Núria Serrano Plana, Marta Gómez Berlanga, Marc Roca Aracil, Clara Pérez Ràfols,  
José Manuel Díaz Cruz  
*Universitat de Barcelona, Barcelona, España*

#### Resumen

La canela es una conocida especia culinaria que se usa como aromatizante tanto en platos dulces como salados. Existen distintas variedades de canela, siendo la canela de Ceilán (*Cinnamomum zeylanicum*, también conocida como “canela verdadera”) y la canela casia (*Cinnamomum aromaticum*) las más conocidas. Desde el punto de vista de la salud es preferible el consumo de canela de Ceilán ya que es rica en compuestos fenólicos y aromáticos como el eugenol y el cinamaldehído y no contiene cumarina, un compuesto con efectos hepatotóxicos que sí que está presente en la canela casia. Aunque el uso de la cromatografía de líquidos está muy extendido en el análisis de alimentos, las técnicas voltamperométricas se postulan como más baratas, rápidas, sencillas y de menor coste debido a su buena sensibilidad y selectividad. Cuando las técnicas voltamperométricas se combinan con electrodos serigrafiados (SPE), se vuelven especialmente adecuadas para el análisis, gracias a las características intrínsecas de estos dispositivos: la configuración de tres electrodos impresos en la misma tira, y su carácter económico, reproducible y desechable. En este sentido, en este trabajo se estudia la respuesta voltamperométrica de tres compuestos característicos de la canela: cinamaldehído (compuesto mayoritario en las distintas especies de canela), eugenol (compuesto característico de la canela de Ceilán) y cumarina (compuesto presente en la canela casia). Este método utiliza la voltamperometría diferencial de impulsos (DPV) con un electrodo serigrafiado de carbono (SPCE) y se basa en una oxidación previa de todos los compuestos a 1 V seguida de un barrido hacia potenciales de reducción. La optimización del método reveló el pH como un parámetro crítico para evitar solapamientos y aumentar la sensibilidad. Adicionalmente, se evaluó la capacidad del óxido de grafeno reducido (rGO) para mejorar la respuesta voltamperométrica de estos compuestos mediante la modificación de los SPCE.

#### Agradecimientos

Este trabajo cuenta con el apoyo económico del proyecto PID2019-107102RB-C22 financiado por MCIN/AEI/10.13039/501100011033, y PID2022-136709OB-C22 financiados por AEI/10.13039/501100011033/Unión Europea NextGenerationEU/PRTR.



## P007

### Discriminación de hierbas relajantes mediante una lengua electrónica voltamperométrica

Núria Serrano Plana<sup>1</sup>, Qing Wang<sup>2</sup>, Clara Pérez Ràfols<sup>1</sup>, Manel Del Valle Zafra<sup>2</sup>,  
José Manuel Díaz Cruz<sup>1</sup>

*1. Universitat de Barcelona, Barcelona, España*

*2. Universitat Autònoma de Barcelona, Barcelona, España*

#### Resumen

El uso de productos ansiolíticos se ha potenciado debido a la necesidad de calmar el estrés i la ansiedad asociados a la vida moderna. En particular, los productos ansiolíticos a base de hierbas se usan como alternativa a los medicamentos por su fácil administración, su eficacia y sus mínimos efectos adversos. Además, se pueden obtener fácilmente en farmacias, herboristerías e incluso supermercados; por ejemplo, en forma de bolsitas de té y/u otros productos para el cuidado de la salud elaborados a base de hierbas. Sin embargo, estos productos también pueden presentar algunos problemas, como, por ejemplo, la baja calidad de la materia prima, la adulteración, la falsificación y el bajo contenido de componentes activos. Así pues, es necesario desarrollar métodos para la identificación y control de calidad de estos productos. En este sentido, la técnica de la lengua electrónica combinada con la voltamperometría cíclica puede ser una buena estrategia para su evaluación. En este trabajo, se utilizó una lengua electrónica constituida por tres sensores que se prepararon a partir de electrodos de grafito-epóxido modificados. Los dos primeros sensores se construyeron incorporando nanopartículas de aleación de Ni-Cu y nanopartículas de TiO<sub>2</sub>, respectivamente. La lengua electrónica se completó con un electrodo de grafito-epóxido sin modificar. Para este estudio, se consideró un conjunto de productos relajantes formado por 35 muestras de manzanilla, valeriana, pasiflora y lavanda, con productos herbales en diferentes presentaciones (bolsitas de té, planta seca, pastilla, cápsula y líquidos extraídos). Para cada muestra se preparó una infusión en KCl 0,1 M y se registró el voltamperograma cíclico con los tres sensores simultáneamente. Las respuestas obtenidas fueron procesadas mediante análisis de componentes principales (PCA) para su identificación y clasificación. Se aplicaron distintos algoritmos de aprendizaje automático y se demostró que los algoritmos de k vecinos más cercanos (k-NN) y máquinas de vectores de soporte (SVM) podían identificar y discriminar estas cuatro variedades de hierbas, tanto en productos medicinales fabricados a base de una sola hierba como de multi-hierbas. Los resultados indicaron la utilidad potencial de la estrategia de la lengua electrónica voltamperométrica como aplicación para la evaluación y control de calidad de estos productos.

#### Agradecimientos

Este trabajo cuenta con el apoyo económico de los proyectos PID2019-107102RB-C21 y PID2019-107102RB-C22 financiados por MCIN/AEI/10.13039/501100011033, y PID2022-136709OB-C21 y PID2022-136709OB-C22 financiados por AEI/10.13039/501100011033/Unión Europea NextGenerationEU/PRTR.



## P008

### Fusión de datos cromatográficos y espectroscópicos para la autenticación de hierbas relajantes

Clara Pérez-Ràfols, Núria Serrano, José Manuel Díaz-Cruz

*Universitat de Barcelona, Barcelona, España*

#### Resumen

Las hierbas medicinales son hierbas puras, preparaciones a base de hierbas o productos derivados de hierbas que contienen como ingredientes activos partes de plantas, como flores, raíces u hojas. Aunque las hierbas medicinales se utilizan como remedios naturales y no se consideran estrictamente medicamentos, esto no garantiza que siempre sean seguras y beneficiosas para la salud. Además, la existencia de múltiples preparaciones para el mismo tipo de hierba (p. ej., tableta, infusión, gota) aumenta la dificultad en su control de calidad, facilitando así la posibilidad de fraudes y manipulación. Este hecho, junto con el constante aumento del uso de hierbas medicinales en todo el mundo, hace que la caracterización, identificación y autenticación de hierbas medicinales sea un tema de gran preocupación tanto desde el punto de vista de la seguridad como del control de calidad. En este trabajo, se propone un enfoque de fusión de datos que combina perfiles cromatográficos y espectroscópicos para la discriminación y clasificación de hierbas relajantes (manzanilla, lavanda, pasiflora y valeriana) en diferentes tipos de preparaciones herbarias. El enfoque de fusión de datos propuesto reveló una mayor capacidad de agrupación que cada técnica analítica por separado, lo que se evaluó mediante un análisis exploratorio basado en el Análisis de Componentes Principales (PCA) acoplado al análisis de Silhouette: el porcentaje de muestras con un ancho de Silhouette negativo fue 19, 15 y 10 para cromatografía, espectroscopia y fusión de datos, respectivamente. Además, un modelo de Análisis Discriminante por Mínimos Cuadrados Parciales (PLS-DA) desarrollado a partir de la fusión de datos fue capaz de discriminar perfectamente muestras de manzanilla, pasiflora y valeriana en un conjunto de 20 muestras, superando las dificultades relacionadas con el tratamiento de diferentes tipos de preparaciones a base de hierbas que incluyen hierbas puras, infusiones, tabletas, cápsulas y gotas de hierbas.

#### Agradecimientos

Este trabajo cuenta con el apoyo económico del proyecto PID2019-107102RB-C22 financiado por MCIN/AEI/10.13039/501100011033.



## P009

### Extracción con líquidos presurizados y determinación GC/MS de contaminantes modelo en HDPE: aplicación al reciclaje de poliolefinas posconsumo utilizando limoneno

Javier Blázquez Martín<sup>1,2</sup>, Jorge García Barrasa<sup>2</sup>, **María Teresa Tena**<sup>1</sup>

*1. Universidad de La Rioja, Logroño, España*

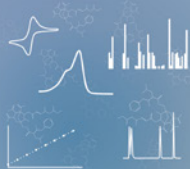
*2. Centro Nacional de Tecnologías del Envase, Logroño, España*

#### Resumen

Se ha desarrollado un método de extracción con líquidos presurizados y cromatografía de gases-espectrometría de masas (PLE-GC/MS) para la cuantificación de siete contaminantes modelo en polietileno de alta densidad (HDPE) reciclado y posconsumo. Se seleccionaron cloroformo, tolueno, clorobenceno, salicilato de metilo, fenilciclohexano, benzofenona y estearato de metilo como contaminantes modelo de acuerdo con las recomendaciones de la Autoridad Europea de Seguridad Alimentaria (EFSA) y la Administración de Alimentos y Medicamentos (FDA). El método GC/MS presenta límites de detección (LOD) inferiores a 0,5 µg L<sup>-1</sup> para todos los contaminantes excepto tolueno y estearato de metilo (18 µg L<sup>-1</sup> y 0,31 mg L<sup>-1</sup> respectivamente). La repetibilidad y la precisión intermedia se ha estudiado a dos niveles de concentración, encontrándose en casi todos los casos desviaciones estándar relativas inferiores al 10 % y 17 %, respectivamente. La temperatura y el tiempo de la etapa PLE se optimizaron mediante un diseño compuesto central (CCD). Las condiciones seleccionadas fueron tres ciclos de extracción con acetona a 100 °C durante 6 minutos a 1500 psi. Se establecieron exactitud, repetibilidad y precisión intermedia para todo el método PLE-GC/MS. Los valores de recuperación fueron cercanos al 100 % para la mayoría de los analitos. La repetibilidad y la precisión intermedia fueron buenas para la mayoría de los contaminantes del modelo, con valores de RSD inferiores al 11 y 17 %, respectivamente. El método PLE-GC/MS se ha aplicado para evaluar, mediante una prueba de desafío (challenge test), un nuevo método de reciclaje de HDPE basado en la disolución y precipitación del polímero utilizando limoneno. Se demostró que el método de reciclaje tiene altas eficiencias de limpieza, lo que demuestra su potencial en el reciclaje de HDPE, así como la utilidad del método PLE-GC/MS para llevar a cabo evaluaciones mediante pruebas de desafío.

#### Agradecimientos

Este trabajo ha sido financiado por la Universidad de La Rioja (Ayuda Grupos de Investigación REGI 22/64) y el Gobierno de La Rioja (Ayudas para la realización del doctorado industrial en el sector del envase y embalaje). J.B.-M. agradece a la Universidad de La Rioja, al Gobierno de La Rioja y al Centro Nacional de Tecnologías del Envase su beca predoctoral.



## P010

### Green determination of regulated PAHs in edible oils

**Lourdes Ramos**, Pamela Silva-Vieira, Belén Gómara

*Dpt. Instrumental Analysis and Environmental Chemistry, IQOG-CSIC, Madrid, España*

#### Resumen

In recent years, there has been an increasing interest in greening the chemical processes. Within this frame, the green sample preparation (GSP) principles were introduced to set specific guidelines to implement eco-friendly and eco-sustainable sample treatment approaches in the analytical laboratories [1]. These principles focus on different aspects of the sample preparation and analyte determination. Among other aspects, they highlight the relevance of using, whenever possible, safe solvents as alternative to conventional toxic and volatile organic solvents (VOSs) of fossil origin. In this context, green and tunable solvents, such as deep eutectic solvents (DESs), become a valuable alternative to VOSs [2] that deserves evaluation. In this study, a sample preparation method based on the use of DESs was developed for routine determination of legislated polycyclic aromatic hydrocarbons (PAHs) in vegetable oils intended for human consumption. Once optimised, the methodology allowed the quantitative recovery (84-101%) of the target analytes at the two evaluated levels, corresponding to the maximum residue levels (MRLs) set in the legislation [3] and half-MRLs. The precision of the method was satisfactory (below 6%, expressed as relative standard deviation, RSD) in all instances and using only 0.50 g of oil for the analysis. The methodological limits of detection (mLOD) were in the 0.03-0.14 µg/kg of oil range, as calculated for real samples and using gas chromatography coupled to mass spectrometry (GC-MS) in the selected ion monitoring (SIM) mode for instrumental determination. These analytical figures of merit demonstrate the applicability of the proposed methodology for accurate determination of the target compounds at levels far below the MRLs. Finally, the developed method was applied to the evaluation of the regulated PAHs in oil samples acquired in supermarkets from Madrid, including extra virgin olive, orujo, sunflower and smoked olive oils.

#### Acknowledgments

This work is part of the I+D+i project PID2019-106405GB-I00 financed by MCIN/AEI/10.13039/501100011033. Authors thank the Comunidad of Madrid and European funding from FSE and FEDER programs for financial support (project S2018/BAA-4393, AVANSECAL-II-CM).

#### References

[1] A. López-Lorente, F. Pena-Pereira, S. Pedersen-Bjergaard, et al. *TrAC-Trends Anal Chem* 148 (2022) 116530. [2] J. Bintanel-Cenis, M.A. Fernández, B. Gómara, L. Ramos. *Talanta* 270 (2024) 125599. [3] REGLAMENTO (UE) N° 835/2011 de 19 de agosto 2011 que modifica el Reglamento (CE) N° 1881/2006 por lo que respecta al contenido máximo de hidrocarburos aromáticos policíclicos en los productos alimenticios.

Diario oficial UE. [http://ec.europa.eu/food/fs/sc/scf/out153\\_en.pdf](http://ec.europa.eu/food/fs/sc/scf/out153_en.pdf)



## P011

### **Sistema de extracción en fase sólida basados en disco rotativo fabricados mediante impresión 3D con materiales sostenibles y modificados con redes metal-orgánicas**

Alejandro Gil Aparicio<sup>1</sup>, Jana Maren Glatz<sup>2</sup>, Enrique Javier Carrasco Correa<sup>1</sup>, Mónica Giménez Marqués<sup>2</sup>, José Manuel Herrero Martínez<sup>1</sup>

1. Grupo CLECEM, Dpto. Química Analítica, Universitat de València, Burjassot, Valencia, España

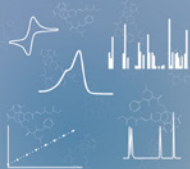
2. Instituto de Ciencia Molecular, Universitat de València, Paterna, Valencia, España

#### **Resumen**

Las sulfonamidas (SAs) son antibióticos ampliamente utilizados en medicina y agricultura. Sin embargo, su metabolismo incompleto conduce a la contaminación ambiental, lo que suscita preocupaciones sobre la proliferación de bacterias que generen resistencia a antibióticos, así como los riesgos para la salud que esto puede ocasionar. Por lo tanto, existe una necesidad apremiante de establecer enfoques eficientes para detectar y cuantificar estos contaminantes en aguas ambientales. En los últimos años, el desarrollo de materiales porosos en el ámbito de tratamiento de muestra ha aumentado considerablemente, especialmente las redes metal-orgánicas (MOFs) debido a sus características: gran área de superficie específica, alta porosidad y funcionalidad ajustable, entre otras. Sin embargo, a pesar de su eficacia en la extracción de contaminantes, su rigidez y su uso extendido en forma de polvo, en modalidad dispersiva, representa un desafío en términos prácticos, especialmente en la recuperación, la cual es laboriosa y a menudo incompleta. En este sentido, la impresión 3D, la cual ha ganado relevancia en varios sectores debido a su accesibilidad, facilidad de diseño y bajo coste, está proporcionando nuevas vías para solventar estas desventajas mediante la construcción de dispositivos específicos que permitan darle al MOF las características de las que carece. Sin embargo, el aspecto de sostenibilidad, que abarca tanto la síntesis de MOF como los materiales de impresión 3D, a menudo queda en un segundo plano. En esta investigación, se plantea la posibilidad de fabricar, usando filamentos basados en materiales sostenibles mediante modelado por deposición fundida (FDM), nuevos diseños de disco rotativo con partes intercambiables mediante uniones tipo "Lego". Estos sistemas fabricados se han empleado como estructuras para hacer crecer MOFs sintetizados con técnicas que cumplen los principios de la Química Analítica Verde y que puedan extraer de manera cuantitativa sulfonamidas en aguas medioambientales.

#### **Agradecimientos**

Agencia Española de Investigación (AEI/10.13039/501100011033) del Ministerio de Ciencia e Innovación (MICINN) por el proyecto PID2021-125459OB-I00 y a la Generalitat Valenciana (GV) por los proyectos CIAICO/2022/183, INVEST/2022/117, INVEST/2022/425 e INNEST/2022/299. Red Nacional para la Innovación en las Técnicas de Tratamiento de Muestras Miniaturizadas (RED2022-134079-T) concedida por el MICINN. Este estudio forma parte del programa de Materiales Avanzados y recibió apoyo del MICINN con financiamiento de la Unión Europea Next Generation EU (PRTR-C17.I1) y de la GV.



## P012

### **Bioimágenes cuantitativas de la distribución de proteínas en células individuales mediante ablación láser acoplada a ICP-MS: Nanopartículas metálicas y rojo de Rutenio como marcadores**

Rosario Pereiro<sup>1</sup>, Paula Menero-Valdés<sup>1</sup>, Lydia Álvarez<sup>2</sup>, Héctor González Iglesias<sup>3</sup>, Beatriz Fernández<sup>1</sup>

*1. Universidad de Oviedo, Oviedo, España*

*2. Fundación de Investigación Oftalmológica (FIO), Oviedo, España*

*3. Instituto de Productos Lácteos de Asturias (IPLA-CSIC), Villaviciosa, Asturias, España*

#### **Resumen**

La integración de la ablación láser (LA) con ICP-MS permite la adquisición de imágenes composicionales no solo de tejidos biológicos, sino también de células individuales. Si bien los elementos endógenos pueden medirse directamente mediante LA-ICP-MS, el análisis de biomoléculas requiere de etiquetas detectables. Actualmente, dos desafíos principales dificultan la determinación de biomoléculas diana dentro de células individuales: la alta sensibilidad requerida y la carencia de un método óptimo para el análisis cuantitativo. En cuanto a la sensibilidad, los nanoclústeres metálicos (MNCs) han surgido como etiquetas muy prometedoras para la determinación de proteínas gracias a su pequeño tamaño (por debajo de 3 nm) que evita el bloqueo de la unidad de reconocimiento, y a la alta amplificación que proporcionan. Por otro lado, si bien se han propuesto estrategias de cuantificación [1, 2], todavía se requiere un método que permita determinar directamente el volumen celular mediante LA-ICP-MS y, por tanto, obtener la bioimagen de la concentración de analito en las células más allá de la masa. En esta comunicación se presenta una estrategia innovadora para conocer la distribución y concentración de proteínas específicas dentro de células individuales utilizando LA-ICP-MS. Para ello, se empleó un anticuerpo específico marcado con AuNCs (compuesto por varios cientos de átomos de Au), para marcar la proteína diana, mientras que el rojo de rutenio (RR) se utilizó para marcar la membrana celular. Como prueba de concepto, se estudió la proteína CYP1B1 en células humanas ARPE-19 derivadas del epitelio pigmentario de la retina bajo estrés prooxidativo inducido por tratamiento con AAPH. Al combinar una inmunosonda marcada con metal (anticuerpo: AuNCs) con el marcaje RR, es posible analizar simultáneamente una proteína específica y el volumen celular en cada célula. En consecuencia, se obtienen imágenes cuantitativas de proteínas específicas dentro de células individuales.

[1] H. Pan, L. Feng, Y. Lu, Y. Han, J. Xiong, H. Li, Trends Anal. Chem. 156 (2022) 116710 [2] A. Lores-Padín, B. Fernández, M. García, et al, Anal. Chim. Acta, 1221 (2022) 340128

**Agradecimientos:** Proyecto coordinado PID2022-137319OB (-C21 y -C22) de MCIN/AEI/10.13039/501100011033, y beca FPU con Ref. FPU19/00556.



## P013

### **Nanoagitación magnética para una transferencia de materia mejorada en medidas espectroelectroquímicas de reflexión**

José Manuel Díaz Cruz<sup>1</sup>, Lluís Otero<sup>1</sup>, Nurhayat Ozbek<sup>2</sup>, Federico Garcia Kelland<sup>1</sup>, Julio Bastos Arrieta<sup>1</sup>, Núria Serrano<sup>1</sup>

1. *Universitat de Barcelona, Barcelona, España*

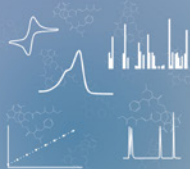
2. *Karadeniz Teknik Üniversitesi, Trabzon, Turquía*

#### **Resumen**

Las medidas espectroelectroquímicas (SEC) en la región del UV-vis analizan los cambios que se producen en el espectro de absorción de una muestra líquida cuando un proceso electroquímico consume o genera una especie absorbente en el electrodo de trabajo. En modo de reflexión normal, estas medidas son menos sensibles que las obtenidas en configuración paralela. Esto es debido a que el volumen de muestra monitorizado contiene una proporción mucho menor de la capa de difusión creada por los procesos electroquímicos, es decir, la región donde tienen lugar los cambios ópticos relevantes. En cambio, la configuración normal es más robusta y reproducible y, a día de hoy, es la única disponible comercialmente. Este trabajo describe una estrategia para mejorar las medidas normales SEC y hacerlas más competitivas con diseños paralelos. La estrategia se basa en la adición de nanopartículas magnéticas de ferrita de cobalto (MNP) a la disolución a medir y el acoplamiento de la celda SEC a un agitador magnético convencional, de modo que el movimiento inducido de las MNP (nano-enabled stirring) potencie el transporte de materia hacia y desde el electrodo, produciendo una rápida renovación de la capa de difusión y un aumento de la corriente en experimentos cronoamperométricos. Esto también genera un flujo mejorado de especies producidas y consumidas en el electrodo y una mayor variación de la absorbancia en los experimentos SEC. Este enfoque ha necesitado el diseño de una nueva celda de medida similar a la celda comercial, pero reemplazando el mecanismo de cierre hermético generado con imanes por un cierre no magnético. Los resultados obtenidos de esta forma con el sistema modelo Fe(II)/(III)-ortofenantrolina muestran un aumento notable de las señales electroquímicas y ópticas en presencia de agitación por MNP, pero también algunos efectos indeseables y un claro aumento del ruido, que debe minimizarse para proporcionar una mejora sustancial de las medidas SEC.

**Agradecimientos:** Este trabajo cuenta con el apoyo económico del proyecto PID2022-136709OB-C22 financiados por AEI/10.13039/501100011033/Unión Europea NextGenerationEU/PRTR.





## P014

### **Detección voltamperométrica de dopamina utilizando electrodos serigrafados de carbono con recubrimientos capa a capa de polímeros**

José Manuel Díaz Cruz, Jing Huang , Xènia Garcia , Julio Bastos Arrieta, Núria Serrano  
*Universitat de Barcelona, Barcelona, España*

#### **Resumen**

La presencia de contaminantes emergentes (CEs) en el medio acuático ha despertado la preocupación pública sobre su impacto en el medio ambiente y sus efectos adversos en la salud humana. La mayoría de estos CEs se consideran indicadores de actividad antropogénica, ya que terminan en aguas superficiales, subterráneas, residuales e incluso potables como resultado de actividades urbanas, industriales, agrícolas y otras actividades humanas, o como productos de transformación durante el tratamiento de efluentes. Los avances en las técnicas analíticas han permitido detectar la presencia de estos contaminantes en el agua en niveles de concentración muy bajos, que antes eran indetectables por limitaciones analíticas. En este trabajo se presenta el desarrollo de un método voltamperométrico basado en el uso alternado de polímeros para la modificación capa a capa (layer by layer) de la superficie de electrodos de carbono serigrafados (SPCE) para mejorar la sensibilidad de la detección de CEs gracias a interacciones electrostáticas. En el caso de la determinación voltamperométrica de dopamina, como analito modelo de CEs con carga positiva, un SPCE estratégicamente modificado con un polímero cargado negativamente mediante deposición de recubrimiento por inmersión combinado con el enfoque capa por capa, conduce a una rápida y sencilla estrategia para su preconcentración en la superficie del electrodo. La caracterización morfológica del SPCE modificado por ángulo de contacto y microscopía de fuerza atómica demuestran la efectividad de la estrategia de modificación utilizada. Las condiciones experimentales optimizadas garantizaron la correcta identificación y cuantificación de la dopamina.

#### **Agradecimientos**

Este trabajo cuenta con el apoyo económico del proyecto PID2022-136709OB-C22 financiados por AEI/10.13039/501100011033/Unión Europea NextGenerationEU/PRTR. J. Huang agradece al Institut de Recerca de l'Aigua de la Universidad de Barcelona.



## P015

### Deep eutectic solvents to extract anthocyanins from red grape skins: experimental and computational approaches for solvent selection

Marta Jiménez Salcedo<sup>1</sup>, María Teresa Tena<sup>1</sup>, Filipe H. B. Sosa<sup>2</sup>, João A. P. Coutinho<sup>2</sup>

1. Universidad de La Rioja, Logroño, España  
2. CICECO-University of Aveiro, Aveiro, Portugal

#### Resumen

Grape skins are a winery by-product with a great potential as source of phenolic compounds to be used as antioxidant in dietary supplements. In red grape skins, anthocyanins are water-soluble pigments which stand out as food colouring. They are the 3-O-monoglucosides and 3-O-acylated monoglucosides of the main anthocyanidins (delphinidin, cyanidin, petunidin, peonidin and malvidin). Deep eutectic solvents (DES) have been proposed as a sustainable and green method for the extraction of bioactive compounds from agri-food industry wastes and as a safe alternative for nutritional, pharmaceutical and cosmetic applications because they are more respectful of the environment and avoid the safety issues that traditional organic solvents entail due to their toxicity, volatility and flammability. In silico studies using COSMO-RS (COnductor-like Screening MOdel for Realistic Solvents) allows DES screening for the solute extraction. They are based on the calculation of solute and DES molecules  $\gamma$ -profiles and the activity coefficients at infinite dilution ( $\gamma^\infty$ ) of the solute in the DES. In this communication, the results of COSMO-RS with malvidin-3-O-glucoside and malvidin-3-O-(6-p-coumaroyl)glucoside as model solutes for a DES screening to find mixtures with high affinity for these compounds are presented. The computational study showed that potassium carbonate, sodium acetate and sodium propionate were better candidates as hydrogen bond acceptors (HBA) than those reported to date in literature for the recovery of anthocyanins from agri-food by-products. Moreover, the efficiencies of the ultrasound-assisted extraction of anthocyanins using different choline chloride and betaine-based DES and those obtained with the novel DES suggested by COSMO-RS are compared. Finally, to establish the most favourable extraction conditions, a study of the sonication time and the aqueous percentage in the DES was carried out using a design of experiments and the response surface methodology. The use of microwave-assisted extraction and the effect of temperature on anthocyanin recovery was also studied. Anthocyanins in the extracts were identified by LC-MS/MS, and their concentrations were determined by HPLC-vis (520nm).

**Acknowledgements** This work was supported by the University of La Rioja (Ayuda Grupos de Investigación REGI 22/64) and partially developed within the scope of the project CICECO-Aveiro Institute of Materials, UIDB/50011/2020, UIDP/50011/2020 and LA/P/0006/2020, financed by national funds through the FCT/ MCTES (PIDDAC). M.J-S. thanks University of La Rioja for her “Margarita Salas” PostDoc grant financed by the European Union-NextGenerationEU. Filipe H. B. Sosa acknowledge FCT for the researcher contract (CEECIND/07209/2022).



## P016

### Uso de dispositivos basados en papel modificados con aptámeros para la extracción de bisfenoles de muestras ambientales

Alba Roselló Carrió, Enrique Javier Carrasco Correa, José Manuel Herrero Martínez, María Jesús Lerma García

*Grupo CLECEM, Dpto. Química Analítica, Universitat de València, Burjassot, València, España*

#### Resumen

El bisfenol A (BPA), comúnmente utilizado en la producción de resinas de policarbonato, es un estabilizador en varios tipos de plástico, lo que puede conducir a su migración a los alimentos o al medioambiente a través de múltiples vías. Por ello, está siendo parcialmente sustituido en aplicaciones industriales y en productos de uso cotidiano por otros compuestos similares, tales como el bisfenol C o el S (BPC y BPS, respectivamente), entre otros. En cualquier caso, se ha demostrado que los BPs son disruptores endocrinos, por lo que la exposición continua en el tiempo, incluso a bajas concentraciones, puede afectar negativamente la vida acuática y la salud humana, alterando la reproducción y el desarrollo y produciendo diferentes enfermedades. Por tanto, es necesario desarrollar metodologías analíticas capaces de determinar simultáneamente diferentes BPs. El papel ha estado presente en el área de Química Analítica durante muchos años. Sin embargo, últimamente ha experimentado un redescubrimiento como dispositivo valioso para la determinación de analitos. En este sentido, el uso de fases sorbentes usando papel como soporte se ha convertido en una tendencia en el ámbito de la preparación de muestras, debido a sus ventajas (amplia accesibilidad, coste, fácil modificación, etc.). En este trabajo, se ha desarrollado un dispositivo basado en papel en el cual se sintetizó un sorbente monolítico basado en metacrilato de glicidilo. Dado que este tipo de fases proporcionan baja selectividad, el monolito resultante se modificó con un aptámero selectivo de BPA. Dicho sorbente se empleó para extraer BPA y otros BPs (BPS, BPC, bisfenol AP y AF). Para ello, se optimizaron varios parámetros de extracción (medio de carga y de elución, tiempos y temperaturas de dichas etapas), y se evaluaron otras variables (capacidad de carga y volumen de muestra) que influyen en las prestaciones analíticas del dispositivo desarrollado. Una vez seleccionadas las condiciones óptimas, la metodología desarrollada se aplicó a la determinación de BPs presentes en muestras medioambientales.

#### Agradecimientos

Agencia Española de Investigación (AEI/10.13039/501100011033) del Ministerio de Ciencia e Innovación (MICINN) por el proyecto PID2021-125459OB-I00 y a la Generalitat Valenciana (GV) por los proyectos CIAICO/2022/183, INVEST/2022/117, INVEST/2022/425 e INNEST/2022/299. Red Nacional para la Innovación en las Técnicas de Tratamiento de Muestras Miniaturizadas (RED2022-134079-T) concedida por el MICINN. Este estudio forma parte del programa de Materiales Avanzados y recibió apoyo del MICINN con financiamiento de la Unión Europea Next Generation EU (PRTR-C17.I1) y de la GV.



## P017

### Evaluación del efecto de la suplementación con zn en proteínas y metales diana en secciones de encéfalo del modelo transgénico de ratón APP/PS1 mediante LA-ICP-MS

Jaime Martínez García<sup>1</sup>, Paula Menero Valdés<sup>1</sup>, Enol Artime<sup>2</sup>, Lydia Álvarez<sup>2</sup>, Ana Navarro<sup>3</sup>, Héctor González Iglesias<sup>4</sup>, Beatriz Fernández<sup>1</sup>, Rosario Pereiro<sup>1</sup>

*1. Departamento de Química Física y Analítica, Universidad de Oviedo, Oviedo, España*

*2. Fundación de Investigación Oftalmológica, Instituto Oftalmológico Fernández-Vega, Oviedo, España*

*3. Departamento de Morfología y Biología Celular, Universidad de Oviedo, Oviedo, España*

*4. Instituto de productos lácteos de Asturias (IPLA-CSIC), Villaviciosa, España*

#### Resumen

Actualmente, las enfermedades neurodegenerativas (EN) son patologías prevalentes en la población mundial. La etiología de estas enfermedades no es del todo conocida, pero se sabe que el envejecimiento, el estrés oxidativo, la dishomeostasis de metales y la formación de agregados proteicos juegan un papel importante. Hay escasas terapias para tratar EN, debido a la falta de conocimiento sobre los mecanismos de desarrollo y a la ausencia de biomarcadores de confianza. La mayoría de los tratamientos disponibles sólo son capaces de aliviar los síntomas, pero no frenan la progresión de la degeneración. Ciertos suplementos alimenticios y nutracéuticos parecen contribuir a reducir el riesgo de padecer EN, aunque no existen dosis de referencia. Por ejemplo, estudios recientes han propuesto un papel protector de la suplementación de Zn frente a neurodegeneración. Trabajar con modelos animales con EN permite estudiar alteraciones de metales y proteínas involucradas en la degeneración. Específicamente, el modelo de neurodegeneración acelerada de ratón transgénico APP/PS1 puede ser útil para estudiar EN como la enfermedad de Alzheimer y la degeneración macular asociada a la edad. Actualmente existen estudios comparando la distribución de metales endógenos en secciones de encéfalo de ratones de este modelo con ratones control mediante LA-ICP-MS [1]. En este trabajo se presenta un paso más allá, enfocándonos no solo en metales endógenos, sino también en proteínas diana relacionadas con depósitos aberrantes típicos de EN. Adicionalmente, se ha evaluado el efecto de la suplementación de ZnSO<sub>4</sub>·H<sub>2</sub>O (85 mg/L, en agua para beber) en la distribución tanto de metales como de proteínas diana en el encéfalo. Así, se han estudiado secciones de encéfalo de 8 grupos muestrales: ratones control y APP/PS1, con y sin suplementación de Zn, y a dos edades diferentes, 4 y 16 meses. Se ha estudiado la distribución cuantitativa de metales y proteínas para determinar cambios en su concentración y localización durante la suplementación de Zn y la progresión de la enfermedad. La distribución metálica se midió directamente con LA-ICP-MS, mientras que para el análisis proteico se emplearon inmunosondas marcadas con nanoclústeres metálicos, usando para cada proteína nanoclústeres de metales diferentes, permitiendo obtener imágenes de la distribución de varias proteínas diana simultáneamente.

[1] S.M.H. Mashkani, D.P. Bishop, N. Raoufi-Rad, et al., *Cells* 12 (2023) 1144.

**Agradecimientos:** Proyectos PID2022-137319OB-C21 y PID2022-137319OB-C22 (MCIN/AEI/10.13039/501100011033/) y beca Severo Ochoa (Ref. BP21-041) – Principado de Asturias



## P018

### Nuevas Estrategias para la detección celular mediante Single Cell ICP-MS: determinación de proteínas en células de Müller sometidas a hipoxia

Alicia Villa Vázquez<sup>1</sup>, Paula Menero Valdés<sup>1</sup>, Lydia Álvarez Fernández<sup>2</sup>, Héctor González Iglesias<sup>3</sup>,  
Beatriz Fernández García<sup>1</sup>, Rosario Pereiro García<sup>1</sup>

1. Departamento de Química Física y Analítica, Universidad de Oviedo, Oviedo, España

2. Fundación de Investigación Oftalmológica (FIO), Oviedo, España

3. Instituto de Productos Lácteos de Asturias (IPLA-CSIC), Villaviciosa, España

#### Resumen

Las poblaciones celulares de todos los sistemas biológicos poseen naturaleza heterogénea. Si se hace referencia al empleo de técnicas de espectrometría de masas elemental para la caracterización de modelos celulares, las muestras pueden analizarse por ICP-MS con nebulización convencional tras su mineralización, obteniéndose información promedio para el analito estudiado. Sin embargo, para conocer la heterogeneidad celular en un mismo cultivo isogénico se requieren estrategias especializadas que permitan el análisis de las células como entidades individuales. En este sentido, la determinación de analitos diana en células individuales puede llevarse a cabo empleando la técnica single cell (sc) ICP-MS. La combinación de sc-ICP-MS con inmunocitoquímica permite determinar también proteínas diana en células individuales. Para ello, las muestras se someten a inmunoensayos utilizando anticuerpos etiquetados con marcas elementales. En este tipo de estudios, a fin de garantizar la integridad celular y confirmar el reconocimiento de la inmunosonda empleada es recomendable, además, el análisis de elementos intrínsecos celulares [1]; sin embargo, la determinación de elementos endógenos está muchas veces limitada por sus bajas concentraciones en cada célula. En este trabajo, con el objetivo de mejorar la sensibilidad de la detección celular mediante sc-ICP-MS se ha estudiado el empleo de un intercalador de ADN (Rh-ADN). El modelo celular estudiado es la línea MIO-M1, un modelo de gran valor para analizar los mecanismos moleculares característicos de las células de Müller de la retina [2]. Las células MIO-M1 se sometieron a dos condiciones de hipoxia (confirmadas mediante RT-qPCR), comparándolas con un estado control (CT). Se ha desarrollado una metodología de análisis por sc-ICP-MS en la que se ha empleado un intercalador Rh-ADN para la detección celular y nanoclústeres (NCs) como marca elemental con un gran poder de amplificación. En concreto, el procedimiento se ha aplicado a la determinación de dos proteínas relacionadas con la hipoxia (HIF-1 $\alpha$  y VEGF) en células MIO-M1, CT y bajo hipoxia (CoCl<sub>2</sub> & privación de O<sub>2</sub>), mediante el marcaje de anticuerpos específicos con AuNCs e IrNCs, respectivamente.

#### Referencias

[1] A. Lores-Padín, E. Mavrakakis, B. Fernández, M. García, H. González-Iglesias, R. Pereiro, et al. *Anal. Chim. Acta.* (2022), 1203, 339701. [2] M. Lucchesi, S. Marracci. *Ann. Eye Sci.* (2022), 7, 9.

#### Agradecimientos

Proyecto coordinado PID2022-137319OB (-C21 y -C22) / Agencia Estatal de Investigación (AEI)/10.13039/501100011033). A. Villa-Vázquez agradece la Beca del Programa Severo Ochoa con Ref. BP22-187 (Consejería de Ciencia, Empresas, Formación y Empleo, Principado de Asturias).



## P019

### **Efectos de la suplementación con Zn en el metabolismo de Cu, en suero y tejido hepático, en un modelo experimental de la enfermedad de Alzheimer**

Marta Marina Latorre<sup>1</sup>, Lara Lobo Revilla<sup>1</sup>, Lydia Álvarez<sup>2</sup>, Enol Artime<sup>2</sup>, Adrián López<sup>1</sup>, Rosario Pereiro<sup>1</sup>

1. *Universidad de Oviedo, Oviedo, España*

2. *Fundación de Investigación Oftalmológica Fernández-Vega, Oviedo, España*

#### **Resumen**

El Zn es un elemento esencial que juega un papel importante en diversas funciones biológicas, incluida la regulación de la señalización celular y la protección contra la inflamación y el estrés oxidativo. Su deficiencia se ha asociado con el desarrollo de diversas patologías neurodegenerativas, como la enfermedad de Alzheimer y el Parkinson. Por ello, la suplementación con Zn se está estudiando a fin de intentar ralentizar o incluso frenar la evolución de patologías neurodegenerativas asociadas a la edad. El metabolismo del Zn está estrechamente ligado al del Cu; de hecho, se sabe que existe un antagonismo entre la absorción de Cu y de Zn. Si bien no se han descrito efectos adversos graves derivados de la suplementación con Zn, resulta evidente la necesidad de evaluar con rigurosidad el efecto que la suplementación con este elemento conlleva a largo plazo, ya que un desequilibrio en el metabolismo del Cu podría condicionar la aparición de ciertas patologías. En este contexto, y empleando un modelo de la enfermedad de Alzheimer, el ratón doble transgénico APP/PS1 y la cepa control, se está estudiando el efecto que ejerce la suplementación de Zn, a nivel elemental (Fe, Cu, Zn, Na, Ca, P, K, Mg) en suero sanguíneo y de especies de Cu en tejido hepático a lo largo del tiempo (1-24 meses). En el caso del tejido hepático, se han evaluado distintas metodologías de preparación de muestra, con el objetivo de procesar conjuntamente las muestras para análisis elemental total, mediante inyección directa y detección por espectrometría de masas con fuente de plasma de acoplamiento inductivo (ICP-MS), y de especiación, mediante cromatografía líquida acoplada a ICP-MS.

#### **Agradecimientos**

Se agradece la financiación recibida por el proyecto PID2022-137319OB-C21 del Ministerio de Ciencia e Innovación. M. Marina-Latorre agradece al Principado de Asturias la beca Severo Ochoa PA-23-BP22-183.



## P020

### **Desarrollo de nanosistemas basados en Selenio para el tratamiento de enfermedades infecciosas: un enfoque prometedor en la lucha contra la Tuberculosis.**

Roberto Álvarez-Fernández García, Lucía Fernández López, María Del Pilar Buendía Nacarino, Jose Luis Luque García  
*Universidad Complutense de Madrid, Madrid, España*

#### **Resumen**

La tuberculosis (Tb) es una enfermedad infecciosa causada principalmente por la bacteria *Mycobacterium tuberculosis* (Mtb). Esta enfermedad representa la principal causa de muerte por infección a nivel mundial. Los tratamientos actuales implican la administración de antibióticos de primera línea durante un periodo de 6 meses. Estos antibióticos, sin embargo, son ineficaces cuando se enfrentan a cepas de Mtb multirresistentes. En este sentido, la Organización Mundial de la Salud (OMS) ha descrito la creciente resistencia microbiana a antibióticos como uno de los principales riesgos actuales para la salud humana. Por ello, se precisa del desarrollo de nuevas terapias no antibióticas para la lucha de enfermedades infecciosas como la tuberculosis. La nanotecnología ha surgido como una alternativa prometedora para abordar este problema debido al potencial de ciertos nanomateriales, como las nanopartículas de selenio (SeNPs), como agentes bactericidas en cepas bacterianas resistentes [1]. Sin embargo, las SeNPs desnudas tienden a agregarse en solución acuosa, disminuyendo su biodisponibilidad. En este trabajo, se propone el uso de un nanosistema basado en sílice mesoporosa a modo de transportador de nanopartículas de selenio (MSNs-Tf-SeNPs) como agente micobactericida. Se describe el proceso de síntesis del nanomaterial, así como su caracterización físico-química mediante diversas técnicas como TEM, EDS o FTIR. Adicionalmente, se incluye una evaluación funcional del nanosistema mediante ensayos bioanalíticos, comenzando por la evaluación de la capacidad bactericida frente a *Mycobacterium smegmatis* (Msm) como modelo no patógeno de Mtb, lo que ha permitido obtener la concentración mínima del nanomaterial capaz de inhibir el crecimiento de la bacteria (MIC). Por otra parte, y dado que para iniciar la infección los macrófagos alveolares deben ingerir los bacilos de Mtb, se ha evaluado tanto la capacidad bactericida del material empleando macrófagos THP-1 infectados con Msm, como la viabilidad de los propios macrófagos frente al nanosistema MSNs-Tf-SeNPs.

[1] H. Estévez, A. Palacios, D. Gil, J. Anguita, M. Vallet-Regi, B. González, R. Prados-Rosales, J. L. Luque-García, Antimycobacterial Effect of Selenium Nanoparticles on *Mycobacterium tuberculosis*, *Front. Microbiol.* (2020), 11, 800. doi: 10.3389/fmicb.2020.00800.



## P021

### **Desarrollo de dispositivos 3D Modificados con redes Metal-Orgánicas para el análisis de antidepressivos**

Miguel Ángel Martínez Briones, María Jesús Lerma García, María Vergara Barberán, José Manuel Herrero Martínez

*Grupo CLECEM, Departamento de Química Analítica, Universitat de València, C/ Doctor Moliner, 50, 46100, Burjassot, València, España*

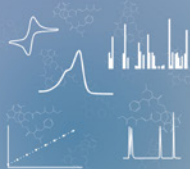
#### **Resumen**

En los últimos años, la impresión 3D ha sido incorporada al área de la Química Analítica, ya sea para llevar a cabo la fabricación de sensores, así como para preparar soportes de extracción para el tratamiento de muestras. Entre las tecnologías de impresión 3D, el modelado por deposición fundida (FDM) ofrece una enorme versatilidad en los materiales a emplear, un bajo coste de impresión y facilidad de manejo. A pesar de estas ventajas, los soportes 3D suelen presentar una baja área superficial, limitando su aplicación en el tratamiento de muestra. No obstante, dichos soportes pueden ser fácilmente funcionalizados tras su impresión para inmovilizar diferentes materiales con el fin de mejorar sus prestaciones. En este sentido, las redes metal-orgánicas (MOFs) han sido empleadas como sorbentes en tratamiento de muestra, dada su elevada área superficial, porosidad, funcionalidad ajustable, entre otras ventajas. Por ello, la combinación de soportes impresos en 3D modificados con MOFs es una alternativa prometedora a los sistemas convencionales, ya que además de facilitar la “personalización” de diseños permite aprovechar al máximo las propiedades de estos materiales, ofreciendo el dispositivo unas mejores prestaciones analíticas. En este trabajo se plantea el desarrollo de dispositivos basados en impresión 3D modificados con MOFs para la extracción de un fármaco antidepressivo (venlafaxina), y su metabolito mayoritario (O-desmetil-venlafaxina) en muestras de aguas medioambientales. En primer lugar, se realizó un estudio preliminar en extracción en fase sólida dispersiva (dSPE) empleándose distintos MOFs, seleccionándose aquel que mejores resultados proporcionó. A continuación, se incorporó el MOF seleccionado al soporte 3D, y se optimizaron distintos parámetros de extracción tales como medios de cargas y elución, así como los tiempos correspondientes, entre otros. Además, se evaluaron los parámetros analíticos significativos del método. Bajo las condiciones óptimas establecidas, se aplicó dicha metodología a la determinación de estos analitos en muestras de agua.

#### **Agradecimientos**

Agencia Española de Investigación (AEI/10.13039/501100011033) del Ministerio de Ciencia e Innovación (MICINN) por el proyecto PID2021-125459OB-I00 y a la Generalitat Valenciana (GV) por los proyectos CIAICO/2022/183 y CIGE/2023/69. Red Nacional para la Innovación en las Técnicas de Tratamiento de Muestras Miniaturizadas (RED2022-134079-T) concedida por el MICINN. Este estudio forma parte del programa de Materiales Avanzados y recibió apoyo del MICINN con financiamiento de la Unión Europea Next Generation EU (PRTR-C17.I1) y de la GV.





## P022

### Evaluación del contenido de aminas biógenas y aminoácidos en chocolates a través de HPLC-MS/MS y técnicas quimiométricas

Laura Morales Erazo<sup>1,2</sup>, Sonia Sentellas<sup>3,4,5</sup>, Javier Saurina<sup>6,7</sup>

*1. Departamento de Ingeniería Química y Química Analítica, Barcelona, España*

*2. Instituto de Investigación en Nutrición y Seguridad Alimentaria, Santa Coloma de Gramenet, España*

*3. Universitat de Barcelona, Barcelona, España*

*4. Universitat de Barcelona, Santa Coloma de Gramenet, España*

*5. Serra Húnter Fellow, Barcelona, España*

*6. E08028, Barcelona, España*

*7. E08921, Santa Coloma de Gramenet, España*

*8. Departament de Recerca i Universitats*

#### Resumen

El cacao y sus derivados son altamente consumidos a nivel global debido a sus propiedades nutricionales, efectos potencialmente beneficiosos para la salud y cualidades organolépticas únicas. Sumado a lo anterior, este cultivo es reconocido como uno de los de mayor importancia en lo que se refiere a prácticas agrícolas sostenibles y mitigación del cambio climático. Por todo, el cacao es susceptible de sufrir prácticas fraudulentas y es por ello que la determinación de la variedad, origen y métodos de cultivo ha adquirido una importancia considerable. Las aminas biógenas y aminoácidos son compuestos que potencialmente pueden ser empleados no solo como indicadores de calidad de diferentes productos alimenticios, sino también como indicadores de autenticidad. En este sentido, el presente estudio tiene como objetivo establecer un método que permita determinar características asociadas con la procedencia o producción de muestras de chocolate. Para esto, se determinó el contenido de 11 aminas biogénicas y 20 aminoácidos en 93 muestras comerciales de chocolate negro, elaboradas con cacao de diferentes variedades botánicas y tipos de cultivo y proveniente de 22 países alrededor del mundo. La determinación de los analitos se realizó mediante una derivatización precolumna empleando cloruro de dansilo y posterior análisis por cromatografía de líquidos acoplada a un espectrómetro de masas (AbSciex QTrap 4000). El estudio estadístico se realizó mediante Análisis de Componentes Principales (PCA) y Análisis Discriminante de Mínimos Cuadrados Parciales (PLS-DA). Los resultados mostraron que todas las aminas y aminoácidos evaluados fueron detectados en las muestras de chocolate, siendo los aminoácidos más abundantes la glutamina, lisina, ornitina y tirosina, mientras que, para el caso de las aminas, compuestos como etilamina, dopamina, tiramina y cadaverina, se encontraron en mayores proporciones. Por otro lado, los estudios de PCA y PLS-DA permitieron visualizar patrones de agrupamiento relacionados con el origen geográfico, la variedad o el contenido de cacao.



## P023

### Magnetic deep eutectic solvent versus deep eutectic solvent: a comparative study for determination of bisphenols in edible oil samples

Cristina Zapater , Miguel Ángel Aguirre , Lorena Vidal , Antonio Canals  
*University of Alicante, Alicante, España*

#### Resumen

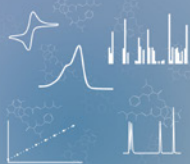
Bisphenols (BPs) are organic compounds mainly used as additives in the manufacture of epoxy resins, polymeric materials or food containers, among others. These compounds can migrate from food packaging into the food, posing a serious risk to human health due to their effects in the immune, reproductive, neuronal, or metabolic systems [1]. Initially, these effects were attributed to bisphenol A (BPA); however, it has been observed that BPA-analogues compounds present similar hazardous effects [2]. The main goal of this research is the development of two analytical methods based on the vortex-assisted dispersive liquid-liquid microextraction process (VA-DLLME) using a deep eutectic solvent (DES) and a magnetic deep eutectic solvent (MDES) as extractants, with subsequent separation and detection by liquid chromatography-diode array detector (LC-DAD). The interest in the study of MDES as an extractant is due to the fact that it combines the ecological character of DES along with the advantages of the magnetic extractant, which facilitates its manipulation and recovery with the use of an external magnetic field, simplifying the process and reducing the analysis time and energy consumption. The extraction process, method validation, and analysis of real samples are studied and compared using a hydrophilic DES composed by choline chloride and ethylene glycol (ChCl:EG, 1:2); and a hydrophilic MDES composed by choline chloride, ethylene glycol, and iron (III) chloride (ChCl:EG:FeCl<sub>3</sub>, 1:4:1) for the determination of four bisphenols (BPA, BPF, BPAF, and BPAP) in edible oil samples (i.e., olive oil, sunflower oil, soybean oil, rapeseed oil and sesame oil).

#### Acknowledgements

The authors are grateful to the Spanish Ministry of Science and Innovation (PID2021- 126155OB-I00) and the Regional Government of Valencia (Spain) (CIPROM/2021/062) for the financial support. Also, authors would like to thank the Spanish Ministry of Science and Innovation for granting the Spanish Network of Excellence in Sample Preparation (RED2022-134079-T), and the Sample Preparation Study Group and Network, supported by the Division of Analytical Chemistry of the European Chemical Society.

#### References

[1] M.F. Manzoor, T. Tariq, B. Fatima, et al. *Front. Nutr.* 9 (2022) 1–16. [2] D. Chen, K. Kannan, H. Tan, et al. *Environ. Sci. Technol.* 50 (2016) 5438–5453.



## P024

### Application of a sorbent based on graphene oxide modified with magnetic nanoparticles for the separation of organic contaminants in wastewater.

Ana B. Martínez Piernas, Alba M. Cruz Soto, Irene S. Trujillo, María Del Mar López Guerrero, Elisa I. Vereda Alonso

*Department of Analytical Chemistry, Faculty of Sciences, University of Málaga, Málaga, España*

#### Resumen

Conventional treatment processes applied in wastewater treatment plants (WWTPs) do not efficiently remove a large variety of organic contaminants (OCs) such as pharmaceuticals, personal care products, or pesticides. Their continuous discharge into aquatic environments leads to ecotoxicological consequences to both the environment and human health [1]. To mitigate the pollution loads, nanoscale sorbents have emerged as a promising solution for the decontamination of a wide variety of contaminants from wastewater. Recently, sorbents based on graphene oxide (GO) have been employed due to their intrinsic physico-chemical properties, such as large surface area, strong  $\pi$ - $\pi$  interactions, and superior adsorption capacity for carbon-based ring structures and hydrophobic compounds. These advantages have been further extended through the functionalization of GO with magnetic nanoparticles (MNPs), resulting in sorbents with enhanced stability and durability. Furthermore, the easy separation of GO-MNP-based sorbents from aquatic solutions through magnetic field application facilitates sorbent reusability, thus minimizing economic cost and environmental impact. In this study, the adsorption capacity of a novel GO-MNP sorbent material, patented as M@GO [2], for the removal of 30 OCs from wastewater was investigated using liquid chromatography coupled with high-resolution mass spectrometry (LC-Orbitrap-MS) for sample analysis. Adsorption optimization comprising solution pH, adsorption method, and contact time were evaluated. 77% of the OCs showed adsorption results between 70 and 100% with relative standard deviations (RSDs) less than 20% using ultrasound-assisted extraction (UAE) for 5min at the typical pH of wastewater effluents (7.5–8). Given the successful results in terms of specificity for OCs and applicability in wastewater decontamination, a magnetic solid-phase extraction (MSPE) method was proposed to investigate sorbent reusability. Factors including extraction time, elution solvent, and solvent pH modifiers were examined. The best recovery results were observed employing 1mL of MeOH with 1% acetic acid (v/v) using UAE for 2min, achieving acceptable recovery rates (70–120%, RSD<20%) for the 40% of the OCs. To enhance recoveries of compounds exhibiting  $\pi$ - $\pi$  adsorption mechanisms, additional elution conditions are currently under investigation.

**References:** [1] A. Fernández-García, A.B. Martínez-Piernas, D. Moreno-González, B. Gilbert-López, A. Molina-Díaz, J.F. García-Reyes, *Chemosphere*, 2024, 357, 142075. [2] ES 2 844 942 B2, P. Montoro-Leal, J.C. García-Mesa, M.M. López-Guerrero, E.I. Vereda-Alonso. *Material compuesto absorbente de metales basado en óxido de grafeno magnético y procedimiento de obtención* Noviembre 24 2021, 40

**Acknowledgements:** The authors thank the University of Málaga (Proyecto Puente B4-2023-19), and the Spanish Ministry of Science and Innovation (Project PID2021-126794OB-100) for funding support.



## P025

### The use of deep eutectic solvents in molecularly imprinted polymers from the green analytical chemistry point of view

Daniel Gallart Mateu<sup>1</sup>, Francesc Albert Esteve Turrillas<sup>1</sup>, Natalia Jatkowska<sup>2</sup>, Mariusz Marc<sup>2</sup>, Justyna Plotka-Wasyłka<sup>2,3</sup>, Miguel De La Guardia Cirugeda<sup>1</sup>

*1. Universidad de Valencia, Valencia, España*

*2. Gdansk University of Technology, Gdansk, Polonia*

*3. EcoTech Center, Gdansk University of Technology, Gdansk, Polonia*

#### Resumen

The use of molecular imprinting technique in Analytical Chemistry has been widely applied for the synthesis of selective phases involved in solid phase extraction (SPE) processes, as well as for the preparation of stationary phases for chromatography. However, some of the chemicals involved in the synthesis of molecularly imprinted polymers (MIPs) may constitute sources of toxicity for users and environment. Despite this situation, promising new generations of more environmentally sustainable solvents are nowadays being developed and studied, including those called deep eutectic solvents (DES), which are characterized by being non-toxic and biodegradable low-cost organic chemical products that are synthesized in the laboratory easily and quickly. In this sense, DES seems to be an appropriate choice for being included in the synthesis of MIPs, replacing completely those traditionally used or reducing the amount of these reagents employed, acting as functional monomer, porogenic agent or cross linker. An interesting way to evaluate the efficiency of these substitutions lies not only in the evaluation of the classical analytical parameters, but also in the use of the sustainability evaluation tools proposed by Green Analytical Chemistry. In this sense, various MIP synthesis strategies in which DES has been used as a replacement for conventional reagents have been evaluated through tools such as the Green Analytical Procedure Index (GAPI) [1], AGREEprep [2] and, Blue Applicability. Grade Index (BAGI) [3], evaluating whether or not this improvement in sustainability affects parameters such as selectivity and sensitivity in the evaluated analytical methodologies.

#### Acknowledgements

Authors gratefully acknowledge the financial support of the project PID2019-110788GB-I00 funded by MCIN/AEI/10.13039/501100011033, Project PND2022I030 funded by Delegación del Gobierno Español para el Plan Nacional sobre Drogas, and Gdansk University of Technology by the DEC-5/2021/IDUB/II.1.3 grant under the Aurum Supporting International Research Team Building - 'Excellence Initiative - Research University' program

#### References

- [1] F. Pena-Pereira, W. Wojnowski and M. Tobiszewski, *Anal. Chem.*, 92(14) (2020) 10076-10082.
- [2] W. Wojnowski, M. Tobiszewski, F. Pena-Pereira, et al., *TrAC, Trends Anal. Chem.*, 149 (2022) 116553.
- [3] N. Manousi, W. Wojnowski, J. Płotka-Wasyłka, et al., *Green Chem.*, 25 (2023) 7598.



## P026

### Desarrollo de aptasensores para la detección de toxinas marinas en el medioambiente

Ana Isabel Pérez López<sup>1,2,3</sup>, Gaelle Catanante<sup>4</sup>, Georges Istamboulie<sup>4</sup>, José Manuel Barat Baviera<sup>1</sup>,  
María Isabel Gómez Gómez<sup>3</sup>, Amadeu Griol<sup>3</sup>, Miriam Beneito Cambra<sup>2</sup>, José Manuel Herrero  
Martínez<sup>2</sup>, María Jesús Lerma García<sup>2</sup>

1 *Departamento de Tecnología de los Alimentos, Universitat Politècnica de València, Camino De Vera S/n, València, España*

2 *Grupo CLECEM, Departamento de Química Analítica, Universitat de València, C/ Doctor Moliner, 50, 46100, Burjassot, València, España*

3 *Centro Tecnológico de Nanofotónica, Universitat Politècnica de València, Camino De Vera S/n, València, España*

4 *Laboratoire Biodiversité et Biotechnologies Microbiennes (LBBM)- Équipe Biocapteurs Analyses Environnement (BAE), University of Perpignan Via Domitia, Av/ Paul Alduy, 52, 66860 Perpignan, Francia*

#### Resumen

La detección de contaminantes emergentes (CEs) en especies marinas se considera actualmente una advertencia medioambiental y económica contra la biodiversidad, ya que interrumpe la cadena alimentaria y afecta tanto a la salud humana como a la vida silvestre. En este contexto, se pueden emplear ligandos selectivos llamados aptámeros para reconocer y determinar la presencia de CEs, como toxinas marinas (por ejemplo, el ácido domoico (DA) o la ficotoxina saxitoxina (STX)), que se encuentra presentes principalmente en productos de pesca. Estos ligandos de afinidad, sintetizados *in vitro*, son oligonucleótidos monocatenarios de corta longitud que presentan un plegamiento tridimensional de su cadena al unirse al analito diana. Dichos ligandos han sido ampliamente utilizados en aplicaciones de sensado y diagnóstico, constituyendo herramientas valiosas para el desarrollo de plataformas sensoras altamente sensibles, selectivas, rentables y con potencial para la detección *in situ*. El objetivo final de este trabajo es el desarrollo de un aptasensor electroquímico para la determinación de DA y STX en muestras ambientales. Para ello, en primer lugar, se han desarrollado aptasensores fluorogénicos, uno para cada analito, que se basan en cuantificar la disminución/extinción de fluorescencia que experimenta un aptámero marcado con una molécula fluorescente al ponerse en contacto con su aptámero complementario, marcado con grupos inhibidores o desactivadores de dicha fluorescencia (quencher). Para ello, se estudiaron y optimizaron diversas variables tales como longitud de los aptámeros, concentraciones de los reactivos implicados, volumen, y tiempos de incubación, entre otros. A continuación, empleando las mejores condiciones, se procedió al desarrollo del aptasensor electroquímico marcando el aptámero selectivo del analito de interés con un grupo electroactivo. Asimismo, se optimizaron diferentes condiciones experimentales tales como anclaje del aptámero/analito sobre la superficie del electrodo de trabajo, técnica y formato de detección, etc. Bajo las condiciones óptimas, ambos tipos de aptasensores se emplearon para la determinación selectiva de estas toxinas en muestras de agua ambientales.

#### Agradecimientos

Este estudio forma parte del programa ThinkInAzul financiado por el MCIN con fondos de la Unión Europea NextGenerationEU (PRTR-C17.11) y por la Generalitat Valenciana (GVA-THINKINAZUL/2021/004).



## P027

### **Modificación de papel con PVC-difenilamina como fase sorbente sostenible para la extracción de opioides en muestras de saliva.**

Ana M. Pedraza-Soto , Carlos Calero-Cañuelo , Rafael Lucena , Soledad Cárdenas  
*Universidad de Córdoba, Córdoba, España*

#### **Resumen**

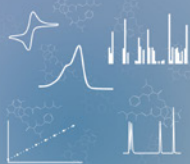
En el presente trabajo se evalúa el potencial de la celulosa como sustrato para la preparación de fases sorbentes planas y su empleo en microextracción en película delgada (thin film microextraction, TFME). Las características ventajosas del papel, tales como sostenibilidad, biodegradabilidad, elevada área superficial, y fácil modificación, justifican su uso como sustrato para modificaciones posteriores [1]. Por ello, se propone la modificación del papel con un recubrimiento de cloruro de polivinilo (PVC), seguido de la unión covalente de difenilamina de manera sencilla usando la técnica dip-coating (inmersión/secado) [2]. De esta forma quedan anillos aromáticos en la superficie del papel para interactuar con los analitos modelo mediante un mecanismo mixto de interacción (combinación de interacciones  $\pi$ - $\pi$  y catión- $\pi$ , siendo predominantes estas últimas) a pH fisiológico. El material resultante se ha caracterizado mediante espectroscopía infrarroja por reflexión total atenuada (ATR-IR), espectroscopía UV-visible de reflexión difusa y microscopía electrónica de barrido (SEM). Para evaluar la capacidad sorbente del material sintetizado, se propone la extracción de opioides (metadona, codeína y tramadol) en muestras de saliva como problema analítico, usando espectrometría de masas por infusión directa para la cuantificación. Una vez optimizadas las variables principales implicadas en el proceso (pH, tiempo de extracción y dilución de la muestra), se evalúan las características analíticas del método, usando muestras blancas de saliva como matriz. El método propuesto proporciona buenos valores de linealidad, precisión y exactitud, con límites de detección competitivos. Por último, se analizan muestras reales de saliva de pacientes voluntarios tratados con codeína y tramadol para evaluar la aplicabilidad del método, demostrando su utilidad para el uso en muestras biológicas.

#### **Agradecimientos**

La investigación desarrollada en este trabajo ha sido posible gracias al proyecto PID2020-112862RB-I00 financiado por MICIU/AEI/ 10.13039/501100011033 (Feder "Una manera de hacer Europa"). Ana M. Pedraza-Soto agradece al ministerio de Ciencia, Innovación y universidades por la ayuda predoctoral FPU (Ref. FPU22/01752).

#### **Bibliografía**

[1] M.C. Díaz-Liñán, R. Lucena, S. Cárdenas, A.I. López-Lorente, Unmodified cellulose filter paper, a sustainable and affordable sorbent for the isolation of biogenic amines from beer samples, *J Chromatogr A* 1651 (2021) 462297. [2] J. Ríos-Gómez, R. Lucena, S. Cárdenas, Paper supported polystyrene membranes for thin film microextraction, *Microchemical Journal* 133 (2017) 90–95.



## P028

### Papel modificado con ácido húmico como sorbente intercambiador catiónico asequible para el aislamiento de drogas básicas en muestras de saliva

Carlos Calero-Cañuelo , Rafael Lucena , Soledad Cárdenas

*Affordable and Sustainable Sample Preparation (AS2P) Research Group, Departamento de Química Analítica, Instituto Químico para la Energía y el Medioambiente IQUEMA, Universidad de Córdoba, Campus de Rabanales, Edificio Marie Curie, E-14071, Córdoba, España*

#### Resumen

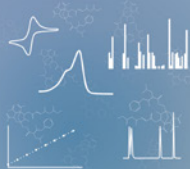
El impacto ambiental del tratamiento analítico de muestra puede minimizarse empleando materiales naturales como precursores en la síntesis de fases sorbentes [1,2]. En este trabajo, se han combinado dos materiales de origen natural, la celulosa y los ácidos húmicos (AHs), para preparar una fase sorbente plana mediante la técnica de dip-coating, que se caracteriza por su simplicidad y bajo consumo de reactivos [3]. La síntesis consiste en la inmersión del papel en una disolución acuosa de AH a pH básico y la posterior evaporación del disolvente mediante un curado térmico. La fase final se ha caracterizado mediante espectroscopía infrarroja, espectroscopía ultravioleta-visible de reflexión difusa, y microscopía de barrido electrónico. Para evaluar el rendimiento del método se han seleccionado como analitos cuatro drogas básicas (cocaína, codeína, metadona y metanfetamina) que se han analizado mediante espectrometría de masas por infusión directa. Se han estudiado diferentes variables involucradas en el proceso de extracción (como pH, fuerza iónica, número de inmersiones y tiempo de extracción). La gran cantidad de grupos ácidos que poseen los ácidos húmicos proporcionan a la fase una capacidad de intercambio catiónico de modo mixto, la cual se ha evaluado y demostrado satisfactoriamente. Se han obtenido límites de detección de 1.5 ng·mL<sup>-1</sup> para la codeína y de 0.3 ng·mL<sup>-1</sup> para el resto de los analitos. Además, la precisión en el mismo día, la precisión entre días, así como la exactitud del método se han estudiado a 3 niveles de concentración. Finalmente, el método se aplicó finalmente a muestras reales de saliva de pacientes bajo tratamiento médico con codeína y fue capaz de cuantificar satisfactoriamente el 96% de las muestras.

#### Agradecimientos

La investigación desarrollada en este trabajo ha sido posible gracias al proyecto PID2020-112862RB-I00 financiado por MICIU/AEI/ 10.13039/501100011033 (Feder “Una manera de hacer Europa”). Carlos Calero-Cañuelo agradece al ministerio de Ciencia, Innovación y universidades por la beca predoctoral FPU (Ref. FPU20/04765).

#### Referencias

[1] Esteve-Turrillas FA, Garrigues S, de la Guardia M (2024) Green extraction techniques in green analytical chemistry: A 2019–2023 up-date. *TrAC Trends Anal Chem* 170:117464. <https://doi.org/10.1016/j.trac.2023.117464> [2] López-Lorente ÁI, Pena-Pereira F, Pedersen-Bjergaard S, Zuin VG, Ozkan SA, Psillakis E (2022) The ten principles of green sample preparation. *TrAC Trends Anal Chem* 148:116530. <https://doi.org/10.1016/j.trac.2022.116530> [3] Ríos-Gómez J, Lucena R, Cárdenas S (2017) Paper supported polystyrene membranes for thin film microextraction. *Microchem J* 133:90–95. <https://doi.org/10.1016/j.microc.2017.03.026>



## P029

### Inmovilización de micropartículas de intercambio catiónico sobre papel para el aislamiento selectivo de opioides en muestras de saliva y orina

Ana M. Pedraza-Soto , Rafael Lucena , Soledad Cárdenas  
*Universidad de Córdoba, Córdoba, España*

#### Resumen

El uso de sustratos naturales, como la celulosa (papel, algodón), es de gran interés para la preparación de fases sorbentes debido a su sostenibilidad y biodegradabilidad [1]. La elevada área superficial del papel hace posible su uso para adaptar materiales particulados a formato plano, consiguiendo un mayor aprovechamiento de las partículas, y combinando las ventajas de ambos materiales. En este trabajo se propone el uso de papel de filtro como sustrato sostenible para inmovilizar micropartículas comerciales de intercambio catiónico (MCX) usando poliacrilonitrilo (PAN) como aglutinante. Para ello, se usa la técnica dip-coating, evitando así procedimientos de modificación complejos. Consiste en introducir el papel del filtro en una dispersión precursora (PAN disuelto en N,N-dimetilformamida con partículas de MCX dispersas), seguido de la evaporación del disolvente. Como resultado se forma una capa de polímero con partículas de MCX accesibles para la extracción de los analitos. El proceso de síntesis es rápido, simple y barato y reduce la cantidad de sorbente necesario (aproximadamente 1 mg de MCX por papel sintetizado), potenciando al máximo la eficiencia de extracción. Para evaluar la capacidad sorbente se propone la extracción de varios opioides (codeína, metadona, naloxona, oxicodona y tramadol) y su posterior determinación mediante espectrometría de masas por infusión directa. Las partículas ofrecen un modo de interacción mixto a pH fisiológico, combinando interacciones hidrofóbicas y electroestáticas (debido a grupos sulfónico) [2]. Una vez optimizados los procesos de síntesis y extracción, el método se ha validado en muestras de saliva y orina, obteniendo límites de detección competitivos en ambas matrices. Por último, se han analizado muestras reales de saliva y orina de pacientes tratados con codeína, demostrando la aplicabilidad del método para el tratamiento de muestras biológicas.

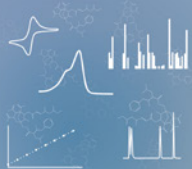
#### Agradecimientos

La investigación desarrollada en este trabajo ha sido posible gracias al proyecto PID2020-112862RB-I00 financiado por MICIU/AEI/ 10.13039/501100011033 (Feder "Una manera de hacer Europa"). Ana M. Pedraza-Soto agradece al ministerio de Ciencia, Innovación y universidades por la ayuda predoctoral FPU (Ref. FPU22/01752).

#### Bibliografía

[1] M.C. Díaz-Liñán, R. Lucena, S. Cárdenas, A.I. López-Lorente, Unmodified cellulose filter paper, a sustainable and affordable sorbent for the isolation of biogenic amines from beer samples, *J Chromatogr A* 1651 (2021) 462297 [2] C. Calero-Cañuelo, F.A. Casado-Carmona, R. Lucena, S. Cárdenas, Mixed-mode cationic exchange sorptive tapes combined with direct infusion mass spectrometry for determining opioids in saliva samples, *J Chromatogr A* 1702 (2023) 464097.





## P030

### **Análisis de la homeostasis del fósforo en streptomyces coelicolor mediante single cell y single particle ICP-MS**

Paula García Cancela<sup>1,2</sup>, Gemma Fernández García<sup>1,2</sup>, Mario Corte Rodríguez<sup>1,2</sup>, Ángel Manteca<sup>1,2</sup>,

Jörg Bettmer<sup>1,2</sup>, María Montes Bayón<sup>1,2</sup>

1. Universidad de Oviedo, Oviedo, España

2. ISPA, Oviedo, España

#### **Resumen**

*Streptomyces* es una bacteria gram-positiva empleada en la producción de la mayoría de los antibióticos utilizados en clínica<sup>1</sup>. Esta producción se ve afectada por la presencia de metales, concretamente cobre<sup>2</sup>, pero también por la presencia de otros elementos, como el fósforo. De hecho, la respuesta global de fosfato en estas bacterias afecta en gran medida al metabolismo secundario por medio de reguladores transcripcionales<sup>3</sup>. En este trabajo en colaboración con el grupo de microbiología, se descubre el regulador PhoQ, que actúa cuando existen altos niveles de fosfato sobre la esporulación de las hifas, inactivando el metabolismo secundario y modulando la acumulación de fosfato y la maduración de la cubierta de las esporas. Hasta hace relativamente poco tiempo la medida de los cambios en la concentración de fosfato intracelular resultaba compleja y habían sido pocos los estudios que permitían establecer diferencias entre cepas. En este trabajo, se lleva a cabo la evaluación de cómo PhoQ modula la respuesta global de fosfato y su efecto sobre la concentración intracelular de esta especie empleando la medida de esporas individuales de *Streptomyces*. Para ello, se han desarrollado estrategias bioanalíticas que permiten aislar y purificar las esporas para posteriormente ser introducidas empleando el sistema single cell-ICP-MS que permita llevar a cabo la cuantificación del fósforo intracelular. Los resultados muestran que la cepa mutada en phoQ acumula aproximadamente  $10.6 \pm 5.8$  fg de fósforo por espora, un nivel de incorporación 4 veces mayor que en la cepa salvaje. Además, se han evaluado procedimientos de lisis de las esporas permitiendo la detección en el lisado de gránulos de fosfato (nanopartículas) de aproximadamente  $1.5 \pm 0.9$  fg de fósforo por gránulo empleando estrategias de single particle-ICP-MS. El contenido de fósforo en estos gránulos es similar al de la cepa salvaje, traduciéndose esto en que las esporas de la cepa mutante son capaces de sintetizar una mayor cantidad de estos gránulos pero el tamaño de éstos es similar.

1. Hopwood DA. *Streptomyces* in nature and medicine: the antibiotic makers. Oxford University Press (2007) 2. Garcia Cancela P, Gonzalez Quinonez N, Corte-Rodriguez M, Bettmer J, Manteca A, Montes-Bayon M. Evaluation of copper uptake in individual spores of *Streptomyces coelicolor* and endogenic nanoparticles formation to modulate the secondary metabolism. *Metallomics* 14, 3 (2022) 3. Barreiro C, Martinez-Castro M. Regulation of the phosphate metabolism in *Streptomyces* genus: impact on the secondary metabolites. *Appl Microbiol Biotechnol* 103, 1643-1658 (2019)



## P031

### Estudiando la bioacumulación de nanopartículas metálicas en diferentes hongos silvestres comestibles

Andrés Suárez Priede<sup>1,2</sup>, Hannes Gödde<sup>3</sup>, Mario Corte Rodríguez<sup>1,2</sup>, Simone Bräuer<sup>4</sup>, Jörg Bettmer<sup>1,2</sup>

*1. Universidad de Oviedo, Oviedo, España*

*2. Instituto de Investigación Sanitaria del Principado de Asturias (ISPA), Oviedo, España*

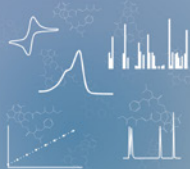
*3. Universidad de Münster, Münster, Alemania*

*4. Universidad de Viena, Viena, Austria*

#### Resumen

Las nanopartículas metálicas, cuyo origen puede ser tanto natural (biogénico o geogénico) como sintético, despiertan un interés en auge en el ámbito de la investigación científica debido a sus propiedades únicas y sus múltiples aplicaciones. Su creciente presencia en dispositivos y productos derivados de la actividad humana provoca que su dispersión y acumulación en el medio ambiente sea cada vez mayor. Diversos estudios han indicado que dichas nanopartículas metálicas exhiben, por lo general, una mayor toxicidad comparadas con concentraciones similares de los metales en forma no nanoparticulada [1]. Si bien la absorción y bioacumulación de metales traza por diversos organismos se halla estudiada en detalle, el conocimiento sobre el comportamiento de las nanopartículas metálicas en este contexto es aún limitado. Los hongos, organismos conocidos por su habilidad para absorber y bioacumular metales, representan un grupo de estudio interesante en este aspecto. Además, son varias las investigaciones que han destacado la capacidad de un tipo de hongos, las setas, de producir nanopartículas de forma biogénica [2]. Dada la importancia de estas últimas en la dieta humana, se hace indispensable llevar a cabo estudios sobre la presencia y bioacumulación de nanopartículas metálicas en dichos organismos. En este trabajo se emplearon tres lotes de muestras de hongos silvestres de las especies comestibles *Boletus edulis* y *Boletus aereus*, provenientes de distintas localizaciones, incluyendo muestras del suelo del que fueron recogidas, con el fin de estudiar su capacidad para producir y/o acumular nanopartículas metálicas presentes en el medio ambiente. Entre las múltiples técnicas descritas en la literatura para la realización de este tipo de estudios, el análisis de "single particle" mediante ICP-MS (SP-ICP-MS) ha sido recientemente utilizado para la caracterización de nanopartículas de selenio en diferentes especies de hongos [2]. Dicha técnica se empleó en este trabajo para determinar la presencia y características de nanopartículas metálicas en las muestras de setas mencionadas. Adicionalmente, se utilizó la microscopía electrónica de transmisión de alta resolución (HR-TEM) con detector de energía dispersiva de rayos X (EDX) como técnicas complementarias para dilucidar más datos sobre el tamaño y la composición de las nanopartículas.

[1] A. B. Sengul, E. Asmatulu. *Environ. Chem. Lett.* 18 (2020) 1659-1683. [2] K. L. LeBlanc, T. Kumlung, A. Suárez Priede et al. *Anal. Bioanal. Chem.* 416 (2024) 2761-2772.



## P032

### **Caracterización elemental de estructuras nanométricas individuales mediante ICP-MS: desde formas esféricas a nanotubos de hierro y nanobarras de platino**

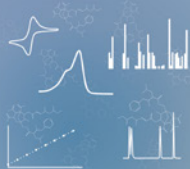
Sara Gonzalez Morales<sup>1,2</sup>, Ana Silvia Gonzalez García<sup>1</sup>, Víctor Vega Martínez<sup>1</sup>, Mario Corte Rodríguez<sup>1,2</sup>, Víctor Manuel De La Prida Pidal<sup>1</sup>, María Montes Bayón<sup>1,2</sup>

1. UNIVERSIDAD DE OVIEDO, Oviedo, España

2. Instituto de Investigación Sanitaria del Principado de Asturias (ISPA), OVIEDO, España

#### **Resumen**

La posibilidad de utilizar la espectrometría de masas de plasma de acoplamiento inductivo en modo de partícula única (SP-ICP-MS) para la caracterización de materiales micro y nanoestructurados es un campo de investigación en crecimiento [1]. Sin embargo, la inmensa mayoría de los estudios publicados hasta la fecha se centran en la caracterización de nanopartículas esféricas o con geometrías que se aproximan a esferas. En este trabajo, se presenta la posibilidad de expandir los límites a estructuras anisotrópicas [2], en las que una dimensión es mucho mayor que las otras. Estas nanoestructuras incluyen nanobarras de Pt sólidas y nanotubos huecos de Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>. Para la adecuada caracterización de estas nanoestructuras tras su fabricación, se estudiaron diferentes estrategias complementarias, incluyendo la microscopía electrónica de barrido (SEM), microscopía electrónica de alta resolución (HR-TEM) y la técnica de SP-ICP-MS [3]. Las tres técnicas se complementan para abordar el análisis de nanoestructuras anisotrópicas multicomponentes. En este estudio se muestran las optimizaciones necesarias para llevar a cabo la medida mediante SP-ICP-MS de los flujos de introducción de muestra, tiempo de integración, etc. que permitan la correcta observación de los eventos iónicos de Fe y Pt respectivamente. Trabajando en las mejores condiciones, se obtiene una buena correlación entre la masa obtenida mediante la calibración directa empleando patrones iónicos a partir de las medidas por SP-ICP-MS y las mediciones de HR-TEM y SEM. Todo esto demuestra la capacidad de estrategia de caracterización de la técnica de SP-ICP-MS como herramienta novedosa para evaluar los diferentes procesos de fabricación de nanomateriales no esféricos, raramente estudiados anteriormente. Además, se proponen estrategias que permiten solventar los problemas asociados a la caracterización de estos nanomateriales.



## P033

### **Nanosistemas para el transporte de cisplatino: evaluación de la incorporación y distribución espacial en sistemas celulares complejos**

Lucía Gutiérrez Romero<sup>1,2</sup>, Borja Gallego<sup>2,3</sup>, René Rodríguez<sup>2,3</sup>, Elisa Blanco González<sup>1,2</sup>, María Montes Bayón<sup>1,2</sup>

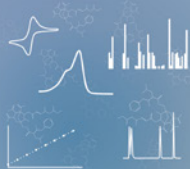
1. Universidad de Oviedo, Oviedo, España

2. Instituto de Investigación Sanitaria del Principado de Asturias (ISPA), Oviedo, España

3. Instituto Universitario de Oncología de Asturias (IUOPA), Oviedo, España

#### **Resumen**

En los últimos años, el empleo de nanotransportadores que mejoren la incorporación celular de fármacos representa una tendencia creciente en investigación. En particular, nuestro grupo ha llevado a cabo numerosos estudios empleando nanopartículas de óxido de hierro ultrapequeñas (< 10 nm) que muestran buena biocompatibilidad, son fáciles de incorporar al interior celular y presentan la capacidad de conjugarse fácilmente con metalofármacos, como puede ser el cisplatino y/o profármacos relacionados con él. Empleando estas nanoestructuras conjugadas con cisplatino (IV) como profármaco se ha obtenido una incorporación significativamente mayor con respecto a cisplatino en modelos celulares 2D de cáncer de ovario y osteosarcoma. Estos estudios han sido llevados a cabo gracias al empleo de estrategias de “single cell” con detección mediante plasma de acoplamiento inductivo (SC-ICP-MS) que facilitan el estudio de incorporación a nivel de célula individual empleando cultivos celulares de modelos tumorales. Sin embargo, el entorno tumoral real es bastante más complejo que el representado por las células en cultivos 2D. Por tanto, se ha propuesto el estudio comportamiento de los nanotransportadores de Pt en cultivos multicelulares con estructura tridimensional denominados esferoides formados por agregados de células tumorales autoensambladas que representan mejor la heterogeneidad de las microrregiones tumorales, ofreciéndonos información muy valiosa sin llegar a modelos animales. Por tanto, el objetivo de este trabajo se basa en la evaluación de la incorporación y distribución espacial de las nanopartículas de óxido de hierro ultrapequeñas recubiertas con el profármaco de cisplatino (IV) (FeNPs-Pt(IV)) en esferoides de osteosarcoma de diferentes tamaños y su comparación con respecto al cisplatino. Se optimizaron dos estrategias analíticas para evaluar la penetración del fármaco y su distribución espacial. Por un lado, se estudió la incorporación de Pt a nivel de célula única (SC-ICP-MS) en los esferoides tratados con ambos tratamientos (FeNPs-Pt(IV) y cisplatino libre) tras la disgregación de los mismos. Los mismos tipos de esferoides fueron analizados adicionalmente mediante ablación laser-ICP-MS (LA-ICP-MS) para estudiar la distribución del fármaco a lo largo de la estructura tridimensional y obtener la imagen completa del comportamiento del nanosistema.



## P034

### **Bioaccesibilidad elemental y nanopartículas endógenas en insectos de granja: en busca de alimentos sostenibles de calidad**

Andrés Suárez Priede<sup>1,2</sup>, Ignacio Machado<sup>3</sup>, Mario Corte Rodríguez<sup>1,2</sup>, David Heath<sup>4</sup>, Esther Heath<sup>4</sup>,  
Lenka Kourimská<sup>5</sup>, Martin Kulma<sup>5</sup>, Jörg Bettmer<sup>1,2</sup>, María Montes Bayón<sup>1,2</sup>

1. Universidad de Oviedo, Oviedo, España

2. Instituto de Investigación Sanitaria del Principado de Asturias (ISPA), Oviedo, España

3. Universidad de la República, Montevideo, Uruguay

4. Jožef Stefan Institute, Liubliana, Eslovenia

5. Czech University of Life Sciences, Praga, República Checa

#### **Resumen**

El uso de insectos como fuente de alimento ha suscitado un gran interés recientemente en el mundo desarrollado. La demanda de menos recursos naturales para su producción, así como la menor emisión de gases de efecto invernadero resultante la convierten en una alternativa de alimentación más sostenible [1]. Los insectos poseen un alto valor nutritivo ya que constituyen una fuente importante de vitaminas, minerales, y, sobre todo, proteínas. Por otro lado, son especialmente adecuados para la producción industrial debido a su rápido crecimiento y alta tasa de reproducción. Son varias las especies de insectos que ya han sido autorizadas por la Comisión Europea para su comercialización y consumo, y otras tantas se encuentran en proceso de evaluación. A pesar de su aprobación y regulación, la producción de insectos para consumo no está libre de ciertos peligros para la seguridad alimentaria que aún requieren de un estudio y control más extenso. Uno de los riesgos toxicológicos destacables se corresponde con la bioacumulación de ciertos contaminantes químicos en estos organismos. Los insectos presentan la capacidad de acumular elementos metálicos que puedan hallarse en niveles relativamente altos en los sustratos utilizados para su alimentación. Esta bioacumulación puede acarrear efectos positivos o negativos para la salud humana, dependiendo tanto de la naturaleza de dichos elementos, como también de su bioaccesibilidad, es decir, de la cantidad de éstos que se libera de la matriz alimentaria y puede ser absorbida en el sistema gastrointestinal. Por otro lado, diversos estudios han revelado la presencia natural de ciertas nanopartículas metálicas endógenas en insectos [2], por lo que también deben ser consideradas durante cualquier evaluación de seguridad alimentaria. En este trabajo se llevó a cabo un ensayo de bioaccesibilidad in vitro de aluminio, cobre, hierro, manganeso, plomo, selenio y zinc en tres especies de insectos de consumo: *Tenebrio molitor*, *Locusta migratoria* y *Acheta domesticus*. Su cuantificación se realizó mediante análisis de ICP-MS. Adicionalmente, la técnica de "single particle" ICP-MS (SP-ICP-MS) fue utilizada para evaluar la presencia y características de nanopartículas de estos metales, junto con otras técnicas complementarias como la cromatografía líquida de alta eficacia (HPLC) o la microscopía electrónica de transmisión de alta resolución (HR-TEM) con detector de energía dispersiva de rayos X (EDX) [3].

[1] A. Van Huis. *J. Insects Food Feed* 7 (2021) 573-584. [2] A. Bhattacharyya, A. Bhaumik et al. *Afr. J. Biotechnol.* 9 (2010) 3489-3493. [3] I. Machado, A. Suárez Priede et al (2024) enviado.



## P035

### Trace level determination of 14 phthalates in edible oils by combination of solid-phase microextraction and gas chromatography-mass spectrometry

Evaristo Ballesteros <sup>1</sup>, Laura Palacios Colon<sup>1</sup>, Andrés J. Rascón <sup>2</sup>, Beatriz Puebla-Domínguez <sup>1</sup>, Laura Ávalos-Monroy <sup>1</sup>

1. E.P.S. de Linares. Universidad de Jaén, Linares, España

2. Facultad de Ciencias. Universidad de Jaén, Jaén, España

#### Resumen

Plasticisers are chemical compounds added to polymers, such as polyvinyl chloride (PVC), to make them flexible and soft and extend their life. Phthalates are the best known and most widely used group of plasticisers. Human exposure to phthalates occurs from a variety of environmental sources, including food contact materials, dust, pharmaceuticals and household products. Most phthalates have been classified as carcinogenic, mutagenic or toxic; affecting to reproduction and endocrine systems [1]. The Environmental Protection Agency has set the Maximum Contamination Limit Goal for phthalates at zero, and the Maximum Contaminant Level for drinking water has been set at 6 micrograms per litre [2]. In literature, several methodologies applied different extraction and isolation techniques for phthalates in food samples; like dispersive liquid-liquid microextraction, ultrasonic assisted extraction, solid-phase extraction and solid-phase microextraction (SPME). Nowadays, the use of SPME has grown thanks to its versatility, covering a wide range of polarity or having different physicochemical properties with different sorbent fibres. For the chromatographic identification different combination are used such as, high-performance liquid chromatography-mass spectrometry, high-performance liquid chromatography–diode array detection, and gas chromatography-mass spectrometry (GC-MS) [3]. In this work SPME combined with GC-MS is used for the determination and quantification of phthalates in edible oils. Phthalates are organic hydrophobic compounds that are highly insoluble in water but have a high affinity for alcohols and fats. The procedure has been optimised under different pHs, time, stirring rate and temperature conditions. Low amounts of organic solvents were used compared to other extraction techniques. The method was validated with good analytical properties: acceptable recovery, good linearity and precision for the satisfactory determination of analytes in commercial oil products at µg/kg level.

[1] L. Panneel, P. Cleys, G. Poma, et al. *Environ. Int.* 186 (2024) 108605. [2] M. Mohammadi, M. Farhadi, S. Ghanbari, et al. *Toxicol. Rep.* 12 (2024) 108605. [3] B. Alves, M. Gallimberti, J. Paulo, et al. *Talanta* 266 (2024) 124974.



## P036

### Monitoring of the presence of benzophenones and derivatives in surface water samples by solid-phase extraction and gas chromatography mass-spectrometry

Evaristo Ballesteros<sup>1</sup>, Beatriz Puebla-Domínguez<sup>1</sup>, Laura Ávalos-Monroy<sup>1</sup>, Laura Palacios Colón<sup>1</sup>,  
Andrés J. Rascón<sup>2</sup>

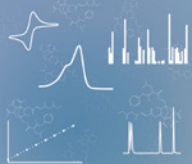
1. E.P.S. de Linares. Universidad de Jaén, Linares, España

2. Facultad de Ciencias. Universidad de Jaén, Jaén, España

#### Resumen

Benzophenones (BPs) are well known UV-filter compounds, with a high capacity to absorb radiation, being the main reason for their use in the cosmetic industry, specially in sunscreen lotions. Although only benzophenone-3 is allowed in cosmetics, it is common to find a wide variety of BPs, from benzophenone-1 to benzophenone-12 following the international nomenclature of cosmetic ingredients registered in the European Union Cosmetics Directive. Along with benzophenone-3, octocrylene, a benzophenone precursor, is also permitted for their use in cosmetics. The interest in these compounds has increased as they are considered harmful to the environment due to their toxicity. It has been seen interferences in growth of algae and plants and hormonal effects over different fish species [1]. The monitoring of this family of compounds in surface water is of great interest to assess their presence and degradation over time, particularly the transition from octocrylene and benzophenone-3 to other benzophenones, which are considered dangerous. Additionally, it aims to understand how the use of sunscreens and cosmetics affects water quality. In this sense, benzophenones are accurately detected and quantified by analytical techniques such as gas chromatography and high-performance liquid chromatography coupled to mass spectrometry (GC-MS and HPLC-MS, respectively) [2]. The sensitivity of the methods used is enhanced by the use of solid phase extraction (SPE), which allows the removal of interferents present in the sample matrix and increases the preconcentration factor. In this work, a method has been proposed for the isolation and determination of 11 benzophenones and derivatives in different water samples based on the use of SPE and GC-MS techniques. After optimization of the different experimental variables, the method proved satisfactory results in terms of precision (relative standard deviation < 10%) and accuracy (recovery rates close to 100%). The proposed method has been applied to sea, sewage, river, well, pool and tap water samples.

[1] L. Carstensen, S. Beil, H. Börnick, et al. J. Hazard. Mater. 430 (2022) 1-20. [2] E. O'Malley, M.S. McLachlan, J.W. O'Brien, et al. Sci. Total Environ. 754 (2021) 1-8.



## P037

### Extracción en fase sólida de fluoroquinolonas mediante discos rotativos impresos en 3D con agitación dual

Francisco Mestre Manrique, Enrique Javier Carrasco Correa, Miriam Beneito Cambra  
*Grupo CLECEM, Departamento de Química Analítica, Universidad de Valencia, C/ Doctor Moliner, 50, 46100, Burjassot, Valencia, España*

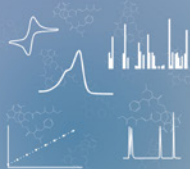
#### Resumen

Desde el descubrimiento de la penicilina, los antibióticos han sido uno de los mayores avances en medicina y veterinaria. Las fluoroquinolonas (FQ) son una familia de agentes antibacterianos de amplio espectro ampliamente utilizadas, pero debido a su metabolismo incompleto y su limitada biodegradación, se liberan al medioambiente provocando efectos tóxicos en organismos acuáticos y efectos indeseables en la salud humana. Por lo tanto, el desarrollo de métodos de pretratamiento de muestra, efectivos y selectivos, para FQ en muestras complejas es crucial para su monitorización, la protección ambiental y la salud humana. Estos analitos en aguas ambientales se encuentran a niveles de trazas, requiriéndose la implementación de sistemas de extracción capaces de alcanzar altos niveles de preconcentración. En este sentido, el desarrollo de sistemas de extracción innovadores es decisivo para la detección de estos compuestos. A este respecto, la impresión 3D ofrece nuevas oportunidades para fabricar dispositivos a medida. Además, inconvenientes de la impresión 3D, como la baja área superficial, son fácilmente subsanables mediante su fácil modificación con materiales funcionales avanzados (ej. redes metal orgánicas, MOFs) que se complementan perfectamente mejorando sus características. En este trabajo, se propone un dispositivo impreso en 3D cuya superficie se ha modificado con un MOF para la retención de FQ en muestras de agua. Entre los diferentes MOFs testados se seleccionó uno basado en zinc y ácido trimésico (BTC). El dispositivo impreso en 3D, con un diseño personalizado en forma de taza, presenta dos posiciones de agitación independientes, dando lugar a factores de preconcentración superiores a 150. Para ello, la cavidad del dispositivo fue tratada para permitir el crecimiento del MOF ( $Zn_3(BTC)_2$ ) en las paredes mediante dos estrategias distintas, crecimiento directo y capa a capa del MOF, con el fin de obtener recuperaciones eficientes y las máximas retenciones de FQ. Este trabajo muestra el gran potencial de la impresión 3D para la preparación de dispositivos de extracción personalizados en el campo del pretratamiento de muestras.

#### Agradecimientos

Agencia Española de Investigación (AEI/10.13039/501100011033) del Ministerio de Ciencia e Innovación (MICINN) por el proyecto PID2021-125459OB-I00 y a la Generalitat Valenciana (GV) por los proyectos CIAICO/2022/183, INVEST/2022/117, INVEST/2022/425, INVEST/2022/299 y CIGE/2023/69. Red Nacional para la Innovación en las Técnicas de Tratamiento de Muestras Miniaturizadas (RED2022-134079-T) concedida por el MICINN. Este estudio forma parte del programa de Materiales Avanzados y recibió apoyo del MICINN con financiamiento de la Unión Europea Next Generation EU (PRTR-C17.11) y de la GV.





## P038

### Detección de trazas de nueces y avellanas en alimentos procesados con inmunoplateformas amperométricas desechables

María Pedrero <sup>1</sup>, Sofiia Tvorynska <sup>1,2</sup>, Alba Civera <sup>1,3</sup>, Maria Gamella <sup>1</sup>, Rebeca M. Torrente-Rodríguez <sup>1</sup>, Patricia Galán-Malo <sup>4</sup>, Luis Mata <sup>4</sup>, Lourdes Sánchez <sup>3</sup>, Jirí Barek <sup>2</sup>, José M. Pingarrón <sup>1</sup>, María D. Pérez <sup>3</sup>, Susana Campuzano <sup>1</sup>

1. Universidad Complutense de Madrid, Madrid, España

2. Charles University, Praga, República Checa

3. Universidad de Zaragoza-CITA, Zaragoza, España

4. ZEULAB S.L, Zaragoza, España

#### Resumen

En esta comunicación se presentarán las primeras inmunoplateformas electroquímicas, individuales y duales, para la detección de trazas de nueces y avellanas en masa cruda y galletas horneadas [1]. La determinación de sus principales proteínas alergénicas, Jug r 1 y Cor a 9, respectivamente, se ha llevado a cabo sobre microsoportes magnéticos (MBs) capturando y marcando estas proteínas con anticuerpos policlonales específicos, producidos en el laboratorio, sin modificar y conjugados con la enzima peroxidasa de rábano picante para su detección amperométrica utilizando el sistema de hidroquinona/peróxido de hidrógeno sobre electrodos serigrafados de carbono, tras el atrapamiento magnético de las MBs que portan los inmunocomplejos tipo sándwich correspondientes. Tanto las plataformas individuales como las duales demostraron excelentes características operativas, permitiendo la determinación sensible y selectiva de las dos proteínas alergénicas (límites de detección de 0.12 y 0.56 ng mL<sup>-1</sup> para Jug r 1 y Cor a 9, respectivamente). Además, se aplicaron con éxito a la detección en un único ensayo de galletas horneadas con 0.0025 % de nuez y 0.00002 % de avellana obteniendo resultados comparables a los proporcionados por las técnicas ELISA. Las características de la bioplateforma dual implementada permiten considerarla como un dispositivo de gran utilidad para garantizar una nutrición segura y personalizada priorizando la precisión y confiabilidad del procesamiento de los alimentos y evitando etiquetados incorrectos. [1] S. Tvorynska, A. Civera, M. Gamella, et al. *Sensing and Bio-Sensing Research* 44 (2024) 10064, <https://doi.org/10.1016/j.sbsr.2024.100644>.

#### Agradecimientos

Subvención PID2022-136351OB-I00 (MCIN/AEI/10.13039/501100011033 y “FEDER Una manera de hacer Europa”), Programa TRANSNANOAVANSENS-CM de la Comunidad de Madrid (Subvención S2018/NMT-4349), Catedrá Agrobank (Ref 2019/0061), Gobierno de Aragón (Ref. A20\_23R) y Fundación Social Europea. A. Civera agradece al Gobierno de Aragón un contrato predoctoral y a la Fundación Ibercaja y al CAI (CA 1/21) una beca de investigación. S. Tvorynska agradece al “Erasmus+ Learning Agreement for Traineeship with Charles University”. Los autores desean agradecer el uso del Servicio General de Apoyo a la Investigación–SAI, Universidad de Zaragoza.



## P039

### **Extracción con fluidos presurizados de compuestos bioactivos en cáscaras de cacahuete para promover la valorización de residuos y la economía circular**

Ana María Ares Sacristán, Clara Schumann Pérez, Beatriz Martín Gómez, José Bernal Del Nozal  
*Universidad de Valladolid, Valladolid, España*

#### **Resumen**

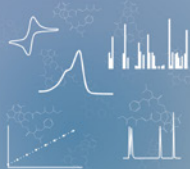
Las cáscaras de cacahuete se consideran normalmente residuos agroindustriales, por lo que se suelen desechar principalmente mediante incineración, lo que produce contaminación ambiental. Sin embargo, las cáscaras de cacahuete presentan muchos compuestos bioactivos, por lo que una alternativa para evitar la contaminación y promover la valorización de las cáscaras de cacahuete consiste en extraer sus compuestos bioactivos, lo que mitiga su impacto medio ambiental y se alinea con la política de residuos cero. Entre estos compuestos bioactivos, los más predominantes en las cáscaras de cacahuete son los flavonoides y los compuestos fenólicos, que tienen actividad antioxidante y senolítica [1]. De acuerdo con los principios de la química verde, es recomendable emplear técnicas de extracción respetuosas con el medio ambiente, como la extracción con fluidos presurizados (PLE), utilizando disolventes como agua o etanol. Este estudio se enfoca en desarrollar y optimizar un método PLE para obtener extractos de cáscaras de cacahuete con la mayor concentración posible de compuestos bioactivos, principalmente flavonoides. Para lograrlo, se llevó a cabo un diseño de experimentos para establecer las condiciones óptimas de extracción con un número limitado y reducido de pruebas. Posteriormente, se analizó la capacidad antioxidante, el contenido total de fenoles y flavonoides, así como el perfil de compuestos fenólicos individuales en estos extractos, utilizando diferentes métodos adaptados a la matriz. Además, se optimizó un método para determinar el contenido individual de aminoácidos esenciales. Estos métodos se aplicaron a seis muestras de cáscaras de cacahuete.

#### **Agradecimientos**

Beatriz Martín-Gómez expresa su Agradecimiento al Ministerio de Ciencia, Innovación y Universidades de España por la concesión de un contrato FPU (FPU22/02334) y Clara Schumann-Pérez agradece al Ministerio de Educación la concesión de una beca de colaboración.

#### **Bibliografía**

[1] X. Rico, B. Gullón, J. L. Alonso et al. *Carbohydr. Polym.* 183 (2018) 21–28



## P040

### Extracción ecosostenible de compuestos fenólicos de hojas de olivo: comparación de disolventes eutécticos profundos naturales y convencionales

Paulina Tapia Quirós<sup>1,2</sup>, Aina Mir cerdà<sup>1,3</sup>, Mercè Granados<sup>1,3</sup>, Sònia Sentellas<sup>1,3,4</sup>, Javier Saurina<sup>1,3</sup>

1. *Universitat de Barcelona, Barcelona, España*

2. *Universitat Politècnica de Catalunya, Barcelona, España*

3. *Instituto de Investigación en Nutrición y Seguridad Alimentaria, Universitat de Barcelona, Santa Coloma de Gramenet, España*

4. *Programa Serra Húnter, Generalitat de Catalunya, Barcelona, España*

#### Resumen

Actualmente, la gestión de residuos es un problema importante para las industrias agroalimentarias, por lo que el desarrollo de estrategias para el tratamiento de estos residuos se ha convertido en un gran desafío [1]. Desde la perspectiva de la economía circular los residuos agroalimentarios son una fuente rica en compuestos bioactivos como los polifenoles, que pueden ser empleados en las industrias alimentaria, farmacéutica y cosmética [2]. Este estudio tiene como objetivo evaluar la recuperación de polifenoles en hojas de olivo utilizando disolventes eutécticos profundos naturales (NADES) y disolventes convencionales (agua y soluciones hidroetanólicas) con diferentes técnicas de extracción compatibles con un escalado a nivel industrial como son: extracción sólido-líquido (SLE) y extracción asistida por microondas (MAE). Para la optimización de las condiciones de extracción, se analizaron los factores de composición del disolvente, temperatura y tiempo. La eficiencia de extracción se evaluó a partir del contenido total de polifenoles (TPC) mediante el ensayo de poder antioxidante (ferric reducing antioxidant power, FRAP), y la cuantificación de compuestos fenólicos individuales determinados mediante cromatografía de líquidos de alta resolución (HPLC). Además, se evaluó la capacidad antioxidante de los extractos por voltamperometría diferencial de impulsos (DPV). Como resultado, el sistema NADES (cloruro de colina:glycerol, 1:5 m/m, 30% agua) obtuvo un mayor rendimiento de extracción que los solventes convencionales. Las técnicas y condiciones de extracción seleccionadas fueron MAE (10 min, 80°C), y SLE con agitación mecánica (2 horas, 80°C). La combinación MAE y NADES podría ser una alternativa ecológica y sostenible a los disolventes convencionales y las tecnologías de extracción tradicionales, especialmente en términos de rendimiento y velocidad de extracción. Por el contrario, SLE con agua o mezclas hidroetanólicas requiere temperaturas y tiempos más prolongados para lograr un rendimiento similar, pero son más fácilmente escalables.

1. Tapia-Quirós, P.; Montenegro-Landívar, M.F.; Vecino, X.; Alvarino, T.; Cortina, J.L.; Saurina, J.; Granados, M.; Reig, M. A Green Approach to Phenolic Compounds Recovery from Olive Mill and Winery Wastes. *Sci. Total Environ.* 2022, 835, 155552, doi:10.1016/j.scitotenv.2022.155552.

2. Tapia-Quirós, P.; Granados, M.; Sentellas, S.; Saurina, J. Microwave-Assisted Extraction with Natural Deep Eutectic Solvents for Polyphenol Recovery from Agrifood Waste: Mature for Scaling-Up? *Sci. Total Environ.* 2024, 912, doi:10.1016/j.scitotenv.2023.168716.



## P041

### Desarrollo de un sorbente de afinidad en papel origami para la extracción de lisozima

José Manuel Herrero Martínez, Natalia Piqueras García, María Vergara Barberán,  
María Jesús Lerma García  
*Grupo CLECEM, Dpto. Química Analítica, Universitat de València, Burjassot, Valencia, España*

#### Resumen

La alergia al huevo es una de las alergias alimentarias más frecuente en la infancia temprana. Entre las diferentes proteínas presentes en el huevo capaces de provocar respuestas alérgicas inmediatas se encuentran: la ovomucoide, ovalbúmina, ovotransferrina, lisozima y  $\alpha$ -livetina. En concreto, la lisozima es una glucosidasa que representa el 3,5% de las proteínas presentes en la clara de huevo. Con el fin de garantizar la seguridad del consumidor, es esencial llevar a cabo el desarrollo de metodologías eficaces, selectivas y sensibles que permitan la monitorización y cuantificación de las proteínas alergénicas del huevo. En este sentido, los aptámeros, secuencias de ADN o ARN de cadena sencilla, han sido reconocidos como ligandos de reconocimiento prometedoros, dadas sus ventajas significativas en cuanto a síntesis, modificación y estabilidad, demostrando su utilidad en diversas aplicaciones analíticas, particularmente en el desarrollo de biosensores y como sorbentes. Sin embargo, la combinación de aptámeros con plataformas de bajo coste basadas en materiales sostenibles (como papel) ha sido muy poco explorada. Por esta razón, en este trabajo se ha llevado a cabo el desarrollo de dispositivos basados en papel modificado con aptámeros capaces de reconocer a la lisozima del huevo. Para ello, en primer lugar, se recubrió un trozo de papel con un polímero monolítico basado en monometacrilato de glicerilo, utilizándose un puntero láser para su polimerización. En esta primera etapa, se optimizó el volumen de mezcla de polimerización necesario para conseguir un recubrimiento homogéneo y reproducible del polímero. A continuación, se llevó a cabo la silanización de la superficie de polímero, seguido de la inmovilización del aptámero mediante una reacción tiol-eno. En esta etapa, se investigó el tiempo de incubación necesario para conseguir un adecuado grado de inmovilización del aptámero a la superficie del polímero. Seguidamente, los soportes de papel con aptámero se utilizaron para llevar a cabo la extracción de lisozima, evaluándose diversos factores que afectan a la retención y elución de dicha proteína. Una vez seleccionadas las condiciones óptimas, el soporte desarrollado se empleó para determinar el contenido de lisozima en muestras susceptibles de contener trazas de huevo.

#### Agradecimientos

Agencia Española de Investigación (AEI/10.13039/501100011033) del Ministerio de Ciencia e Innovación (MICINN) por el proyecto PID2021-125459OB-I00 y a la Generalitat Valenciana (GV) por los proyectos CIAICO/2022/183, CIGE/2023/69 y INVEST/2022/425. Red Nacional para la Innovación en las Técnicas de Tratamiento de Muestras Miniaturizadas (RED2022-134079-T) concedida por el MICINN.



## P042

### **Extracción selectiva del ácido domoico mediante piezas impresas en 3D basadas en estructuras LEGO®**

José Manuel Herrero Martínez, María Jesús Lerma García, Alba Roselló Carrió, Marta Moscardó Lloret, José María Gordón Pidal  
*Grupo CLECEM, Dpto. Química Analítica, Universitat de València, Burjassot, Valencia, España*

#### **Resumen**

El ácido domoico (AD) es una neurotoxina que se encuentra comúnmente en mariscos y pescados contaminados, representando un riesgo significativo para la salud humana, por lo que su detección y cuantificación supone un reto importante. Habitualmente, la cromatografía líquida acoplada con detección UV suele ser la técnica más empleada para su determinación dada las ventajas de rapidez, sencillez y sensibilidad. No obstante, se requiere de una etapa de tratamiento de muestra, para la cual se suelen emplear sorbentes de limitada selectividad. En este sentido, la utilización de aptámeros como elementos de reconocimiento molecular, dada su elevada selectividad, puede subsanar esta limitación, y mejorar significativamente la extracción. Hasta la fecha, la mayoría de los soportes utilizados con estos ligandos en preparación de muestra se basan en nanopartículas magnéticas y barritas agitadoras, siendo deseable la utilización de nuevos soportes que garanticen una mayor flexibilidad a la hora de resolver problemas analíticos. En este sentido, la impresión 3D permite la creación de objetos personalizados a bajo coste. Sin embargo, los soportes impresos suelen presentar una limitada selectividad, por lo que su combinación con aptámeros representa una alternativa prometedora. En este estudio, se propone un enfoque innovador para la extracción de AD basado en el diseño y fabricación de piezas impresas en 3D modulares, que imitan el ensamblaje tipo LEGO®, las cuales fueron modificadas con aptámero. Este diseño modular permite modificar no solamente la pieza de interés, sino que también minimiza el consumo de reactivos y reduce el coste. Para ello, se fabricaron piezas impresas con filamentos de fluoruro de polivinilideno (PVDF) usando la tecnología de deposición fundida. A continuación, se modificó la superficie de ciertas piezas impresas en 3D para introducir grupos vinilo, facilitando así la posterior unión del aptámero mediante una reacción click. Tras la oportuna caracterización, se abordó la optimización de las condiciones de extracción con las piezas modificadas, estudiándose distintas variables para lograr recuperaciones cuantitativas de AD.

#### **Agradecimientos**

Agencia Española de Investigación (AEI/10.13039/501100011033) del Ministerio de Ciencia e Innovación (MICINN) por el proyecto PID2021-125459OB-I00 y a la Generalitat Valenciana (GV) por el proyecto CIAICO/2022/183. Red Nacional para la Innovación en las Técnicas de Tratamiento de Muestras Miniaturizadas (RED2022-134079-T) concedida por el MICINN. Este estudio forma parte del programa de Materiales Avanzados y recibió apoyo del MICINN con financiamiento de la Unión Europea Next Generation EU (PRTR-C17.11) y de la GV.



## P043

### Plumas de aves marinas como bioindicador de contaminación metálica

María Estela Del Castillo Busto, David Pais Freire, Javier Terán Baamonde, Atocha Paula Ramos Martínez, José Manuel Andrade Garda, Soledad Muniategui Lorenzo  
*Universidade da Coruña (UDC), A Coruña, España*

#### Resumen

La contaminación por metales pesados es una problemática medioambiental global debido a su persistencia, su capacidad de acumulación en los diferentes compartimentos medioambientales, y sus efectos tóxicos sobre una gran variedad de organismos, incluyendo los seres humanos. El análisis de plumas de aves ha surgido como una estrategia no destructiva y éticamente favorable para monitorear este tipo de contaminación. Sin embargo, la eficacia de las plumas como bioindicadores depende de la eliminación adecuada de la contaminación exógena. En este trabajo, se evaluó el potencial de las plumas de la especie de ave marina Frailecillo Atlántico (*Atlantic Puffin Fratercula Arctica*) como bioindicador de la contaminación metálica. Las aves, cuyos cuerpos fueron recogidos en las costas gallegas entre 2020 y 2023, fueron sometidos a necropsias y a la extracción de plumas primarias. Se investigaron dos protocolos de lavado, ambos incluyendo una etapa inicial con agua ultrapura, para eliminar la posible contaminación externa. Tras el lavado, las plumas se secaron, trocearon y se sometieron a una digestión ácida asistida por microondas (MAE). El proceso de digestión se validó mediante el análisis de dos materiales de referencia de composición similar a la pluma (GBW07601, pelo humano y SRM 2977, tejido de mejillón). A continuación, se determinaron metales pesados (As, Cd, Hg, Ni y Pb), y elementos esenciales (Co, Cu, Fe y Mg) mediante espectrometría de masas con plasma de acoplamiento inductivo (ICP-MS). Tras la optimización de los parámetros analíticos e instrumentales, se evaluaron los protocolos de lavado, siendo necesarios lavados secuenciales con detergente, disolvente orgánico y ácido nítrico diluido para eliminar la fracción metálica exógena. Los metales analizados se detectaron en todas las muestras de plumas primarias de los tres ejemplares de Frailecillos Atlánticos, con niveles de concentración comparables o inferiores a estudios previos. Este trabajo propone un método no invasivo, sencillo y rápido para la biomonitorización de metales en plumas de aves marinas mediante MAE y determinación por ICP-MS, previa limpieza exhaustiva para asegurar la correcta determinación de los metales endógenos.

#### Agradecimientos

Este trabajo ha sido financiado por la Xunta de Galicia (Ref. ED431C 2021/56). M.E. del Castillo Busto agradece a los fondos Next Generation EU y al Gobierno Español por su Beca María Zambrano (RSU.UDC.MZ08). J. Terán-Baamonde también agradece a la Xunta de Galicia por su beca postdoctoral (ED481B-2021-090).



## P044

### Biomonitorización de metales en orina de población adulta en la Comunidad Valenciana

Carmen Sáez<sup>1</sup>, Alfredo Sánchez<sup>2</sup>, Clara Coscollà<sup>3</sup>, Miguel Ángel Aguirre<sup>1</sup>, Antonio Canals<sup>1</sup>

1. Departamento de Química Analítica, Nutrición y Bromatología, Instituto Universitario de Materiales, Universidad de Alicante, Alicante, España

2. Laboratorio de Salud Pública de Alicante, Alicante, España

3. Fundación para el Fomento de la Investigación Sanitaria y Biomédica de la Comunidad Valenciana, FISABIO-Salud Pública, Valencia, España

#### Resumen

Estamos expuestos constantemente a diversos tipos de contaminantes, entre los cuales se encuentran los metales. Estos entran en nuestro organismo a través de la ingesta, inhalación o contacto dermal principalmente [1]. La biomonitorización nos permite evaluar la exposición interna a través de matrices biológicas (i.e., sangre, orina, pelo, leche materna, entre otras). BIOMOVAL es un estudio de biomonitorización humana llevado a cabo en población adulta de la Comunidad Valenciana, donde se han evaluado los niveles de 19 metales en orina de 518 participantes para su evaluación del riesgo en la salud humana. El método de análisis consiste en una dilución 1:10, utilizando 1 mL de muestra y añadiendo 8,9 mL de H<sub>2</sub>O ultrapura y 0,1 mL de HNO<sub>3</sub> al 69%. Posteriormente se agita y se analiza mediante ICP-MS. De los 19 metales, 7 de ellos son considerados esenciales (i.e., Co, Cu, Mn, Mo, Se, V y Zn) y el resto tóxicos (i.e., As, Ba, Be, Cd, Cs, Ni, Pb, Pt, Sb, Th, Tl y U). El límite de cuantificación (LOQ) es 0,5 µg/L para todos ellos, excepto para Be que es 1 µg/L y para Cu y Zn que es de 10 µg/L. La frecuencia de detección (DF) es 100% para Mo, Se y Zn (elementos esenciales) siendo la media geométrica (GM) 35,1, 32,0 y 254,7 µg/L, respectivamente. En cuanto a metales tóxicos As, Ba, Cs, Ni y Pb presentan DF cercanas al 100% (excepto Pb, que es del 77%) y los niveles encontrados han sido 44,1, 2,1, 5,4, 2,3 y 0,7 µg/L, respectivamente. A efectos de la evaluación del riesgo, se estimaron los cocientes de peligrosidad (HQ) para los metales tóxicos y esenciales con valores de referencia en "biomonitoring equivalents (BE)" establecidos para Ba, Se, Mo y Zn (HQ = GM o percentil 95 / BE). Un HQ > 1 indica que puede haber un riesgo potencial en la población estudiada. En nuestro estudio ningún metal supera dicho valor, pero se ha encontrado que el 32,2% de la población tienen una deficiencia de Zn, el 22,8% de Mo y el 5,8% de Se.

#### Agradecimientos

Este trabajo contó con el apoyo de la Dirección General de Salud Pública de Valencia junto con FISABIO, que financió el proyecto BIOMOVAL y la Universidad de Alicante (UAIND21-03C).

#### Referencias

[1] Nordberg, G.; Fowler, B. A.; Nordberg, M. Handbook on the Toxicology of Metals, 4th edition.; Elsevier/Academic Press: Amsterdam, 2015.



## P045

### El rol del catión y el anión en la cromatografía líquida acuosa con dodecilsulfato sódico y líquidos iónicos de imidazolio como reactivos de la fase móvil

Carlos Josué Tereba Mamani, María José Ruiz Ángel, María Blazquez Mateu, María Celia García Álvarez-Coque  
*Universitat de Valencia, Burjassot, España*

#### Resumen

La cromatografía líquida de fase inversa (RPLC) es una técnica de análisis ampliamente reconocida en la actualidad, en la cual la separación de los solutos se logra mediante su interacción con una fase estacionaria apolar y una fase móvil moderadamente polar, lo que le confiere una gran versatilidad [1]. Sin embargo, la presencia de grupos silanol libres aniónicos en la fase estacionaria puede generar picos amplios y asimétricos al interactuar con analitos cargados positivamente [2]. Para superar esta limitación, en esta investigación se estudia el comportamiento cromatográfico de compuestos básicos en RPLC con fases móviles que contienen únicamente el tensioactivo dodecilsulfato sódico (SDS) por encima de su concentración micelar crítica, y líquidos iónicos (LIs) derivados de 1-alquil-3-metilimidazolio, como aditivos en ausencia de disolvente orgánico, por lo que se trata de una fase móvil acuosa [3]. Se exploró el comportamiento de distintos LIs asociados a cloruro, tetrafluoroborato y hexafluorofosfato. Como solutos de prueba se utilizaron los beta-bloqueantes acebutolol, atenolol, carteolol, metoprolol, oxprenolol, y propranolol. Los resultados mostraron mejoras significativas en la retención y resolución de los analitos, con la obtención de picos más estrechos y simétricos. Además, se observó una influencia notable del catión y anión de los LIs, de acuerdo a su naturaleza, sobre la interacción del tensioactivo y los solutos con la fase estacionaria, lo que brinda nuevas perspectivas sobre la dinámica cromatográfica. Se debe destacar, también, la eficiencia de la combinación de SDS y LI en la mejora de la selectividad y la separación de compuestos básicos en RPLC, superando los resultados obtenidos al emplearse SDS y LI por separado. La nueva modalidad cromatográfica, al evitar la necesidad de utilizar disolventes orgánicos, también fomenta la sostenibilidad en la práctica cromatográfica. Por lo tanto, estos resultados no sólo ofrecen una solución efectiva para los desafíos asociados con la interacción entre analitos catiónicos y grupos silanol, sino que también tienen implicaciones significativas para el diseño de metodologías analíticas más respetuosas con el medio ambiente.

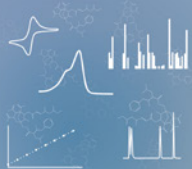
#### Agradecimientos:

Este trabajo ha sido financiado por el Proyecto PID2019-106708GB-I00 del Ministerio de Ciencia e Innovación (MCIN)/AEI/ 10.13039/501100011033

#### Referencias

- [1] M.C. García-Álvarez-Coque, J.J. Baeza-Baeza, G. Ramis-Ramos, Reversed phase liquid chromatography, en Analytical Separation Science Series, Vol. 1, Wiley-VCH, Nueva York, 2015, págs. 159–197.
- [2] U.D. Neue, K. Tran, A. Méndez, P.W. Carr, J. Chromatogr. A 1063 (2005) 35–45.
- [3] C.J. Tereba-Mamani, M.A. Janczuk, M.J. Ruiz-Ángel, M.C. García-Álvarez-Coque, J. Chromatogr. A 1689 (2023) 463740.





## P046

### Estudiando la senescencia celular en cáncer colorrectal mediante inmunosensado electroquímico: un gran desafío para entenderlo y tratarlo.

Sandra Tejerina-Miranda <sup>1</sup>, Maria Gamella <sup>1</sup>, María Pedrero <sup>1</sup>, Ana Montero-Calle <sup>2</sup>, José M Pingarrón <sup>1</sup>,  
Rodrigo Barderas <sup>2</sup>, Susana Campuzano <sup>1</sup>

1. Universidad Complutense de Madrid, Madrid, España

2. Instituto de Salud Carlos III, Madrid, España

#### Resumen

Con el paso de los años, en un número creciente de células del organismo se van produciendo daños en el ADN, disfunción de telómeros, activación de oncogenes y estrés de orgánulos, derivando en un proceso de senescencia celular [1]. Las células senescentes se acumulan en los tejidos creando microambientes pro-tumorales a través del fenotipo secretor asociado a senescencia (SASP), aumentando la expresión de quimioquinas, proteasas, factores de crecimiento, citoquinas y otros biomarcadores [2]. Entre ellos, el factor diferencial de crecimiento 15 (GDF-15) y el inhibidor tisular de la metaloproteínasa 1 (TIMP-1) se han relacionado con senescencia celular y metástasis en cáncer colorrectal (CCR) [2, 3]. Con el propósito de profundizar en el papel de estos biomarcadores en estos procesos, en este trabajo se han desarrollado inmunoplateformas para la detección individual de TIMP-1 y simultánea de TIMP-1 y GDF-15, asistidas por el empleo de microsoportes magnéticos, formatos de inmunoensayo tipo sándwich, marcaje enzimático con la enzima HRP y transducción amperométrica sobre electrodos serigrafados de carbono, individuales o duales, utilizando el sistema H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>/hidroquinona. En las condiciones experimentales exhaustivamente optimizadas, ambas bioplateformas demostraron excelentes características analíticas en términos de reproducibilidad (RSD 2.1-3.6%), límites de detección (13.0-19.2 pg mL<sup>-1</sup>), tiempo de análisis (60-75 min) y especificidad frente a otras proteínas que coexisten en muestras biológicas. Las bioherramientas desarrolladas se enfrentaron al análisis de extractos y secretomas de células de CCR con diferente capacidad metastásica y plasma y tejido de pacientes diagnosticados con CCR en distintos estadios, demostrando la posibilidad de cuantificar el contenido de ambas proteínas en todas ellas de manera rápida y tras una simple dilución de las muestras. Los resultados obtenidos ponen en valor las oportunidades que ofrecen estas nuevas tecnologías frente a las convencionales (ELISA o blotting), tanto en términos de capacidad de multiplexado y aplicabilidad en el punto de necesidad como para explorar el secretoma celular, así como el papel que juegan los dos biomarcadores diana de senescencia celular en la tumorigénesis y metástasis de CCR, clave para seguir avanzando en su entendimiento y tratamiento.

#### Agradecimientos

Proyectos PID2022-136351OB-I00 (MCIN/AEI/10.13039/501100011033 y “FEDER Una manera de hacer Europa”), PI20CIII/00019 y PI23CIII/00027 (Programa AES-ISCIII cofinanciado con fondos FEDER) y FEI-EU-22-08 (Programa Horizonte 2020-UCM).

**Bibliografía:** [1] D. Hanahan. *Cancer Discov.* 12 (2022) 31–46. [2] S. Tejerina-Miranda, V. Pérez-Ginés, R.M. Torrente-Rodríguez, et al. *Sens. Diagn.* 3(2) (2024) 238–247. [3] I. Guccini, A. Revandkar, M. D’Ambrosio, et al. *Cancer Cell* 39(1) (2021) 68–82.



## P047

### Determinación elemental e isotópica de Boro por espectrometría de absorción molecular de alta resolución con cámara de grafito

Flavio Venancio Nakadi, André Luis Marques De Souza, Maite Aramendía, Martín Resano  
*Universidad de Zaragoza, Zaragoza, España*

#### Resumen

Las técnicas que se basan en la medición de la absorción atómica del boro en una cámara de grafito (GFAAS) presentan sus propios desafíos, principalmente asociados con la tendencia del boro a formar carburos y óxidos refractarios. Es necesario el uso de temperaturas de atomización elevadas y tiempos de integración significativamente extendidos para promover la atomización del boro, reduciendo así sustancialmente la vida útil de los componentes de grafito dentro del instrumento. En este estudio, se desarrolla un método de determinación de boro elemental e isotópico formando una molécula diatómica volátil de boro, monofluoruro de boro (BF), y midiendo su absorbancia en un instrumento GFAAS de alta resolución [1]. En consecuencia, introducimos un método novedoso para la determinación de boro, que emplea la espectrometría de absorción molecular (GFMAS) directamente en muestras sólidas. Sin embargo, la especie BF<sub>3</sub> es volátil y se pierde en la etapa de pirolisis de GFMAS. Por tanto, se propone una solución que implica una reacción en fase gaseosa con CH<sub>3</sub>F. Aunque todavía no se ha confirmado el mecanismo exacto para la formación de la molécula de BF, es probable que la fluoración se produzca en la fase gaseosa después de la atomización del boro. A partir de esta estrategia se ha desarrollado un método para la determinación directa de boro en materiales biológicos, monitorizando la molécula BF a 195,589 nm (transición vibrónica X1Σ<sup>+</sup>→A1Π 0,0). Este método requiere temperaturas de vaporización más bajas y un tiempo de integración más corto en comparación con el método GFAAS convencional y proporciona una sensibilidad similar. Se han logrado resultados precisos analizando directamente diferentes materiales de referencia certificados, con la corrección adecuada de las interferencias espectrales (en particular, de la molécula de PO) utilizando el método time absorbance profile TAP [2]. Además, el método GFMAS ofrece una ventaja adicional en forma de un cambio isotópico sustancial en la absorbancia de las moléculas <sup>10</sup>BF (λ=201,160 nm) y <sup>11</sup>BF (λ=200,993 nm) en la transición vibrónica X1Σ<sup>+</sup>→A1Π (1,0). Esta característica abre nuevas posibilidades para el análisis isotópico, que también se exploran en este estudio.

[1] M. Resano, M. Aramendía, FV Nakadi et al. TrAC Trends Anal. Chem. 129 (2020) 115955. [2] FV Nakadi, MC. García-Poyo, C. Pécheyran et al. J. Anal. At. Spectrom. 36 (2021) 2370-2382.

#### Agradecimientos

DGA, Construyendo Europa desde Aragón, Grupo E43\_20R PID2021-122455NB-I00 (MCIN/AEI/10.13039/501100011033) PGC2018-093753-B-I00



## P048

### Evaluating antibiotic contamination in mediterranean olive grove soils using ultrasound-assisted extraction combined with solid-phase extraction and liquid chromatography-tandem mass spectrometry

Andrés J. Rascón<sup>1,2</sup>, David Moreno-González<sup>1,2</sup>, Bienvenida Gilbert-López<sup>1,2</sup>, Juan F García-Reyes<sup>1,2</sup>

1. Universidad de Jaén, Jaén, España

2. University Research Institute for Olives Grove and Olive Oil (INUO), Jaén, España

#### Resumen

Antibiotics (ABs) are substances used primarily to combat bacterial infections in living organisms. Within the European Union, the annual consumption of antibiotics for animal production is estimated at 5,219.6 tonnes<sup>1</sup>. Their presence in manure and fertilizers directly impacts the environment and its inhabitants. Antibiotics fixate in soils through diverse mechanisms, given their nonvolatile nature and high polarity. Their existence in soils is closely tied to their presence in manure. Under this premise, and within the SOIL Mission framework, the Soil o-LIVE project aims to target this issue. For this, 475 samples from 5 different Mediterranean countries and three different types of soil management have been studied. Traditional, high-density and organic orchard soil samples were subjected to this study. The primary interaction between soils and antibiotics are solid-phase sorption and desorption mechanisms, depending heavily on the physicochemical properties of the antibiotics themselves<sup>2</sup>. The main challenge relies on dealing with matrix effects. The goal is to minimize these effects while maintaining high extraction efficiencies. A methodology combining ultrasound-assisted solid-liquid extraction followed by solid-phase extraction and detection by ultrahigh-performance liquid chromatography-tandem mass spectrometry has been developed to address this. The identified antibiotic families include quinolones, tetracyclines,  $\beta$ -lactams, ionophores, diaminopyrimidines, macrolides, sulphonamides, cephalosporins, and amphenicols. A total of 22 traditional soil management orchards were included in the study, with a cumulative concentration of ABs of 1100  $\mu\text{g}/\text{kg}$ , being  $\beta$ -lactams the most frequently detected family. The high-density orchards (9 in total) exhibited a total of 1400  $\mu\text{g}/\text{kg}$ , and organic soil management orchards (19 in total) showed a total of 3300  $\mu\text{g}/\text{kg}$  of ABs. Tetracyclines and quinolones were the predominant ABs detected families in these orchards.

The authors acknowledge the funding from the European Commission for the SOIL O-LIVE project (HORIZON-MISS-2021-SOIL-02, Grant agreement ID: 101091255).

#### References

- 1 Medicines Agency, E. Trends from 2010 to 2021 (Twelfth ESVAC report). <https://doi.org/10.2809/291108>
- 2 Jechalke, S., Heuer, H., Siemens, J., Amelung, W., & Smalla, K. (2014). Trends in Microbiology (Vol. 22, Issue 9, pp. 536–545). <https://doi.org/10.1016/j.tim.2014.05.005>



## P049

### Enhancing glycopeptide separation and identification: microseparation techniques coupled to mass spectrometry

Laura Pont<sup>1,2</sup>, Estela Giménez<sup>1</sup>, Fernando Benavente<sup>1</sup>

1. *Department of Chemical Engineering and Analytical Chemistry, Institute for Research on Nutrition and Food Safety (INSA-UB), University of Barcelona, Barcelona, España*

2. *Serra Hùnter Program, Generalitat de Catalunya, Barcelona, España*

#### Resumen

Capillary electrophoresis (CE) and low-flow liquid chromatography (micro, capillary, and nanoLC), both coupled to mass spectrometry (MS), are widely acknowledged methods for glycopeptide analysis [1,2]. Despite their widespread use, challenges persist in accurately separating glycopeptide glycoforms and unequivocally identifying them. In this work, we assessed the efficacy of CE-MS and capillary LC-MS (capLC-MS) for robust and high-throughput glycopeptide analysis [3]. Recombinant human erythropoietin (rhEPO) served as a model glycoprotein due to its significance in biopharmaceuticals and its wide glycopeptide microheterogeneity. While CE-MS with fused silica capillaries effectively separated glycopeptides differing in sialic acid content, it struggled with glycoforms possessing the same sialic acid content but varying in glycan branching. In contrast, capLC-MS, employing a suitable reversed-phase C18 column, enhanced the separation of these glycoforms. Furthermore, these methods in tandem mass spectrometry (CE-MS/MS and capLC-MS/MS) yielded specific fragmentation patterns and facilitated more reliable glycoform identification. Interestingly, the capLC-MS/MS method emerged as the most promising, successfully detecting and reliably identifying a greater number of glycoforms. Furthermore, it also enabled the identification of glycopeptides containing glycolylneuraminic acid, crucial for distinguishing between endogenous and recombinant hEPO. These findings underscore the established C18 capLC-MS/MS method as highly recommended for accurate, robust, and high-throughput quality control of rhEPO biopharmaceuticals through glycopeptide fingerprinting. Additionally, its versatility extends to the analysis of other glycoprotein biopharmaceuticals or glycoprotein biomarkers of biomedical or agri-food importance.

#### Acknowledgments

This study was supported by grant PID2021-127137OB-I00 funded by MCIN/AEI/10.13039/501100011033 and by "ERDF A way of making Europe". The authors thank Judey Aymed García-Artalejo and Teresita Rodríguez for kindly provide rhEPO samples. The Bioanalysis group of the UB is part of the INSA-UB Maria de Maeztu Unit of Excellence (Grant CEX2021-001234-M) funded by MICIN/AEI/FEDER, UE.

#### References

[1] L. Pont, V. Kuzyk, F. Benavente, et al. *J. Proteome Res.* 20 (2021) 1666-1675. [2] E. Giménez, M. Gay, M. Vilaseca, *J. Proteomics.* 152 (2017) 236-242. [3] L. Pont, G. Lobo, Fernando Benavente, et al. *Microchem. J.* 200 (2024) 110386.



## P050

### Simple and low-cost auto-sampling system for wastewater monitoring

Miguel Muñoz Bartual, Ángel Sánchez Illiana, Salvador Garrigues Mateo, Francesc Albert Esteve Turrillas  
*Universitat de València, Valencia, España*

#### Resumen

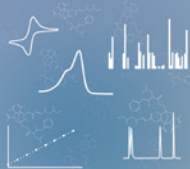
Given the rising popularity of illicit drugs, combined with the easy accessibility and misuse of prescribed medications for mental disorders, wastewater monitoring has emerged as a powerful tool for determining consumption patterns and to relate it with public health trends within a specific population group [1]. Sample collection remains a crucial step in wastewater monitoring, and choosing an appropriate sampling mode and frequency is fundamental to ensure not only the accuracy and reliability of the analytical method but also the representativeness of the wastewater sample analyzed and its extrapolation to the community studied [2]. Common collection methods at high temporal resolution involve high-cost and large-size automatic sampling devices, which present several logistical difficulties. Therefore, the need for simpler and more readily available equipment has received significant research attention [3]. In this study, a low-cost and easily constructed device based on a mini-peristaltic pump with open hardware and source has been developed as an alternative to traditional wastewater sampling methods. This system is designed to fit into the most space-constrained installations, enabling widespread deployment without requiring expensive installation or maintenance equipment, and protected from vandalism or damage. Design, selection of components and operation parameters have been evaluated to obtain the required functionality. The proposed system was deployed in sewers located at different points of the installations of University of Valencia to demonstrate its adequate performance. Composite wastewater samples were collected on different days during the first half of 2024 to obtain representative samples for the illicit and pharmaceutical drugs monitoring. Thirty-six psychoactive substances, including stimulants, benzodiazepines, antidepressants and opioids, among others, were extracted from the collected wastewater samples applying a validated solid-phase extraction (SPE) protocol developed by our research group. These substances were then determined by UPLC-MS/MS to elaborate the prevalence profile of psychoactive substances in different centers of the University of Valencia.

#### Acknowledgements

Authors gratefully acknowledge the financial support of the Spanish Delegación del Gobierno para el Plan Nacional sobre Drogas, Project PND2022I030.

#### References

[1] T.B. Erickson, N. Endo, C. Duvallet, et al. *J. Med. Toxicol.* 17 (2021) 397–410. [2] C. Ort, M.G. Lawrence, J. Rieckermann, et al. *Environ. Sci. Technol.* 44 (2010) 6024–6035. [3] D.T. McCarthy, B. Shi, M. Wang, et al. *HardwareX* 10 (2021) e00214.



## P051

### Micro-solid phase extraction of pharmaceuticals and illicit drugs from wastewaters using monolith-coated syringe filters

Miguel Muñoz Bartual, Salvador Garrigues Mateo, Francesc Albert Esteve Turrillas  
*Universitat de València, Valencia, España*

#### Resumen

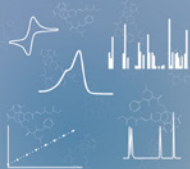
Analytes sample extraction step is crucial in analytical processes, especially for complex matrices, to ensure accurate and reliable analysis. Therefore, there is a growing trend in developing new strategies and devices for sample pre-treatment that can effectively extract and concentrate target analytes from such matrices. In recent years, polymer-based sorbents have gained recognition as sample preparation tools for the extraction of target compounds [1]. In particular, porous copolymer-monoliths are widely employed as sorbent materials due to their versatility, unique structural properties, ease of preparation, and customizable chemical functionalities [2]. In this study, a porous monolith of poly(methacrylic acid-co-ethylene glycol dimethacrylate) has been prepared on the nylon membrane of a commercial syringe filter (13 mm, 0.22  $\mu\text{m}$ ) for the micro solid-phase extraction ( $\mu\text{SPE}$ ) of pharmaceutical and illicit drugs from wastewater samples prior to liquid chromatography-tandem mass spectrometry (LC-MS/MS) determination. Polymer synthesis conditions were designed and adjusted to provide robust devices with reduced costs and ease of use. The performance of the developed devices was assessed by investigating the most appropriate  $\mu\text{SPE}$  conditions. The features of the proposed device allow for the extraction of sample volumes up to 25 mL of wastewater and the use of minimal amounts of organic solvents (200  $\mu\text{L}$  of 0.1% formic acid in methanol) in the elution step, providing an enrichment factor of 125. Sample extracts were measured by LC-MS/MS, providing limits of detection from 2 to 22 ng L<sup>-1</sup>, recoveries from 84 to 120 %, and relative standard deviations lower than 16 %. The proposed approach has demonstrated to be suitable for the easy and simple extraction of thirty-six psychoactive substances from wastewater samples with a reduced solvent consumption, low cost, minimal environmental impact, and high enrichment capacity. The method greenness and practicality has been evaluated using AGREEprep, complexGAPI, and BAGI tools, demonstrating an adequate green character and practicality of the proposed methodology.

#### Acknowledgements

Authors gratefully acknowledge the financial support of the Spanish Delegación del Gobierno para el Plan Nacional sobre Drogas, Project PND2022I030.

#### References

[1] N. Fontanals, R.M. Marcé, F. Borrull, J. Chromatogr. A 1152 (2007) 14–31. [2] T. Nema, E.C.Y. Chan, P.C. Ho, J. Pharm. Biomed. Anal. 87 (2014) 130–141.



## P052

### Empleo de materiales naturales modificados como sorbentes para microextracción en fase sólida de drogas y fármacos

Patricia García Atienza<sup>1</sup>, Sergio Armenta<sup>1</sup>, Jose Manuel Herrero Martínez<sup>1</sup>, Soledad Cárdenas<sup>2</sup>, Rafael Lucena<sup>2</sup>

1. *Universitat de València, Valencia, España*

2. *Universidad de Córdoba, Córdoba, España*

#### Resumen

La química analítica verde está estrechamente ligada a la miniaturización del tratamiento de muestra y la priorización de materiales renovables<sup>1</sup>. Esta tendencia ha suscitado un notable interés entre los investigadores en el uso de materiales naturales como sorbentes en la microextracción en fase sólida. Estos materiales se distinguen por su biodegradabilidad y sostenibilidad. En los últimos años, se han empleado materiales como papel, palillos de madera, algodón o corcho<sup>2</sup>. Estos dispositivos ya se han empleado para el análisis de cannabinoides sintéticos en saliva<sup>3</sup> o para el análisis de quinonas en orina y suero<sup>4</sup>. Por lo general, se modifica su superficie para mejorar las interacciones con los analitos de interés mediante el uso de polímeros monolíticos, polímeros de impronta molecular (MIPs), redes metálicas orgánicas (MOFs), nanopartículas, entre otros. Aunque el empleo de los materiales sin tratamiento previo puede tener ciertas ventajas, es crucial resaltar que las modificaciones en su estructura potencian notablemente su eficacia. En este trabajo se ha analizado el potencial de diversos materiales naturales, como el papel y los palillos de madera, para su utilización como sorbentes en la microextracción en fase sólida ( $\mu$ SPE) de 25 drogas y fármacos, y su posterior determinación mediante LC-MS/MS. Se ha estudiado el empleo de ambos materiales, tanto con modificaciones en su superficie como sin ellas. Las modificaciones empleadas han abarcado desde la carboximetilación de la superficie hasta la incorporación de MOFs en la misma. Para estos materiales porosos, dicha incorporación se ha llevado a cabo mediante diversas estrategias: (i) generación in situ del MOF a superficies carboxiladas, y (ii) mediante la utilización de elementos adhesivos (como silicona o cianoacrilato). En todas las variantes mencionadas, se han evaluado las condiciones de extracción para lograr recuperaciones cuantitativas, así como el volumen de muestra y de elución necesario para alcanzar un alto factor de preconcentración.

#### Agradecimientos

Agencia Española de Investigación (AEI/10.13039/501100011033) del Ministerio de Ciencia e Innovación (MICINN) por los proyectos PID2021-125459OB-I00 y PID2020-112862RB-I00. Red Nacional para la Sostenibilidad en la Preparación de Muestra (RED2022-134079-T) concedida por el MICINN.

#### Referencias

[1] S. Armenta, S. Garrigues, M. de la Guardia. *TrAC* 71 (2015) 2-8. [2] J. Millán-Santiago, R. Lucena, S. Cárdenas. *J. Sep. Sci.* 45 (2021) 223-232. [3] H. Martínez-Pérez-Cejuela, P. García-Atienza, E.F. Simó-Alfonso, et al. *Microchim. Acta* 190 (2023) 271. [4] C. Ling, Q. Shi, Z. Wei, et al. *Talanta* 237 (2022) 122912.



## P053

### **Nueva estrategia para la evaluación de CuONPs en alimentos de origen marino: hidrólisis enzimática asistida por ultrasonidos optimizada mediante análisis de superficies de respuesta y posterior monitorización mediante sp-ICP-MS**

Ángel Ríos Castro, María Jesús Villaseñor Llerena, Manuel Bartolomé Díaz  
*Universidad de Castilla - La Mancha, Ciudad Real, España*

#### **Resumen**

En este trabajo se ha desarrollado una estrategia para la extracción de nanopartículas de óxido de cobre (CuONP) en alimentos de origen marino, las cuales fueron posteriormente cuantificadas a niveles traza mediante ICP-MS en su modalidad de análisis de partículas individuales (sp-ICP-MS). La extracción propuesta se basa en una hidrólisis enzimática asistida por ultrasonidos, debido a su rapidez, sencillez y capacidad para aislar CuONPs a partir de tejidos de muestra sin alterar su tamaño y morfología nativos [1]. El diseño para la optimización de las condiciones extractivas se llevó a cabo mediante la metodología de análisis de superficies de respuesta (RSM) utilizando un modelo Box-Behnken, el cual permite realizar un estudio exhaustivo de las variables involucradas, minimizando el número total de experimentos al mismo tiempo [2]. La evaluación de los parámetros estadísticos obtenidos en el análisis de ANOVA demostró que el modelo establecido era coherente estadísticamente y permitía predecir satisfactoriamente la cantidad de CuONPs aisladas en la extracción. Empleando dicho modelo, se determinaron las condiciones de extracción más adecuadas para maximizar el rendimiento de extracción conseguido, las cuales implican: sonicación continua al 62% de amplitud durante 8 minutos, utilizando una mezcla de enzimas (pancreatina y lipasa) de 2.9 g/L. Las características de funcionamiento analítico de la metodología se evaluaron satisfactoriamente en términos de exactitud (valores de recuperación entre el 90% y el 107%) y precisión (RSD = 12%). Finalmente, las muestras marinas fueron sometidas a análisis mediante la metodología extractiva implementada y posterior monitorización via sp-ICP-MS para determinar la cantidad de CuONPs presentes. Se observaron cantidades significativas de NPs en la mayoría de las muestras estudiadas, con concentraciones comprendidas entre 29 y 113  $\mu\text{g kg}^{-1}$  y tamaños promedio de partícula que oscilaban entre 25 y 38 nm. Los resultados obtenidos proporcionaron una base sólida en la evaluación de los riesgos potenciales para la salud, mediante la estimación de parámetros relevantes como los valores NBCF (factores de bioconcentración basados en número) relativos a todas las muestras estudiadas.

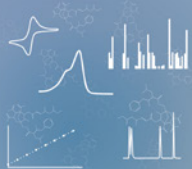
#### **Referencias**

[1] M.V. Taboada-López, et al. *Microchem. J.* 148 (2019) 652-660. [2] [2] M. Hadidi, et al. *Food. Chem.* 309 (2020) 125786.

#### **Agradecimientos**

Este trabajo ha sido financiado mediante los siguientes proyectos y entidades: PID2022-138761NB-I00 (Ministerio de Ciencia e innovación), JCCM SBPLY/21/180501/000188 (Junta de Comunidades de Castilla La Mancha), Ref. 2022-GRIN-34376 FEDER-UCLM (Plan Propio de la UCLM) y 2020-PREDCLM-15185 (contrato predoctoral de D. M. Bartolomé Díaz a cargo de la UCLM).





## P054

### El empleo de medidas de ICP-MS de célula individual (SC-ICP-MS) en estudios de inmunoterapia.

Ángela De La Rosa Díaz<sup>1,2</sup>, Mario Corte Rodríguez<sup>1,2</sup>, María Montes Bayón<sup>1,2</sup>

1. Universidad de Oviedo, Oviedo, España

2. Instituto de Investigación Sanitaria del Principado de Asturias (ISPA), Oviedo, España

#### Resumen

Las inmunoterapias representan un grupo de terapias amplio y de rápido crecimiento en el tratamiento del cáncer. Su mecanismo de acción se basa en su potencial de activación del sistema inmunológico para atacar específicamente las células cancerosas sin los efectos secundarios ampliamente dañinos de muchos quimioterapéuticos convencionales. Los anticuerpos monoclonales (mAb) están entre los tipos iniciales de inmunoterapia aprobados como tratamiento contra el cáncer y continúan desempeñando un papel fundamental y creciente en los regímenes de tratamiento actuales. Entre ellos el Rituximab (anti-CD20) es un fármaco empleado para el tratamiento de la leucemia linfocítica crónica (CLL). [1]. La CD20 es una proteína transmembrana que se encuentra en la superficie de diferentes tipos de célula del sistema inmunitario conocidas como linfocitos B y que puede encontrarse sobreexpresada hasta en un 80% en pacientes con CLL. La detección de la proteína CD20 se ha llevado a cabo tradicionalmente empleando citometría de flujo a través de anticuerpos específicos marcados con fluoróforos que se unen selectivamente a esta proteína. Sin embargo, en la búsqueda de estrategias que permitan obtener datos cuantitativos y absolutos de número de receptores CD20 por célula, en el presente trabajo se han desarrollado estrategias basadas en espectrometría de masas elemental empleando ICP-MS. En este trabajo se muestra la evaluación del marcaje del anticuerpo anti-CD20 con quelatos metálicos (MAXPAR) seguido de la introducción de células individuales en ICP-MS (single cell ICP-MS), lo permite la medida de las células CD20 positivas con una elevada sensibilidad. Además, también se muestra el desarrollo de estrategias para cuantificar la expresión de marcadores en cada célula individual tras una calibración metodológica adecuada [2]. Aplicando estas estrategias se observaron diferentes niveles de expresión de CD20 en células de diferentes pacientes de CLL respecto a la línea celular humana derivada de leucemia linfocítica crónica MEC I.

[1] A. K. Church, K. R. VanDerMeid, N. A. Baig, et al. *Clinical & Experimental immunology* 183 (2016) 90-101 [2] A. Fernández Asensio, M. Corte-Rodríguez, J. Bettmer, et al. *Talanta* 235 (2021) 122773.



## P055

### How excitation-emission matrices have revolutionised multi-way data analyses – a roadmap for multi-way calibration method developments

Arsenio Muñoz De La Peña<sup>1</sup>, Marina Antonio<sup>2,3</sup>, Hector C. Goicoechea<sup>1,2,3</sup>, Mirta R. Alcaraz<sup>1,2,3</sup>

1. *Universidad de Extremadura, Badajoz, España*

2. *Universidad Nacional de Litoral, Santa Fe, Argentina*

3. *Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas, Rosario, Argentina*

#### Resumen

The multi-way calibration is a robust analytical approach, utilising higher-order instrumental data to discern analytes within intricate systems, focusing on improving experimental efficiency and cost-effectiveness. The increasing availability of sophisticated analytical instruments has facilitated the acquisition of multidimensional data, bolstering the efficacy of multi-way calibration. Among the various analytical techniques adept at capturing high-dimensional instrumental signals, one longstanding method continues to prove its worth: fluorescence spectroscopy. For many years, excitation-emission matrix (EEM) fluorescence spectroscopy has been a compelling analytical technique, fostering the development of multidimensional data analysis-based methods. Its applications span diverse fields, including analytical chemistry and biological, food, and environmental sciences, which have been extensively documented in the scientific literature [1]. EEM spectroscopy stands out for its versatility, affordability, and exceptional capacity to provide rich analytical insights, making it the preferred choice for investigations requiring higher-order data analysis. While second-order data analysis based on EEM fluorescence spectroscopy has been widely explored, generating third-order data from EEMs data remains a challenging and spotlighted research area. Multi-way methods in analytical chemistry have evolved alongside new instrumental advances, facilitating the acquisition of second- and third-order data and, notably, EEM-based data. Given the many alternatives in developing a multi-way calibration method, charting a clear path forward is beneficial. This field remains fertile ground for further exploration and breakthroughs. In the meantime, chemometricians are preparing the ground for pioneering methodologies and advancements that promise to unravel this longstanding challenge. This work intends to trace the evolution of multi-way data analysis in recent years, focusing on applying multidimensional fluorescence in analytical contexts. It delves into the critical issues, emerging trends, and challenges in the field of analytical calibration method developments. Moreover, our comprehensive assessment encompasses the instrumental, methodological, and practical aspects of multi-way data applications, providing tailored guidance to empower readers in overcoming obstacles. In the context of this work, which aims to guide the development of EEM-based methods, understanding the principles of chemometrics is paramount. By applying these principles, researchers can harness the potential of EEM technology to address analytical challenges and drive scientific progress.

**Aknowledgements:** Ministerio de Ciencia e Innovación de España (Project PID2020-112996GB-I00) co-financed by European Funds for Regional Development is acknowledged.

#### References:

1.- A. Olivieri, G. M. Escandar, H. C. Goicoechea, A. Muñoz de la Peña (Eds.), *Fundamentals and Applications of Multiway Data Analysis*, Elsevier, 2024



## P056

### **El rol de la impresión 3D en la preparación de fases sorbentes planas y su aplicación en la etapa de preparación de muestra**

Francisco Antonio Casado-Carmona , Manuel Miró

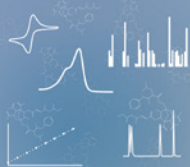
*FI-TRACE Group, Department of Chemistry, University of the Balearic Islands, Carretera de Valldemossa, km 7.5, E-07122, Palma De Mallorca, España*

#### **Resumen**

La baja concentración de los compuestos de interés en muestras ambientales, los numerosos componentes de dichas muestras, así como su incompatibilidad para el análisis directo mediante técnicas instrumentales modernas hace que la preparación de muestra sea ineludible. En este punto, con el fin de minimizar los efectos anteriormente descritos la preparación de nuevos materiales es uno de los puntos más importantes, cobrando especial interés las fases sorbentes planas. Estas fases sorbentes planas simplifican las etapas de preparación de muestra, pues son fáciles de recuperar de la matriz de la muestra. En este sentido la preparación de nuevas fases sorbentes se soporta en diversas metodologías, de las cuales una de las más empleadas es la funcionalización de un sustrato. Entre los sustratos disponibles están el papel, las láminas metálicas y los soportes de materiales plásticos. En esta comunicación nos centraremos en la presentación de diversos materiales sorbentes, basados en fases planas. Para la preparación de estas fases sorbentes presentaremos soportes impresos en 3D que permiten la preparación de geometrías a placer. Además, los soportes impresos permiten su modificación superficial bien sea mediante el anclaje químico de grupos funcionales, la deposición física de materiales particulados, o incluso la deposición en superficie de solventes. Así pues, los materiales propuestos podrán ser empleados en procesos simples de muestreo/extracción que permitan aislar los compuestos de interés de matrices de complejidad creciente como muestras ambientales, muestras biológicas simples (saliva y orina), o incluso muestras de plasma.

#### **Agradecimientos**

Los autores agradecen la financiación de la Agencia Estatal de Investigación de España (Agencia Estatal de Investigación, AEI/10.13039/501100011033), el Ministerio de Ciencia e Innovación de España (Ministerio de Ciencia e Innovación, MCIN) y la Unión Europea (NextGenerationEU/PRTR) a través del proyecto PID2020-117686RB-C33 (AEI/MCIN). Los autores también agradecen al MCIN por la financiación de la Red Española de Excelencia en Preparación Sostenible de Muestras (RED2022-134079-T).



## P057

### **Autenticación de café mediante HS-SPME-GC-MS y quimiometría. Aplicación a la detección y cuantificación de adulteraciones**

Nerea Núñez <sup>1,2</sup>, Erica Moret <sup>3</sup>, Paolo Lucci <sup>4</sup>, Javier Saurina <sup>1,2</sup>, Oscar Núñez <sup>1,2,5</sup>

1. Departamento de Ingeniería Química y Química Analítica, Universidad de Barcelona, E-08028, Barcelona, España

2. Instituto de Investigación en Nutrición Alimentaria y Seguridad Alimentaria, Universidad de Barcelona, E-08901, Santa Coloma de Gramanet, España

3. Departamento de Ciencias Agroalimentarias, Ambientales y Animales, Universidad de Údine, Via Sondrio 2/a, Údine, Italia

4. Departamento de Ciencias Agrarias, Alimentarias y Ambientales, Universidad Politécnica de Marcas, Via Breccia Bianche 10, Ancona, Italia

5. Serra Hünter Fellow, Departamento de Investigación y Universidades, Generalitat de Cataluña, Via Laietana 2, E08003, Barcelona, España

#### **Resumen**

Dada la complejidad de la cadena alimentaria, la adulteración de alimentos está aumentando y causando casos de fraude alimentario. Este trabajo se basa en la detección de fraude en una de las bebidas más populares del mundo: el café [1,2]. El café contiene un elevado número de sustancias bioactivas que contribuyen a una importante actividad antioxidante, conocida por sus efectos beneficiosos para la salud. Además, sus compuestos volátiles contribuyen tanto en el aroma como en el perfil sensorial. El contenido de esas sustancias puede variar dependiendo de la región de origen, el clima o la especie, entre otros factores. Como consecuencia, el perfil de compuestos bioactivos puede ser utilizado como fuente de datos analíticos para abordar la autenticación del café [1,2]. Se propuso el uso de HS-SPME-GC-MS utilizando dos columnas capilares (una polar WAX y una no polar DB5) para obtener información metabólica de muestras de achicoria (un adulterante de café frecuentemente utilizado) y de café sin ningún tratamiento de muestra. Además, se adulteraron cafés Robusta y Arábica con achicoria y café Robusta, respectivamente, en porcentajes de adulteración entre el 15% y el 85%, para probar la viabilidad del método propuesto para detectar y cuantificar los niveles de adulteración. Las huellas metabólicas HS-SPME-GC-MS obtenidas con ambas columnas capilares demostraron ser buenos descriptores químicos del café para ser explotados en su clasificación y autenticación mediante quimiometría. Se logró una muy buena discriminación entre las diferentes muestras de café y achicoria, café soluble y granos de café molidos, cafés de diferentes orígenes geográficos (Vietnam, Camboya y Costa Rica) y diferentes variedades de café (Arábica, Robusta y mezclas de Arábica y Robusta) mediante análisis discriminante de regresión parcial (PLS-DA), con ratios de clasificación superiores al 93.3%. Además, los estudios de adulteración de café llevados a cabo mediante regresión de mínimos cuadrados parciales (PLS) demostraron la buena capacidad de la metodología propuesta para la detección y cuantificación de los niveles de adulteración en las bebidas de café hasta un 15% de adulteración, con errores de predicción inferiores al 7.4%.

1. S. Kamiloglu. Food Chem. 227 (2019), 12-24 2. P. Esquivel, V. M. Jiménez. Food Res. Int. 46 (2) (2011), 488-495



## P058

### Desarrollo de un biosensor basado en papel origami para la detección de $\beta$ -lactoglobulina en muestras alimentarias

Natalia Piqueras García<sup>1</sup>, María Jesús Lerma García<sup>1</sup>, Donato Calabria<sup>2</sup>, Mara Mirasoli<sup>2</sup>, José Manuel Herrero Martínez<sup>1</sup>

1. Grupo CLECEM, Departamento de Química Analítica, Universitat de València, C/ Doctor Moliner, 50, 46100, Burjassot, València, España

2. Departamento de Química "Giacomo Ciamician", Alma Mater Studiorum—Universidad de Bolonia, Via Francesco Selmi 2, I-40126 Bolonia, Italia

#### Resumen

En la última década, la alta prevalencia de alergias alimentarias en la población ha generado un enorme interés debido a la sensibilización inmune a ciertos alimentos. En particular, la leche de vaca y los lácteos son los principales desencadenantes de alergias en lactantes, siendo la proteína  $\beta$ -lactoglobulina ( $\beta$ -LG) una de las más relevantes, incluso en concentraciones bajas ( $< 20$  mg/Kg), provocando reacciones adversas graves e incluso shock anafiláctico. Por lo tanto, es esencial el desarrollo de biosensores económicos, rápidos y portátiles para monitorizar la presencia de dicho alérgeno. En concreto, los aptámeros son ligandos de reconocimiento que se presentan como una alternativa interesante frente a los anticuerpos, debido a su bajo coste y gran eficiencia. En este trabajo se ha desarrollado un biosensor en papel para la detección del  $\beta$ -LG en alimentos mediante detección quimioluminiscente (CL). Para ello, se llevó a cabo un estudio preliminar de reconocimiento de dicha proteína usando partículas magnéticas modificadas con aptámero, en combinación con anticuerpos anti- $\beta$ -LG y peroxidasa de rábano (HRP), con el fin de obtener una señal luminiscente en presencia de peróxido de hidrógeno y luminol. Una vez optimizadas las condiciones de retención, se transfirió al dispositivo en papel, basado en la técnica de Origami. Dicho dispositivo se acopló a una cámara con detector de carga acoplada (CCD) para la captura de las correspondientes imágenes. En dicho dispositivo, se investigaron diferentes variables (volumen de partículas magnéticas modificadas con aptámero, volúmenes de anti- $\beta$ -LG, HRP, entre otros) con el fin de encontrar las condiciones que ofrecieran las mejores señales de CL. A continuación, se evaluaron los parámetros analíticos de la metodología desarrollada (sensibilidad, límite de detección, reproducibilidad, etc.) Actualmente, se está llevando a cabo la evaluación de la selectividad del biosensor, así como su aplicación a muestras reales.

#### Agradecimientos

Agencia Española de Investigación (AEI/10.13039/501100011033) del Ministerio de Ciencia e Innovación (MICINN) por el proyecto PID2021-125459OB-I00 y a la Generalitat Valenciana (GV) por los proyectos CIAICO/2022/183, INVEST/2022/117, INVEST/2022/425 e INNEST/2022/299. Este estudio forma parte del programa de Materiales Avanzados y recibió apoyo del MICINN con financiamiento de la Unión Europea Next Generation EU (PRTR-C17.I1) y de la GV.



## P059

### Autenticación de café adulterado mediante FIA-ESI-MS y quimiometría

Nerea Núñez <sup>1,2</sup>, Josep Pons <sup>1</sup>, Javier Saurina <sup>1,2</sup>, Oscar Núñez <sup>1,2,3</sup>

1. Departamento de Ingeniería Química y Química Analítica, Universidad de Barcelona. E-08028, Barcelona, España

2. Instituto de Investigación en Nutrición Alimentaria y Seguridad Alimentaria, Universidad de Barcelona, E-08901, Santa Coloma de Gramanet, España

3. Serra Hùnter Fellow, Departamento de Investigación y Universidades, Generalitat de Cataluña, Via Laietana 2, E08003, Barcelona, España

#### Resumen

Los productos alimenticios son matrices muy complejas, lo que hace que la calidad de estos productos sea un tema de gran interés en nuestra sociedad. Considerando la complejidad de la cadena alimentaria, la adulteración de alimentos está aumentando, provocando casos de fraude alimentario. En este campo, las bebidas son productos alimenticios que pueden ser fácilmente adulterados. Este estudio se centra en la temática de la detección de fraudes en el café, una de las bebidas más populares en el mundo. El café contiene un número elevado de sustancias bioactivas (ácidos fenólicos, polifenoles y alcaloides; siendo especialmente abundantes los ácidos eláigico, cafeico y clorogénico) que dan lugar a su importante actividad antioxidante, conocida por sus efectos beneficiosos para la salud [1,2]. El objetivo de este trabajo fue desarrollar un método eficiente no dirigido de huellas FIA-ESI-MS en combinación con quimiometría para lograr la caracterización, clasificación y autenticación de muestras de café, junto con posibles adulterantes (cebada, achicoria y harinas) utilizando el método quimiométrico de análisis discriminante de regresión de mínimos cuadrados parciales (PLS-DA). Además, muestras de café Arábica y Robusta fueron adulteradas con cebada, achicoria y harina, y los datos de FIA-ESI-MS obtenidos fueron sometidos a regresión de mínimos cuadrados parciales (PLS). Los resultados demostraron la viabilidad de la metodología propuesta para evaluar la autenticidad del café y cuantificar los niveles de adulteración (entre 15% y 85%, junto a muestras puras que representaban el 0% y el 100% de adulteración), mostrando errores de calibración y predicción inferiores a 9.0% y 15.0%, respectivamente.

1. S. Kamiloglu. Food Chem. 227 (2019), 12-24 2. P. Esquivel, V. M. Jiménez. Food Res. Int. 46 (2011), 488-495



## P060

### **Influencia del catión/anión empleado como agente coacervante en la síntesis de BioSUPRAS de 1,2-hexanodiol**

Noelia Caballero Casero, Celia Sánchez Vallejo, Soledad Rubio Bravo  
*Universidad de Córdoba, Córdoba, España*

#### **Resumen**

Los disolventes sostenibles, aquellos que se alinean con los Principios de la Química Verde, han adquirido notoriedad en los últimos años; especialmente aquellos cuyas propiedades pueden ser diseñadas y adaptadas según lo requiera el problema analítico. Un ejemplo de disolvente sostenible modulable son los disolventes supramoleculares (SUPRAS). Los SUPRAS son líquidos nanoestructurados generados a partir de moléculas anfífilas mediante procesos de autoensamblaje y coacervación. En una disolución de anfífilos a una concentración superior a la concentración de agregación crítica (cac), la acción de un agente coacervante promueve el crecimiento de los agregados hasta que alcanzan una densidad distinta a la de la disolución de síntesis y se separan en una nueva fase (SUPRAS). El crecimiento de los agregados está dominado por interacciones no-covalentes, por lo que dependen de las condiciones ambientales. Para que se produzca el crecimiento de los agregados, las interacciones anfífilo-anfífilo deben estar favorecidas. En este estudio se ha evaluado el efecto de diferentes sales, incluyendo cloruros, sulfatos y citratos de sodio y amonio, como agentes coacervantes para un bioSUPRAS formado a partir de disoluciones acuosas de 1,2-hexanodiol. Se han establecido los diagramas de fases obtenidos para los distintos bioSUPRAS, evaluado el volumen obtenido conforme a las condiciones de síntesis; con el objetivo de establecer cómo las diferentes sales intervienen en el proceso de autoensamblaje y coacervación en función de sus propiedades (ej. radio hidrodinámico, carga, volumen, capacidad de solvatación, etc.). Los resultados obtenidos permiten predecir las sales más adecuadas en el proceso de coacervación de compuestos anfífilos solubles en agua permitiendo el desarrollo de SUPRAS a temperatura ambiente.

Los autores agradecen la ayuda PID2020-113743RB-I00 financiada por MICIU/AEI/10.13039/501100011033. N. Caballero-Casero agradece la ayuda IJC2020-044941-I financiada por MICIU/AEI/10.13039/501100011033 y por Unión Europea NextGenerationEU/PRTR.



## P061

### Síntesis de bioSUPRAS para la obtención de polifenoles a partir de plantas subutilizadas

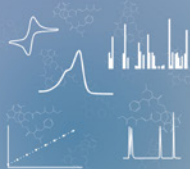
Noelia Caballero Casero, Angie Julieth Bellaizac Riascos, Soledad Rubio Bravo  
*Universidad de Córdoba, Córdoba, España*

#### Resumen

En la última década, ha surgido un interés significativo dentro de la comunidad científica por desarrollar disolventes que se alineen con los principios de la Química Verde. Los disolventes supramoleculares representan una alternativa prometedora para sustituir los disolventes tradicionales en los procedimientos de extracción debido a sus propiedades intrínsecas, como la capacidad para solubilizar múltiples compuestos en un amplio intervalo de polaridad gracias a sus diferentes microambientes y el elevado número de sitios de unión con interacciones diferentes que presentan. En este estudio se ha desarrollado un nuevo biodisolvente supramolecular (bioSUPRAS) a partir de oleato de sorbitano, un anfífilo obtenido a partir de fuentes renovables, mediante coacervación inducida por benzoato de sodio. Se ha llevado a cabo la caracterización estructural del bioSUPRAS mediante técnicas de microscopía electrónica, así como el estudio de su composición y principales propiedades fisicoquímicas. El nuevo bioSUPRAS se ha aplicado a la obtención de compuestos bioactivos a partir de la Jara, un género (*Cistus*) de plantas silvestres propias del monte mediterráneo, que presentan un rico perfil fenólico. El aprovechamiento de estas plantas contribuye a una mayor eficiencia de la gestión silvícola de los montes mediterráneos, dado el alto valor añadido de los compuestos bioactivos para la industria cosmética y alimentaria. Así, se ha desarrollado un método de extracción de polifenoles a partir de Jara blanca (*Cistus albidus*) y la Jara negra (*Cistus salviifolius*). Las principales variables del proceso de extracción han sido optimizadas, obteniéndose valores de contenido fenólico total de  $277 \pm 15$  mg y  $269 \pm 34$  mg equivalentes de ácido gálico por gramo de muestra seca para Jara blanca y negra, respectivamente. Estos valores fueron hasta dieciocho veces superiores a los obtenidos mediante un proceso de extracción tradicional empleando etanol. Este estudio muestra que el nuevo bioSUPRAS sintetizado permite realizar una extracción más sostenible y eficiente que los disolventes orgánicos. Además, su aplicación para la obtención de compuestos bioactivos a partir de plantas silvestres abre la puerta a nuevas formas de financiación sostenibles para el sector agrario.

Los autores agradecen la ayuda PID2020-113743RB-I00 financiada por MICIU/AEI/10.13039/501100011033. N. Caballero-Casero agradece la ayuda IJC2020-044941-I financiada por MICIU/AEI/10.13039/501100011033 y por Unión Europea NextGenerationEU/PRTR.





## P062

### Near-Infrared enhanced rhodium-based nanozyme for biofilm eradication via depropargylation

Andrés Machuca Marcos<sup>1</sup>, Liang Liu<sup>2</sup>, Soham Chakraborty<sup>2</sup>, Mingdi Jiang<sup>2</sup>, William Ndugire<sup>2</sup>, Cristina-Maria Hirschbiegel<sup>2</sup>, Hao-Yu Greg Lin<sup>3</sup>, Alexander Ribbe<sup>2</sup>, José Luis Luque García<sup>1</sup>, Vincent M. Rotello<sup>2</sup>

2

1. *Universidad Complutense de Madrid, Madrid, España*

2. *University of Massachusetts, Amherst, Estados Unidos*

3. *Harvard University, Cambridge, Estados Unidos*

#### Resumen

Nowadays, bacterial infections have become a major health concern worldwide due to the increasingly bacterial resistance to antibiotics over the years. One of the principal triggers of this situation is the misuse of common antibiotics such as incomplete treatments, which lead to systemic administration of antibiotics at ineffective doses. Besides, the formation of bacterial biofilms promotes antibiotic resistance and evasion of immune attacks due to the “encapsulation” of the bacteria within a protective matrix, thus requiring higher antibiotic dosage or even surgery for eradication [1]. On this behalf, bioorthogonal chemistry has emerged as a potential strategy in the design of innovative treatments like on-site activation of masked antibiotics, allowing for more precise treatments while minimizing the off-target effects of conventional antibacterial drugs, hence potentially preventing further development of resistance. However, its clinical applications are limited due to the organometallic nature of common catalysts [2]. Therefore, new research is needed for the development of new catalysts with enhanced activity under physiological conditions. Recently, many studies have demonstrated the great potential of metallic nanoparticles in nanomedicine. In fact, some nanoparticles can interact with external electromagnetic radiation through plasmonic resonance, thus enhancing their properties. This is the case of rhodium nanoparticles (RhNPs), which have been not only used for catalytic purposes over the years but also have been recently demonstrated to have potential biomedical applications. Interestingly, these nanoparticles can be excited by using near-infrared (NIR) radiation, leading to a therapeutic response [3]. Accordingly, interesting new biomedical applications of these nanoparticles are yet to be discovered. In this work, we propose a new hybrid nanocatalyst based on the light-enhanced catalytic properties of RhNPs conjugated with a positively charged PONI-C11-TMA polymer for enhanced biofilm internalization. The obtained material was characterized using HAADF-STEM, EDS, DLS and Z potential and the catalytic conditions were optimized based on fluorescence release of propargyl-masked dye. Additionally, the internalization ability of this nanoconjugates and its catalytic performance within bacterial biofilms were demonstrated in 2-day-old RFP MRSA biofilms by confocal microscopy. Biofilm eradication effect of NIR-enhanced catalytic activation of masked antibiotic (propargyl-linezolid) was confirmed based on MRSA biofilm viability through resazurin assay. Finally, the low cytotoxicity of the material was confirmed, thus making it a promising candidate for clinical applications.

#### References

1. Sharma et al., *Antimicrob Resist In* 8, (2019) 76.
2. Wang et al., *Adv Drug Deliv Rev* (2021) 176.
3. Machuca et al., *Chem–Eur J* 26 (2020) 34.



## P063

### **Nuevo biodisolvente supramolecular (bioSUPRAS) para la valorización de residuos de poda**

Alejandro Pulido Zurera, Noelia Caballero Casero, Soledad Rubio Bravo  
*Universidad de Córdoba, Córdoba, España*

#### **Resumen**

La gestión sostenible y eficiente de residuos de poda ha ganado importancia en los últimos años como vía para un mejor aprovechamiento de los recursos naturales. La biomasa vegetal es una fuente de compuestos bioactivos, entre los que destacan los polifenoles. Estos compuestos presentan propiedades antioxidantes y anticancerígenas; por lo que son de interés para las industrias cosmética y alimentaria. La extracción de compuestos bioactivos a partir de biomasa se ha llevado a cabo tradicionalmente mediante disolventes orgánicos. Sin embargo, su extracción está limitada a la polaridad del disolvente y se requieren elevados volúmenes y tiempos de extracción con energía auxiliar. Ello ha llevado a la búsqueda de una alternativa más sostenible, en consonancia con los principios de la Química Verde. Los disolventes supramoleculares (SUPRAS) son líquidos nanoestructurados formados por el autoensamblaje de moléculas anfifílicas. Sus propiedades los convierten en una excelente alternativa a los disolventes orgánicos en procesos de extracción. En este estudio se propone la síntesis de un nuevo biodisolvente supramolecular (bioSUPRAS) a partir del monopalmitato de sorbitano, un anfifilo natural ampliamente empleado en la industria alimentaria y cosmética. La síntesis se llevó a cabo en un ambiente hidro-orgánico formado por agua, 1-propanol y sulfato sódico. Se ha obtenido el diagrama de fases que determina las condiciones de síntesis del bio-SUPRAS. Además, mediante microscopía (TEM, cryo-TEM y cryo-SEM) se ha determinado que la morfología de las nanoestructuras son hexosomas de 50-250 nm. Asimismo, se ha estudiado la composición del bioSUPRAS y sus propiedades fisicoquímicas bajo diferentes condiciones de síntesis. El nuevo bioSUPRAS se ha aplicado a la extracción de polifenoles en restos de poda de morera blanca (*Morus alba*). Se ha seleccionado la morera blanca dada su presencia en los parques urbanos y su rico perfil fitoquímico. Se ha llevado a cabo la optimización de las principales variables, como la composición del bioSUPRAS, la relación muestra:SUPRAS y el tiempo de extracción. El método desarrollado muestra una mayor eficiencia que la extracción con disolvente orgánico, permitiendo extraer el perfil completo de polifenoles.

Los autores agradecen la ayuda PID2020-113743RB-I00 financiada por MICIU/AEI/10.13039/501100011033. N. Caballero-Casero agradece la ayuda IJC2020-044941-I financiada por MICIU/AEI/10.13039/501100011033 y por Unión Europea NextGenerationEU/PRTR.



## P064

### Uso de intercambiadores catiónicos débiles basados en serrín como fases sorbentes en la determinación de antidepresivos en saliva mediante Espectrometría de Masas

Carmen González-Galán <sup>1</sup>, Jaime Millán-Santiago <sup>1</sup>, Héctor Martínez-Pérez-Cejuela <sup>2</sup>, Sergio Armenta <sup>2</sup>,  
José-Manuel Herrero-Martínez <sup>2</sup>, Rafael Lucena <sup>1</sup>, Soledad Cárdenas <sup>1</sup>

1. Grupo de investigación *Affordable and Sustainable Sample Preparation*, Departamento de Química Analítica,  
Universidad de Córdoba, Córdoba, España

2. Department of Analytical Chemistry, University of Valencia, Dr Moliner 50, 46100, Burjassot, Valencia, España

#### Resumen

El tratamiento de muestra constituye una etapa fundamental para poder obtener información analítica de calidad. En este punto, la complejidad de la matriz de la muestra combinada con los niveles exigentes de sensibilidad y selectividad requeridos, hacen que la comunidad científica centre sus esfuerzos en buscar nuevos materiales con mejores prestaciones que las que proporcionan los sorbentes clásicos. Dentro de esta búsqueda, los materiales naturales adquieren gran relevancia debido a su elevada porosidad y área superficial, así como los grupos funcionales que presentan en su superficie. Muchos de ellos presentan interacciones débiles con los analitos que pueden ser reforzadas mediante su modificación superficial utilizando polímeros, nanopartículas, anclajes covalentes o mediante reacciones químicas. En esta comunicación, se estudia el potencial del serrín químicamente modificado mediante una reacción de carboxilación, como sorbente para la extracción de antidepresivos (amitriptilina, imipramina, clomipramina y fluoxetina) de muestras de saliva. El sorbente permite establecer una interacción mixta con los analitos (combinado interacciones hidrofóbicas y de intercambio catiónico) mejorando la selectividad de la extracción y permitiendo el análisis mediante el la técnica de infusión directa acoplada a espectrometría de masas en tándem (DI-MS/MS). Se llevó a cabo un estudio de las variables que afectan a los procesos de extracción (pH, fuerza iónica, número de ciclos, cantidad de sorbente) y elución (eluyente, volumen de elución) para favorecer el rendimiento de extracción de los analitos. El método analítico descrito presenta un elevado potencial en términos de sensibilidad con límites de detección inferiores a 0.18 µg L<sup>-1</sup>. Además, el proceso de tratamiento de muestra se simplifica ya que no es necesario diluir la muestra ni ajustar el pH, pudiendo trabajar al pH fisiológico de la saliva. La DI-MS/MS permite aumentar la frecuencia de análisis de muestras al eliminar la separación cromatográfica previa. Además, el dispositivo de extracción usado es asequible debido al bajo coste del sorbente y a su fácil preparación.

#### Agradecimientos

La investigación desarrollada en este trabajo ha sido posible gracias a los proyectos PID2020-112862RB-I00 y PID2021-125459OB-I00 financiados por MICIU/AEI 10.13039/501100011033 (FEDER "Una manera de hacer Europa"). C. González-Galán y J. Millán-Santiago agradecen a los organismos correspondientes por las ayudas "Programa INVESTIGO" y "FPU19/01488", respectivamente. Los autores agradecen a la Red Nacional para la Sostenibilidad en la Preparación de Muestra (RED2022-134079-T) financiada por el MICINN.



## P065

### Cinta de aluminio recubierta con micropartículas de intercambio iónico y su combinación directa con espectrometría de masas ambiental

Carlos Calero-Cañuelo <sup>1</sup>, Francisco Antonio Casado-Carmona <sup>1,2</sup>, Rafael Lucena <sup>1</sup>, Soledad Cárdenas <sup>1</sup>

*1. Affordable and Sustainable Sample Preparation (AS2P) Research Group, Departamento de Química Analítica, Instituto Químico para la Energía y el Medioambiente IQUEMA, Universidad de Córdoba, Campus de Rabanales, Edificio Marie Curie, E-14071, Córdoba, España*

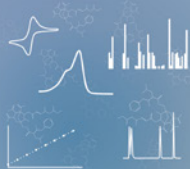
*2. FI-TRACE Group, Department of Chemistry, University of the Balearic Islands, Carretera de Valldemossa, km 7.5, E-07122, Palma de Mallorca, España*

#### Resumen

El análisis directo mediante espectrometría de masas (MS) es una estrategia interesante en bioanálisis ya que permite una toma rápida de decisiones, reduciendo el consumo de reactivos. Sin embargo, debido a la complejidad de la matriz de la muestra y la baja concentración de los analitos, en muchos casos es necesario llevar a cabo una etapa previa de tratamiento de muestra. Este trabajo propone la preparación de cintas de aluminio recubiertas con partículas de intercambio iónico como fases sorbentes y estudia su acoplamiento directo con MS mediante la modalidad de "substrate spray". Este acoplamiento se ha evaluado usando la determinación de codeína en muestras de saliva como prueba de concepto. El proceso de preparación de la fase sorbente es simple y rápido, lo que permite preparar un número elevado de ellas. Este aspecto, unido a que la extracción se realiza empleando un agitador orbital, hace posible el tratamiento simultáneo de numerosas muestras (al menos 45), incrementando de este modo la frecuencia de análisis. Para el estudio de las variables involucradas en el proceso de extracción se ha empleado un modelo multivariante. Finalmente, la metodología optimizada se validó para su aplicación en muestras reales. El límite de detección fue 0,3 ng/mL, mientras que la precisión en el mismo día, expresada como desviación estándar relativa, fue mejor que el 9,4%. La exactitud del método, expresada como recuperación relativa, estuvo en el intervalo comprendido entre el 78-98 %. Además, este método se aplicó a la determinación de muestras de saliva de pacientes que habían consumido codeína como tratamiento médico, siendo capaz de determinar correctamente más del 91 % de las muestras. Además, como la modalidad de ionización en condiciones ambientales para la introducción de la muestra en MS no está presente en todos los laboratorios, también se demostró el potencial del empleo de MS en la modalidad de infusión directa.

#### Agradecimientos

La investigación desarrollada en este trabajo ha sido posible gracias al proyecto PID2020-112862RB-I00 financiado por MICIU/AEI/10.13039/501100011033 (Feder "Una manera de hacer Europa"). Carlos Calero-Cañuelo agradece al ministerio de Ciencia, Innovación y universidades por la beca predoctoral FPU (Ref. FPU20/04765).



## P066

### **Egg white-assisted fast green synthesis of fluorescent copper nanoparticles: characterization and sensing applications**

Dimitrios Ziogkas<sup>1,2</sup>, Olga Fernández Nuñez<sup>1</sup>, Ana Maria Contento Salcedo<sup>1,2</sup>, Ángel Ríos Castro<sup>1,2</sup>

1. *Department of Analytical Chemistry and Food Technology, Faculty of Sciences and Chemical Technologies, University of Castilla-La Mancha, 13071, Ciudad Real, España*

2. *Regional Institute for Applied Chemistry Research (IRICA), 13071, University of Castilla-La Mancha, 13071, Ciudad Real, España*

#### **Resumen**

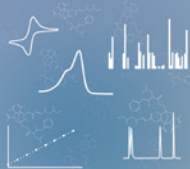
Nowadays, nanoparticles can be synthesized using different physical and chemical procedures. However, these methods can have significant drawbacks and real concerns for the laboratories, but also for the environment, due to the use of high temperature and pressure, acidic mediums, high energy and time consumption, toxic and expensive chemicals, and toxic by-products formation. Compared to traditional synthesis approaches, green-synthesized nanoparticles, using eco-friendly and non-toxic materials and methods, are meeting the increasing needs for clean, cost-effective, less expensive, environmentally friendly, and efficient synthesis processes [1]. In response to these challenges, egg white is an excellent component for the green synthesis of nanoparticles, as it is rich in proteins such as ovalbumin, lysozyme, ovalyoid, and ovaltransferrin, easily available, inexpensive, and non-toxic. Moreover, it can be used for bioimaging, biolabeling, and biocatalytic applications as well as for the development of biosensors [2]. In this work, a successful synthesis of copper nanoparticles (CuNPs), using a green and environmentally friendly approach that applies malic acid and egg white as reducing and protective agent respectively have been prepared, with copper(II) chloride as precursor. Several parameters related to the synthesis on concentration, fluorescence and size of the nanoparticle were also optimized. Once purified, the CuNPs were characterized in terms of morphology, size and composition using Scanning Electron Microscopy (SEM), Dynamic Light Scattering (DLS), Ultraviolet–Visible Spectroscopy (UV-Vis), Fluorescence, and Fourier Transform Infrared Spectroscopy (FTIR). The resulting CuNPs exhibit photoluminescence and highly stable properties in colloidal dispersions. The distinctive luminescent characteristics have been exploited as a sensitive sensor of alcohols based to aggregation induced emission enhancement (AIEE) effect. Therefore, the fluorescence emission of the CuNPs at 520 nm under the excitation of 446 nm was effectively enhanced.

#### **References**

[1] S, Ying, Z. Guan, P. C. Ofoegbu, et al. *Environ. Technol. Innovation*. 26 (2022) 102336. [2] Y. Li, Y. He, Y. Ge, et al. *Microchim. Acta*. 188 (2021), 1-9.

#### **Acknowledgements**

This work was supported by the Spanish Ministry of Science and Innovation [grant number PID2022-138761NB-I00], JJCC Castilla-La Mancha [grant number JCCM SBPLY/21/180501/000188], and Plan Propio de Investigación de la UCLM [grant number 2022-GRIN-34376 FEDER-UCLM].



## P067

### Desarrollo de nuevos biodisolventes supramoleculares para la valorización de residuos agroalimentarios

MARIA LORETO Lunar Reyes, NEDA Feizi, JESÚS Roldán Peña, NOELIA Caballero Casero,  
SOLEDAD Rubio Bravo  
UNIVERSIDAD DE CÓRDOBA, Córdoba, España

#### Resumen

La implementación de nuevos disolventes que constituyan una alternativa real a los disolventes convencionales y que cumplan con los principios de la Química Verde es una necesidad en la actualidad, tanto en procesos de extracción analítica como industriales. En este contexto, han surgido recientemente los biodisolventes supramoleculares (bioSUPRASs). Estos biodisolventes, obtenidos a partir de compuestos bioanfílicos, constituyen una alternativa muy ventajosa para la extracción de compuestos bioactivos a partir de residuos agroalimentarios. En este trabajo, se han sintetizado un nuevo bioSUPRASs mediante un proceso de autoensamblaje y coacervación de monolaurina (monoglicérido obtenido a partir de fuentes renovables), inducido por sulfato sódico en mezclas agua-propanol. La incorporación del monoglicérido al bioSUPRAS estuvo por encima del 90%, lo que hace que la síntesis sea selectiva y atómicamente eficiente. Los diferentes bioSUPRASs sintetizados están constituidos por monolaurina, agua y propanol, y su composición puede ajustarse variando la proporción de los diferentes ingredientes en la disolución de síntesis. Se ha demostrado mediante microscopía óptica y electrónica que el bioSUPRAS se forma a través de un proceso de coacervación y que la monolaurina se asocia formando cubosomas. Para demostrar la aplicabilidad de los bioSUPRASs sintetizados en la valorización de residuos agroalimentarios, se ha estudiado la extracción de polifenoles y carotenoides en borras de café y piel de calabacín. Las principales ventajas del uso de bioSUPRAS a base de monolaurina en estas aplicaciones fueron: (1) tanto los polifenoles como los carotenoides pueden extraerse de manera simultánea y eficiente, mientras que se requieren disolventes convencionales polares y no polares para extraer polifenoles y carotenoides, respectivamente. (2) Se requieren proporciones de disolvente/muestra (mL g<sup>-1</sup>) mucho más bajas para los bioSUPRAS (~2) que para los disolventes convencionales (15-333), lo que resulta en una concentración más elevada de compuestos bioactivos en los extractos de bioSUPRAS (6,5 frente a 0,027 -2,1 mg equivalente de ácido gálico mL<sup>-1</sup> para borras de café). (3) Las extracciones se llevan a cabo en condiciones suaves (temperatura ambiente y agitación durante cinco minutos), mientras que se requieren altas temperaturas (40-200 °C) y/o tiempos de extracción (20 min a 3 h) utilizando disolventes convencionales. (4) Todos los ingredientes del bioSUPRAS están permitidos por la industria cosmética, por lo que los extractos podrían usarse directamente para la producción de formulaciones.

Los autores agradecen la ayuda PID2020-113743RB-I00 financiada por MICIU/AEI/10.13039/501100011033.



## P068

### Determinación de bisfenoles en fluido seminal mediante microextracción dispersiva por sorción sobre barra agitadora miniaturizada

Andreu L. López-Juan <sup>1</sup>, Víctor Váñez-Gomis <sup>1</sup>, Juan L. Benedé <sup>1</sup>, Antonio Martín-Esteban <sup>2</sup>, Alberto Chisvert <sup>1</sup>

1. GICAPC, Departamento de Química Analítica, Facultad de Química, Universidad de Valencia, Burjassot-Valencia, España

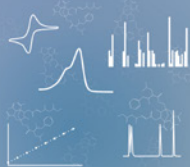
2. Departamento de Medio Ambiente y Agronomía, INIA-CSIC, Madrid, España

#### Resumen

Los bisfenoles son compuestos químicos con marcadas funciones de disrupción endocrina presentes en una gran cantidad de bienes de consumo, incluidos juguetes, botellas, y envases de alimentos, entre otros. Existen estudios que demuestran su relación con problemas observados en la función reproductora masculina [1]. Por lo tanto, el desarrollo de nuevos métodos analíticos para la determinación de bisfenoles en matrices biológicas es necesario para controlar la exposición de la población a estos compuestos. En este trabajo se propone un nuevo método analítico para la determinación de los tres bisfenoles más empleados a nivel industrial (bisfenol A, F y S) en fluido seminal. El método se basa en la precipitación de las proteínas y fosfolípidos de la muestra empleando una mezcla de acetonitrilo y metanol, que posteriormente se evapora y reconstituye en una mezcla agua y acetonitrilo. Para llevar a cabo la preconcentración de los analitos y limpieza de la matriz se empleó la microextracción dispersiva por sorción sobre barra agitadora miniaturizada (mSBSDME) [2], previamente a su inyección en el cromatógrafo de líquidos acoplado a espectrometría de masas en tándem (LC-MS/MS). Como material sorbente se empleó un composite compuesto por nanopartículas magnéticas de CoFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub> recubiertas por un copolímero formado por 4-vinilpiridina (4-VP), 2-hidroxietil metacrilato (HEMA) y divinilbenceno (DVB) (CoFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub>@MPS@4-VP-co-HEMA-co-DVB), que presenta una excelente interacción con los analitos. Los principales parámetros que influyen en la etapa de extracción se determinaron mediante un diseño Plackett-Burman, siendo optimizadas la masa de sorbente y la fuerza iónica. A continuación, se optimizó la etapa de desorción (tiempo y volumen de desorción). En estas condiciones óptimas, el método propuesto se validó adecuadamente mostrando buenas características analíticas en términos de linealidad, factores de preconcentración, límites de detección, precisión y exactitud. Finalmente, el método fue aplicado a la determinación de los tres bisfenoles en muestras de fluido seminal de cinco voluntarios. Este método expande la aplicabilidad de la mSBSDME a otras muestras biológicas y ofrece una herramienta para evaluar si los problemas de infertilidad de hombres podrían estar asociados a la exposición a estos disruptores.

**Agradecimientos** Los autores agradecen al Ministerio de Ciencia e Innovación la financiación recibida a través del proyecto PID2020-118924RB-I00 (MCIN/AEI/10.13039/501100011033). A.L.L.J. quiere agradecer además a la Generalitat Valenciana y al Fondo Social Europeo por el contrato INVESTIGO a través del proyecto INVEST/2022/109.

**Referencias** [1] I. Virant-Klun, S. Imamovic-Kumalic, B. Pinter, *Antioxidants* 11 (2022) 1617. [2] C. Azorín, J.L. Benedé, A. Chisvert, *Anal. Chim. Acta* 1238 (2023) 340627.



## P069

### Tuning the properties of imprinted nanoparticles as antibody substitutes for bioanalysis: assessing the influence of the cross-linking degree and the peptide length used as template

Alberto Gómez Caballero<sup>1</sup>, Ainhoa Elejaga Jimeno<sup>1</sup>, Gontzal García Del Caño<sup>2</sup>, Nora Unceta Zaballa<sup>1</sup>,  
María Aránzazu Goicolea Altuna<sup>1</sup>, Joan Sallés Alvira<sup>3</sup>, Ramón José Barrio Diez-Caballero<sup>1</sup>

1. Universidad del País Vasco UPV/EHU - Dpto. de Química Analítica, Vitoria-Gasteiz, España

2. Universidad del País Vasco UPV/EHU - Dpto. de Neurociencias, Vitoria-Gasteiz, España

3. Universidad del País Vasco UPV/EHU - Dpto. de Farmacología, Vitoria-Gasteiz, España

#### Resumen

This work aims producing high affinity nanoparticles as real antibody substitutes for bioassays. Here, we wanted to assess the influence of different variables, such as the cross-linking degree or the length of the peptide used as template, on binding affinity. It is crucial to maximise binding behaviour of resulting nanoparticles for the latter application of this material on bioassays based on protein immunoprecipitation. This will definitely reduce cross-reactivity, and thus pave the way to the application of these nanoparticles for protein extraction from complex tissue homogenates. This research is presented as a continuation of previous works on molecularly imprinted nanoparticles (MIN) for the cannabinoid CB1 receptor developed in our research group [1]. The cross-linker (CL) influences the rigidity of produced MIN. Rigid nanoparticles have more stable binding sites, thereby showing higher selectivity, but association-dissociation kinetics are slower. To determine how the percentage of CL influenced binding properties, nanoparticles with different CL percentages (5-25%) were synthesised. The flexibility of MIN and other parameters such as size, Z potential, and apparent molecular weight were also determined. Binding affinities were obtained from batch rebinding experiments, obtaining KD (equilibrium dissociation constant) and Bmax (maximum binding capacity) values of  $(6.78 \pm 3.83) \times 10^{-8}$  M and  $0.22 \pm 0.07 \mu\text{mol g}^{-1}$ , respectively after fitting the experimental isotherm to a Langmuir model. The influence of the length of the epitope used as a template was also studied. To this end, epitopes of 6, 9, 12, and 15 amino acids were used for imprinting, all of them matching the carboxy-terminal end of the CB1 protein. The binding event between the developed MIPs and the target protein was assessed by SPR analysis. Finally, MIN that showed highest binding were tested for immunoprecipitation experiments, using the recombinant protein GST-CB1414-472 as target. As a result, 30% of immunoprecipitation was achieved. This demonstrates the goodness of produced anti-CB1 antibodies for the proposed purpose and may be further exploited for immunoprecipitating the CB1 protein in tissue homogenates.

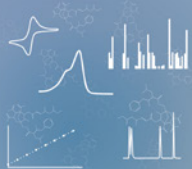
#### Acknowledgements

This research was supported by the grant PID2022-138266NB-I00 funded by the Spanish Ministry of Science, Innovation and Universities MCIN/AEI/10.13039/501100011033, and by the grant IT1492-22 funded by the Basque Government to Research Groups of the Basque University System.

#### References

1. Alberto Gómez-Caballero, Ainhoa Elejaga-Jimeno, Gontzal García Del Caño, et al. *Microchim Acta* 188:368 (2021) 1-13.





## P070

### Determinación de tetraciclinas en muestras ambientales sólidas mediante dispersión de matriz en fase sólida

Noelia García Criado, Juan Luis Santos Morcillo, Julia Martín Bueno, Irene Aparicio Gómez, Esteban Alonso Álvarez  
*Universidad de Sevilla, Sevilla, España*

#### Resumen

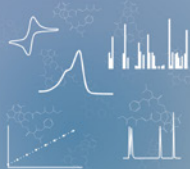
La presencia de antibióticos en el medio ambiente es un hecho constatado desde hace años. Las tetraciclinas son antibióticos de amplio espectro que se usan para tratar enfermedades en humanos y animales. Son de los antibióticos más utilizados para el tratamiento de infecciones bacterianas y también como aditivos alimentarios para la mejora del crecimiento animal en acuicultura y ganadería [1]. A pesar de la presencia constante y del impacto de las tetraciclinas en el medio ambiente [2], los datos relativos a su presencia en matrices ambientales sólidas son, hasta la fecha, insuficientes, entre otros, por la falta de metodologías analíticas fiables que permitan su determinación en estas matrices complejas. El objetivo de este trabajo es proponer un método analítico para la determinación de 7 tetraciclinas en lodo, compost y suelo. El método se basa en la extracción de los compuestos empleando la técnica de dispersión de matriz en fase sólida (MSPD) y posterior determinación mediante cromatografía líquida con detector de espectrometría de masas en tándem. El método se optimizó en términos de proporción de dispersante, disolvente empleado en la elución y sorbente para la limpieza del extracto. Para una mejor evaluación de las interacciones entre las diferentes variables se emplearon en la optimización diseños experimentales Box-Behnken. Las recuperaciones fueron superiores al 60 % para la mayoría de compuestos, con una precisión, expresada como desviación estándar relativa inferior, al 15 % y límites de detección inferiores a 125 ng/g en general. Para la cuantificación se empleó calibrado en matriz. La aplicabilidad del método se verificó mediante el análisis de muestras de lodos, compost y suelos de la provincia de Sevilla.

#### Agradecimientos

Estos resultados son parte del proyecto I+D+i PID2020-117641RB-I00, financiado por MICIU/AEI/10.13039/501100011033 al que está adscrito el contrato predoctoral (FPI) de Noelia García con referencia PRE2021-100799.

#### Referencias

[1] J. Scaria, K.V. Anupama, P.V. Nidheesh. *Sci Total Environ* 771 (2021) 145291. [2] J. Antos, M. Piosik, D. Ginter-Kramarczyk, et al. *Chemosphere* 353 (2024) 141519.



## P071

### **Microextracción en fase sólida dispersiva en punta de pipeta con sorbentes magnéticos como potencial herramienta en el diagnóstico no invasivo de cáncer de mama**

Luis Miguel Moreno-Calleja , Juan L. Benedé , Alberto Chisvert

*GICAPC, Departamento de Química Analítica, Facultad de Química, Universidad de Valencia, Burjassot-Valencia, España*

#### **Resumen**

Los niveles de las aminas biogénicas resultantes del metabolismo de los aminoácidos arginina y lisina se incrementan cuando prolifera una formación tumoral en ciertos órganos, como es el cáncer de mama [1,2]. Por tanto, estas aminas endógenas son potenciales biomarcadores de esta patología. Debido a la correlación encontrada entre los niveles en sangre y saliva [3], resulta interesante el desarrollo de métodos analíticos que permitan la determinación de este grupo de aminas en saliva como método de diagnóstico no invasivo de cáncer de mama. Este trabajo se ha centrado en las aminas biogénicas putrescina, cadaverina, acetilputrescina, acetilcadaverina, acetilpermina y diacetilpermina. Debido a la polaridad de los analitos y con la intención de evitar la derivatización de éstos, se propone la cromatografía de líquidos de interacción hidrofílica (HILIC), acoplada a espectrometría de masas en tándem (LC-MS/MS), como técnica analítica. Con la finalidad de acondicionar la matriz para su inyección en el sistema cromatográfico, se propone el uso de la microextracción en fase sólida dispersiva en punta de pipeta con sorbentes magnéticos [4]. Para este caso en concreto, considerando la naturaleza de los compuestos objeto de estudio, se propone un composite de intercambio catiónico fuerte con nanopartículas magnéticas de  $\text{CoFe}_2\text{O}_4$  incrustadas como material sorbente. Los principales parámetros involucrados en las etapas de extracción y desorción se optimizaron. Con las condiciones optimizadas, el método fue validado en términos de linealidad, sensibilidad, precisión y exactitud, empleando una pipeta multicanal para la etapa de preparación de muestra, que permite tratar mayor número de muestras de forma simultánea. A continuación, se aplicó la metodología a un conjunto de muestras de voluntarias sanas y enfermas. Tras un análisis por componentes principales (PCA), los resultados mostraron diferencias entre ambos grupos de muestras. Por último, se estudió la sostenibilidad y aplicabilidad de la metodología, concluyéndose que el método propuesto es práctico y sostenible.

#### **Agradecimientos**

Los autores agradecen al Ministerio de Ciencia e Innovación la financiación recibida a través del proyecto PID2020-118924RB-I00 (MCIN/AEI/10.13039/501100011033).

#### **Referencias**

[1] V. Hemminki, J. Laakso, M. Kähönen, et al., *Metabolism* 56 (2007) 1305–1310. [2] T. Kovács, E. Mikó, A. Vida, et al., *Sci. Rep.* 9 (2019) 1–14. [3]. R.A. Casero, T. Murray Stewart, A.E. Pegg, *Nat. Rev. Cancer* 18 (2018) 681–695. [4] J. Grau, J.L. Benedé, A. Chisvert, et al., *Anal. Chim. Acta* 1221 (2022) 340117.



## P072

### Separation of complex mixtures of duplex and triplex DNA structures by capillary electrophoresis and multivariate curve resolution

Kanan Hatamli<sup>1,2</sup>, Raimundo Gargallo<sup>1</sup>, Estela Giménez<sup>1,2</sup>, Fernando Benavente<sup>1,2</sup>

1. *Department of Chemical Engineering and Analytical Chemistry, University of Barcelona, Barcelona, España*

2. *Institute for Research on Nutrition and Food Safety (INSA·UB), University of Barcelona, Barcelona, España*

#### Resumen

Antiparallel triplex DNAs are higher-order structures formed by the specific pairing of nucleic acid strands that may be naturally or synthetically formed. Understanding fundamental biological processes, developing novel therapeutic strategies, and utilizing special qualities of DNA for a range of biotechnological and medical applications depend in many cases on the analysis of triplex DNAs. However, the study of DNA triplexes with the typically applied spectrophotometric techniques is hindered because of the small spectral variations observed during their formation [1]. In a recent study [2], we demonstrated that CE-UV in combination with advanced multivariate curve resolution chemometrics methods can be very convenient for the highly efficient separation of higher-order DNA structures with small spectral variations, such as i-motif DNAs. Here, a novel CE-UV method was developed for the analysis of complex mixtures of single-stranded, duplex, and triplex structures. The electrophoretic analyses were performed in negative polarity with a 32 cm long capillary permanently coated with hydroxypropyl cellulose (HPC). The mixtures of two or more DNA sequences were prepared at different concentration levels in background electrolyte (BGE), consisting on cacodylate buffer pH 7.4 and MgCl<sub>2</sub>, which promoted the formation and stability of the triplex structure [3]. Analyses were performed at 15°C and 35°C and different BGE compositions. As the separations resulted in partially overlapped peaks, multivariate curve resolution-alternating least-squares (MCR-ALS) was successfully applied to resolve the concentration and spectral profiles of all the species present in the mixtures. In parallel, circular dichroism (CD) spectroscopy was applied to validate the CE-UV and MCR-ALS results. Our findings demonstrate that CE-UV assisted by MCR-ALS may become a very useful tool in biomedical research to get a novel insight into complex mixtures involving triplex structures.

#### References

[1] M. Dalla, A. Abdullrahman, J. Cardin, G. Gasser, J. Hall, *Chem. Sci* 13 (2022), 10193 [2] L. Bchara, R. Eritja, R. Gargallo, F. Benavente, *Anal. Chem* 95 (2023), 15189-15198 [3] Y. Zhang, L. Liu, J. Sha, Z. Ni, H. Yi, Y. Chen, *Nano. Res. Let*, 8, (2013), 245

#### Acknowledgements

This study was supported by grants PID2021-127137OB-I00 and PID2019-107158GB-I00 funded by MCIN/AEI/10.13039/501100011033 and by “ERDF A way of making Europe”. The Bionalysis group of the UB is part of the INSA-UB Maria de Maeztu Unit of Excellence (Grant CEX2021-001234-M) funded by MCIN/AEI /10.13039/501100011033. Kanan Hatamli thanks the “State Program on increasing the international competitiveness of the higher education system in the Republic of Azerbaijan for 2019-2023” for a PhD fellowship.



## P073

### Uso de redes Metal-Orgánicas en la determinación quimioluminiscente de peróxido de hidrógeno

Natalia Piqueras García<sup>1</sup>, Miguel Ángel Martínez Briones<sup>1</sup>, María Jesús Lerma García<sup>1</sup>, Nicholas Kassouf<sup>2</sup>, Donato Calabria<sup>2</sup>, Mara Mirasoli<sup>2</sup>, José Manuel Herrero Martínez<sup>1</sup>

1. Grupo CLECEM, Dpto. Química Analítica, Universitat de València, Burjassot, Valencia, España

2. Universidad de Bolonia, Bolonia, Italia

#### Resumen

Las redes metal-orgánicas (MOFs) son polímeros de coordinación porosos compuestos por iones metálicos o agrupaciones de estos, y ligandos orgánicos. Estos materiales presentan una serie de propiedades prometedoras, tales como una elevada área superficial, porosidad ajustable, funcionalidad manipulable, y una buena actividad catalítica, entre otras. De hecho, los MOFs han sido utilizados en diferentes ámbitos del área de la Química Analítica, tales como el desarrollo de sorbentes en el tratamiento de muestra y (bio)sensores. Recientemente se ha demostrado que ciertos MOFs presentan actividad mimética, pudiendo imitar la función de ciertas enzimas, como peroxidasas y lipasas, en procesos catalíticos. Sin embargo, su potencial como catalizadores en quimioluminiscencia (CL), produciendo una exaltación de la señal y una mejora de la sensibilidad, ha sido poco explorada hasta la fecha. Por todo ello, en este trabajo, se han preparado, caracterizado y evaluado distintos MOFs para llevar a cabo la determinación de peróxido de hidrógeno por CL empleando luminol. Para ello, se prepararon dispersiones de los distintos MOFs, y se evaluó su influencia en la exaltación de la señal de CL, incluyéndose el estudio de variables tales como la concentración del MOF, el pH, la concentración del luminol, etc. El MOF que proporcionó los mejores resultados se ensayó en presencia de otros exaltadores de CL tales como 4-morfolinopiridina (MORP) y la sal sódica de 3-(10H-fenotiazina-10-propanosulfonato) (SPTZ). A continuación, se investigó la posibilidad de implementar el MOF con mejores prestaciones en un sistema microfluídico basado en papel, dada las ventajas de simplicidad y portabilidad en el análisis que ofrece este tipo de dispositivo.

#### Agradecimientos

Agencia Española de Investigación (AEI/10.13039/501100011033) del Ministerio de Ciencia e Innovación (MICINN) por el proyecto PID2021-125459OB-I00 y a la Generalitat Valenciana (GV) por los proyectos CIAICO/2022/183 y INVEST/2022/117. Este estudio forma parte del programa de Materiales Avanzados y recibió apoyo del MICINN con financiamiento de la Unión Europea Next Generation EU (PRTR-C17.I1) y de la GV.



## P074

### Impulsando la miniaturización en el análisis clínico: determinación de bisfenoles en suero y orina empleando la microextracción dispersiva por sorción sobre barra agitadora miniaturizada

Guillem Peris-Pastor <sup>1</sup>, Evelin Lara-Molina <sup>2,3</sup>, Juan L. Benedé <sup>1</sup>, Alberto Chisvert <sup>1</sup>  
1. GICAPC, Departamento de Química Analítica, Facultad de Química, Universidad de Valencia, Burjassot-Valencia, España  
2. IVIRMA Barcelona, Barcelona, España  
3. IVI Fundación IVIRMA Global, Instituto Investigación Biomédica La Fe, Valencia, España

#### Resumen

El bisfenol A (BPA) y sus análogos han sido ampliamente empleados en la producción de resinas y poliacrilatos que se encuentran en productos de uso diario (botellas de plástico, envases para el almacenamiento de alimentos, lentes de vista o electrodomésticos) [1]. Se ha demostrado que estos compuestos son disruptores endocrinos y han sido relacionados con problemas de salud como la genotoxicidad o la infertilidad [2]. Por ello, es importante su determinación en fluidos biológicos, de los cuales habitualmente solo se dispone de un volumen limitado de muestra, por lo que las técnicas de microextracción son de gran importancia para alcanzar la sensibilidad necesaria y evitar potenciales interferentes. En el presente trabajo, se ha desarrollado un método miniaturizado y sostenible para la determinación de siete bisfenoles en suero y orina empleando la microextracción dispersiva por sorción sobre barra agitadora miniaturizada (mSBSDME) [3]. Debido a que los bisfenoles se conjugan en el cuerpo humano a sus formas glucuronidadas y sulfatadas, se ha realizado una enzimólisis empleando una mezcla comercial de  $\beta$ -glucuronidasa y arilsulfatasa previa al procedimiento de microextracción para determinar el contenido total de bisfenoles. Como sorbente para llevar a cabo la extracción de los analitos de las matrices biológicas se empleó un material magnético basado en una estructura orgánica covalente (COF), obteniendo un buen rendimiento debido a sus interacciones hidrofóbicas,  $\pi$ - $\pi$  y dipolo-dipolo con los analitos. Para la detección instrumental, se ha empleado la cromatografía de líquidos acoplada a espectrometría de masas en tándem (LC-MS/MS) permitiendo alcanzar una buena sensibilidad y selectividad. El método fue validado para ambas matrices, suero y orina, obteniendo un intervalo lineal de hasta 100 ng mL<sup>-1</sup>, límites de detección en el rango de los bajos ng mL<sup>-1</sup>, buenos valores de precisión (desviaciones estándar relativas por debajo de 15 %) y buena exactitud (recuperaciones relativas entre 80 y 127 %). El método desarrollado se aplicó a ambos tipos de muestra de mujeres con problemas de fertilidad.

#### Agradecimientos

Los autores agradecen al Ministerio de Ciencia e Innovación la financiación recibida a través del proyecto PID2020-118924RB-I00 (MCIN/AEI/10.13039/501100011033). G.P-P también agradece a la Generalitat Valenciana por la beca predoctoral (CIACIF/2021/027).

#### Referencias

[1] R.L. Prueitt, M.L. Hixon, T. Fan, et al., Regul. Toxicol. Pharmacol. 142 (2023) 105414 [2] I.A. Kawa, A. Masood, Q. Fatima, et al., Diabetes Metab. Syndr. Clin. Res. Rev. 15 (2021) 803-811 [3] C. Azorín, J.L. Benedé, A. Chisvert. Anal. Chim. Acta 1238 (2023) 340627



## P075

### Determinación de sulfamidas en aguas basada en extracción en fase sólida magnética con adsorbentes comerciales incrustados

Francisco Javier Guzmán Bernardo, Maxell Rafael Rodríguez Medina, Manuel Alejandro Andino Enríquez, Rosa Del Carmen Rodríguez Martín-Doimeadios  
*Universidad de Castilla-La Mancha, Toledo, España*

#### Resumen

El extenso uso de sulfamidas en veterinaria genera vertidos masivos de estos antibióticos al medio ambiente, que hacen que estos compuestos acaben en las masas de agua. Esto ha producido una creciente preocupación por la resistencia en los tratamientos con estos antibióticos. Así pues, son necesarios métodos analíticos sensibles y selectivos que permitan la determinación y el seguimiento de estos compuestos en aguas. La cromatografía líquida acoplada a diversos detectores cumple con estos requisitos y se ha utilizado para este propósito, pero no evita la preparación de la muestra para limpiarla y/o enriquecerla. La extracción en fase sólida es una técnica muy extendida en preparación de muestra. La introducción de nanopartículas magnéticas (MNPs) como adsorbentes combinada con los modos dispersivos de esta técnica han constituido un hito, tanto por las ventajas operativas como por la posibilidad de modificar las MNPs para hacerlas más selectivas, y han dado lugar a las técnicas de extracción en fase sólida magnética (MSPE). Un enfoque interesante es incrustar adsorbentes comerciales con la selectividad requerida en las MNPs [1]. Esta estrategia simplifica la síntesis de los adsorbentes, la hace más reproducible y el enriquecimiento obtenido permite alcanzar bajos límites de detección. Además, es coherente con los principios de la preparación de muestra verde y de la practicidad, cada vez más importantes en la Química Analítica actual. En este trabajo se presenta un método novedoso para la determinación de cuatro sulfamidas en agua, sulfametoxazol, sulfatiazol, sulfametoxipiridazina y sulfametazina, utilizando MSPE con MNPs incrustadas en un adsorbente comercial. La extracción y la elución están asistidas por ultrasonidos y la determinación es por cromatografía líquida con detección ultravioleta. El método se ha aplicado a muestras de agua de suministro y de río con diferente salinidad y contenido de materia orgánica. Los límites de detección y cuantificación fueron 1,4–3,8 ng mL<sup>-1</sup> y 4,8–12,6 ng mL<sup>-1</sup>, respectivamente, con factores de enriquecimiento de 5,8 a 13,9. El método se consideró seguro, ecológico y práctico, según las métricas AGREEprep y BAGI [2,3].

#### Agradecimientos

Ministerio de Ciencia e Innovación (PID2022-138761NB-I00), Junta de Comunidades de Castilla-La Mancha (SBPLY/23/180225/000153) y Universidad de Castilla-La Mancha (2022-GRIN-34415), con cofinanciación FEDER.

#### Referencias

1] E.M. Reyes-Gallardo, G. Lasarte-Aragonés, R. Lucena, S. Cárdenas, M. Valcárcel, J. Chromatogr. A 1271 (2013) 50-55. [2] W. Wojnowski, M. Tobiszewski, F. Pena-Pereira, E. Psillakis. Tr. Anal. Chem., 116553 (2022) 149. [3] N. Manousi, W. Wojnowski, J. Plotka-Wasylyka, V. Samadinou. Green Chem., 25 (2023) 7598-7684.



## P076

### **Solid-phase synthesis of peptide imprinted nanoparticles targeting the SARS-CoV-2 spike protein as recognition elements for sensing**

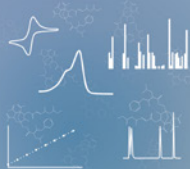
Amaia Alday Izaguirre, Lucía Diez-Caballero Gallo, Alberto Gómez Caballero, Nora Unceta Zaballa, M<sup>a</sup> Aránzazu Goicolea Altuna, Ramón J. Barrio Diez-Caballero  
*Universidad del País Vasco (UPV/EHU)-Dpto. Química Analítica, Vitoria-Gasteiz, España*

#### **Resumen**

The purpose of this work is to fabricate molecularly imprinted nanoparticles (MIN) capable of recognising a 9 amino acid sequence (470-TEIYQAGST-478) which is part of the receptor binding motif of the spike protein of SARS-CoV-2. To this end, two approaches were combined: the epitope imprinting approach and solid-phase synthesis. Three different monomer mixtures were selected to produce 3 different MIN. The first mixture consisted of (2-Hydroxyethyl) acrylamide, N-(3-Aminopropyl)methacrylamide (APMA) and N-Isopropylacrylamide as functional monomers, and N,N'-methylenebis(acrylamide) as crosslinker. The second mixture contained essentially the same monomers but removing (2-Hydroxyethyl)acrylamide, whereas the third mixture contained N-(4-hydroxyphenyl)acrylamide instead of (2-Hydroxyethyl) acrylamide. The binding behaviour of produced MIN was examined by surface plasmon resonance (SPR). To this end, SPR gold chips were first functionalised using mercaptoundecanoic acid (MUA) to obtain a self-assembled monolayer (SAM) containing terminal carboxylic groups. Nanoparticles were then grafted to the SAM via their amino groups using carbodiimide chemistry (EDC/NHS). Finally, ethanolamine was used to block unreacted NHS groups. Different concentrations of MIN suspensions were injected in the SPR instrument for being grafted on gold chips, and thereafter the resulting thickness of the immobilised MIN layer was estimated. It was found that MIN suspensions of 100µg/ml provided about 50nm thickness for the MIN. This concentration was found to be the one providing highest imprinting factor (MIN/NIN SPR signal). Equilibrium dissociation constants (KD) of all produced nanoparticles were calculated and compared versus non imprinted control NIN particles. MIN that showed best binding performance compared to NIN was selected for further analysis (6.90±0.01 nM for the MIN versus 39.8±0.08 nM for the NIN). Produced artificial antibodies were used as recognition element for EQCM sensing (electrochemical quartz crystal microbalance). Using the same protocol as above, the polymers were attached to a gold coated quartz crystal. The frequency change observed with addition of the spike protein at increasing concentrations corroborated the results obtained with SPR measurements.

#### **Acknowledgements**

This research was supported by the grant PID2022-138266NB-I00 funded by the Spanish Ministry of Science, Innovation and Universities MCIN/AEI/10.13039/501100011033, and by the grant IT1492-22 funded by the Basque Government to Research Groups of the Basque University System.



## P077

### **Solvent-assisted laser desorption coupled to flexible microtube plasma mass spectrometry for direct analysis of dried samples on paper**

Juan Francisco Garcia Reyes<sup>1</sup>, Marcos Bouza<sup>1</sup>, Norman Ahlmann<sup>2</sup>, Joachim Franzke<sup>2</sup>

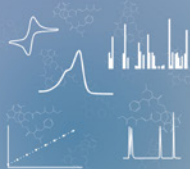
1. *Universidad de Jaen, Jaén, España*

2. *ISAS, Dortmund, Alemania*

#### **Resumen**

The present study investigated the potential for solvent-assisted laser desorption coupled with flexible microtube plasma ionization mass spectrometry (SALD-F $\mu$ TP-MS) as a rapid analytical technique for direct analysis of surface-deposited samples. Paper was used as the demonstrative substrate, and an infrared hand-held laser was employed for sample desorption, aiming to explore cost-effective sampling and analysis methods. SALD-F $\mu$ TP-MS offers several advantages, particularly for biofluid analysis, including affordability, the ability to analyze low sample volumes (<10  $\mu$ L), expanded chemical coverage, sample and substrate stability, and in situ analysis and high throughput potential. The optimization process involved exploring the use of viscous solvents with high boiling points as liquid matrices. This approach aimed to enhance desorption and ionization efficiencies. Ethylene glycol (EG) was identified as a suitable solvent, which not only improved sensitivity but also ensured substrate stability during analysis. Furthermore, the addition of cosolvents such as acetonitrile/ water (1:1) and ethyl acetate further enhanced sensitivity and reproducibility for a standard solution containing amphetamine, imazalil, and cholesterol. Optimized conditions for reproducible and sensitive analysis were determined as 1000 ms of laser exposure time using a 1  $\mu$ L solvent mixture of 60% EG and 40% acetonitrile (ACN)/water (1:1). A mixture of 60% EG and 40% ACN/water (1:1) resulted in signal enhancements and relative standard deviations of 12, 20, and 13% for the evaluated standards, respectively. The applicability of SALD-F $\mu$ TP-MS was further evaluated by successfully analyzing food, water, and biological samples, highlighting the potential of SALD-F $\mu$ TP-MS analysis, particularly for thermolabile and polarity diverse compounds.





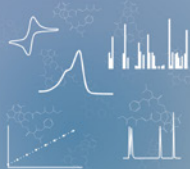
## P078

### Metal-Organic Framework-coated glass vials: a step forward in analytical platforms

Jorge Pasán , Iván Taima Mancera, Maria José Trujillo Rodríguez, Verónica Pino  
*Universidad de La Laguna, La Laguna, España*

#### Resumen

A robust microextraction device in the form of a glass vial internally coated with metal-organic frameworks (MOFs) is designed, fabricated by in situ growth of different Zr-based MOFs, and fully characterized for its novel use as analytical platform. This device, uniformly coated by the MOF, ensures high simplicity and short times when used as analytical microextraction tool, as the device acts as both the sample container and the extraction device, being tested for monitoring the presence a group of endocrine disrupting chemicals in pool waters. The thin film format and MOF nature allow for high extraction efficiency and preconcentration of these target contaminants. Adsorption and desorption of the analytes were studied through kinetic experiments, with uptakes up to 90% for propylparaben in the UiO-66-abdc vial, and an extremely fast desorption in just seconds. The UiO-66-abdc vial does not require more than 15 min to perform a complete extraction-desorption cycle, with limits of detection down to 0.10  $\mu\text{g L}^{-1}$  in pool waters. The MOF-coated vials demonstrated to be easily (and highly) reusable by simple washing for a few min followed by drying. The simplicity of the method can be pushed further working in static mode or by a simple manual shaking.



## P079

### Monte Carlo Peaks: generación aleatoria de bandas simuladas para la obtención de conjuntos de datos no dependientes de factores biológicos

Jaume Bejar Grimalt<sup>1</sup>, David Perez Guaita<sup>1</sup>, Angel Sanchez Illana<sup>1</sup>, Victor Navarro Esteve<sup>1</sup>, Guillermo Quintas Soriano<sup>2</sup>, Hugh J. Byrne<sup>3</sup>

1. *Universitat de València, Burjassot, España*

2. *Leitat technological center, Valencia, España*

3. *FOCAS Research institute, Tu Dublin, Irlanda*

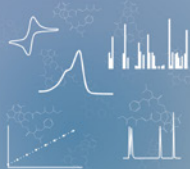
#### Resumen

La investigación en espectroscopía clínica generalmente implica experimentación con muestras clínicas bien caracterizadas. Este es un factor limitante importante en el proceso de desarrollo de nuevos métodos ya que supone la asignación de recursos para el manejo de muestras clínicas con lo que esto conlleva (p.ej., lidiar con la aprobación de los comités de ética). Además, debido a la naturaleza multivariada de la espectroscopía clínica, los espectros se tratan normalmente utilizando técnicas de aprendizaje automático y minería de datos. En esos casos, el diseño de las condiciones experimentales como el número de muestras requeridas para proporcionar suficiente poder estadístico en un modelo diagnóstico o la resolución temporal en estudios farmacocinéticos, así como la interpretación de los resultados, se convierten en un desafío ya que no puede realizarse con metodologías univariadas tradicionales [1]. En este trabajo proponemos el uso de la experimentación *in silico* para la simulación de los espectros de muestras biológicas a partir de las combinaciones de sus componentes. De esta manera se persigue modelar diferentes procesos biológicos de interés como cambios en marcadores espectrales de una enfermedad específica o la evolución de procesos celulares metabólicos. Los espectros simulados pueden ser utilizados luego en una amplia gama de aplicaciones, incluyendo: i) optimizar métodos de preprocesamiento de muestras, ii) predecir el número de muestras necesarias para obtener valores confiables de sensibilidad y especificidad en una metodología diagnóstica y iii) evaluar el valor óptimo de los puntos de tiempo de medición en estudios farmacocinéticos. Con este fin, proporcionamos diferentes ejemplos de experimentos con espectros simulados que pueden guiar la experimentación real y ayudar en la interpretación de resultados, evitando el uso de las muestras reales cuando estas son escasas. También discutimos algunas limitaciones, como las dificultades encontradas al modelar efectos no lineales y el desafío de simular muestras biológicas complejas.

#### Agradecimientos

Ayudas RYC2019-026556-I y PID2020-119326RA-I00 financiadas por el MCIN/AEI/10.13039/501100011033. Programa INVESTIGO (INVEST/2022/95) financiado por NextGenerationEU. Ayuda JDC2022-049354-I financiada por MCIN/AEI/10.13039/501100011033 y por la "Unión Europea NextGenerationEU/PRTR". Este estudio ha sido financiado por el Instituto de Salud Carlos III (ISCIII) mediante el proyecto PI23/00135 y cofinanciado por la Unión Europea. PRE2021-098833 from the Spanish MICIN/AEI/10.13039/501100011033 and the FSE+.

**Bibliografía** [1] D. Pérez-Guaita, G. Quintás, Z. Farhane, R. Tauler, H.J. Byrne, Combining Pharmacokinetics and Vibrational Spectroscopy: MCR-ALS Hard-and-Soft Modelling of Drug Uptake In Vitro Using Tailored Kinetic Constraints, *Cells* 11 (2022) 1555. <https://doi.org/10.3390/cells11091555>.



## P080

### **Microextracción en fase sólida dispersiva con MOFs comerciales y LC-MS/MS para la determinación de isoflavonas en bebidas de soja**

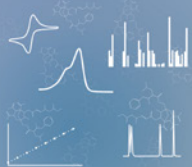
Myriam Bustamante Rangel, Miguel Del Nogal Sánchez, Samuel García García, Paolo Conejo Valverde, Encarnación Rodríguez Gonzalo, José Luis Pérez Pavón  
*Universidad de Salamanca, Salamanca, España*

#### **Resumen**

En este trabajo se ha propuesto por primera vez un método basado en microextracción en fase sólida dispersiva (D- $\mu$ SPE) utilizando estructuras organometálicas (MOFs) comerciales para la extracción de isoflavonas de bebidas de soja. La separación y detección de los analitos se llevó a cabo mediante cromatografía líquida-espectrometría de masas en tándem de triple cuadrupolo (LC-MS/MS). El uso de materiales MOF de disponibilidad comercial simplifica el procedimiento de tratamiento de muestras a la vez que facilita su aplicación a análisis de rutina. Se ha utilizado un diseño experimental de optimización tipo Box-Behnken para la optimización de los parámetros involucrados en el proceso de microextracción, tales como cantidad de sorbente, tiempo de extracción y desorción, volumen y pH del disolvente de desorción. Para la mayoría de los compuestos se obtuvieron modelos sin fallo de ajuste considerando únicamente modelos lineales con los factores. El método fue validado adecuadamente y se obtuvieron buenos resultados en términos de precisión y exactitud. Los límites de detección oscilaron entre 2 y 7  $\mu\text{g L}^{-1}$ . Con el método descrito no se encontró ningún efecto de matriz significativo, lo que permitió utilizar el método de calibración de estándar externo. Esto implica un importante ahorro de tiempo y dinero, que no suele ser habitual cuando se estudian matrices alimentarias complejas. Este hecho, junto con la posibilidad de utilizar sorbentes comerciales, hace que el método sea útil para análisis de rutina. El método se aplicó con éxito a la determinación de isoflavonas en muestras de leche de soja, encontrándose contenidos elevados de los glucósidos daidzina y genistina (entre 31 y 74  $\text{mg L}^{-1}$ ), así como de genisteína (15-51  $\text{mg L}^{-1}$ ). Los niveles más bajos corresponden a gliciteína (< 13  $\text{mg L}^{-1}$ ) y daidzeína (< 36  $\text{mg L}^{-1}$ ), no detectándose en algunas de las muestras. Para estos analitos, las recuperaciones oscilaron entre el 98 y el 120 %. Los resultados se confirmaron utilizando el método de adición de estándar, encontrándose valores significativamente iguales a los obtenidos mediante calibración con estándar externo.

#### **Financiación**

Ministerio de Economía y Competitividad de España (Proyecto No. PID2021-127679NB-I00).



## P081

### Chemometrical approach for the identification of the metabolism pathway of the synthetic cathinone $\alpha$ -PHiP using Upcyte human hepatocytes

Francesc A. Esteve Turrillas<sup>1</sup>, Alicia Trigueros Sancho<sup>1</sup>, Ramiro Jover<sup>2,3</sup>, David Pérez Guaita<sup>1</sup>,  
Guillermo Quintás<sup>4</sup>

1. Department of Analytical Chemistry, University of Valencia, Burjassot, España

2. Instituto de Salud Carlos III, Madrid, España

3. Department of Biochemistry and Molecular Biology, University of Valencia, Burjassot, España

4. Leitat Technological Center, Terrassa, España

#### Resumen

Synthetic cathinones are the second largest group of new psychoactive substances notified by the Early Warning System of The European Monitoring Centre for Drugs and Drug Addiction. Reports of cases of synthetic cathinone consumption and overdose draw attention due to their serious toxicity. However, their analytical identification in biological samples represents a great challenge, given the great occurrence of different derivatives with similar chemical structures accessible to consumers, and the lack of information of metabolic profiles for most new psychoactive substances [1]. In this study the *in vitro* toxicity and metabolic profile of the synthetic cathinone  $\alpha$ -pyrrolidinoisohexiophenone ( $\alpha$ -PHiP) was studied.  $\alpha$ -PHiP toxicity was evaluated by HepG2 cell viability assay, estimating a half-maximal inhibitory concentration (IC<sub>50</sub>) of  $200 \pm 30$  mg/L. The metabolic profile  $\alpha$ -PHiP was assessed using Upcyte human hepatocytes (UHH), as *in-vitro* hepatic cell system, and metabolites were identified by liquid chromatography coupled to high resolution tandem mass spectrometry (LC-HRMS/MS). A MATLAB-based dedicated chemometric tool was utilized to automatically identify putative metabolites based on three different criteria: the *m/z* values of potential biotransformations, the similarity of the MS/MS spectra of each candidate to the MS/MS spectrum of the parent compound, and the presence of signals in the treated samples that are not present in the untreated ones. While 10 Phase I metabolites were identified, no Phase II metabolite was identified. The UHH cell extracts predominantly contained metabolite M1 (C<sub>16</sub>H<sub>25</sub>NO,  $\alpha$ -PHiP ketone  $\beta$ -reduction), as the most abundant, while metabolite M8 (C<sub>16</sub>H<sub>23</sub>NO<sub>3</sub>,  $\alpha$ -PHiP dihydroxylation), was predominantly present in cell medium, respectively. Results indicate that these metabolites are potential biomarkers of consumption of  $\alpha$ -PHiP in biological samples or wastewater. Moreover, the study was performed using UHH from two different donors, showing idiosyncratic reactions to the exposed drug and characteristic metabolic profiles. The use of a dedicated chemometrical tools for the identification of metabolites from treated cell extracts by LC-HRMS/MS technique has been proved to be a promising approach to investigate the metabolic pathway of NPS and recognise different effects on the employed model organism.

#### Acknowledgements

Authors acknowledge the financial support of Project PND2022I030 funded by Delegación del Gobierno para el Plan Nacional sobre Drogas and projects RYC2019- 026556-I and PID2019-110788GB-I00 funded by MCIN/AEI/10.13039/501100011033.

#### References

[1] European Monitoring Centre for Drugs and Drug Addiction (EMCDDA), European Drug Report (2023).



## P082

### Optimización de un sensor electroquímico para la detección de bisfenol A utilizando polímeros de impresión molecular basados en óxido de grafeno magnético

Lourdes Mena Herrera, Rebeca Jiménez Pérez, Antonio Jesús Ruiz Sánchez, Pablo Montoro Leal, Ana Belén Martínez Piernas, Irene Sánchez Trujillo, María Del Mar López Guerrero, Elisa Isabel Vereda Alonso  
*Universidad de Málaga, Málaga, España*

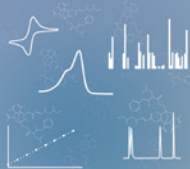
#### Resumen

Los químicos disruptores endocrinos (EDC) comúnmente se consideran compuestos que son capaces de imitar o bloquear la activación transcripcional provocada por las hormonas esteroides que circulan naturalmente al unirse a los receptores de hormonas esteroides.[1] Un miembro destacado de esta clase de disruptores es el bisfenol A (BPA), el cual se ha convertido en un foco de preocupación ambiental. El BPA se ha utilizado como material de recubrimiento en el interior de casi todos los utensilios de plástico y se ha convertido en el compuesto químico más sintetizado. [2] Una exposición prolongada de BPA puede provocar diabetes, neurotoxicidad, enfermedades cardiovasculares, problemas de desarrollo infantil e incluso aumentar el riesgo de cáncer. Por lo tanto, es muy urgente explotar un método sensible y selectivo para la detección del BPA para controlar la exposición y el riesgo potencial para la salud pública. Recientemente, en nuestro grupo de investigación se ha logrado desarrollar un sensor electroquímico altamente sensible y de coste reducido basado en polímeros de impresión molecular (MIPs). Los MIPs pueden reconocer y unirse a moléculas objetivo con alta selectividad y especificidad mediante la copolimerización de un monómero funcional y un agente reticulante de una molécula plantilla, y la eliminación de la molécula plantilla (en nuestro caso BPA), para formar sitios de unión específicos que coincidan con las moléculas plantilla en forma, tamaño y grupos funcionales. Los MIPs que se han empleado en nuestra investigación, han sido sintetizados a base de pirrol, un polímero conductor el cual dota al MIP de una mayor selectividad, y sobre óxido de grafeno magnético (MGO) funcionalizado previamente con nanopartículas magnéticas de hierro (MNPs), recubiertas con sílice. Como resultado de esta combinación, el pirrol puede polimerizarse sobre la superficie de MGO en presencia de BPA originando cavidades dentro del MIP con la misma forma, tamaño y grupos funcionales que el BPA. De esta manera, se puede detectar selectivamente BPA incluso en muestras de agua residual alcanzando límites de detección por debajo de 10-10 M.

Este trabajo ha sido cofinanciado con los Proyectos del Ministerio de Ciencia e Innovación PID2021-126794OB-100 y del Plan Propio de la Universidad de Málaga B4-2023-19 (UMA-Andalucía-TECH).

#### Bibliografía

[1]. Tabb, M. M. & Blumberg, B. New modes of action for endocrine-disrupting chemicals. *Molecular Endocrinology* vol. 20 475–482 Preprint at <https://doi.org/10.1210/me.2004-0513> (2006). [2]. Kumar Issac, P. et al. Futuristic advancements in phytoremediation of endocrine disruptor Bisphenol A: A step towards sustainable pollutant degradation for rehabilitated environment. *Waste Management* 179, 216–233 (2024).



## P083

### Microextracción in-situ de benzofenonas en agua mediante cintas magnéticas híbridas basadas en la integración de dominios micro y nanométricos

Ahmed Belhameid <sup>1,2</sup>, Francisco Antonio Casado-Carmona <sup>1,3</sup>, Adel Megriche <sup>2</sup>, Ángela I. López-Lorente

<sup>1</sup>, Rafael Lucena <sup>1</sup>, Soledad Cárdenas <sup>1</sup>

<sup>1</sup>. *Universidad de Córdoba, Córdoba, España*

<sup>2</sup>. *University of Tunis El Manar, Tunis, Tunisia*

<sup>3</sup>. *Universidad de las Islas Baleares, Palma de Mallorca, España*

#### Resumen

En esta comunicación póster se presenta un dispositivo de extracción in-situ que consiste en un sorbente compuesto por dominios concéntricos de partículas micrométricas Hydrophilic-Lipophilic Balance (HLB), rodeadas por un anillo de partículas magnéticas nanométricas, depositadas sobre cinta adhesiva como soporte, cuyo carácter adhesivo permite la fijación del material particulado. Por un lado, la presencia de nanopartículas magnéticas permite la sujeción de la cinta modificada a un tornillo metálico mediante un imán, que se acopla a un taladro inalámbrico [1, 2]. Por otro lado, las micropartículas HLB, que presentan una gran superficie específica, están fácilmente disponibles en la superficie, permitiendo extraer los analitos objetivo. La fase sorbente se sumerge en la muestra y se agita mediante el taladro para conseguir la transferencia de los analitos hacia ella. El sistema portátil permite, por tanto, integrar en una sola etapa el muestreo y la extracción de los analitos (benzofenonas). Se han evaluado las variables que pueden afectar al proceso de extracción. En las condiciones óptimas y utilizando cromatografía de líquidos-espectrometría de masas en tándem como técnica instrumental, el método proporcionó un límite de detección de 0.03 µg/L, con precisiones, expresadas como desviación estándar relativa, inferiores al 10%. El método se aplicó al análisis de agua de piscinas detectándose la presencia de dichos compuestos.

#### Agradecimientos

Se agradece el apoyo económico de la Consejería Andaluza de “Transformación Económica, Industria, Conocimiento y Universidades” (PY20\_00461). Esta investigación está basada en el trabajo de la Red Temática Española sobre Sostenibilidad en el Tratamiento de Muestras (RED 2022-134079-T).

[1] F.A. Casado-Carmona, M.C. Alcudia-León, R. Lucena, S. Cárdenas. *J. Chromatogr. A* 606 (2019) 360359 [2] F.A. Casado-Carmona, R. Lucena, S. Cárdenas. *Talanta* 228 (2021) 122217.



## P084

### **Desarrollo de un dispositivo para la microextracción dispersiva por sorción sobre barra agitadora miniaturizada basado en placas de 96 posiciones: aplicación a la determinación de THC y CBD en saliva de fumadores de marihuana**

Cristian Azorín , Juan L. Benedé , Alberto Chisvert

*GICAPC, Departamento de Química Analítica, Facultad de Química, Burjassot-Valencia, España*

#### **Resumen**

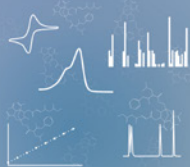
El análisis de muestras biológicas puede resultar un desafío debido a que las matrices biológicas suelen ser muy complejas, con un gran número de interferencias y analitos diferentes, usualmente a nivel de trazas. Además, los laboratorios clínicos necesitan tratar diariamente un elevado número de muestras de las que a menudo no se dispone de grandes volúmenes (p.ej., saliva, fluido folicular, suero de recién nacidos, etc). Para superar estas limitaciones es esencial desarrollar estrategias de preparación de muestra miniaturizadas y cinéticamente eficientes en las que los equilibrios se alcancen más rápido y, además, el espacio físico reducido permita tratar más muestras simultáneamente. Además, el desarrollo de estrategias miniaturizadas también contribuye a la reducción de los residuos químicos y del consumo de energía y de muestra. En este sentido, las técnicas de microextracción han evolucionado en las últimas décadas para crear configuraciones aún más miniaturizadas [1]. Tomando como punto de partida la microextracción dispersiva por sorción sobre barra agitadora miniaturizada (mSBSDME) [2], se ha desarrollado un nuevo dispositivo de extracción de 96 posiciones empleando insertos de vidrio de base plana, un soporte impreso en 3D, una placa de agitación de 96 posiciones y una pipeta multicanal, lográndose una estrategia de preparación de muestra miniaturizada y de alto rendimiento. En esta técnica, la dispersión de un material magnético como sorbente y el pequeño tamaño de sus partículas favorecen la cinética de extracción. Además, la miniaturización del dispositivo permite el empleo de bajos volúmenes de muestra y el tratamiento de 96 muestras en paralelo. Como prueba de concepto se ha llevado a cabo la determinación de tetrahidrocannabinol (THC) y cannabidiol (CBD) en saliva humana para diferenciar entre el consumo de marihuana y cannabis legal, respectivamente, siendo necesarios tan solo 100  $\mu$ L de saliva para el análisis.

#### **Agradecimientos**

Los autores agradecen al Ministerio de Ciencia e Innovación la financiación recibida a través del proyecto PID2020-118924RB-I00 (MCIN/AEI/10.13039/501100011033). Los autores también agradecen al Ministerio de Universidades por la beca predoctoral de C.A. (FPU19/04239).

#### **Referencias**

[1] C. Azorín, J.L. Benedé, A. Chisvert, *J. Sep. Sci.* 46 (2023) 1–16. [2] C. Azorín, J.L. Benedé, A. Chisvert, *Anal. Chim. Acta.* 1238 (2023) 340627.



## P085

### Real-time monitoring of ions at the single-cell scale with potentiometric nanosensors

Francisco Baños-Costa <sup>1</sup>, Águeda Molinero-Fernández <sup>1</sup>, Gastón A. Crespo <sup>1,2</sup>, María Cuartero <sup>1,2</sup>

1. UCAM-SENS, Universidad Católica San Antonio de Murcia, Murcia, España

2. Department of Chemistry, KTH Royal Institute of Technology, Stockholm, Suecia

#### Resumen

Monitoring extra- and intra-cellular levels of ions (e.g. pH, K<sup>+</sup>, Na<sup>+</sup>, Cl<sup>-</sup> or HCO<sub>3</sub><sup>-</sup>) holds immense relevance in biological systems, because of their critical role in cellular physiology. Moreover, by examining ion concentrations at the single-cell level, researchers can uncover the diversity among individual cells within a population or tissue. This heterogeneity, often masked in bulk measurements, offers crucial clues about cellular behaviour and specialization. Specifically, ion concentrations exert profound influences on fundamental cellular processes, including membrane potential, signalling pathways, enzymatic activity, and cell-to-cell communication. Understanding these intricate mechanisms at the single-cell level is essential for deciphering the complexities of cellular function and behaviour in health and certain diseases. Also, single-cell ion measurements play a pivotal role in drug discovery and development: Many pharmaceutical agents target ion channels and transporters, making precise measurements of ion concentrations essential for assessing drug efficacy and safety. Therefore, by leveraging single-cell analysis, researchers can identify novel drug targets, screen potential therapeutics, and predict individual responses to treatment with greater accuracy.

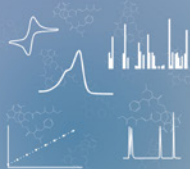
Potentiometric nanosensors offer unique capabilities for ion concentration monitoring within single cells, allowing for a deeper exploration of individual behaviours. Effectively, potentiometric nanosensors can monitor the activities of single cells in real-time owing to their high sensitivity and superior temporal-spatial resolution, crossing the cell membrane in a minimally invasive way and with no disturbance to the normal physiological function.

We will present a range of potentiometric nanosensors designed for detecting ions at the single-cell level. The architecture of the nanosensors resembles that of traditional ion-selective microelectrodes and can be classified as all-solid-state carbon nanopipettes electrodes (CNPEs). They include an ion-selective membrane as the ion sensing element or a reference membrane for the reference electrode. Analytical figures of merit such as sensitivity, linear response over intra- and extra-cellular medium concentrations, repeatability, reproducibility, response time, and medium-term stability are explored to prove technique accuracy. Finally, we demonstrate two applications of these potentiometric nanosensors: (i) tracking ion gradients from extracellular to intracellular media upon sensor insertion into a single cell; (ii) monitoring temporal changes in intracellular ion levels following administration of a pharmaceutical drug into the cell media. In both cases, cell measurements are validated by comparison with an alternative analytical technique.

#### Acknowledgements:

Grant PID2022-140418NA-I00 funded by MICIU/AEI/ 10.13039/501100011033 and by ERDF/EU.





## P086

### Olive oil as plasticizer in polymeric ion-selective membranes for potentiometric measurements

Francisco Baños-Costa <sup>1</sup>, Joaquín A. Ortuño <sup>2</sup>, Gastón A. Crespo <sup>1,3</sup>, María Cuartero <sup>1,3</sup>

1. UCAM-SENS, Universidad Católica San Antonio de Murcia, Murcia, España

2. Department of Analytical Chemistry, Universidad de Murcia, Murcia, España

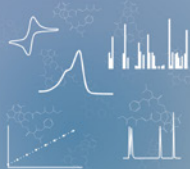
3. Department of Chemistry, KTH Royal Institute of Technology, Stockholm, Suecia

#### Resumen

Potentiometric ion-selective electrodes (ISEs) play a crucial role in various application fields that need from ion detection, from environmental monitoring to clinical diagnostics. Plasticized polymeric membranes traditionally used in ISEs of any configuration are usually composed of a polymer, e.g., polyvinyl chloride (PVC) or polyurethane (PU), and a plasticizer. The plasticizer is an additive that enhances the flexibility and processability of the polymer and indeed the entire membrane. Moreover, the plasticizer tends to be the ca. 70 % wt. of the membrane, providing some key characteristics for the potentiometric measurements. Plasticizers improve the mobility of ions within the polymer matrix, facilitating faster ion transport across the membrane. They help to reduce the glass transition temperature of the polymer, ensuring flexibility even at low temperature. This is in turn crucial for ensuring intimate contact between the membrane and the sample solution (i.e., a well-defined membrane-sample interface).

Among the most used plasticizers in potentiometry are compounds such as bis(2-ethylhexyl) sebacate (DOS), bis(2-ethylhexyl) phthalate or 2-nitrophenyl octyl ether. These are valued for their compatibility with PVC and PU matrices, as well as their ability to impart desirable mechanical properties to the membranes. While plasticizers offer significant advantages in membrane fabrication technologies, their use raises concerns regarding toxicity. Many traditional plasticizers have been identified as potential endocrine disruptors and carcinogens, prompting the search for safer alternatives. In addition, these plasticizers are produced from non-renewable sources, such as fossil fuels.

In this poster, we will show the potential of olive oil as a novel and sustainable plasticizer for polymeric ion-selective membranes. Olive oil is a natural and renewable resource that predominantly consists of triglycerides, being a promising candidate to enhance the performance of ion-selective membranes without compromising the environment. Moreover, the biocompatibility of olive oil addresses concerns about the potential health risks associated to traditional plasticizers, positioning it as a safer alternative for membrane fabrication. Here, we demonstrate the functionality in potentiometric ISEs by evaluating the dynamic response to increasing potassium ion concentrations, the linear range of response, selectivity, reversibility, and lifetime. Remarkably, we found no significant differences with a conventional DOS-based membrane. These outstanding results open the possibility of applying this approach to other types of ion-selective electrodes; specifically all-solid-state ISEs like 3D printed electrodes, microneedles and nanosensors, enhancing cost reduction, environmental impact mitigation and biocompatibility.



## P087

### **Desarrollos microfluidicos para la determinacion eficiente y diferenciada de xantina e hipoxantina en el control de calidad de alimentos.**

Angel Lopez Molinero, Marco Oyarzabal , Javier Galban  
*UNIVERSIDAD DE ZARAGOZA, Zaragoza, España*

#### **Resumen**

Los dispositivos microfluídicos para el -micro- tratamiento de procesos analíticos se han configurado como herramientas clave en el desarrollo de métodos eficaces y eficientes. En particular las opciones con plataformas en papel (PAD) son particularmente económicas y adaptables a diferentes necesidades, formas y tamaños [1]. Además, los modos de lectura y detección de respuestas, especialmente, colorimétricas o de fluorescencia pueden ser conseguidos con dispositivos portátiles, como cámaras, teléfono-móvil, o similares, que proporcionan medidas 'in situ', rápidas y reproducibles [2]. Todo el conjunto de estas características configura un 'nuevo escenario' en el que se alían prestaciones de alta eficiencia para proporcionar respuestas en situaciones críticas, lo cual supone cambios muy drásticos en el paradigma del desarrollo analítico.

En el presente trabajo, se ha puesto a punto una metodología de detección y diferenciación de Xantina e Hipoxantina basada en microfluidica sobre papel, con desarrollo de reacción colorimétrica que pasa a ser medida por colorimetría digital RGB en cámara de teléfono-móvil [2].

El procedimiento colorimétrico se genera en la oxidación de Xantina (Hipoxantina), catalizada por xantina oxidasa, y posterior oxidación del colorante Amplex Red (AR), a resorufina, catalizada por la enzima HRP.

En las condiciones óptimas se adicionan 10+10=20 µl total, de disolución de reactivos y analito, a disco circular de 1 cm diam, papel Whatman™. Con tamaño de poro óptimo (gran) w4, 20-25 µm, y tiempo de medida a 230 s, se consigue la mayor varianza colorimétrica y sensibilidad, así como rango lineal.

La respuesta del canal R (RGB) para la Hipoxantina es lineal en el intervalo LQ 1,6E-06 y máximo lineal 8,0E-06 mol/L, con una gran sensibilidad 3,0E+06 ur/mol.L-1 . En la reacción de Xantina se reduce la sensibilidad, 1,0E+06 ur/mol.L-1, en coherencia con la estequiometría de la reacción. Los estudios de efecto salino han puesto de manifiesto diferente comportamiento entre los dos analitos y por tanto un método de especiación entre ellos.

#### **Agradecimiento**

Este trabajo ha sido desarrollado con la financiación del proyecto: PID2022-139235OB-IOO, de la UE-AEI y también DGA, proyecto E25-23R, N&SB.

#### **Bibliografía:**

[1] L. A. PradelaF., W.B. Veloso, : et al., *Microchim. Acta*, 179(2023) 5:23.

[2] P. Cebrián, I. Sanz-Vicente, Á. López-Molinero, J. Galbán et al., *Biosensors* 12(2022) 341:349.



## P088

### Vibrational spectroscopy-chemometrics tandem as green analytical tool for industry quality control

Salvador Garrigues <sup>1</sup>, Daniel Gallart-Mateu <sup>1</sup>, Eva Tarazona <sup>1</sup>, Alejandro Bermejo <sup>2</sup>

1. *Department of Analytical Chemistry. University of Valencia, Burjassot, España*

2. *R&D Department. Agroderivados y químicos WeGrow, S.L., Madrid, España*

#### Resumen

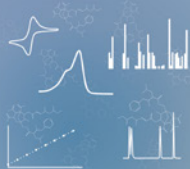
Nowadays the industry demands rapid analytical methodologies allowing quality control processes (QC) to be carried out fast and without sample treatment as much as possible. However, in most cases, QC and product quality assessment (QA) entail the use of classic rearguard analytical methodologies, involving time consuming, reagents use, waste generation and preparation stages before measurements. In this sense, the use of rapid methodologies and, if possible, without sample treatment, can play a more than important role in industry. In this work, the use of direct measurements with vibrational spectroscopy, in the middle (MIR) and near infrared (NIR) regions, is proposed together with chemometric tools such as partial least squares (PLS) spectral treatment applied to the determination of active ingredients in agrochemical formulations employed as nitrogen inhibitors. For this purpose, PLS models have been developed for determination of N-(n-butyl)thiophosphoric triamide (NBPT), dicyandiamide (DCD) and 3,4-dimethylpyrazole phosphate (DMPP) in agrochemical products, using different calibration strategies. Models selection has been performed considering minimum values for root mean square error of calibration (RMSEC), prediction (RMSEP) and the lowest number of latent variables (LVs) required; together with the maximum values for R<sup>2</sup><sub>cal</sub> and R<sup>2</sup><sub>pred</sub> and the ratio of standard error of performance to standard deviation (RPD). For validation purposes, commercial samples were employed and results compared with those obtained by a reference liquid chromatography method. Both techniques, NIR transmission using standard glass vials and MIR attenuated total reflection, allow the direct sample measurement without requiring any previous treatment or the need to use reagents or solvents. To evaluate the greenness characteristics, the developed methodologies have been compared with the liquid chromatography based reference methodologies in terms of the principles of Green Analytical Chemistry using several evaluation tools such as the Green Analytical Procedure Index (GAPI) [1], AGREEprep [2] and, Blue Applicability Grade Index (BAGI) [3].

#### Acknowledgements

Authors gratefully acknowledge the financial support of the Conselleria de Educació, Universitats y Empleo de la Generalitat Valenciana (Project CIAICO/2022/217) and the technical assistance provided by Agroderivados y químicos WeGrow, S.L.

#### References

- [1] F. Pena-Pereira, W. Wojnowski and M. Tobiszewski, *Anal. Chem.*, 92(14) (2020) 10076-10082.
- [2] W. Wojnowski, M. Tobiszewski, F. Pena-Pereira, et al., *TrAC, Trends Anal. Chem.*, 149 (2022) 116553.
- [3] N. Manousi, W. Wojnowski, J. Płotka-Wasyłka, et al., *Green Chem.*, 25 (2023) 7598.



## P089

### **Disolventes eutécticos profundos naturales (NaDES) como alternativa verde para la obtención de carotenoides a partir de residuos de tomate**

Rosa María Alonso Rojas, Omaira De La Hera Fernández  
*Universidad del País Vasco (UPV/EHU), Leioa, España*

#### **Resumen**

El aumento de la población mundial está provocando un incremento en la demanda de alimentos y recursos naturales. Esta situación está generando grandes cantidades de residuos agrícolas y alimentarios procedentes de las cadenas de suministro de alimentos, los hogares y las industrias de procesamiento de alimentos.

Los residuos alimenticios contienen biomoléculas como vitaminas, proteínas, minerales, antioxidantes y aceites aromáticos [1]. La recuperación de estos compuestos bioactivos proporciona un gran potencial para su uso en la industria alimentaria como componentes funcionales y nutracéuticos y en aplicaciones farmacéuticas y cosméticas [2].

Una de las etapas importantes en la estrategia de recuperación de residuos alimentarios es la selección de técnicas de separación y extracción adecuadas para obtener los ingredientes activos que se desean. En este sentido, los disolventes eutécticos profundos naturales (NaDES) han surgido como una alternativa verde para la obtención de compuestos bioactivos a partir de fuentes naturales [3,4]. Los componentes de estos NaDES son biomoléculas existentes en los alimentos. Por ello, la extracción con NaDES permite la incorporación directa del extracto rico en biomoléculas en la cadena alimentaria, sin necesidad de uso y eliminación de los disolventes orgánicos.

En este trabajo se aplicaron procedimientos de extracción basados en NaDES para obtener carotenoides de los residuos del procesamiento del tomate, que serán incorporados en la producción de alimentos funcionales potenciando la bioeconomía circular. Se optimizaron procesos de extracción de licopeno y se puso a punto un método de HPLC-DAD para determinar el contenido de licopeno en extractos de piel de tomate.

Los NaDES timol: ácido oleico 1:8 y 1:5 junto con ácido cáprico: ácido oleico 1.5 proporcionaron una recuperación semejante a la obtenida con el disolvente orgánico acetona (descrito en la Bibliografía como el más efectivo). Este procedimiento de extracción permite no solo la recuperación de licopeno, sino también de otros carotenoides como el beta-caroteno.

#### **Agradecimientos**

Los autores agradecen al Departamento de Educación (proyecto IT673-22) y al de Desarrollo Económico, Sostenibilidad y Medio Ambiente (proyecto PA24/04) del Gobierno Vasco por su financiación.

#### **Bibliografía**

- [1] R. Poritosh, K. M. Amar, D. Phil et al. ACS Environ. Au. 3 (2023) 58–75.
- [2] A. Baiano. Molecules 19 (2014) 14821-14842.
- [3] R.F. González-Laredo, V.I. Sayago-Monreal, M. R. Moreno-Jimenez et al. Int. J. Food Sci. Technol. 58 (2023) 6660–6673.
- [4] L. Schuh, M. Reginato, I. Florêncio. Molecules 28 (2023) 7653.



## P090

### Desarrollo de una metodología quiral rápida por electroforesis capilar para la separación simultánea de los enantiómeros del fungicida fenpropidin y su metabolito ácido

Laura García Cansino, María Luisa Marina , María Ángeles García  
*Universidad de Alcalá, Alcalá De Henares, España*

#### Resumen

Aproximadamente el 30-40 % de los productos agroquímicos tienen al menos un centro quiral en su molécula y suelen comercializarse como racematos. Sin embargo, sus enantiómeros pueden tener una actividad o un comportamiento medioambiental diferentes, lo que hace necesario el desarrollo de metodologías analíticas quirales que permitan realizar estudios de estabilidad, degradación o toxicidad en matrices medioambientales a nivel enantiomérico, además de controlar la calidad de las formulaciones comerciales de agroquímicos. La Electroforesis Capilar (CE) ha demostrado ser una técnica con elevado potencial en el campo del análisis quiral por la posibilidad de añadir el selector quiral al medio de separación sin necesidad de emplear fases estacionarias quirales y por su elevada eficacia.

El objetivo principal de este trabajo ha sido desarrollar una metodología quiral por CE que permita la separación enantiomérica simultánea del fungicida fenpropidin y su metabolito ácido, ambos con un centro quiral en su estructura. Para ello, se empleó el modo de separación de Cromatografía Electrocinética empleando ciclodextrinas como selectores quirales. Se investigó el efecto de la naturaleza y concentración del tampón de separación y del selector quiral, del voltaje de separación y de la temperatura. Ello permitió llevar a cabo la separación de los cuatro enantiómeros en menos de 11 min con valores de resolución enantiomérica de 3,1 y 3,2 para fenpropidin y su metabolito, respectivamente. Se evaluaron las características analíticas del método en términos de linealidad, exactitud, selectividad, precisión, y límites de detección (LODs) y cuantificación (LOQs) (0,25 y 0,75 mg L<sup>-1</sup>, respectivamente, para los cuatro enantiómeros). El método se aplicó al control de calidad de una formulación agroquímica comercial y al análisis de suelos de cultivo empleando microextracción en fase sólida ( $\mu$ SPEed).

**Agradecimientos.** Los autores agradecen al Ministerio de Ciencia e Innovación (proyecto PID2022-140512NB-I00) y a la Universidad de Alcalá (PIUAH23/CC-041) la financiación concedida. L.G.C. agradece a la Universidad de Alcalá su contrato predoctoral FPI.



## P091

### Biosensor electroquímico de grafeno inducido por láser para la detección de lactato

Isabel Blasco Pascual, Yann Houeix Acid, Brenda Denice Gerardo Iribe, Noel Rodríguez Santiago, Francisco Javier Romero Maldonado, Alfonso Salinas Castillo  
*Universidad de Granada, Granada, España*

#### Resumen

El lactato es uno de los biomarcadores más importantes de la hipoxia tisular y la disfunción metabólica, ayudando en el diagnóstico y el tratamiento de afecciones como la sepsis, la insuficiencia cardíaca y el cáncer. Los recientes avances en su sonorización se enfocan en biosensores electroquímicos basados en enzimas, esenciales en la mayoría de los medidores portátiles comerciales de lactato tanto en muestras de sangre como de sudor [1].

Para desarrollar nuevos biosensores portátiles no invasivos, es deseable que los sensores de lactato estén basados en nanomateriales depositados sobre sustratos flexibles y ligeros para ser incorporados en dispositivos wearables, además de estar asociados a procesos de fabricación de bajo coste. Siguiendo estas premisas, podemos destacar el grafeno inducido por láser (LIG) como técnica de gran interés para desarrollar sensores electroquímicos por su elevada área superficial, porosidad y conductividad eléctrica. Además, se obtiene mediante un proceso de un único paso de irradiación láser de materiales ricos en carbono, como es la poliimida flexible Kapton® [2]. Por tanto, combinar electrodos basados en LIG, junto con técnicas de impresión de tintas conductoras, abre un gran abanico de posibilidades para el desarrollo de sensores electroquímicos flexibles de bajo coste.

En este trabajo se presenta un sensor electroquímico no invasivo para la determinación de lactato en muestras biológicas. Para ello, se fabricaron electrodos basados en LIG e inyección de tinta de plata (como electrodo de referencia) y se funcionalizaron con una membrana multicapa selectiva al lactato [3]. El rendimiento del sensor electroquímico ha sido evaluado comparándolo con el obtenido para electrodos comerciales, demostrando la viabilidad de este enfoque para el desarrollo de sensores de lactato flexibles, no invasivos y de bajo coste.

#### Referencias

- [1] X. Xuan, C. Pérez-Ràfols, C. Chen, et al. Lactate biosensing for reliable on-body sweat analysis. *ACS Sens*, 2021, 6(7), 2763–2771.
- [2] D. Gerardo, Y. Houeix, F. J. Romero, et al. Optimization of dry laser-induced graphene (LIG) electrodes for electrocardiography (ECG) signals monitoring. *Appl Phys A, Materials Science & Processing*, 2024, 130(3).
- [3] W. Jia, A. J. Bhandodkar, G. Valdés-Ramírez, et al. Electrochemical tattoo biosensors for real-time noninvasive lactate monitoring in human perspiration. *Anal. Chem.*, 2013, 85(14), 6553–6560.

#### Agradecimientos

Este trabajo ha sido parcialmente financiado por el Ministerio de Ciencia e Innovación de España (MCIN/AEI/10.13039/501100011033) a través del Proyecto Nacional PID2020-117344RB-I00 y por la Junta de Andalucía – Consejería de Universidad, Investigación e Innovación a través del proyecto ProyExcel\_00268.



## P092

### Plataforma multisensora biocompatible para detección de frescura de alimentos

M<sup>a</sup> Angustias Torres-Molina Jiménez, Elisa M<sup>a</sup> Ruiz Cano, María García Sánchez, Isabel M<sup>a</sup> Pérez De Vargas Sansalvador, Miguel M Erenas Rodríguez, Alberto José Palma López, Luis Fermín Capitán Vallvey  
*Universidad de Granada, Granada, España*

#### Resumen

La seguridad alimentaria y en concreto el desperdicio alimentario es un tema de actualidad, siendo un problema global y uno de los factores clave de estudio en la comisión europea.

La forma más habitual de presentar alimentos al consumidor es envasados, cumpliendo funciones de protección, comunicación, conveniencia y contención. En respuesta a las nuevas necesidades, el envasado tradicional ha llevado a un envasado inteligente, que cumple las funciones principales y es capaz de proporcionar información sobre el producto o extender su vida útil[1]. Uno de los aspectos de mayor importancia es el desarrollo de sensores para gases, ya que ciertos gases diana pueden utilizarse para corroborar el estado de la atmosfera protectora del envase y se pueden correlacionar con el contenido microbiano del alimento y, por tanto, con su frescura[2].

Existen varios gases diana de interés, como son el dióxido de carbono (CO<sub>2</sub>) originado en la respiración bacteriana, el sulfuro de hidrógeno (H<sub>2</sub>S), resultante de la descomposición de la cisteína, y el amoniaco (NH<sub>3</sub>), producto de la degradación microbiana. Además, la determinación de CO<sub>2</sub> se puede utilizar como control de la integridad de la atmósfera modificada[3].

Es por ello por lo que, para detectar estos gases, hemos desarrollado sensores colorimétricos utilizando distintos tipos de indicadores, tanto naturales como sintéticos, que son inocuos y biocompatibles. Estudiamos la variación colorimétrica de las coordenadas RGB y HSV a distintas concentraciones de cada uno de los gases diana, ensayando distintas condiciones, matrices y soportes con el fin de optimizar las membranas y desarrollar sensores para envasado inteligente de utilidad para distintos alimentos. Además, se ha estudiado su funcionamiento en condiciones de humedad relativa semejantes a la industria y su estabilidad en diferentes condiciones, logrando una estabilidad de más de 10 días, lo que se considera clave para su aplicación. Se ha llevado a cabo una caracterización analítica de los sensores desarrollados para los tres gases, cuyos resultados demuestran que pueden formar la base para el desarrollo de una plataforma analítica de detección de frescura biocompatible para su uso en la industria alimentaria.

#### Referencias:

1. K.L. Yang, P.T. Takhistov, J. Miltz Hypotheses in Food Science Intelligent Packaging. 2005;70(1):1–10.
2. R. Gutiérrez, T. García, I. González, B. Sanz, PE. Hernández, R. Martín. Lett Appl Microbiol. 1998;26(5):372–6.
3. Z. Fang, Y. Zhao, RD. Warner, SK. Johnson. Trends Food Sci Technol. 2017;61(2):60–71.

#### Agradecimientos:

Proyecto PID2022-138727OB-I00 financiado por MICIU/AEI/10.13039/501100011033 y por el FSE+



## P093

### Aplicaciones de las técnicas electroanalíticas en la caracterización de nanopartículas metálicas, microplásticos y en su interacción con contaminantes emergentes.

Juan Carlos Vidal , Francisco Laborda Gracia

*Grupo de Espectroscopía Analítica y Sensores (GEAS), Instituto Universitario de Investigación en Ciencias Ambientales de Aragón (IUCA), Universidad de Zaragoza, Pedro Cerbuna 12, 50009-Zaragoza, España, Zaragoza, España*

#### Resumen

Las técnicas electroanalíticas pueden proporcionar información químico-física muy importante en el estudio de nanopartículas y nanomateriales. Además de información adicional a otras técnicas más dedicadas al estudio de este tipo de materiales (microscopía electrónica SEM y espectroscopía de acoplamiento de plasma inductivo en modo partícula única con detección por espectrometría de masas, SP-ICP-MS).

En este trabajo se describen las posibilidades de técnicas muy potentes como espectroscopía de impedancia electroquímica (EIS), cronocoulombimetría y técnicas de nanoimpacto electroquímico en la caracterización y cuantificación de nanopartículas metálicas de Plata (AgNPs, electroactivas) y de forma indirecta de microplásticos de poliestireno (PS-MPs) y de cloruro de polivinilo (PVC-MPs). Los resultados se comparan con microscopía SEM y SP-ICP-MS.

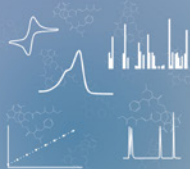
El nanoimpacto de partículas individuales AgNP sobre microelectrodos a partir de dispersiones de muy baja concentración permiten obtener distribuciones de tamaño del conjunto de nanopartículas que colisionan sobre el electrodo. Además de la estimación analítica de su concentración, en la llamada crono-coulombimetría de impacto de partículas, al relacionarse con su frecuencia de impacto. Por otro lado, el impacto de microplásticos (movimiento browniano) sobre microelectrodos de carbono produce su adsorción y la disminución de su área efectiva para el intercambio de carga. Por lo que, indirectamente y a través de un mediador de transferencia de carga, pueden también mediante técnicas de impacto electroquímico obtenerse distribuciones de tamaño y cuantificar el número de partículas en dispersión. Mediante EIS se confirma la adsorción de los microplásticos (PS-MPs y PVC-MPs) y su cinética sobre los microelectrodos de carbon empleados.

Adicionalmente, los microplásticos estudiados tienen una alta capacidad de adsorber moléculas orgánicas consideradas contaminantes emergentes, tales como disruptores endocrinos o fármacos, produciendo un efecto sinérgico en el medio ambiente. Mediante técnicas voltamétricas muy sensibles (voltametría diferencial de pulsos) se estudiaron como modelo las interacciones de bisfenol A y el antibiótico amoxicilina con PS-MPs y PVC-MPs, obteniéndose información sobre el tipo de interacción, cinética, termodinámica y capacidad de adsorción de estos contaminantes sobre los microplásticos indicados.

#### Referencias:

- [1] Juan C. Vidal et al., Detection, size characterization and quantification of silver nanoparticles in consumer products by particle collision coulometry, *Microchim. Acta* 188 (2021) 12-22
- [2] Juan C. Vidal et al., Detection, quantification, and characterization of polystyrene microplastics and adsorbed bisphenol A contaminant using electroanalytical techniques, *Microchim. Acta* 190 (2023) 203





## P094

### Extracción selectiva de mercaptanos, usando sales de Cu(I) en lechos de fase sólida. aplicación a cinco mercaptanos polifuncionales en vino

Lucía Lenti<sup>1</sup>, Oscar Castejón<sup>2</sup>, Ignacio Ontañón<sup>2</sup>, Dennis Fiorni<sup>1</sup>, Vicente Ferreira<sup>2</sup>,  
Ana Escudero<sup>2</sup>

1. University of Camerino, Camerino, Italia

2. Laboratorio de Análisis del Aroma y Enología (LAAE), Departamento de Química Analítica, Universidad de Zaragoza, IA2 (UNIZAR-CITA). Unidad asociada al ICVV (UR-CSIC-GR), Zaragoza, España

#### Resumen

Los mercaptanos son compuestos muy potentes aromáticamente en el vino. Tienen umbrales de olfacción de ng/L. Los hay con efectos negativos o positivos para la calidad del vino, como son 4-mercapto-4-metil-2-pentanona (MP), furfuriltiol (FFT), bencilmercaptano (BM), 3-mercaptohexanol (MOH) y acetato de 3-mercaptohexilo (MHA) [1].

El análisis de estos compuestos es complicado debido a su baja concentración, su alta reactividad y sus pobres propiedades espectrométricas. La mayoría de los métodos usan la derivatización [2, 3] obteniendo derivados sin olor y por tanto no pueden ser usados para la identificación cualitativa de mercaptanos desconocidos. Además, la derivatización depende mucho de la matriz y por tanto el uso de estándares internos deuterados es crucial. Por esto disponer de un procedimiento de aislamiento selectivo de los mercaptanos en una matriz compleja es el objetivo de nuestro trabajo. Se pensó en utilizar la reactividad selectiva de los compuestos con S y el Cu (I).

El novedoso método puesto a punto consiste en:

- Los mercaptanos son absorbidos en un cartucho de extracción en fase sólida (SPE) con Isolute ENV+, al percolar 15 mL de vino.
- Posteriormente son fijados como complejos de Cu(I) percolando una disolución de CuCl.
- Las interferencias extraídas junto con los analitos pueden ser totalmente lavadas con cualquier disolvente (hexano, diclorometano o metanol). Se eligió el metanol.
- Se percola una disolución de cisteína junto con DTT (1,4-ditiotreitol) para romper los complejos mercaptanos-Cu(I) y eliminar el Cu(I) del lecho de SPE.
- Para impedir la oxidación de los mercaptanos se percola una disolución de DTT como antioxidante.
- Por último, se eluye con 1.3 mL de metanol con DTT.

Todas estas etapas han sido optimizadas para aislar cuantitativamente los 5 mercaptanos (MP, FFT, BM, MHA y MOH) en vino. La presencia de agentes reductores (DTT) es esencial para garantizar la recuperación y se utilizó en diferentes pasos para garantizar una recuperación final completa de los analitos. Finalmente, para el análisis automatizado de mercaptanos no derivatizados, el extracto obtenido deberá ser transferido a un sistema GC-MS con desorción térmica, para poder introducir todo el extracto y llegar a la sensibilidad requerida.



## P095

### A preliminary survey of the presence of organic micropollutants adsorbed onto microplastics from insular coasts

José Juan Santana Rodríguez, Ludovit Schreiber , Zoraida Sosa Ferrera  
*UNIVERSIDAD DE LAS PALMAS DE GRAN CANARIA, Las Palmas De Gran Canaria, España*

#### Resumen

A preliminary survey of the presence of organic micropollutants adsorbed onto microplastics from insular coasts Ludovit Schreiber, Zoraida Sosa-Ferrera and José Juan Santana-Rodríguez Instituto Universitario de Estudios Ambientales y Recursos Naturales (i-UNAT), Universidad de Las Palmas de Gran Canaria, 35017 Las Palmas de Gran Canaria, Spain Microplastics have long been acknowledged as major pollutants in marine ecosystems. Their ability to adsorb various organic compounds, effectively becoming carriers of contamination, has been extensively studied and supported by our research team [1, 2]. In our investigation, we focused on assessing the presence of recently identified organic compounds listed in the 4th Watch List, as per the criteria established by the European Union. We examined the adsorption of these compounds onto microplastics in the eastern coastal areas of The Canaries archipelago. To achieve this, we optimized and utilized a previously used ultrasound-assisted extraction method for the extraction process [3, 4]. We thoroughly investigated the influence of different factors on the extraction process using experimental design techniques facilitated by Minitab® software. This methodology enabled us to assess the specific effects of each variable on the extraction process and identify potential correlations among them. After the extraction process, ultra-high-performance liquid chromatography system coupled to triple quadrupole mass spectrometer (UHPLC-MS/MS) was employed for the precise separation and detection of analytes. Several validation parameters underwent rigorous testing to assess the adequacy of the proposed method for the targeted compounds. Subsequently, this innovative was employed examine samples of microplastic fragments and plastic pellets collected from different beaches across eastern islands in the Canary Islands archipelago (Spain) to determine the presence of emerging contaminants adsorbed onto these microplastic residues.

**References** [1] S. Santana-Viera, S. Montesdeoca-Esponda, R. Guedes-Alonso, Z. Sosa-Ferrera, J.J. Santana-Rodríguez. *TrEAC* Vol. 29 (2021) p. e00114 [2] R. Guedes-Alonso, Z. Sosa-Ferrera, J.J. Santana-Rodríguez. *Microchem. J.* Vol. 171 (2021) p. 106834 [3] S. Santana-Viera, S. Montesdeoca-Esponda, Z. Sosa-Ferrera and J. J. Santana-Rodríguez. *Marine. Pollut.Bull.* Vol. 168 (2021) p.112434 [4] S. Santana-Viera, S. Montesdeoca-Esponda, M. E. Torres-Padrón, Z. Sosa-Ferrera and J. J. Santana-Rodríguez. *Chemosphere* Vol. 266 (2021) p. 129007

**Acknowledgements** Ludovit Schreiber thanks the European Union his post-doc Marie Curie grant, agreement No.101090291/IMPACTAS.



## P096

### Validación de un procedimiento analítico para identificar y cuantificar microplásticos y sus metales asociados

Diana Beatriz Diez-Pérez<sup>1,2</sup>, José M. Andrade Garda<sup>1</sup>, Soledad Muniategui Lorenzo<sup>1</sup>

1. Grupo QANAP, Instituto Universitario de Medio Ambiente, Universidade da Coruña, A Coruña, España

2. Universidad Nacional de Asunción, Facultad de Ciencias Químicas, Departamento de Química Física, San Lorenzo, Paraguay

#### Resumen

Los microplásticos (MPs) constituyen un problema global dada su ubicua presencia ambiental. Pueden adsorber compuestos químicos, p.ej. metales, cuyas mayores cantidades fueron reportadas, precisamente, para MPs envejecidos [Liu, 2022; Jones et al., 2020; Tourinho et al., 2019]. La investigación de MPs en aguas superficiales es incipiente en Paraguay, así como la de los contaminantes asociados [Diez-Pérez et al., 2023]. Los objetivos del presente estudio son: validar un procedimiento analítico para identificar y cuantificar MPs en aguas superficiales de riachuelos, y determinar metales adsorbidos sobre ellos. El protocolo para caracterizar MPs aplica varias etapas bien conocidas [Diez-Pérez et al., 2023] mientras que la determinación de Fe, Mn, Zn, Cu y Cd (totales) implica digestión ácida ( $\text{HNO}_3$ , 65 %) asistida por radiación de microondas. La validación interna implica agregar MPs y metales a las muestras y evaluar recuperaciones. También se estudiaron la repetibilidad ( $r$ ), límites de detección (LOD) y cuantificación (LOQ). Estos definidos clásicamente y considerando los riesgos de falsos positivos y negativos. Las recuperaciones analíticas variaban desde  $91.9 \pm 12.0$  % a  $119.8 \pm 23.9$  % y desde  $91.1 \pm 0.8$  % a  $118.3 \pm 1.7$  % para MPs y metales. Los LODs, LOQs (clásicos), y  $r$  para los metales variaban entre  $0.3 \mu\text{g}\cdot\text{g}^{-1}$  –  $8.9 \mu\text{g}\cdot\text{g}^{-1}$ ;  $1.1 \mu\text{g}\cdot\text{g}^{-1}$  –  $29.8 \mu\text{g}\cdot\text{g}^{-1}$ ; y 1.1 % - 8.9 %, respectivamente. Estos valores coinciden con la Bibliografía y hacen aplicable el método a muestras reales. Las grandes diferencias observadas para los LOD y LOQ usando las dos aproximaciones enfatizan la necesidad de aplicar las definiciones más recientes.

#### Agradecimientos:

Al Consejo Nacional para la Ciencia y la Tecnología (CONACYT), Incentivo Nacional par Investigadores de Paraguay (PRONII).

#### Referencias:

- D. B. Diez-Pérez, I. Arenas, E. Maidana, et al. Mar. Pollut. Bull., 192 (2023), 115075.  
J. I. Jones, A. Vdovchenko, D. Cooling, et al. Int J Environ Res Public Health, 17(24), (2020) 1–12.  
S. Liu, J. Huang, W. Zhang, et al. J. Environ. Manage 302 (2022) 113995.  
P.S. Tourinho, V. Kočí, S. Loureiro, et al. Environ. Pollut. 252 (2019) 1246–1256.



## P097

### **Análisis de azul de metileno en aguas con dispositivos colorimétricos in-situ empleando piezas impresas en 3D**

Roser Payà Pou<sup>1</sup>, Beatriz Fresco Cala<sup>2</sup>, Miriam Beneito Cambra<sup>1</sup>, Ernesto Francisco Simó-Alfonso<sup>1</sup>, Enrique Javier Carrasco Correa<sup>1</sup>

1. Grupo CLECEM, Dpto. Química Analítica, Universitat de València, València, España

2. Departamento de Química Analítica, Instituto Universitario de Investigación en Química Fina y Nanoquímica IUNAN, Universidad de Córdoba, Córdoba, España

#### **Resumen**

El azul de metileno (MB) es un tinte catiónico usado habitualmente en la industria textil, vertido habitualmente al medioambiente, contaminando aguas superficiales y subterráneas. Además, se ha demostrado que es persistente en el medio y tóxico para los organismos acuáticos [1]. Por ello, es necesario desarrollar nuevos métodos en química analítica centrados en metodologías sostenibles, económicas, portables y directas para su detección y monitorización, siguiendo los principios de la Química Analítica Verde [2]. En este sentido, la extracción en fase sólida (SPE) puede ser una de las grandes aliadas para conseguir estos objetivos, permitiendo realizar tratamientos de muestras para concentrar analitos que se encuentran en bajas concentraciones en el medioambiente. Sin embargo, la SPE suele combinarse con técnicas analíticas separativas que tienen un alto coste y que no pueden emplearse en campo. Gracias al empleo de la impresión 3D, es posible desarrollar dispositivos compatibles con la SPE y con medición in-situ empleando detectores colorimétricos como un smartphone o sistemas de detección portátiles. En este trabajo, se ha diseñado un dispositivo impreso en 3D para la detección in-situ de MB en aguas. Basándose en el uso de smartphones y colorímetros portables, se ha diseñado un cartucho impreso en 3D con una ventana plana mejorando la sensibilidad de la detección comparado con cartuchos SPE convencionales. La detección se ha optimizado usando la cámara del smartphone con un tratamiento fotográfico posterior para medir la intensidad RGB o empleando espectrómetros portables. El uso de la tecnología 3D propuesta permite el desarrollo rápido y sencillo de un dispositivo especializado a bajo coste. Además, esta nueva propuesta abrirá nuevas posibilidades para la extracción en fase sólida, no solo como sistema de tratamiento de muestra, sino como sistema para análisis in-situ de contaminantes sin la necesidad de emplear otras técnicas analíticas.

[1] I. Khan, et al., *Water* 14 (2022) 242. [2] S. Armenta, et al., *TrAC* 27 (2008) 497–511.

#### **Agradecimientos**

Agencia Española de Investigación (AEI/10.13039/501100011033) del Ministerio de Ciencia e Innovación (MICINN) por el proyecto PID2021-125459OB-I00 y a la Generalitat Valenciana (GV) por los proyectos CIAICO/2022/183, INVEST/2022/117, INVEST/2022/425 e INNEST/2022/299. Este estudio forma parte del programa de Materiales Avanzados y recibió apoyo del MICINN con financiamiento de la Unión Europea Next Generation EU (PRTR-C17.I1) y de la GV. Roser Payà-Pou agradece a la GV por el contrato "Investigo" (Ref. CPI-22-446).



## P098

### Acumulación Y metabolización del antidepresivo venlafaxina y su metabolito principal o-desmetilvenlafaxina en tres organismos marinos: *Holothuria Tubulosa*, *Anemonia Sulcata* y *Actinia Equina*

Alberto Zafra Gómez<sup>1</sup>, María Del Carmen Gómez Regalado<sup>1</sup>, Julia Martín Bueno<sup>2</sup>, Felix Hidalgo<sup>1</sup>, José Luis Santos<sup>2</sup>, Irene Aparicio<sup>2</sup>, Esteban Alonso<sup>2</sup>

1. *Universidad de Granada, Granada, España*

2. *Universidad de Sevilla, Sevilla, España*

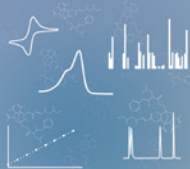
#### Resumen

Los fármacos son un grupo de sustancias químicas utilizadas para el tratamiento y la prevención de enfermedades en humanos y animales. Existen más de 4000 con diferentes propiedades químicas y terapéuticas que han mejorado exponencialmente la salud pública mundial en las últimas décadas [1]. Sin embargo, su elevado consumo hace que, tras su excreción o descarte directo a las aguas residuales, lleguen al medio ambiente y a los ecosistemas marinos convirtiéndose en contaminantes. La Unión Europea ha marcado alguno de ellos como sustancias de especial vigilancia en el ambiente [2]. La presente investigación se centra en la evaluación de la exposición al antidepresivo, de alta prescripción, venlafaxina y a su metabolito o-desmetilvenlafaxina en tres bioindicadores marinos: *Holothuria tubulosa*, *Anemonia sulcata* y *Actinia equina*. Se realizó un experimento de exposición de 28 días (10 µg/L día) seguido de un periodo de depuración de 52 días. Los análisis se realizaron mediante UHPLC-MS/MS. La acumulación muestra un proceso cinético de primer orden que alcanza una concentración media de 49-54 µg/g dw en *H. tubulosa* y 65-93 ng/g dw en *Anemonia*. La venlafaxina se considera acumulativa (BCF > 2000 L/kg dw) en los tres bioindicadores; y la o-desmetilvenlafaxina en *A. sulcata*. El factor de bioconcentración de cada organismo sigue en general el orden *A. sulcata* > *A. equina* > *H. tubulosa*. Por último, se observaron diferentes capacidades de metabolización entre tejidos en *H. Tubulosa* (tracto digestivo/pared corporal).

[1] I.A. Duarte, P. Reis-Santos, J. Fick, et al. *Environ. Pollut.* 316 (2023) 120531. [2] European Union. *Off. J. Eur. Union* L197 (2022) 117-121.

#### Agradecimientos

Este trabajo de investigación es parte del proyecto de I+D+i C-EXP-047-UGR23, cofinanciado por la Consejería de Universidad, Investigación e Innovación y por la Unión Europea con cargo al Programa FEDER Andalucía 2021-2027. Los autores agradecen también a las personas que contribuyeron a la recogida de las muestras y al Aula del Mar de la Universidad de Granada.



## P099

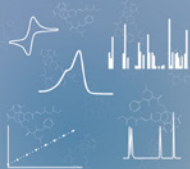
### **Bioacumulación de alteradores endocrinos químicos en la pared corporal del bioindicador marino *Holothuria Tubulosa*. análisis mediante GC-MS/MS**

Alberto Zafra Gómez, Úrsula Gallardo Gómez, Laura Martín Pozo, María Del Carmen Gómez Regalado, Felix Hidalgo  
*Universidad de Granada, Granada, España*

#### **Resumen**

Las actividades antropogénicas provocan la liberación de numerosos contaminantes al ambiente. Éstos no se eliminan correctamente durante el proceso de depuración del agua y acaban alcanzando el medio marino, donde se bioacumulan y ejercen efectos fisiológicos adversos sobre los organismos. Algunos actúan como alteradores del sistema endocrino de animales y humanos [1,2]. Bisfenoles, parabenos y el triclosán destacan especialmente por su impacto tóxico y persistente. La presente investigación se centra en la evaluación de la bioacumulación de 20 sustancias de síntesis (12 homólogos de bisfenol, 7 parabenos y triclosán) en la pared corporal de *Holothuria tubulosa* Gmelin 1791 (pepino de mar), empleando cromatografía de gases-espectrometría de masas en tándem previa extracción asistida con ultrasonidos de los analitos. Se optimizaron las variables clave del proceso de extracción y de la cromatografía. Se validó el método en términos de linealidad ( $\%R^2 > 99\%$  y  $\%Plof > 5\%$ ); sensibilidad, mediante la pendiente de la recta de calibrado y el cálculo los límites de detección (0.1-0.7 ng g<sup>-1</sup>) y de cuantificación (0.5-2 ng g<sup>-1</sup>); y exactitud (veracidad/precisión) mediante un ensayo de recuperación, con resultados comprendidos entre el 85.6% y el 112.3%, con una precisión aceptable (DER<15%) en todos los casos. Finalmente, se analizaron especímenes recogidos en 7 áreas de la costa sur de España encontrándose una contaminación importante en todas ellas. Bisfenol A y metilparabeno fueron los contaminantes predominantes (100% de las muestras). Las concentraciones más elevadas se encontraron en las zonas con mayor actividad antropogénica, lo que indica una tendencia situacional y geográfica. *H. tubulosa* es un excelente bioindicador de contaminación marina.

[1] C. Pironti, M. Ricciardi, A. Proto, et al. *Water* 13 (2021) 1347. [2] X. Gao, S. Kang, R. Xiong, et al. *Sustainability* 12 (2020) 7615. Agradecimientos Este trabajo de investigación es parte del proyecto de I+D+i C-EXP-047-UGR23, cofinanciado por la Consejería de Universidad, Investigación e Innovación y por la Unión Europea con cargo al Programa FEDER Andalucía 2021-2027. Los autores agradecen también a las personas que contribuyeron a la recogida de las muestras y al Aula del Mar de la Universidad de Granada.



## P100

### **Nuevo enfoque para la generación de la molécula CaF utilizando LIBS: reacción en fase gaseosa**

Alicia Garcia Garcia, Flávio Venâncio Nakadi, Martín Resano  
*Universidad de Zaragoza, Zaragoza, España*

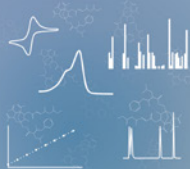
#### **Resumen**

La espectroscopia de descomposición inducida por láser (LIBS) es una técnica analítica utilizada en diversos campos para la determinación de elementos, principalmente metales. Esta técnica permite valorar el espectro de emisión generado por un pulso láser sobre una muestra [1], en la mayoría de los casos sólida. Los elementos no metálicos como Br, Cl, F, I, P o S no son ampliamente explotados por la dificultad de romper sus enlaces y excitarlos con único disparo láser y porque sus líneas de resonancia se encuentran en la región UV de alta energía [2]. No obstante, la determinación de no metales es posible por LIBS cuando hacemos reaccionar el analito (un halógeno, por ejemplo) con otro elemento generando una molécula diatómica, que emita radiación dentro del rango espectral de trabajo de LIBS [2]. Además, hay estudios que valoran el desplazamiento isotópico de algunos elementos via formación de moléculas diatómicas (LAMIS) [3]. Sin embargo, la mayoría de las estrategias de generación de moléculas se lleva a cabo mezclando la muestra sólida con una sal que contiene el elemento que genera la molécula con el analito. En este trabajo se evalúa la posibilidad de generar la molécula diatómica CaF a partir de un gas de reacción, en este caso el fluoruro de metilo (CH<sub>3</sub>F) diluido en argón al 1% v/v. Para ello, se llevó a cabo la optimización del flujo de gas, gate delay y la fluencia, utilizando una disolución patrón de 500 mg L<sup>-1</sup> de Ca y Sr. Las mejores condiciones resultaron ser de 0,6 L min<sup>-1</sup> de flujo de gas, 0,25 μs de gate delay y fluencia de 0,27 J cm<sup>-2</sup>. A través de este estudio se abre la posibilidad de estudiar este tipo de estrategia de generación de moléculas diatómicas, sin la necesidad de dilución de la muestra con sales.

[1] V.Gardette, V. Motto-Ros, C.Alvarez-Llamas et al., *Anal.Chem.* 93 (2023) 49-69. [2] M.Resano , M. Aramendía , F. V. Nakadi et al., *TRAC-Trends Anal.Chem.* 129 (2020) 115955. [3] A. A. Bol'shakov, X. Mao, J. J. González et al., *J. Anal. At. Spectrom.* 31 (2016) 119-134.

#### **Agradecimientos**

Proyecto PID2021-122455NB-I00 (MCIN/AEI/10.13039/501100011033) DGA, Construyendo Europa desde Aragón, Grupo E43\_20R PRE2022-104710



## P101

### Redes Metal Orgánicas Fluorescentes como alternativa a métodos convencionales para establecer la capacidad antioxidante en alimentos

Francesc Amaro Simeón Antich<sup>1</sup>, Roser Payà Pou<sup>1</sup>, Neus Crespí Sánchez<sup>2</sup>, Ernesto Francisco Simó Alfonso<sup>1</sup>, Enrique Javier Carrasco Correa<sup>1</sup>

1. Grupo CLECEM, Dpto. Química Analítica, Universitat de València, Burjassot, València, España

2. Química de Materiales, Dpto. Química, Universitat de les Illes Balears, Palma, España

#### Resumen

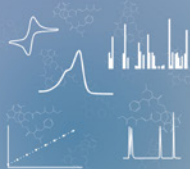
Los micronutrientes en alimentos que actúan como antioxidantes (vitaminas E y C, carotenos, flavonoides, ácidos fenólicos, diterpenos y aceites volátiles, entre otros) [1], han despertado mucho interés en la industria alimentaria. Esto es debido a su efecto beneficioso contra enfermedades relacionadas con el estrés oxidativo [2]. Sin embargo, determinar estos compuestos es complicado debido a las matrices y diversidad de compuestos en una muestra, siendo necesario emplear métodos analíticos de alta resolución y coste. Como alternativa sencilla y económica se emplean métodos basados en evaluar la capacidad antioxidante (CA) de estos micronutrientes. Estos métodos, como el folin-ciocalteu, la captación de radicales libres o el poder antioxidante de reducción férrica, aunque son comúnmente empleados, presentan desventajas como la baja reproducibilidad para evaluar la CA, debido a que reactivos dependientes de reacciones redox no producen resultados confiables [3]. Por lo tanto, es necesario encontrar alternativas para evaluar la CA. En este contexto, puede generar un avance significativo el uso de redes metal-orgánicas (MOFs) fluorescentes. Algunos MOFs pueden presentar cambios en su señal debido a la presencia de otros compuestos ya que provocan un efecto antena en la luminiscencia del MOF, amplificando su señal por la transmisión de energía de excitación del compuesto. Por lo tanto, en este trabajo se propone el uso de MOFs fluorescentes basados en europio para desarrollar sistemas de evaluación de la CA presente en alimentos. La presencia de compuestos con CA provoca procesos de efecto antena en MOFs fluorescentes, lo que permite obtener una nueva manera de evaluar la capacidad oxidante. De esta manera, el método desarrollado se ha optimizado y comparado con otros métodos convencionales. Estos estudios han servido para ver con que método de los convencionales muestra mayor correlación y obtener resultados con mayor sensibilidad y reproducibilidad.

[1] E. M. Atta, et al. Eur. Chem. Bull. 6 (2017) 365-375. [2] C. Manach, et al. Am. J. Clin. Nutr. 79 (2004) 727-747. [3] H.M. Appel, et al. J. Chem. Ecol. 27 (2001) 761-778.

#### Agradecimientos

Agencia Española de Investigación (AEI/10.13039/501100011033) del Ministerio de Ciencia e Innovación (MICINN) por el proyecto PID2021-125459OB-I00 y a la Generalitat Valenciana (GV) por los proyectos CIAICO/2022/183, INVEST/2022/117, INVEST/2022/425 e INNEST/2022/299. Este estudio forma parte del programa de Materiales Avanzados y recibió apoyo del MICINN con financiamiento de la Unión Europea Next Generation EU (PRTR-C17.I1) y de la GV. Roser Payà-Pou. agradece a la GV por el contrato "Investigo" (Ref. CPI-22-446).





## P102

### Presencia de arsénico en algas comestibles: evaluación de riesgos para la salud

Alba Morales Rodríguez<sup>1,2,3</sup>, Yanli Yu<sup>2,4</sup>, Guangming Zhou<sup>5</sup>, Àngels Sahuquillo Estrugo<sup>2,6</sup>, José Fermín López Sánchez<sup>2,6</sup>, Dolores Barrón Bueno<sup>1,3</sup>

1. *Dep. Nutrició, Ciències de l'Alimentació i Gastronomia. Universitat de Barcelona, Santa Coloma De Gramenet, España*

2. *Dep. Enginyeria Química i Química Analítica. Facultat de Química. Universitat de Barcelona, Barcelona, España*

3. *Institut de Recerca en Nutrició i Seguretat Alimentària. Universitat de Barcelona (INSA-UB), Santa Coloma de Gramenet, España*

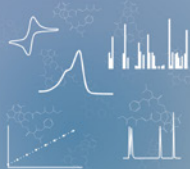
4. *Green Intelligence Environmental School, Yangtze Normal University, Chongqing, China*

5. *School of Chemistry and Chemical Engineering, Southwest University, Chongqing, China*

6. *Institut de Recerca de l'Aigua. Universitat de Barcelona (IdRA-UB), Barcelona, España*

#### Resumen

En la última década se ha incrementado el consumo de algas en las dietas europeas. Dado que los seres humanos son especialmente sensibles a la exposición al arsénico, es obligatorio un estricto control de las algas más consumidas, ya que es bien conocido que algunas especies acumulan importantes cantidades de este elemento. El objetivo de este trabajo ha sido estudiar los contenidos totales de arsénico y de las especies de arsénico en veinticinco algas de cinco orígenes diferentes que se pueden adquirir en tiendas especializadas en la ciudad de Barcelona para evaluar la ingesta de arsénico en función del consumo, EDI (Estimated Daily Intake) y determinar los THQ (Target Hazard Quotient) y los TCR (Target Cancer Risk). Las algas seleccionadas incluyeron los géneros Phaeophyta (alga parda), Chlorophyta (alga verde) y Rhodophyta (alga roja). Para el análisis del contenido total de arsénico se ha realizado una digestión en medio ácido con microondas y determinación por ICP-MS. Para el análisis de las especies se realizó una extracción con agua y la posterior determinación por LC-ICP-MS. Los mayores contenidos de arsénico total se observaron en algas del género Phaeophyta en el intervalo de 11 a 162 mg·kg<sup>-1</sup> de peso seco. En relación con la especiación, se encontró que los arsenoazúcares eran la especie de arsénico predominante en la mayoría de las algas marinas, representando hasta el 99,7% del arsénico total en algunas muestras. También se observó que en algunas especies predominaba el arsénico inorgánico, arsenito y arseniato, formas más tóxicas de este elemento. Teniendo en cuenta los contenidos de arsénico inorgánico se evaluaron los valores de ingesta diaria, EDI, de las algas estudiadas y se calcularon los valores de THQ y TCR. Las algas marinas mostraron un riesgo bajo de ingesta de arsénico, excepto las muestras de la especie *Hizikia fusiforme* con valores de THQ y TCR elevados incluso para ingestas bajas.



## P103

### Diseño de un método cinético para la determinación de vitamina C en cosméticos para el cuidado facial

Vanesa Romero , Isela Lavilla , Paula Otero , Carlos Bendicho  
*Universidad de Vigo, Vigo, España*

#### Resumen

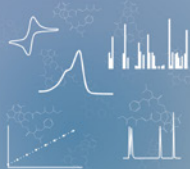
La vitamina C o ácido L-ascórbico (AA) es un ingrediente clásico en cosmética utilizado como conservante, potenciador y regulador del pH en concentraciones a partir de 0,0001% m/m. No obstante, en los últimos años ha ganado gran popularidad aprovechando su actividad antioxidante, empleándose en las fórmulas cosméticas faciales como agente antienvjecimiento y fotoprotector [1]. En estas formulaciones, la concentración máxima recomendada es 200 mg/g de AA (20% m/m) [2]. Así pues, la determinación de AA en un amplio intervalo de concentraciones es fundamental en las formulaciones cosméticas, no sólo por su control de calidad, sino también para la propuesta de fórmulas mejoradas que proporcionen una mayor estabilidad de este ingrediente para aumentar el periodo efectivo del producto [1]. En este trabajo, se ha desarrollado un método cinético espectrofotométrico a tiempo fijo para la determinación rápida y sencilla de AA en cosméticos basado en la emulsificación asistida por ultrasonidos combinada con la fotorreacción entre el AA y el azul de metileno (MB) [3]. En presencia de AA se produce una reducción en la intensidad de absorbancia del MB cuyo logaritmo es proporcional a la concentración de AA (primer orden), utilizándose para la calibración y cuantificación. En condiciones óptimas, los límites de detección y cuantificación fueron 8 µg/g y 30 µg/g, respectivamente. El procedimiento propuesto se adaptó para el análisis de una amplia gama de cosméticos con concentraciones muy diferentes de AA. Cabe destacar que con la metodología propuesta no se requiere centrifugación ni filtración de las muestras, ofreciendo un procedimiento selectivo, simple, rápido y sensible para la determinación y el seguimiento de AA en muestras cosméticas, que se puede adaptar fácilmente al análisis de rutina.

#### Agradecimientos

Los autores agradecen al MCIN/AEI/10.13039/501100011033/FEDER, UE (Proyecto PID2022-136337OB-I00 y RTI2018-093697-B-I00) por el apoyo financiero.

#### Referencias

[1] A. C. Caritá, B. Fonseca-Santos, J. D. Shultz, B. Michniak-Kohn, M. Chorilli, G. R. Leonardi, *Nanomedicine* 24 (2020) 102117. [2] S. R. Pinnell, H. Yang, M. Omar, N. M. Riviere, H. V. DeBuys, L. C. Walker, Y. Wang and M. Levine, *Dermatol. Surg.* 27 (2001) 137–142. [3] I. Lavilla, V. Romero, P. Costas, C. Bendicho, *Anal. Methods* 15 (2023) 951-958.



## P104

### **Droplet luminescent assays for fish freshness assessment using smartphone-based detection**

Nerea Villarino García, Francisco Javier Pena Pereira, Isela Lavilla Beltrán, Carlos Bendicho  
Hernández  
*Universidade de Vigo, Vigo, España*

#### **Resumen**

Trimethylamine nitrogen (TMA-N) and total volatile basic nitrogen (TVB-N) monitoring is commonly carried out for fish freshness assessment [1]. Reference methods are used with this aim [2,3], although they show drawbacks such as excessive waste generation, extended analysis time and/or complex sample preparation [4]. The development of straightforward, fast, and greener alternatives that allow for decentralized analysis is therefore highly desirable. The present contribution reports on the development of two droplet-based luminescent assays for the determination of TMA-N and TVB-N in fish samples. The assays rely on the luminescence quenching experienced by a microvolume of copper nanoclusters (CuNCs) when exposed to basic volatiles, namely ammonia, dimethylamine and trimethylamine (i.e., TVB-N). Thus, in-drop enrichment/sensing of TVB-N was performed by exposing a microdrop of CuNCs to volatile nitrogen bases, whereas the selective determination of TMA-N required the addition of formaldehyde to the sample, leading to the formation of non-volatile imines prior to the enrichment/sensing step. Smartphone-based digitization and image processing were accomplished to obtain the analytical response, thus avoiding the use of bulky and hardly portable equipment. In addition, a hydrophobized cellulose-based substrate (Whatman 1PS) served as holder of the microdrop for both enrichment and smartphone-assisted luminescent detection [5]. Under optimal conditions, the assays showed limits of detection of 0.11 mg/100 g and 0.27 mg/100 g for TMA-N and TVB-N, respectively, and enrichment factors of 181 and 153 for TMA-N and TVB-N, respectively. The repeatability, expressed as relative standard deviation, was 5.2% and 5.6% for TMA-N and TVB-N, respectively (N=8). The proposed assays were applied to the analysis of fish samples, obtaining results that did not significantly differ from those obtained with reference methods for both parameters (paired t test, significance level of 0.05).

#### **Acknowledgments**

The authors thank the MCIN/ AEI / 10.13039/501100011033 / FEDER, UE (Projects PID2022-136337OB-I00 and RTI2018-093697-B-I00) for financial support. The CACTI facilities (University of Vigo) are also acknowledged.

#### **References**

1] Bekhit, A.-E.-D.-A., Giteru, S. G., Holman, B. B., & Hopkins, D. L. *Comprehensive Reviews in Food Science and Food Safety* 20 (2021) 3620–3666. [2] AOAC Official Method 971.14. *AOAC Official Methods of Analysis* (1995). [3] European Commission (1995). *Official Journal of the European Union*, L97, 84–87. [4] Capitan-Vallvey, L. F., Lopez-Ruiz, N., Martínez-Olmos, A., Erenas, M. M., & Palma, A. J. *Analytica Chimica Acta*, 899 (2015) 23–56. [5] Villarino, N., Lavilla, I., Pena-Pereira, F. & Bendicho, C. *Food Chemistry*, 424 (2023) 136475.



## P105

### **Elucidación del mecanismo de toxicidad asociado a la exposición a puntos cuánticos de perovskita de CsPbBr<sub>2</sub>I mediante metabolómica basada en espectrometría de masas**

Estefanía García Calvo, Gabriel A. Peñalver, Andrés Machuca, Jose L. Luque García  
*Universidad Complutense, Madrid, España*

#### **Resumen**

Los puntos cuánticos de perovskita (QDs) son nanomateriales prometedores con propiedades ópticas y electrónicas únicas, que los hacen atractivos para aplicaciones como LED, paneles solares, láseres y sensores. A pesar de sus ventajas, su potencial toxicidad es motivo de preocupación, sobre todo considerando que muchos de estos QDs poseen metales pesados como el plomo. Por tanto, comprender su potencial toxicidad es crucial para su uso de forma segura en aplicaciones industriales. En este contexto, actualmente se están realizando estudios de toxicidad, centrados en evaluar las respuestas celulares, fisiológicas, genotóxicas e inmunotóxicas asociadas a la exposición de QDs de perovskita. Asimismo, abordar el estudio de la posible liberación de metales pesados es también un aspecto esencial para garantizar su uso seguro y prevenir efectos adversos para el medio ambiente y la salud. En base a esto, en el presente trabajo se evaluó la potencial toxicidad ejercida por QDs de perovskita de CsPbBr<sub>2</sub>I en células hepáticas HepG2 como modelo in-vitro. El estudio en profundidad del mecanismo molecular de toxicidad de estas nanopartículas se abordó mediante técnicas de metabolómica no dirigida empleando espectrometría de masas acoplada tanto a cromatografía de gases (GC-TOF-MS) como de líquidos (LC-QTOF-MS). A partir de los resultados generados, se observó la alteración de gran variedad de metabolitos que sugieren una posible liberación parcial de plomo dentro de las células. El plomo es un elemento conocido por sus efectos citotóxicos ejercidos principalmente a través del estrés oxidativo. Tras la exposición a las QDs, este estrés celular se manifestó en una elevación significativa de los niveles de glucosa, hecho que está potencialmente relacionado con un aumento de la capacidad de transporte y captación de glucosa. Como consecuencia de la inhibición observada en el proceso de glicólisis, la glutamina actuó como fuente de energía alternativa, conduciendo a una mayor producción de alanina y amoníaco. Por otra parte, la elevada acumulación de urea, a pesar de ser menos tóxica que el amonio, suscitó preocupación por su relación con una mayor letalidad y con un aumento en la generación de ROS. Otros metabolitos alterados indicaron posibles efectos citotóxicos adicionales tales como: alteraciones en el crecimiento y señalización celular, alteraciones del metabolismo energético, e inducción de senescencia, entre otros. En conclusión, el análisis metabolómico puso de relieve el impacto significativo de la exposición a QDs de perovskita en el metabolismo celular, indicando una posible citotoxicidad que, sin duda, conlleva importantes implicaciones medioambientales y de salud.



## P106

### Desarrollo de metodología analítica para la determinación de aminas biógenas y aminoácidos en muestras de chocolate

Laura Morales Erazo<sup>1,2</sup>, Javier Saurina<sup>3,4</sup>, Sonia Sentellas<sup>5,6,7</sup>

1. *Departamento de Ingeniería Química y Química Analítica, Barcelona, España*

2. *Instituto de Investigación en Nutrición y Seguridad Alimentaria, Santa Coloma de Gramenet, España*

3. *Universitat de Barcelona, Barcelona, España*

4. *Universitat de Barcelona, Santa Coloma de Gramenet, España*

5. *E08028, Barcelona, España*

6. *E08921, Santa Coloma de Gramenet, España*

7. *Serra Hünter Fellow, Barcelona, España*

#### Resumen

Las aminas biógenas (AB) son compuestos de bajo peso molecular que se forman a partir de aminoácidos mediante procesos de aminación, transaminación de aldehídos y cetonas, o descarboxilación por acción de microorganismos. Estas sustancias se encuentran de manera natural en alimentos, especialmente en aquellos altamente perecederos y sometidos a fermentación. La concentración de AB puede variar según diversos parámetros durante la producción alimentaria, lo que las convierte en indicadores de calidad y frescura. Además, algunos estudios han demostrado su potencial como marcadores de autenticidad alimentaria. Entre las metodologías utilizadas para su determinación destaca la cromatografía de líquidos previa derivatización de los grupos amino. Estos métodos implican múltiples etapas, por lo que es crucial optimizar el proceso de medición e implementar herramientas de control de calidad para garantizar resultados analíticos adecuados. En este sentido, en el presente estudio se evaluaron diferentes factores que influyen en la extracción y derivatización de las aminas biógenas y aminoácidos en chocolates, como el pH, tiempo, relación muestra/disolvente y temperatura. Además, se implementaron estrategias para corregir errores, especialmente asociados a la deriva durante el proceso de determinación cromatográfica. La determinación de aminas biógenas y aminoácidos se llevó a cabo utilizando un HPLC Agilent acoplado a un espectrómetro de masas (AbSciex Qtrap 4000) en modo de multiple reaction monitoring (MRM). Las condiciones de extracción y derivatización se evaluaron en muestras comerciales de chocolate, utilizando como factor de respuesta el área y el coeficiente de variación. Para mitigar los errores asociados a la derivatización y la deriva instrumental, se emplearon como patrones subrogados e internos diferentes compuestos. Los resultados indicaron que el tiempo no tuvo un efecto significativo sobre la extracción o derivatización. En cambio, la relación de muestra para la extracción y el pH y la temperatura de derivatización fueron las variables más relevantes. El análisis de los patrones subrogados permitió asegurar que la derivatización se realizó adecuadamente en todas las muestras, manteniendo coeficientes de variación por debajo del 7%. Además, se seleccionó el patrón interno más adecuado para cada analito considerando los coeficientes de correlación obtenidos. La asparagina resultó ser el estándar interno más adecuado para el 64% de los compuestos, mientras que la octopamina lo fue para el 33%. El uso de estos patrones internos permitió mitigar la deriva instrumental, obteniéndose coeficientes de variación menores de 10% para la mayoría de los compuestos evaluados.



## P107

### Evaluación de diferentes alternativas de pre procesamiento de espectros de fluorescencia de rayos X

Diego Ahumada Forigua<sup>1</sup>, Georgios Magkanas<sup>2</sup>, Javier Saurina<sup>3</sup>, Jose Francisco Garcia<sup>1</sup>

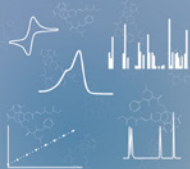
1. Departamento de Ingeniería Química y Química Analítica, Barcelona, España

2. Universitat de Barcelona, Barcelona, España

3. E08028, Barcelona, España

#### Resumen

La fluorescencia de rayos X (XRF) se ha convertido en una herramienta esencial en la ciencia del patrimonio debido a su capacidad para determinar la composición elemental de objetos asegurando su integridad. Sin embargo, enfrenta desafíos técnicos y metodológicos que afectan la interpretación y adquisición de resultados cualitativos y cuantitativos. Estos desafíos incluyen el acceso limitado a objetos patrimoniales, las condiciones de medición y el tiempo requerido para obtener resultados confiables. Para garantizar resultados analíticos adecuados, es esencial optimizar tanto las condiciones de medición como el pre procesamiento de los espectros de XRF. En este contexto, este estudio presenta los resultados obtenidos en la evaluación de diversos métodos de pre procesamiento, que incluyen el suavizado, la corrección de la deriva, la alineación y la calibración de la ordenada, y su influencia en la identificación de elementos presentes en muestras de vidrio a concentraciones bajas. Se utilizó un espectrómetro portátil (Elio, XGLAB) equipado con un tubo de rayos X de ánodo de rodio, una ventana de berilio de 12.5  $\mu\text{m}$  y un detector de deriva de silicio con una resolución energética de 135 eV en la línea  $K\alpha$  de manganeso. El preprocesamiento de los espectros se realizó utilizando el software estadístico R. Se analizaron más de 100 muestras de vidrio, cuyos elementos fueron determinados mediante espectrometría de masas por plasma acoplado inductivamente (ICP-MS) o el método de parámetros fundamentales, previamente calibrado. La evaluación de los métodos de preprocesamiento se llevó a cabo mediante la estimación del índice de Jaccard, la relación señal-ruido y la estimación de la incertidumbre asociada a la identificación. Los resultados indicaron que el método de suavizado Savitzky-Golay mostró el mejor rendimiento, mientras que la corrección de la línea base a través del método de Rolling ball mejoró significativamente la detección de las señales. Además, se observó que la segmentación de los espectros y el empleo de modelos de regresión mediante mínimos cuadrados ponderados proporcionaron una mejor calibración de la ordenada, lo que se reflejó en menores incertidumbres de identificación para la mayoría de los elementos.



## P108

### Hacia un modelo global unificado de retención para predecir huellas cromatográficas de muestras medicinales no relacionadas

Pau Peiró Vila, Gemma Torres Villanueva, José Ramón Torres Lapasió,  
María Celia García Álvarez-Coque  
*Universitat de València, Burjassot, España*

#### Resumen

El desarrollo de métodos de análisis mediante HPLC en productos de medicina natural presenta importantes retos, como la presencia de cantidades muy elevadas (e indefinidas) de constituyentes químicos, la disparidad de concentraciones, el desconocimiento en mayor o menor grado de la composición de la matriz y, en consecuencia, la carencia de patrones [1]. Los organismos reguladores aceptan el uso de las denominadas “huellas dactilares cromatográficas” para controlar la calidad de los productos comerciales. Puesto que la calidad informativa de una huella dactilar es proporcional a la cantidad de compuestos visualizados, es importante poder establecer las condiciones experimentales que maximicen la cantidad de constituyentes [2,3]. La mejor solución para resolver el problema es la aplicación de metodologías basadas en modelos. Lamentablemente, los modelos convencionales son inaplicables en este contexto. Recientemente se ha desarrollado un nuevo enfoque en la modelización cromatográfica: el uso de modelos globales [3]. Estos modelos incluyen parámetros comunes que caracterizan tanto a la columna como al disolvente, así como parámetros específicos de cada soluto. La ventaja principal de estos modelos es que no requieren el uso de patrones para cada compuesto eluido, y son aplicables a muestras muy complejas, con cientos de constituyentes. En este trabajo, se amplía el concepto de modelo global de retención, de modo que los parámetros comunes se obtienen utilizando varios tipos de muestras, lo que se ha denominado modelos globales unificados. Se demuestra que los modelos globales unificados permiten predecir las condiciones óptimas de separación para nuevos materiales, de manera muy fiable y con una experimentación mínima. En muchos casos, con un único experimento es posible pronosticar el gradiente más adecuado para muestras que pueden contener decenas o centenares de constituyentes.

#### Agradecimientos

PID2019-106708GB-I00, MCIN/AEI/ 10.13039/501100011033. Pau Peiró-Vila agradece la beca predoctoral ACIF 2021/262, Generalitat Valenciana

#### Referencias

[1] G. Alaerts, S. Pieters, H. Logie, M. Merino-Arévalo, B. Dejaegher, J. Smeyers-Verbeke, Y. Vander Heyden, Exploration and classification of chromatographic fingerprints as additional tool for identification and quality control of several artemisia species, *J. Pharm. Biomed. Anal.* 95 (2014) 34–46. [2] T. Alvarez-Segura, A. Gómez-Díaz, C. Ortiz-Bolsico, J.R. Torres-Lapasió, M.C. García-Alvarez-Coque, A chromatographic objective function to characterise chromatograms with unknown compounds or without standards available, *J. Chromatogr. A* 1409 (2015) 79–88. [3] A. Gisbert-Alonso, J.A. Navarro-Huerta, J.R. Torres-Lapasió, M.C. García-Álvarez-Coque, Global retention models and their application to the prediction of chromatographic fingerprints, *J. Chromatogr. A* 1637 (2021) 461845.



## P109

### **REefVOLUTION: reef-centered analytical tools for bioremediation in marine ecosystems**

Carlos Pagan-Galbarro <sup>1</sup>, Joseba Aguiló-Arce <sup>2</sup>, Francisco Antonio Casado-Carmona <sup>1</sup>, Pere Ferriol <sup>3</sup>,  
Manuel Miró <sup>1</sup>

1. *FI-TRACE Group, Department of Chemistry, University of the Balearic Islands, Carretera de Valldemossa km 7.5, E-07122, Palma, España*

2. *Department of Bioscience, Biotechnology and Environment, University of Bari Aldo Moro, Via Orabona 4, 70125, Bari, Italia*

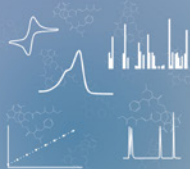
3. *Interdisciplinary Ecology Group, Department of Biology, University of the Balearic Islands, Carretera de Valldemossa km 7.5, E-07122, Palma, España*

#### **Resumen**

We herein present complementary analytical tools serving for monitoring reef-based bioremediation approaches aimed at the restoration of autochthonous fauna and flora in marine settings. A pilot project is being currently underway at the Balearic Islands to exploit Biorock-based artificial reefs that are colonized with benthic filter-feeding and suspension-feeding organisms (e.g., sponges, ascidians, annelids, scleractinians, hydroids or bryozoans) for bioremediation of the coastal seabed of the Balearic Islands that is affected by the continuous discharge of treated and reclaimed water. A first analytical tool capitalizes on the exploration of analytical suspect-screening methods based on liquid chromatography and high-resolution mass spectrometry. The idea behind is not a mere identification and quantification of legacy and emerging (unregulated) organic pollutants (e.g., relatively polar chemical compounds) from the reclaimed waters released by marine outfalls, before and after setting the artificial reef, but establishing more effective treatment technologies in wastewater treatment plants. Within the objectives of sustainable development of the Agenda 2030 and the environmental objectives of the ecological transition set out in Regulation (EU) 2020/852 of the European Parliament, this pilot project delves into the resilience of aquatic life and the circular/bioeconomy by exploring the potential valorization of the biomass generated throughout the environmental restoration. The idea behind is to isolate bioactive natural products (namely, tyrosine-derived brominated compounds, polyprenylhydroquinones, polycyclic guanidine alkaloids, just to name a few) produced by the filter-feeding organisms in environmentally impacted marine settlements by using green extraction methods as the second main analytical tool in this project. Preliminary results capitalized upon using natural deep eutectic solvents (NADES) as extractants for isolation of bioactives of potential use in the pharmaceutical industry, and potentially bioaccumulated organic pollutants are presented.

**Acknowledgement:** The authors acknowledge the financial support provided by the Spanish Ministry of Science, Innovation and Universities (MICIU), the Spanish State Research Agency (AEI/10.13039/501100011033) and the European Union (NextGenerationEU/PRTR) through the project TED2021-131303B-I00 (MICIU/AEI/NextGenerationEU/PRTR)





## P110

### Estudio de la evolución de compuestos volátiles y eficacia antifúngica de un nuevo envase activo para fruta y verdura basado en aceites esenciales

Esther Asensio Casas<sup>1</sup>, Eire López Arroyos<sup>1</sup>, Laura Aguerri Fernández<sup>1</sup>, Filomena Silva<sup>2</sup>

1. Universidad de Zaragoza, Zaragoza, España

2. Fundación Agencia Aragonesa para la Investigación y Desarrollo (ARAID), Zaragoza, España

#### Resumen

El objetivo de este trabajo ha sido estudiar cómo se puede extender la vida útil de los alimentos (frutas y verduras), minimizando el desperdicio alimentario y garantizando su seguridad alimentaria. Es por ello que se ha desarrollado un nuevo envase activo con actividad antifúngica para fruta y verdura, en concreto un papel recubierto con una emulsión de almidón y aceites esenciales, para colocar en el cajón de las verduras del frigorífico, y que permita alargar su tiempo de vida útil sin contacto directo con el mismo. Para evaluar los nuevos papeles activos formulados (preparados con dos emulsiones de almidones diferentes), se han realizado estudios de determinación de compuestos volátiles y actividad antifúngica (anti-*Botrytis cinerea*) cada 7 días durante 31 días, almacenando los papeles activos a temperatura ambiente y 4 °C. Para llevar a cabo la identificación de los compuestos volátiles de mayor interés (con propiedades antifúngicas), así como su evolución en el tiempo, según el papel activo formulado y según la temperatura de almacenamiento; se ha trabajado con microextracción en fase sólida con espacio de cabeza (HS-SPME) acoplado a cromatografía de gases (GC/MS). La mayoría de los compuestos volátiles identificados han sido monoterpenos y sesquiterpenos. Se ha observado una importante disminución de la cantidad de compuestos volátiles en las tres/cuatro primeras semanas (17/24 días de almacenaje), en todos los ensayos llevados a cabo, y una disminución mucho más suave en las últimas semanas del estudio. En las mismas condiciones de ensayo y con los mismos materiales se han llevado a cabo ensayos de actividad antifúngica en fase vapor frente a *Botrytis cinerea* con el objetivo de evaluar la estabilidad de la actividad antifúngica. Se ha verificado que dicha estabilidad es dependiente del tipo de almidón usado para preparar las emulsiones de recubrimiento del papel activo. Se ha demostrado que el almidón catiónico, con mejores propiedades emulsionantes, ha sido capaz de mantener la actividad antifúngica por más tiempo (24 días) mientras que el recubrimiento con el almidón que posee mejores propiedades filmogénicas ha sido capaz de mantener su actividad antifúngica por 17 días.

#### Agradecimientos

Proyecto TED2021-129138B-C21: Desarrollo de nuevas soluciones ecológicas y sostenibles de envases activos para fruta fresca y, Gobierno de Aragón y Fondo Social Europeo por la financiación del grupo GUIA (Grupo Universitario de Investigación Analítica) T53\_23R.



## P111

### Determination of cocaine in camouflaged samples by using a green methodology

Daniel Gallart Mateu, Miguel De La Guardia Cirugeda, Salvador Garrigues Mateo  
*Universidad de Valencia, Valencia, España*

#### Resumen

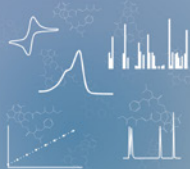
Cocaine continues being the second most consumed drug in Europe, although its production continues to be located mainly in Central and South America [1]. The increase in border controls against drug trafficking has made traffickers look for more ingenious methods to transport and introduce the drug into the markets, one of them being camouflage it within other substances or compounds, to recover it later by applying relatively simple treatments [2]. This has meant that the organizations in charge of identifying and controlling its presence in these new substances face new analytical challenges, significantly increasing the work and activity of these laboratories. In this work we present a methodology based on the ultrasound-probe assisted extraction with ethanol and dry film attenuated total reflectance infrared spectroscopy (DF-ATR-FTIR) measurement of extracts has been developed for a fast evaluation of non-conventional ("exotic") solid sized cocaine samples. The method was validated providing quantitative results, from 80% until 105%, in less than three minutes with a limit of detection in the solid sample of 1.6  $\mu\text{g g}^{-1}$  cocaine, with a variation coefficient lower than 7%. Results found for seized samples of different nature were in good agreement as compared with those obtained by a reference gas chromatography (GC-MS) method. On the other side, the greenness of the whole proposed procedure was evaluated and compared by using several greenness evaluation tools such as the Analytical Eco-Scale, Green Analytical Procedure Index (GAPI), Analytical Greenness Metric (AGREE) or AGREEprep. The developed methodology offers a fast, simple and efficient way, reaching scores of 95.4, 0.62 and 0.72 by using the Green Certificate, AGREE and AGREEprep evaluation tools, respectively. Compared with the use of GC-MS, infrared instruments are simpler, with low maintenance and do not require a dilution of the organic extract, thus reducing the organic solvent consumption.

#### Acknowledgements

Authors gratefully acknowledge the financial support of the project PID2019-110788GB-I00 funded by MCIN/AEI/10.13039/501100011033 and Spanish Delegación del Gobierno para el Plan Nacional sobre Drogas, Project PND2022I030. Authors also acknowledge the Official Valencia Drug Control Laboratory (Valencia, Spain) for providing samples.

#### References

[1] United Nations Office on Drugs and Crime (UNODC). World Drug Report 2022: Drug market trends of cocaine, amphetamine-type stimulants and new psychoactive substances, Office on Drugs and Crime, New York (2023). [2] N.V.S. Rodrigues, E.M. Cardoso, M.V.O. Andrade, et al., J. Braz. Chem. Soc., 24(3) (2013) 507-517.



## P112

### Estudio de la variación de la forma del pico de sustancias polares en función del contenido de modificador y la temperatura: comparación de columnas de distinta naturaleza

Juan José Baeza Baeza, Carlos Josue Tereba Mamani, Luis Jesús Baeza Ballesteros, María Celia García Álvarez-Coque  
*Universitat de Valencia, Burjassot, España*

#### Resumen

La caracterización de los perfiles de los picos cromatográficos ha sido objeto de extensa investigación [1]. Aunque el perfil ideal de un pico cromatográfico se describe comúnmente como una función Gaussiana, en la práctica, los picos reales muestran desviaciones significativas de este modelo, exhibiendo tanto asimetría como curtosis. [2]. En este trabajo, se investigan los picos eluidos en dos columnas cromatográficas con propiedades muy distintas (una convencional C18 de fase inversa y otra compuesta de micropartículas de grafito). Para una caracterización adecuada de los picos, se propone emplear los valores de semianchura al 60 % y 10 % de altura, y evaluar la normalidad en base a la asimetría y la curtosis, así como calcular la similitud entre los picos. Las ecuaciones propuestas permiten considerar el efecto de la concentración del modificador y de la temperatura en las características de los picos cromatográficos. Se evaluaron los picos de 25 sustancias de interés bioquímico y farmacéutico, con un valor medio de polaridad elevado ( $\log P_o/w$  entre -2.5 y 0.85), incluyendo nucleósidos, xantinas, sulfonamidas y diuréticos. Se concluye que el perfil de los picos depende en gran medida de las interacciones que los solutos experimentan con la fase estacionaria. Así, la columna C18 muestra picos con elevada similitud y alta normalidad, excepto en el caso de la amilorida, cuya asimetría puede atribuirse a la existencia de interacción electrostática debido a su carga positiva. Por otro lado, la columna Hypercarb origina una variedad de formas de pico, menor similitud entre ellos y una menor normalidad. Este comportamiento puede atribuirse a interacciones con la fase estacionaria de naturaleza diversa con cinéticas más lentas. En consecuencia, la temperatura es un factor crucial para mejorar la forma de los picos con características menos favorables, ya que acelera la transferencia de masa, impactando de forma más significativa a los solutos eluidos con la columna Hypercarb.

#### Agradecimientos

Este trabajo ha sido financiado por el Proyecto PID2019-106708GB-I00 del Ministerio de Ciencia e Innovación (MCIN)/AEI/ 10.13039/501100011033.

**Referencias** [1] V.B. Di Marco, G.G. Bombi, J. Chromatogr. A 931 (2001) 1-30. [2] J.R. Torres Lapasió, J.J. Baeza Baeza, M.C. García Álvarez-Coque, Modeling of peak shape and asymmetry, en Chemometrics in Chromatography, Vol. 111 de Chromatographic Science Series (editado por L. Komsta, Y. Vander Heyden y J. Sherma), Capítulo 12, CRC Press, Boca Raton, FL, págs. 217-238, 2018.



## P113

### Estudio de la elución de compuestos polares con fases móviles submicelares en función de la concentración de acetonitrilo y la temperatura

Juan José Baeza Baeza, Nicolás Ariño Bueno, Carlos Josué Tereba Mamani, María José Ruiz Ángel, María Celia García Álvarez-Coque  
*Universitat de Valencia, Burjassot, España*

#### Resumen

Numerosos compuestos polares de interés bioquímico y farmacológico encuentran desafíos en su separación mediante RPLC, debido a una retención insuficiente. Una solución comúnmente empleada implica el uso de HILIC, que requiere fases móviles con elevados porcentajes de acetonitrilo [1]. En este trabajo, se explora una alternativa que consiste en utilizar columnas C18 junto a fases móviles que contienen bajos porcentajes de acetonitrilo, complementadas con la adición de una cantidad muy baja del surfactante dodecilsulfato sódico (SDS) [2]. Esta modalidad ha demostrado aumentos sustanciales en la retención de muchos compuestos polares, respecto a su elución mediante RPLC. Se ha encontrado que cuando la concentración de SDS ( $\mu$ ) es suficientemente baja, la retención sigue una tendencia lineal:  $k=k_0+K_S \times q_S \times \mu$  donde  $k_0$  representa el factor de retención del compuesto en la fase hidro-orgánica, y  $K_S$  y  $q_S$  son la constante de interacción soluto-SDS y la constante de adsorción del SDS en la fase estacionaria, respectivamente. Este modelo constituye una simplificación de un modelo más completo propuesto por Jandera y Fisher [3]. El estudio aborda el comportamiento de retención de solutos de diversa naturaleza, utilizando fases móviles que contienen SDS en concentraciones que oscilan entre 0 y 0.5 mM, diversas concentraciones de acetonitrilo entre el 5 y 20 %, a diferentes temperaturas entre 25 y 55 °C. Además, se analiza la variación de las semianchuras de pico en las diferentes condiciones de elución. Debido a que el tensioactivo se adsorbe en la fase estacionaria, se ha investigado el tiempo de equilibrado, observando que éste aumenta al reducir la concentración de SDS. Así, para una concentración de SDS 0.1 mM y un 5 % de acetonitrilo, el tiempo de equilibrado es de seis horas. Por otro lado, se ha observado que este tiempo disminuye al aumentar la concentración de SDS, el porcentaje de acetonitrilo y la temperatura.

#### Agradecimientos

Este trabajo ha sido financiado por el Proyecto PID2019-106708GB-I00 del Ministerio de Ciencia e Innovación (MCIN)/AEI/ 10.13039/501100011033

**Referencias** [1] R. Burgos-Gil, E. Peris-García, M.J. Ruiz-Ángel, J.J. Baeza-Baeza, M.C. García-Álvarez-Coque, *Microchemical J.* 149 (2019) 103973. [2] M.J. Ruiz-Ángel, J.R. Torres-Lapasió, M.C. García-Álvarez-Coque, S. Carda-Broch, *Anal. Chem.* 80 (2008) 9705–9713. [3] E Jandera, J. Fischer, *J. Chromatogr. A* 728 (1996) 279-298.



## P114

### Determinación del alérgeno Ara h1 en alimentos mediante el uso de aptámeros fluorescentes

Andrea Tortosa Cabanes, Miriam Beneito Cambra, María Vergara Barberán, José Manuel Herero Martínez, María Jesús Lerma García, Ernesto Francisco Simó Alfonso  
*Grupo CLECEM, Departamento de Química Analítica, Universidad de Valencia, C/ Doctor Moliner, 50, 46100, Burjassot, Valencia, España*

#### Resumen

En las últimas décadas se ha visto un aumento exponencial de las alergias alimentarias, representando un problema para la salud humana. Entre los productos alimentarios que causan alergias o intolerancias se encuentran los cacahuets y derivados. Estos producen una hipersensibilidad tipo 1 que puede manifestarse en el sistema cutáneo, respiratorio, gastrointestinal y cardiovascular, con tendencia a presentar síntomas graves. A modo de ejemplo, se estima que este tipo de alergia afecta entre el 1 y 2% de la población en Estados Unidos [1]. En consecuencia, es importante disponer de metodologías sensibles y eficaces para la detección de alérgenos en alimentos. En este trabajo se ha explorado el uso de un aptámero marcado con una molécula fluorescente para cuantificar la Ara h1, una glicoproteína identificada como uno de los principales sensibilizantes presentes en el cacahuete. Trabajando en disolución, se monitorizó el aumento observado en la fluorescencia del aptámero por su interacción con la proteína. El método se optimizó en base a la concentración de aptámero empleada, las longitudes de onda de excitación y de emisión, la temperatura y la cinética de la interacción aptámero-proteína. Los resultados han mostrado que el método permite cuantificar Ara h1 con una sensibilidad adecuada, siendo el límite de detección de 0,01 mg mL<sup>-1</sup> y el rango dinámico lineal de 0,03 a 1,5 mg mL<sup>-1</sup>. Adicionalmente, se ha aplicado a muestras reales con excelentes resultados sin observarse posibles interferencias. En comparación con otros métodos selectivos más extendidos como ELISA, el uso de aptámeros ofrece ventajas tales como mayor estabilidad física, y mayor viabilidad en su potencial síntesis a gran escala, presentando un bajo coste, alta pureza, poca variación entre tandas y fácil modificación química. [1] Christopher Warren, Dawn Lei, Scott Sicherer, Robert Schleimer y Ruchi Gupta. Prevalence and characteristics of peanut allergy in US adults, *J Allergy Clin Immunol*, 147 (2021) 2263-2270.

#### Agradecimientos

Agencia Española de Investigación (AEI/10.13039/501100011033) del Ministerio de Ciencia e Innovación (MICINN) por el proyecto PID2021-125459OB-I00 y a la Generalitat Valenciana (GV) por los proyectos CIAICO/2022/183 y CIGE/2023/69. Este estudio forma parte del programa de Materiales Avanzados y recibió apoyo del MICINN con financiamiento de la Unión Europea Next Generation EU (PRTR-C17.I1) y de la GV.



## P115

### Evaluating commercial vs. open-source data processing methods in GC-Orbitrap-HRMS untargeted metabolomics for food authentication: thyme as a case study

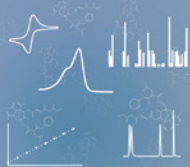
Araceli Rivera Pérez, Antonia Garrido French  
*Universidad de Almería, Almería, España*

#### Resumen

Untargeted metabolomics using gas chromatography-high resolution mass spectrometry analysis (GC-HRMS) represents a significant challenge in identifying metabolite markers in food applications, such as the authentication of condiments [1]. In this context, few studies have investigated the efficacy of untargeted data processing tools for GC-HRMS analysis data since most of them are focused on liquid chromatography (LC) [2]. This study addresses this gap by comprehensively evaluating two data analysis tools for GC-Orbitrap-HRMS metabolomics data: the open-source MS-DIAL software and the commercial Compound Discoverer™ software (specifically designed for Orbitrap data processing). The evaluation focuses on their application in geographical discrimination and marker identification in thyme samples from Spain and Poland as a case study. Both tools encountered challenges during feature extraction, primarily arising from unknown metabolites, background signals, and duplicate features, that should be carefully evaluated before proceeding to multivariate data analysis for reliable putative marker identification. After data matrices curation, Compound Discoverer™ and MS-DIAL putatively annotated 52 and 115 compounds at Level 2, respectively. Further multivariate data analysis (by partial least square-discriminant analysis, PLS-DA) facilitated the identification of differential compounds, pointing out the significance of data processing parameters, particularly the databases employed during compound annotation, in the process of marker identification. Despite these challenges, the study concludes that both Compound Discoverer™ and MS-DIAL offer viable options for untargeted GC-Orbitrap-HRMS data analysis in food authenticity applications since the compound class overview did not display disparate outcomes among them, and the annotated metabolites in thyme samples were mainly represented by monoterpenoids and sesquiterpenoids, among other miscellaneous compounds. This comparative evaluation serves as a practical guide for users intending to implement these data processing approaches in plant-based metabolomics studies, emphasizing the importance of considering tool availability and parameter optimization in achieving reliable results. Acknowledges: ARP acknowledges “Plan Propio de Investigación y Transferencia de la Universidad de Almería, financiado por la Consejería de Universidad, Investigación e Innovación con fondos del Programa Operativo Fondos Europeos de Desarrollo Regional de Andalucía (FEDER) 2021-2027. Programa: Investigación Científica e Innovación 54.A”. Grant reference: CPUENTE2023/21.

#### References

- [1] A. Rivera-Pérez, R. Romero-González, A. Garrido French. Food Chem. 393 (2022) 133377.
- [2] X. Wang, X. Ma, J. Liu, et al. Anal. Chim. Acta 1254 (2023) 341127.



## P116

### Detection and quantification of $\beta$ -casomorphin-5 and -7 in bovine milk hydrolysates by capillary electrophoresis-mass spectrometry

Tahereh Tehrani <sup>1</sup>, Laura Pont <sup>1</sup>, Bibiana Juan <sup>2</sup>, Antonio Trujillo <sup>2</sup>, Fernando Benavente <sup>1</sup>

*1. University of Barcelona, Barcelona, España*

*2. Autonomous University of Barcelona, Barcelona, España*

#### Resumen

Bovine milk features different  $\beta$ -casein ( $\beta$ -CN) proteoforms, mainly  $\beta$ -CN-A1 and  $\beta$ -ACN-A2, which are relevant to unequivocally identify milk with specific  $\beta$ -CN compositions [1]. Interestingly,  $\beta$ -CN-A1 is implicated in the enzymatic release of opioid peptides, such as  $\beta$ -casomorphin-5 and  $\beta$ -casomorphin-7 ( $\beta$ -CM-5 and  $\beta$ -CM-7), which have been linked to various human diseases, including milk intolerance and diabetes [2]. While liquid chromatography-mass spectrometry (LC-MS) methods have greatly facilitated the analysis of these peptides in bovine milk hydrolysates, persistent challenges remain [3]. Therefore, there is an urgent need for the development of novel complementary analytical methods to ensure their reliable detection and quantification, particularly as part of quality control processes of A2A2 bovine milks and for comprehensive bioactivity studies. In this work, we have developed a novel capillary electrophoresis-mass spectrometry (CE-MS) method for the detection and quantification of  $\beta$ -CM-5 and  $\beta$ -CM-7 in bovine milk hydrolysates from simulated gastrointestinal digestion. The method was established and validated using standards in terms of linearity, limits of detection (LODs), limits of quantification (LOQs), repeatability, and reproducibility for both  $\beta$ -CM-5 and  $\beta$ -CM-7. Then, it was applied to the analysis of  $\beta$ -CM-5 and  $\beta$ -CM-7 in A1A1 and A2A2 bovine milk hydrolysates from simulated gastrointestinal digestion with the INFOGEST method [4]. Prior CE-MS analysis, a sample clean-up and preconcentration step using hydrophilic lipophilic balance (HLB) microcartridges was necessary.  $\beta$ -CM-7 was effectively detected and quantified in A1A1 hydrolysates, whereas  $\beta$ -CM-5 was undetected. In addition, the absence of  $\beta$ -CM-5 and  $\beta$ -CM-7 in A2A2 samples was confirmed through CE-MS and -MS/MS analysis. These findings hold significant implications due to the potential applicability of the established method for  $\beta$ -CN profiling in dairy products, either for quality control or for investigating the biological mechanisms involved in sensitive individuals.

#### Acknowledgements

This study was supported by grant PID2021-127137OB-I00 funded by MCIN/AEI/10.13039/501100011033 and by "ERDF A way of making Europe" The Bioanalysis group of the University of Barcelona is part of the INSA-UB Maria de Maeztu Unit of Excellence (Grant CEX2021-001234-M) funded by MICIN/AEI/FEDER, UE.

#### References

[1] Z. Ghafoori, T. Tehrani, L. Pont, et al. *J. Sep. Sci.* 45 (2022) 3614-3623. [2] I. De Noni, R.J. FitzGerald, H.J.T. Korhonen, et al. *EFSA Sci Rep* 231 (2009) 1-107. [3] R. De Poi, E. De Dominicis, E. Gritti, et al. *Food Anal. Methods* 13 (2020) 2177-2187. [4] A. Brodkorb, L. Egger, M. Alming, et al. *Nat Protoc* 14 (2019) 991-1014.



## P117

### **Green analytical method for simultaneous determination of phthalate esters, adipate, and halodiphenyl ether residues in honeys from different botanical origins by GC-MS**

Ana M. Ares Sacristán, Adrián De La Fuente Ballesteros, José Bernal Del Nozal,  
Silvia Valverde Bastardo  
*Universidad de Valladolid, Valladolid, España*

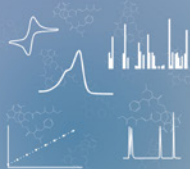
#### **Resumen**

Phthalate esters (PAEs), adipates (AEs), and halodiphenyl ethers (ETs) are essential chemical components in the plastics industry, utilized to enhance flexibility. However, certain PAEs/AEs/ETs pose health risks as some are classified as endocrine disruptors, toxic to reproduction, and potentially harmful to fertility or unborn children. Bees gather residues of these contaminants from pollen, nectar, and water, which are then inevitably found in honey due to their foraging habits. Furthermore, honey is often stored in plastic containers for consumer convenience, and crystallized honey is usually heated to regain liquidity, thereby enhancing the release of plasticizers. Hence, it is crucial to analyze the content of PAEs/AEs/ETs in honey samples due to potential migration and associated toxicity. This study introduces a novel analytical method developed to determine several mentioned compounds in honey samples using gas chromatography coupled with mass spectrometry. Multiple sample procedures were assessed to optimize recovery efficiency while minimizing matrix effects, and finally, a green sample treatment involving a double solvent extraction using ethyl acetate was employed. Chromatographic analysis utilized a 5% phenyl 95% dimethyl arylene siloxane column operating under programmed temperature conditions. The proposed method underwent comprehensive full validation and was applied to analyze honeys from different botanical origins, but mean concentration values were below European Commission limits. Keywords: plasticizers, honey, green sample preparation; GC-MS.

#### **Acknowledgements**

Authors thank the Women's Institute of the Spanish Ministry of Equality for funding this project (n°10-2-ID22). Adrián Fuente-Ballesteros thanks the University of Valladolid for his PhD grant.





## P118

### Development and validation of different analytical methods for determining pesticides in bee products

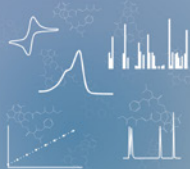
José Bernal Del Nozal, Adrián De La Fuente Ballesteros, Ana Jano Báscones,  
Ana María Ares Sacristán  
*Universidad de Valladolid, Valladolid, España*

#### Resumen

In recent years a series of food alerts have been issued related to the detection of contaminants such as pollutants, antibiotics, or pesticides in bee products around the world. Pesticides that are used both in agriculture and livestock can reach the beehives and subsequently their related products like honey, beeswax, royal jelly, propolis, or bee pollen through the pollination process. In addition, other pesticides, especially those employed to fight against *Varroa destructor* like acaricides, can produce direct contamination to the beehives because they are applied directly to the honeycombs. Different options for the use of acaricides, highly conditioned by the form of application, the climatic conditions, as well as the health status of the beehive, also compromise their effectiveness. This leads to the frequent application of doses higher than those recommended, and there is a high probability that acaricide residues appear in the different beehive products. Indeed, acaricide residues have been found in honeys from different countries, and maximum residue levels have been established by regulatory agencies to protect the consumer's health. Therefore, the development of specific and sensitive methodologies for the determination of acaricides in bee products is justified. The main goal of this research was to propose alternative methods for determining simultaneously seven of the most frequently detected pesticides (herbicide: atrazine; acaricides: chlorpyrifos, chlorfenvinphos,  $\alpha$ -endosulfan, bromopropylate, coumaphos, and  $\tau$ -fluvalinate) in beeswax, bee pollen royal jelly, propolis and honey by using gas chromatography-mass spectrometry (GC-MS). We developed a GC-MS method that was applied with slight modifications to all bee-related matrices. Moreover, we wanted to focus our attention in proposing efficient, simple, economic, and fast sample treatments. We addressed this issue providing the best performance in terms of extraction efficiency (recoveries) and significance of the matrix effect for determining the selected acaricides in the different bee products. In addition, some of these objectives (reduction of time and cost, number of steps, and amount of reagents) as well as searching for environmentally friendly reagents/solvents are in good agreement with the principles of the green analytical chemistry. Further goals of the present study were to validate the proposed methods for each bee product, and to analyze samples from different geographical origins.

#### Acknowledgements

Authors thank financial support by the Spanish "Ministerio de Economía y Competitividad" and the "Instituto Nacional de Investigación y Tecnología Agraria y Alimentaria" (Project number, RTA2017-00004-C02-02). Adrián Fuente-Ballesteros thanks the University of Valladolid for his PhD grant.



## P119

### Authenticating bee pollen origin by using high performance liquid chromatography

José Bernal Del Nozal, Jesús Alberto Tapia García, María Teresa Martín Gómez, Laura Toribio Recio,  
Ana María Ares Sacristán  
*Universidad de Valladolid, Valladolid, España*

#### Resumen

Bee pollen has been used in the human diet for many centuries. Its ever-increasing consumption results from its nutritional value and its health-promoting effects, like those relating to its antioxidant, anti-inflammatory, anticarcinogenic, antibacterial or anti-fungal properties. The nutritional value/quality and health properties of bee pollen are linked to its constituents, which include proteins, amino acids, lipids, carbohydrates, phenolic compounds, vitamins, and minerals, among several other compounds. However, its composition varies greatly according to several factors, like botanical and geographical origins, climatic conditions, the type of soil, or harvesting and processing conditions. This is quite important to prevent one of the main problems currently affecting the commercialization of bee pollen and thus the beekeeping industry, which is the fraudulent practice of adulteration with pollen from other sources/origins, such as, for instance, pine pollen. As may be expected, studying the profile of a particular family of compounds in bee pollen has been proposed to specify/authenticate its origin as well as to evaluate its corresponding nutritional value or health-promoting effect. Therefore, the main goal of this presentation is to investigate the potential of two families of bioactive compounds (amino acids and betaines) as bee pollen markers, by determining with high performance liquid chromatography coupled to different detectors their respective content in bee pollen samples from different geographical origins. It should be mentioned that in most cases, new analytical methods which fulfilled some of the principles of white analytical chemistry were proposed, and they were fully validated according with current legislation. Results showed that bee pollen samples can be classified, in most cases, by means of statistical analysis based on the content of the different compounds.

#### Acknowledgements

The communication is part of the action "PID2022-141679OR-C33", financed by MICIU/AEI /10.13039/501100011033 and by FEDER, EU



## P120

### Evaluación de la seguridad de poliolefinas recicladas destinadas al contacto con alimentos

Estela Pérez Bondía, Margarita Aznar Ramos, Celia Domeño Recalde, Cristina Nerín De La Puerta  
*Universidad de Zaragoza, Zaragoza, España*

#### Resumen

Actualmente, el uso de envases alimentarios de plástico está ampliamente extendido. Sin embargo, debido a las inquietudes relacionadas con el problema medioambiental que generan sus residuos, cobra gran importancia la búsqueda de nuevas tecnologías de reciclaje que permitan obtener materiales reciclados seguros para el consumidor. Este trabajo se ha centrado en la evaluación de la seguridad de muestras de polietileno reciclado de alta densidad (rHDPE) tras aplicar estrategias de descontaminación fundamentadas en el uso de temperatura y vacío, con el fin de garantizar si sería segura su implementación en la fabricación de envases alimentarios. Para ello, se llevaron a cabo ensayos de migración en 3 simulantes alimentarios en base a la Regulación EU/10/2011 [1] (acético 3%, etanol 10% y etanol 95%) y se determinó la concentración de los migrantes presentes. El análisis de los compuestos volátiles se llevó a cabo mediante cromatografía de gases acoplada a espectrometría de masas y microextracción en fase sólida (SPME-GC-MS). Los compuestos no volátiles se analizaron mediante cromatografía líquida acoplada a espectrometría de masas de alta resolución (UPLC-QTOF-MS) y a espectrometría de masas con triple cuadrupolo (UPLC-QqQ-MS). Los resultados mostraron un total de 67 compuestos volátiles en la migración a los 3 simulantes alimentarios, siendo etanol 95% el que mostró valores de migración mayores, del orden de los mg/kg para algunos migrantes como fue el caso de diferentes alquilbencenos. Las muestras de rHDPE sobre las que se aplicaron las estrategias de descontaminación mostraron valores de migración menores, reduciéndose en muchos casos por encima del 50%. En relación a los compuestos no volátiles, las disminuciones de concentración no fueron tan notables respecto a las muestras sin descontaminar. Destacó la migración de una serie de aminas lineales en los tres simulantes y se confirmó la presencia de algunos aditivos como la erucamida o el Irgafos 168 en concentraciones del orden de mg/kg, principalmente en etanol 95%. Se concluyó finalmente que la aplicación de vacío y temperatura reducía la posterior migración a los diferentes simulantes, especialmente de aquellos más volátiles. Por otro lado, etanol 95% fue en todos los casos el simulante con mayores valores de migración, por lo que el uso del rHDPE como envase de alimentos más grasos podría suponer un mayor riesgo para el consumidor.

#### Agradecimientos:

Ayuda PID2021-128089OB-I00 financiado por MCIN/AEI/ 10.13039/501100011033 y por la "Unión Europea NextGenerationEU/PRTR

[1] Regulación EU 10/2011 sobre materiales y objetos plásticos destinados a entrar en contacto con alimentos



## P121

### Desarrollo y validación de una nueva metodología analítica para la determinación de ftalatos en polen de abeja

Beatriz Martín Gómez, Silvia Valverde Bastardo, José Bernal Del Nozal, Ana María Ares Sacristán  
*Universidad de Valladolid, Valladolid, España*

#### Resumen

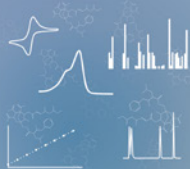
Los plásticos son materiales muy populares debido a su facilidad de producción, su peso ligero y su versatilidad. En la fabricación de plásticos, normalmente se utilizan aditivos para mejorar sus propiedades, como por ejemplo los ésteres de ftalatos (PAEs). Sin embargo, estos aditivos se clasifican como disruptores endocrinos, que son sustancias externas capaces de afectar adversamente al sistema endocrino, lo que conduce a graves problemas de salud. La disposición inadecuada de plásticos representa un riesgo significativo, ya que puede provocar la liberación de estos aditivos en el medio ambiente [1]. Cuando las abejas interactúan con elementos ambientales contaminados, estos compuestos pueden llegar a las colmenas, contaminando productos de la colmena como el polen de abeja [2]. Además, en el proceso de comercialización puede existir una fuente adicional de contaminación, ya que existe la posibilidad de que los PAEs migren desde el envase de plástico hacia el polen de abeja comercial [3]. Este estudio se centra en el desarrollo de una nueva metodología analítica para la determinación de PAEs en muestras de polen de abeja. Mediante una extracción con disolventes seguida de cromatografía de gases acoplada a espectrometría de masas (GC-MS), se encontraron y cuantificaron residuos de PAEs en algunas de las muestras. Los resultados del análisis confirman la presencia de residuos de disruptores endocrinos en el polen de abeja, lo que demuestra la importancia de investigar la contaminación por estos compuestos para poder establecer regulaciones adecuadas para proteger tanto el medio ambiente como la salud pública.

#### Agradecimientos

Este trabajo fue financiado por el Instituto de las Mujeres adscrito al Ministerio de Igualdad de España (proyecto nº10-2-ID22). Beatriz Martín-Gómez expresa su Agradecimiento al Ministerio de Ciencia, Innovación y Universidades de España por la concesión de un contrato FPU (FPU22/02334).

#### Bibliografía

[1] B. Martín-Gómez, J. Stephen Elmore, S. Valverde et al. *Microchem. J.* 197 (2024) 109903 [2] Y. Al Naggar, M. Brinkmann, C.M. Sayes et al. *Toxics* 9 (2021) 109 [3] H. Yuan, Q. Hao, R. Su et al. *J. Consum. Prot. Food S.* 15 (2020) 135–143



## P122

### Modelización de la transición del comportamiento cromatográfico entre la cromatografía líquida de fase inversa convencional y las modalidades submicelar y micelar

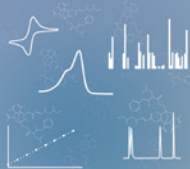
Carlos Josué Tereba Mamani, Juan José Baeza Baeza, María José Ruiz Ángel,  
María Celia García Álvarez-Coque  
*Universitat de Valencia, Burjassot, España*

#### Resumen

La cromatografía líquida de fase inversa (RPLC) no es capaz de separar de manera efectiva solutos altamente polares debido a su escasa retención. Para superar esta limitación, actualmente se recurre a la cromatografía de interacción hidrofílica (HILIC), que emplea fases móviles hidro-orgánicas ricas en modificador orgánico. Por otro lado, la cromatografía líquida micelar (MLC) ofrece otra alternativa ajustando las propiedades de la fase estacionaria para mejorar la retención de compuestos polares, mientras se reduce la retención de los apolares [1]. En MLC, las fases móviles acuosas contienen tensioactivo a concentraciones superiores a su concentración micelar crítica (cmc), lo que asegura un recubrimiento completo de la fase estacionaria con el tensioactivo y la formación de micelas. Otra modalidad de interés para el análisis de compuestos iónicos es la RPLC de pares iónicos, que utiliza fases móviles hidro-orgánicas con tensioactivo a concentraciones inferiores a la cmc (i.e., cromatografía líquida submicelar). En este trabajo, se investiga el rendimiento cromatográfico para solutos con propiedades químicas diversas, cuando se utilizan fases móviles que contienen dodecilsulfato sódico (SDS) a concentraciones tanto por debajo como por encima de su cmc, en presencia de acetonitrilo. Los solutos examinados comprenden tres nucleósidos, cinco diuréticos y dos sulfonamidas, de relevancia biomédica y farmacéutica, y con diferentes características ácido-base. Se analiza la evolución de la retención y la forma de los picos cromatográficos bajo condiciones experimentales, que permiten la transición desde la modalidad convencional de RPLC hasta la cromatografía líquida submicelar y micelar, para cada soluto. Además, se propone un modelo para predecir la retención durante la transición de fases móviles hidro-orgánicas a micelares, atravesando la fase submicelar [3]:  $k = [k_0 + K_s q \mu] / [(1 + q \mu) (1 + K \mu \mu)]$  donde  $\mu$  es la concentración de tensioactivo. El modelo propuesto muestra un rendimiento similar al propuesto por Jandera y Fisher [2], pero además permite analizar el grado de cobertura de la fase estacionaria en función de la concentración de SDS, y ofrece una explicación sobre el mecanismo de elución basado en las propiedades del analito.

**Agradecimientos:** Este trabajo ha sido financiado por el Proyecto PID2019-106708GB-I00 del Ministerio de Ciencia e Innovación (MCIN)/AEI/ 10.13039/501100011033.

**Referencias** [1] A. Berthod, M.C. García-Álvarez-Coque, *Micellar Liquid Chromatography*, Marcel Dekker, Nueva York, 2000. [2] E Jandera, J. Fischer, *J. Chromatogr. A* 728 (1996) 279-298. [3] M.J. Ruiz-Ángel, J.R. Torres-Lapasió, M.C. García-Álvarez-Coque, S. Carda- Broch, *Anal. Chem.* 80 (2008) 9705–9713.



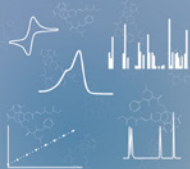
## P123

### **Análisis y cuantificación de drogas y medicamentos en polvo del interior de diferentes entornos públicos del sur de España.**

Cristina De Dios Pérez, Ana María Ballesteros Gómez, Soledad Rubio Bravo  
*Universidad de Córdoba, Córdoba, España*

#### **Resumen**

En este estudio se emplea una técnica de microextracción novedosa basada en disolventes supramoleculares (SUPRAS) para la preparación de muestras de polvo interior para la determinación de fármacos y drogas de abuso mediante cromatografía líquida y espectrometría de masas de alta resolución. Se cuantificaron 45 drogas de abuso y 34 productos farmacéuticos. Se probaron SUPRAS de diferentes composiciones para obtener recuperaciones máximas. Se recolectaron muestras de diferentes entornos públicos (oficinas, aulas de edificios educativos, peluquerías, discotecas, cafeterías y restaurantes) en el sur de España. El análisis se realizó con adquisición de datos independiente (IDA) y librerías comerciales. Los criterios de identificación fueron la masa exacta ( $\leq 5$  ppm) y el ajuste del patrón isotópico ( $m\text{Sigma} \leq 50$ ) tanto de los principales iones precursores como de los fragmentos, así como el ajuste del tiempo de retención ( $\pm 0.25$  min). Los resultados mostraron la ubicuidad de drogas de abuso, como la cocaína y el cannabis. Estos resultados muestran la ubicuidad y altos niveles de drogas en el polvo interior de lugares públicos, lo cual ha sido escasamente reportado y podría constituir una fuente relevante de exposición humana.



## P124

### Parental obesity predisposes the offspring to exacerbated metabolic disturbances later in childhood

Lucía Jurado Sumariva<sup>1</sup>, Álvaro González Domínguez<sup>1</sup>, Otto Savolainen<sup>2</sup>, Jesús Domínguez Riscart<sup>1</sup>,  
Rikard Landberg<sup>2</sup>, Raúl González Domínguez<sup>1</sup>

1. Instituto de Investigación e innovación Biomédica de Cádiz (INiBICA), Hospital Universitario Puerta del Mar, 11009  
Cádiz, España, Cádiz, España

2. Division of Food and Nutrition Science, Department of Life Sciences, Chalmers University of Technology. SE-412  
96 Gothenburg, Sweden, Gotemburgo, Suecia

#### Resumen

Family history of obesity is known to increase the risk of developing childhood obesity in the offspring, but molecular mechanisms underlying this greater predisposition remain to be elucidated. Herein, we investigated a population-based cohort comprising children with obesity and parental obesity (when at least one of the parents had obesity), children with obesity without parental obesity (when none of the parents had obesity), and lean healthy children as controls, from whom plasma and erythrocyte samples were collected for metabolomics analysis using ultra-high performance liquid chromatography coupled to high resolution mass spectrometry. Interestingly, we found parental obesity to associate with unhealthier outcomes in children with obesity, as reflected in higher fasting insulin levels and impaired insulin sensitivity. This was in turn accompanied by alterations in multiple obesity-related metabolic pathways, such as energy homeostasis, amino acid metabolism, oxidative stress, synthesis of steroid hormones and bile acids, membrane lipid composition, and exposome-related factors. Notably, some differential metabolites showed more pronounced changes in children from parents with obesity, especially at erythroid level, when compared to counterparts not suffering from this parental predisposition. Therefore, we hypothesize that family history of obesity could be an important risk factor in modulating and exacerbating the characteristic metabolic impairments that typically underly childhood obesity, with erythrocytes serving as sensitive sensors to decipher the impact that parental conditioning may have on metabolic health in the offspring.



## P125

### ¿Es el bisfenol A asociado a microplásticos menos biodisponible que el bisfenol A libre?

Llucia Garcia-Moll <sup>1</sup>, Alberto Fuster <sup>1,2</sup>, Francisco Antonio Casado-Carmona <sup>1</sup>, Miguel D. Ferrer <sup>3</sup>,  
Antoni Sureda <sup>3</sup>, Silvia Tejada <sup>4</sup>, Josep Mercader <sup>5</sup>, Manuel Miró <sup>1</sup>

1. FI-TRACE Group, Department of Chemistry, University of the Balearic Islands, Palma De Mallorca, España

2. Department of Physics, University of the Balearic Islands, Palma de Mallorca, España

3. Research Group on Community Nutrition and Oxidative Stress, University of the Balearic Islands,  
Palma De Mallorca, España

4. Laboratory of Neurophysiology, Department of Biology, University of the Balearic Islands,  
Palma De Mallorca, España

5. MOLONE group, Department of Fundamental Biology and Health Sciences, University of the Balearic Islands,  
Palma De Mallorca, España

#### Resumen

En este trabajo se propone una metodología para la monitorización de bisfenol A (BPA) y bisfenol glucuronidado (BPAg), su metabolito más abundante [1], en plasma de rata para comparar la biodisponibilidad del BPA libre frente a BPA adsorbido a microplásticos de dimensiones promedio inferiores a 100  $\mu\text{m}$ . Para ello, se administró por vía oral BPA libre disuelto en aceite de maíz y BPA adsorbido a microplásticos de polietileno (BPA-PE) disperso en carboximetilcelulosa a dos grupos de ratas Wistar adultas. La dosis administrada fue de 2 mg de BPA libre/kg de rata y de 0,67 g BPA-PE/kg de rata con PE conteniendo 3 mg BPA/g, de manera que la cantidad de BPA administrada fuera la misma en ambos casos. Después de la administración se recolectaron muestras de plasma en un período comprendido entre 0-24h. El tratamiento de las muestras para la purificación de BPA y BPAg del plasma se llevó a cabo mediante una extracción en fase sólida con Captiva EMR-Lipid (40 mg) y la posterior reconstitución de los analitos en agua-metanol (60:40). Se usaron como patrones internos el bisfenol A-d16 y el BPAg-13C12. Para la cuantificación de los analitos se usó un equipo de LC-MS con columna C18-Luna (150  $\times$  2.1 mm). El perfil toxicocinético tanto del BPA como del BPAg para ambos grupos experimentales mostró un pico de absorción máximo inicial aproximadamente a los 30 minutos y un descenso gradual a partir de las 6h hasta las 24h sin haber llegado aún en este último punto a su nivel basal. Se evaluó la exposición sistémica de BPA de ambos grupos experimentales mediante el cálculo del área bajo la curva de concentración plasmática-tiempo (AUC, 0-24 h), obteniendo valores de AUC de  $170 \pm 9 \mu\text{g}\cdot\text{h/L}$  y  $9490 \pm 1314 \mu\text{g}\cdot\text{h/L}$  para el BPA y el BPAg, respectivamente, en el grupo que se administró BPA libre, y unos valores de  $333 \pm 83 \mu\text{g}\cdot\text{h/L}$  y  $6680 \pm 1411 \mu\text{g}\cdot\text{h/L}$  para el grupo BPA-PE, con lo que se concluye que, estadísticamente, el BPA asociado a microplásticos no es menos biodisponible que el BPA libre.

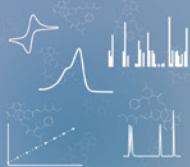
#### Referencias

[1] D. R. Mattison, N. Karyakina, M. Goodman, et al. Crit Rev Toxicol, 44, (2024) 696–724.

#### Agradecimientos

Los autores agradecen la ayuda económica de la Agencia Estatal de Investigación (AEI/10.13039/501100011033) y el Ministerio de Ciencia, Innovación y Universidades (MICIU) a través del proyecto PID2020-117686RB-C33. LG-M. agradece a MICIU por financiar una beca FPI-PhD (PRE2021-100217).





## P126

### Evaluación del riesgo químico en envases para alimentación infantil

Margarita, Aznar\*; Estela, Pérez; Javier, Galindo; David Rupérez; Elena Canellas; Cristina, Nerín  
*Grupo GUIA, Departamento de Química Analítica, Universidad de Zaragoza, 50018, España*  
*\*marga@unizar.es*

#### Resumen

Las bolsas reutilizables para almacenar alimentos infantiles (zumos, purés, yogures), así como las bolsas de almacenaje de leche materna, están fabricadas en su mayoría con materiales multicapa, que incluyen el uso de diferentes polímeros así como capas de adhesivo (comúnmente poliuretano) que permiten su unión, y tintas de impresión. Cabe por tanto la posibilidad de que las sustancias presentes en los diferentes componentes del envase sean transferidas a los alimentos envasados pudiendo suponer un riesgo para el consumidor. En este trabajo se evaluó la seguridad de bolsas reutilizables para alimentación infantil y bolsas para almacenaje de leche materna. Para ello, se llevaron a cabo ensayos de migración bajo las condiciones establecidas en la Regulación EU/10/2011 [1], teniendo en cuenta las condiciones específicas de uso de los diferentes materiales. Se utilizaron 3 simulantes alimentarios (ácido acético 3%, etanol 10% y etanol 95%) que cubrían todo el rango de alimentos y se realizó la evaluación tanto de compuestos volátiles como no volátiles utilizando para ello cromatografía de gases acoplada a espectrometría de masas (GC-MS) y cromatografía de líquidos acoplada a espectrometría de masas (UPLC-MS). Se detectó la presencia de numerosos migrantes volátiles, principalmente en etanol al 95%, lo que supone una mayor migración a alimentos grasos. Los resultados mostraron entre los principales migrantes productos de descomposición de Irgafos 168, un antioxidante ampliamente utilizado a base de trisarilfosfito, tales como el 2,4-ditertbutilfenol (2,4-dtBP); o compuestos añadidos intencionadamente a los envases como el antioxidante butilhidroxitolueno. Por otro lado, se estudió entre los no volátiles la presencia de algunos de los plastificantes y antioxidantes más extendidos, destacando la migración de la erucamida, utilizada en los polímeros como aditivo de deslizamiento y antibloqueo. Se identificaron también otras amidas con funciones similares y diferentes oligómeros procedentes del adhesivo de poliuretano utilizado para unir las diferentes capas del material, tales como los formados por adípico y dietilenglicol. Los resultados mostraron la necesidad de llevar a cabo estudios de toxicidad en algunos de los migrantes detectados para garantizar la seguridad de estos envases en contacto con alimentos.

#### Agradecimientos:

Ayuda PID2021-128089OB-I00 financiado por MCIN/AEI/ 10.13039/501100011033 y por la “Unión Europea NextGenerationEU/PRTR

[1] Regulación EU 10/2011 sobre materiales y objetos plásticos destinados a entrar en contacto con alimentos



## P127

### Estudio integral de la degradación de dos bioplaguicidas y de la toxicidad de sus metabolitos tras su aplicación en pepino

Alba Reyes Ávila, Roberto Romero González, Antonia Garrido Frenich

*Grupo de Investigación "Química Analítica de Contaminantes", Departamento de Química y Física, Centro de Investigación en Agrosistemas Intensivos Mediterráneos y Biotecnología Agroalimentaria (CIAMBITAL), Universidad de Almería, Campus de Excelencia Internacional Agroalimentario, ceiA3, Ctra. Sacramento s/n, 04120, La Cañada de San Urbano, Almería, España, Almería, España*

#### Resumen

El uso de plaguicidas menos tóxicos para el medioambiente y la salud humana se ha extendido en las últimas décadas. Por ello, el empleo de bioplaguicidas ha aumentado debido a que proporcionan mayor seguridad al estar compuestos por productos naturales (extractos vegetales, minerales, microorganismos, etc.). Aunque se han estudiado durante años los efectos de diferentes extractos vegetales y aceites esenciales en todo tipo de plagas, hay pocos estudios sobre el comportamiento de estos bioplaguicidas en muestras medioambientales o alimentarias. Estos bioplaguicidas pueden no ser tóxicos, si bien los productos de transformación o metabolitos que se generan al degradarse hay que monitorizarlos para verificar si pueden suponer un problema medioambiental. A fin de mejorar el conocimiento sobre estos compuestos, se ha estudiado la degradación en muestras de pepino de trans-cinamaldehído y limoneno, dos sustancias con acción plaguicida, que se encuentran en abundante concentración en bioplaguicidas derivados de extractos de canela y naranja, respectivamente. Para tener una mayor visión de su comportamiento se han realizado dos estudios, uno en condiciones controladas en laboratorio y otro en condiciones reales en invernadero aplicando los bioplaguicidas comerciales. Tras la aplicación de los bioplaguicidas, se tomaron muestras de pepino durante 3 días y se realizó una extracción tipo QuEChERS con acetato de etilo. Para monitorizar la degradación, así como la identificación de los metabolitos generados, se emplearon de forma complementaria la cromatografía de gases y de líquidos acopladas a analizadores de espectrometría de masas de alta resolución. La degradación de ambos compuestos fue rápida, 24 h para limoneno y 72 h para trans-cinamaldehído. Se identificaron tentativamente algunos metabolitos descritos previamente para trans-cinamaldehído, como ácido cinámico o alcohol cinámico, además de otros nuevos como ácido p-cumárico, alcohol bencílico y ácido p-tolilacético. Para limoneno se identificaron tentativamente metabolitos conocidos como limoneno-1,2-epóxido, carvona o alcohol perilílico. La toxicidad de los metabolitos se obtuvo empleando el software T.E.S.T, presentando una toxicidad baja, siendo para algunos más elevada que para los compuestos progenitores. Dichos metabolitos también se degradaban de forma rápida y su concentración no era elevada. Estos resultados confirman que la utilización de bioplaguicidas es más beneficiosa que el uso de plaguicidas de síntesis al degradarse rápidamente, tanto los compuestos progenitores como los metabolitos generados.

#### Agradecimientos

Proyecto UAL2020-FQM-B1943 financiado por la Universidad de Almería, la Junta de Andalucía y Fondos Europeos, y PPIT-UAL, Junta de Andalucía-FEDER 2021-2027. Programa: 54.A.



## P128

### Metabolomics investigation of the beneficial effect of acute seaweed consumption in modulating the metabolic stress induced by a mixed-meal challenge

Desta Gebremedhin Gebrehiwot<sup>1</sup>, Mónica Schwarz<sup>1</sup>, Alfonso Lechuga Sancho<sup>1</sup>, Coral Barbas<sup>2</sup>,  
Enrique Durán Guerrero<sup>1</sup>, Raúl González Domínguez<sup>1</sup>

1. Instituto de Investigación e innovación Biomédica de Cádiz (INiBICA), Hospital Universitario Puerta del Mar, 11009  
Cádiz, España, Cádiz, España

2. Centre for Metabolomics and Bioanalysis (CEMBIO), Department of Chemistry and Biochemistry, Facultad de  
Farmacia, Universidad San Pablo-CEU, CEU Universities, Urbanización Montepríncipe, 28660 Boadilla del Monte.  
Madrid. Spain, Madrid, España

#### Resumen

The consumption of seaweed may have beneficial repercussions on health because of their rich nutritional profile, comprising fibers, essential minerals (e.g., iodine) and lipids (e.g., PUFAs), and other bioactive compounds (e.g., polyphenols, carotenoids). In this respect, metabolomics has shown great potential to unravel the complex molecular mechanisms through which food components influence health status and protect against disease development. Herein, we have conducted a randomized crossover trial in 11 healthy subjects who were asked to consume a mixed meal accompanied by a seaweed smoothie containing 75 g of red ogonori (intervention group) or water (control group). At different time points along the challenge test, plasma (0, 30, 60, 120, 180 min) and urine (0, 3, 6, 12, 24 h) samples were collected for further metabolomics analysis using liquid chromatography coupled to high-resolution mass spectrometry. The intervention with seaweed was primarily mirrored in the urinary excretion of several bioactives, including vitamins, phenolic compounds, and furan fatty acids, which are well-known to participate in endocrine control and antioxidant systems. Furthermore, we found that acute seaweed intake contributes to maintain a tighter control of metabolic adaptations occurring in response to the mixed-meal challenge. On the one hand, many differential metabolites suggested that seaweed supplementation improves individuals' metabolic flexibility in energy homeostasis, as reflected in lower postprandial peak of carbohydrates, more effective blocking of alternative energy sources (e.g., ketogenesis, lipolysis,  $\beta$ -oxidation, proteolysis), and faster return to basal metabolic conditions. Other beneficial effects of the dietary intervention included ameliorations in oxidative stress, production of uremic toxins, and hormonal changes. Altogether, this study pinpoints that dietary seaweed might strongly influence health status by modulating a myriad of central metabolic processes, which opens the door to their use as nutraceuticals for preventing and treating a variety of disorders.



## P129

### Bioaccesibilidad oral in vitro de elementos traza y nanopartículas de ZnO en algas marinas

María Carmen Barciela Alonso<sup>1</sup>, Laura Millán Fernández<sup>1</sup>, Raquel Domínguez González<sup>1</sup>, Santiago Cabaleiro<sup>2</sup>, María Vázquez<sup>2</sup>, Pilar Bermejo Barrera<sup>1</sup>, Antonio Moreda Piñeiro<sup>1</sup>

1. Grupo de Elementos Traza, Espectroscopia y Especiación (GETEE), Instituto de Materiales (iMATUS), Departamento de Química Analítica, Nutrición y Bromatología. Facultad de Química. Universidade de Santiago de Compostela. Avenida das Ciencias, s/n. 15782, Santiago De Compostela, España

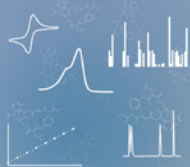
2. Ctr. Tecnol. Cluster Acuicultura, Cluster Acuicultura, Punta Couso S-N, 15965,, Ribeira, España

#### Resumen

En la industria alimentaria las algas cada día están más presentes por ser una fuente natural de macro y micronutrientes. Sin embargo, la capacidad de bioacumulación de las algas también tiene un aspecto negativo ya que son capaces de acumular contaminantes ambientales, tales como las nanopartículas inorgánicas (NPs). Las nanopartículas de óxido de zinc (ZnO NPs) se usan como ingrediente activo en productos de cuidado personal debido a su capacidad para absorber radiación UV. Además, sus propiedades antibacterianas hacen que se empleen también en el sector de la agricultura y de la alimentación. La liberación de estas nanopartículas al medio ambiente, especialmente al medio acuático, puede suponer, por tanto, su entrada en la cadena trófica. En este trabajo se hace un estudio sobre la bioacumulación y bioaccesibilidad de ZnO NPs en algas marinas (lechuga de mar, *Ulva rígida*) expuestas a ZnO NPs bajo condiciones controladas (exposición en circuito cerrado a 1,0 mg/L ZnO NPs, durante una semana, 1 tanque control y 2 tanques de exposición, muestras recogidas a tiempo 0 y a los 2 y 6 días de exposición). Se estudió el contenido de ZnO NPs (extracción enzimática como pretratamiento de muestra y medida por spICP-MS) y los niveles de Zn y otros elementos de interés (As, Cd, Cr, Cu, Fe, Mn, Ni y Pb) tras digestión ácida asistida por energía de microondas y medida por ICP-MS. Los resultados obtenidos han mostrado que el contenido de ZnO NPs es menor que el LOD del método ( $5,58 \times 10^5$  ZnO NPs/g). Sin embargo, se han encontrado elevados niveles de Zn en las algas expuestas, lo cual indica un proceso de biotransformación de las ZnO NPs a Zn iónico durante el proceso de exposición. Por otro lado, los estudios de bioaccesibilidad oral in vitro de los metales estudiados han mostrado que el Cd es el elemento más bioaccesible y que el Mn el menos bioaccesible (orden de bioaccesibilidad Cd > As > Ni  $\approx$  Cu > Pb > Cr > Zn > Fe > Mn).

#### Agradecimientos

Los autores desean agradecer el apoyo financiero de la Xunta de Galicia (Consolidación 2022, Grupo de Referencia Competitiva, Referencia ED431C\_2022/29).



## P130

### Development of a HILIC-MS/MS method for the determination of highly polar anionic pesticides in soils

David Moreno González<sup>1,2</sup>, Alfonso Fernández García<sup>1,2</sup>, Andrés J. Rascón<sup>1</sup>, Ana B. Martínez Piernas<sup>1,2</sup>,  
Bienvenida Gilbert López<sup>1,2</sup>, Juan F. García Reyes<sup>1,2</sup>

1. Analytical Chemistry Research Group (FQM 323), Department of Physical and Analytical Chemistry, University of Jaén, Campus Las Lagunillas edif. B3, 23071 Jaén, Spain, Jaén, España

2. University Research Institute for Olives Grove and Olive Oil (INUO), University of Jaén, Jaén, Spain, Jaén, España

#### Resumen

Soil sustainability has been of crucial importance across the world population for ages. Despite their benefits, pesticides can be hazardous to human and environmental health by contaminating soil, water, and organisms. Herbicides have represented the most rapidly growing industry section among all pesticide classes. Despite their comparatively lower toxicity to animals, including humans, and their ability to specifically target plants, their misuse is considered a global concern. Therefore, the widespread application of anionic polar herbicides such as Glyphosate and related compounds triggers environmental contamination issues. Hence, the determination of these herbicides in environmental samples to evaluate soil sustainability has gained increasing importance. The development of simple methods for the quantification of glyphosate and related compounds at residue levels is challenging because of its ionic character, high polarity, low volatility, and low molecular weight. Thus, specialized chromatographic techniques are mandatory for their accurate and sensitive detection. Moreover, the analytical determination of glyphosate is challenging in soils with high organic matter content because of the higher complexity of these soils and the likely presence of interfering compounds. In this work, a HILIC-MS/MS method has been developed for the determination of 8 highly polar anionic molecules including glyphosate (GLY), glufosinate (GLUF), 3-(Methylphosphinico)propionic acid (MPPA), (aminomethyl) phosphonic acid (AMPA), fosetyl-aluminium, aminomethyl phosphonic acid N-acetyl (N-acetyl-AMPA), and glufosinate-N-acetyl (GLUF-N-acetyl) in soil samples. Chromatographic separations were performed on a Waters anionic polar pesticides (APP) Column (5  $\mu\text{m}$ , 130  $\text{\AA}$ , 100 mm  $\times$  2.1 mm). An LC-QTRAP-MS system was used in the triple-quadrupole mode, operating in the multiple reaction monitoring mode. ESI ionized the analytes in negative mode. A method based on extraction with phosphate buffer was employed to isolate the analytes from the soil. A negligible matrix effect was obtained for the studied compounds. The recovery for spiked samples ranged from 80 to 120%. The rest of the parameters were also satisfactory, reaching quantification limits lower than 2  $\mu\text{g kg}^{-1}$  in all cases. The precision was better than 20% in all cases. Finally, the method performance was successfully demonstrated with soil samples, five of which contained pesticide residues.

#### Acknowledgements

The authors acknowledge the funding from the European Commission for the SOIL O-LIVE project (HORIZON-MISS-2021-SOIL-02, Grant agreement ID: 101091255). D.M.G and B.G.L. acknowledge funding support from the Ministerio de Ciencia, Innovación y Universidades through the Ramón y Cajal program (RYC2022-035915-I and RYC2019-026581-I, respectively). A.F.G acknowledges funding from the University of Jaen for their predoctoral (Acción 8a, ref. RYC\_2\_2022).



## P131

### **Análisis y evaluación de la bioaccesibilidad in vitro de las aflatoxinas B1, B2, G1 y G2 en leches vegetales**

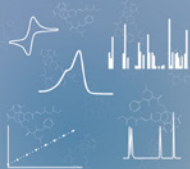
Emma Gracia Lor, Iván Romero Sánchez, Yolanda Madrid Albarrán

*Departamento de Química Analítica, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Complutense de Madrid, Madrid, España*

#### **Resumen**

La demanda de leches vegetales como alternativa a la leche de vaca ha experimentado un aumento notable en los últimos años. Los consumidores eligen este tipo de leche por distintos motivos: intolerancia a la lactosa, hipercolesterolemia, por seguir una dieta vegana o vegetariana, o prácticas saludables. Sin embargo, al prepararse a base de cereales, legumbres, nueces, semillas o pseudocereales, son susceptibles a la contaminación con micotoxinas. En este trabajo se ha optimizado un método para la determinación del contenido de las aflatoxinas B1, B2, G1 y G2 en leches comerciales de origen vegetal (leche de arroz, almendra, avena y soja) mediante HPLC-MS/MS. También se ha evaluado su bioaccesibilidad mediante la aplicación de un proceso de digestión gastrointestinal in vitro. En ambos procedimientos, tanto la extracción de las aflatoxinas de las leches como de los extractos gastrointestinales obtenidos, se ha realizado mediante extracción en fase sólida (SPE) utilizando cartuchos Oasis HLB, precedida de una etapa de limpieza (clean-up) empleando n-hexano. La eficiencia de extracción osciló entre un 71% y un 98%, con la excepción de la aflatoxina G2 en leche de avena para la que se obtuvo una recuperación del 45%. Las aflatoxinas B1, B2 y G1 se detectaron en una de las muestras de leche de soja analizadas, con una concentración inferior al límite de cuantificación del método (es decir, inferior a 36, 15 y 16 ng/kg, respectivamente) y a los límites establecidos por la legislación europea [Reglamento (UE) 2023/915]. Los mayores valores de bioaccesibilidad se obtuvieron para la aflatoxina B2 (82%-92%) y los más bajos, para la aflatoxina G1 (15%-30%). En el caso de la aflatoxina B1, la bioaccesibilidad osciló entre un 28% en la leche de arroz y un 50% en la de almendra y, para la aflatoxina G2, entre un 32% y 76%. Por tanto, la bioaccesibilidad de las aflatoxinas depende no solo de la naturaleza de la aflatoxina sino de la composición de la matriz alimentaria. Los datos de bioaccesibilidad para las micotoxinas son escasos pero son relevantes para una correcta evaluación del riesgo del consumidor a estas toxinas de naturaleza carcinogénicas.

**Agradecimientos:** Ministerio de Ciencia e Innovación (PID2020-114714RB-100); Comunidad de Madrid (PR65/19-22432); Universidad Complutense de Madrid [CT63/19-CT64/19].



## P132

### Evaluación de diferentes tratamientos para la extracción de ARNm encapsulado en nanopartículas lipídicas de la vacuna Comirnaty® (PFIZER): espectrofotometría UV y DLS como técnicas de confirmación.

Pilar Baena Álvarez<sup>1</sup>, Raquel Pérez Robles<sup>2</sup>, Antonio Salemerón García<sup>3</sup>, José Cabeza Barrera<sup>4</sup>,  
Natalia Navas Iglesias<sup>5</sup>

1. Departamento de Química Analítica e Instituto Biosanitario de Granada *ibs.Granada, Granada, España*

2. Facultad de Ciencias, Granada, España

3. Universidad de Granada., Granada, España

4. Fundación para la Investigación Biosanitaria de Andalucía Oriental-Alejandro Otero (FIBAO)  
e Instituto Biosanitario de Granada *ibs.*, Granada, España

5. Farmacia Hospitalaria e Instituto Biosanitario de Granada *ibs.Granada, Granada, España*

#### Resumen

Comirnaty® (Pfizer-BioNTech) es una vacuna contra la COVID-19 basada en la nueva tecnología de ácido ribonucleico mensajero (ARNm) encapsulado en nanopartículas lipídicas (LPNs). El potencial de estas vacunas ha quedado patente en la superación de la pandemia de la COVID-19. Esta nueva estrategia presenta nuevos retos analíticos derivados de la complejidad propia del sistema ARNm-LPN. El análisis y caracterización del principio activo -ARNm- requiere un tratamiento previo de la muestra que permita su liberación -desde la nanopartícula- al medio. Aquí evalúa diferentes tratamientos de muestra de la vacuna Comirnaty® para la liberación de tozinamerán (ARNm) al medio como una primera etapa, para su posterior aislamiento y caracterización. Se han empleado viales de Comirnaty®, (caducidad aproximada 2 años, 11-2021), que fueron previamente caracterizadas en periodo de uso, y se demostró la tendencia a formar especies de mayor tamaño [1]. Se han evaluado diferentes tratamientos de muestras: carácter químico -surfactantes (tween-80 y SDS) y metanol-, carácter físico -ultrasonidos- y carácter físico-químico (SDS y agitación). Mediante el registro de espectros UV se ha realizado el seguimiento de liberación de ARNm y se ha evaluado su presencia a partir de porcentajes de liberación por comparación con muestra control a  $\lambda_{max}$ /ARNm de 260 nm: Mediante DLS (Dinamic Light Scattering) se ha analizado la evolución de las LNPs. Los resultados de DLS han indicado que no hay lisis completa de las partículas de ARNm-LNPs aunque los datos de UV han corroborado aumento del contenido de ARNm en el medio. Los mejores resultados se han obtenido con el tratamiento físico (ultrasonidos) de las muestras, estimándose un 42 % de liberación al medio. Las ventajas de este tratamiento son además, rapidez (un minuto), sencillez, y sin adicionar sustancias que puedan interferir en el análisis posterior de ARNm. Esta investigación se enmarca en estudios de caracterización completa de Comirnaty®, constituyendo una primera etapa, antes del aislamiento y caracterización mediante cromatografía líquida de par iónico. Este trabajo ha recibido el segundo premio de la V Edición de los premios AQA a los TFG de Química 2022-2023 (15/11/2023) [2].

**Agradecimientos:** Al Servicio de Farmacia del Hospital Universitario Clínico San Cecilio (Granada), por la amable cesión de las muestras reconstituidas de Comirnaty®. [1] J. Herмосilla, A. Alonso, A. Salmeron et al. *Vaccines* 11 (2023) 1635 (1/19); doi.org/10.3390/vaccines11111635 [2] 2ª Premio V Edición TFG AQA 2023 (<https://www.colegiodequimicos.org/premio-trabajo-fin-de-grado/>)



## P133

### **Caracterización analítica de nanopartículas de ZnO como aditivo en la fabricación de hormigones ligeros y estudio de su distribución superficial mediante rayos-X y espectrometría de masas**

Diego Panizo Martín, Mario Corte Rodríguez, Mar Alonso Martínez, Luis Tomás Silva Klein, Juan José Del Coz Díaz, María Montes Bayón  
*Universidad de Oviedo, Oviedo, España*

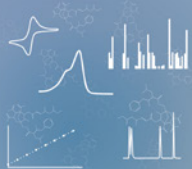
#### **Resumen**

El desarrollo en la tecnología de materiales de construcción basada en nanotecnología viene en un ritmo muy rápido y las propiedades que conlleva muestran un futuro prometedor. La nano-modificación del hormigón, en combinación con la síntesis y la manipulación del material a la escala nano ofrece posibilidades en el desarrollo de nuevos aditivos de cemento como nuevos super-plastificantes, nano-partículas o nano-refuerzos. Uno de estos aspectos, la adición de compuestos metálicos en forma de nanopartículas representa una nueva generación de materiales de construcción más sostenibles. Las nanopartículas de dióxido de titanio (TiO<sub>2</sub> NPs) y de óxido de zinc (ZnO NPs) son dos de las especies que pueden utilizarse para este fin [1]. Su papel como catalizadores de la captura de dióxido de carbono (CO<sub>2</sub>) es fundamental en el desarrollo de materiales de construcción más respetuosos con el medio ambiente como el hormigón ligero (LWC). [2] En este trabajo se evalúa la adición de ZnO obtenido como un subproducto en la industria local del zinc, por lo que su uso contribuye al desarrollo de un modelo de economía circular. Esta presentación mostrará principalmente la aplicación del ICP-MS en el modo de análisis de partículas individuales (sp-ICP-MS) para caracterizar nanopartículas de TiO<sub>2</sub> y ZnO como aditivos de hormigón, así como el uso de diversas técnicas analíticas complementarias que permitan obtener información relevante en términos de composición y tamaño de las propias NPs. El problema más importante para todas las nanopartículas es la dispersión efectiva en el propio hormigón. Aunque es particularmente significativo en altas dosificaciones, incluso bajas dosificaciones experimentan problemas con la autoagregación, lo que reduce los beneficios de su pequeño tamaño. Por tanto, además de la caracterización de las nanopartículas se estudiará la homogeneidad de su distribución en las mezclas resultantes de hormigón mediante el mapeo de la superficie del material mediante difracción de rayos X y análisis elemental mediante ablación láser acoplada a ICP-MS (LA-ICP-MS).

#### **Referencias**

[1] C. Moro, V. Francioso, M. Velay-Lizancos, "Modification of CO<sub>2</sub> capture and pore structure of hardened cement paste made with nano-TiO<sub>2</sub> addition: Influence of water-to-cement ratio and CO<sub>2</sub> exposure age," *Constr Build Mater*, vol. 275, Mar. 2021. [2] F. Xi, S. J. Davis, P. Ciais et al., "Substantial global carbon uptake by cement carbonation," *Nat Geosci*, vol. 9, no. 12, pp. 880–883.





## P134

### Acoplamiento de una precolumna HILIC con espectrometría de masas en tándem para la determinación rápida y sin derivatización de malondialdehído en orina

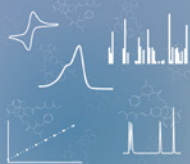
Diego García-Gómez , Ana María Casas Ferreira, Carla Iglesias-Martín , Encarnación Rodríguez-Gonzalo , José Luis Pérez Pavón

*Departamento de Química Analítica, Nutrición y Bromatología. Facultad de Ciencias Químicas. Universidad de Salamanca., Salamanca, España*

#### Resumen

El desarrollo de métodos rápidos de análisis es un campo de trabajo que ha tenido un gran desarrollo en los últimos años. El uso de modalidades rápidas de separación cromatográfica y la utilización de analizadores de masas con gran sensibilidad y selectividad permiten diseñar estrategias de análisis eficaces en las que, en algunos casos, puede llegar a prescindirse de la separación cromatográfica [1]. El estrés oxidativo es un proceso de daño celular, desencadenado por radicales libres, principalmente de oxígeno, que puede afectar a uno o a varios componentes de la célula y alterar seriamente sus funciones. La forma habitual de evaluar el estrés oxidativo consiste en la determinación de marcadores estables que reflejan un daño causado por la interacción de especies reactivas de oxígeno (ROS) con moléculas tales como ácidos nucleicos, lípidos, y proteínas. Los lípidos son especialmente susceptibles al daño oxidativo, generando compuestos de cadena corta como diferentes aldehídos, alcanos y alquenos. Uno de los productos finales más estudiados como marcador de oxidación lipídica es el malondialdehído (MDA) excretado en orina. La determinación de MDA en orina es una tarea compleja, siendo necesarios procedimientos de purificación y preconcentración para mejorar la selectividad. En este sentido, han sido publicados varios métodos basados en fotometría UV-Vis o en cromatografía líquida o de gases acoplada con detección fotométrica, fluorescencia o espectrometría de masas (MS). Sin embargo, debido a las propiedades fisicoquímicas del MDA, como su alta reactividad, bajo peso molecular y ausencia de cromóforos y/o fluoróforos, todos estos métodos requieren el uso de un agente derivatizante [2]. En este trabajo se propone un método rápido y robusto para la determinación y cuantificación de MDA en muestras de orina basado en la combinación de una precolumna HILIC y un detector triple cuadrupolo sin que sea necesaria una derivatización previa. El análisis se lleva a cabo en tan solo un minuto, superando así las metodologías publicadas anteriormente. El método desarrollado representa una alternativa novedosa que podría aplicarse en investigaciones futuras que involucren la determinación de MDA como biomarcador de peroxidación lipídica, campo en el que metodologías simples, rápidas y fiables podrían representar una mejora significativa.

[1] A.M. Casas-Ferreira, M. del Nogal-Sánchez, J.L. Pérez-Pavón et al. *Anal. Chim. Acta* 1045 (2019) 10–22. [2] A. Toto, P. Wild, M. Graille et al. *Toxics* 10 (2022) 160. Financiación: Ministerio de Ciencia, Innovación y Universidades PID2021-127679NB-I00



## P135

### Upcycling polyphenols from industrial olive oil waste (LIFE CYCLOPS Project)

Rubén Titos Guillén<sup>1</sup>, Sònia Sentellas<sup>1</sup>, Javier Saurina<sup>1</sup>, Mònica Reig<sup>2</sup>

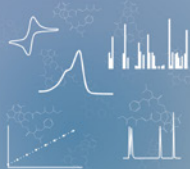
*1. Universitat de Barcelona, Barcelona, España*

*2. Universitat Politècnica de Catalunya, Barcelona, España*

#### Resumen

Olive oil and wine production ranks as one of the most important industrial sectors in the economy of Mediterranean countries. During the production of these agri-food products, different wastes are generated, with olive pomace and alcoholic fermentation lees being the predominant. Due to their composition and polyphenol content, dumping and storage of these wastes can cause environmental problems as they are highly polluting. Therefore, it's necessary to develop a new management model that can lead to a circular economy. Thus, the overall objective of LIFE CYCLOPS project is to develop a solution to manage these agri-food wastes through the recovery and valorization of polyphenols as well as de-phenolized waste. Recovered polyphenols will become high-added-value products for food, cosmetic, or pharmaceutical industries, among others. Moreover, the de-phenolized waste can be subjected to anaerobic digestion to produce biogas, thus promoting a zero-waste achievement. The polyphenol extraction method employed in this work involved solid-liquid extraction using water as solvent, mirroring a green liquid extraction technique, since water can be considered as the most environmentally friendly solvent. The final conditions were optimized through an experimental design, considering factors such as temperature, time, pH, and the ratio of sample to water (w/v). The total polyphenolic content (TPC) was determined by the Folin-Ciocalteu method and polyphenols were identified and quantified by HPLC-HRMS/MS and HPLC-UV, respectively. After extraction, sequential membrane process was studied to purify the polyphenolic fraction. It involved a ceramic ultrafiltration (UF) step followed by a nanofiltration (NF) step, with different objectives. On one hand, the UF aimed to effectively eliminate suspended solids and major molecular weight compounds, thereby clarifying the extract. On the other hand, the NF was used to concentrate the target compounds, contributing to the substantial enhancement of the TPC of the extract. This study conducted a comprehensive analysis of the extracted compounds, revealing a diverse range of antioxidants, both phenolic and non-phenolic constituents. Polyphenols have been concentrated from 674 mg gallic acid equivalents L<sup>-1</sup> at the entrance of the UF membrane to 1929 mg gallic acid equivalents L<sup>-1</sup> after passing through NF membrane. Additionally, the performance of the proposed technology was further assessed by the quantification of three key compounds, all of which hold significant potential for various applications: hydroxytyrosol glucoside, p-coumaric acid glucoside, and comselogside with rejections of 99.1%, 99.1%, and 99.5% in the NF step, respectively.

This work is included in the EU funded project LIFE CYCLOPS (LIFE21-ENV-ES-CYCLOPS101074544)



## P136

### “Efecto caballo de Troya” en la exposición conjunta de nanoplasticos y contaminantes orgánicos. evaluación de la absorción y toxicidad en células de pez cebra

Paloma De Oro Carretero<sup>1</sup>, Marlid Garcia Ordonez<sup>2</sup>, Nerea Roher<sup>2,3</sup>, Jon Sanz Landaluze<sup>1</sup>

1. *Departamento de Química Analítica. Facultad de Ciencias Químicas. Universidad Complutense de Madrid, Madrid, España*

2. *Instituto de Biotecnología y Biomedicina. Universitat Autònoma de Barcelona, Barcelona, España*

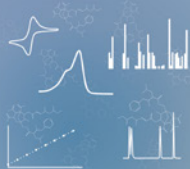
3. *Departamento de Biología celular. Fisiología e inmunología animal. Universitat Autònoma de Barcelona, Barcelona, España*

#### Resumen

La liberación de plásticos al medioambiente se ha convertido en un tema candente de gran interés público y científico. Estos plásticos pueden encontrarse en grandes cantidades en el medio marino en tamaño nanométrico (NPs, < 100 nm), planteando un desafío ecológico real e incontrolado debido a la capacidad para penetrar en los organismos vivos. Además, debido a su elevada relación superficie/volumen y a su hidrofobicidad, pueden adsorber sustancias químicas tóxicas del medio circundante y transferirlas a los organismos (“efecto caballo de Troya”) [1, 2]. Sin embargo, el conocimiento de los efectos y las posibles implicaciones de los nanoplasticos sigue siendo escaso. En este estudio se evalúa la capacidad de los NPs de poliestireno (PS) de 40-60 nm para transferir y alterar la toxicidad de contaminantes orgánicos como el fenantreno (PHE), mediante la línea celular de hígado de pez cebra (ZFL). Además, se evaluó el efecto contrario, si la presencia y toxicidad del PHE, repercutía la absorción de los PS-NPs. Para ello, se expusieron las células ZFL a 2 concentraciones de PS-NPs (10 y 50 µg/mL), que no presentaban toxicidad de forma individual [3], junto con diferentes concentraciones de PHE. Los ensayos de citotoxicidad (MTT) y estrés oxidativo (formación de ROS) realizados mostraron que la presencia de PS-NPs modifica la susceptibilidad tóxica de las células al PHE. Por otro lado, mediante una extracción miniaturizada asistida por sonda de ultrasonidos y separación y cuantificación por GC-MS, se determinó la concentración de PHE y sus metabolitos mayoritarios (OH-PHEs) en el interior de las células y en el medio celular para el estudio de la bioacumulación y metabolización; donde se observó que la presencia de PS-NPs también alteraba dichos procesos. Por último, mediante la técnica de citometría de flujo y PS-NPs marcados con un fluoróforo verde (Dragon Green) se observó que el PHE también actúa como facilitador de la entrada de PS-NPs. Estos resultados muestran que la toxicidad individual se ve afectada por su exposición conjunta, lo que puede ser bastante perjudicial para los organismos.

**Referencias** [1] Katsumiti, A. et al. *Sci Rep* 11 (2021) 22396. [2] Zhang Y. and Goss G.G. *Environ. Sci. Nano* (2020). [3] Brandts I. et al. *Environ. Sci. Nano* 7 (2020) 2410.

**Agradecimientos** Apoyo financiero del Ministerio de Ciencia e Innovación [PID 2020 114714 RB 100]. Universidad Complutense por el apoyo al grupo de investigación “Determinación de Trazas, Especiación y Proteómica. Paloma de Oro agradece su contrato predoctoral [PRE2021/097956].



## P137

### Estudio de la composición polifenólica y la capacidad antioxidante de extractos de hojas de olivo de diversas variedades

Raúl García García<sup>1</sup>, Aina Mir Cerdà<sup>1,2</sup>, Mercè Granados<sup>1,2</sup>, Sonia Sentellas<sup>1,2,3</sup>, Javier Saurina<sup>1,2</sup>

1. Departamento de Ingeniería Química y Química Analítica, Universitat de Barcelona, Barcelona, España

2. Instituto de Investigación en Nutrición y Seguridad Alimentaria, Universitat de Barcelona, Barcelona, España

3. Programa Serra Húnter, Generalitat de Catalunya, Barcelona, España

#### Resumen

Actualmente, la gestión de residuos es un problema importante para las industrias agroalimentarias, por lo que el desarrollo de estrategias para el tratamiento de estos residuos se ha convertido en un gran desafío [1]. Desde la perspectiva de la economía circular los residuos agroalimentarios son una fuente rica en compuestos bioactivos como los polifenoles, que pueden ser empleados en las industrias alimentaria, farmacéutica y cosmética [2]. Este estudio tiene como objetivo evaluar la recuperación de polifenoles en hojas de olivo utilizando disolventes eutécticos profundos naturales (NADES) y disolventes convencionales (agua y soluciones hidroetanólicas) con diferentes técnicas de extracción compatibles con un escalado a nivel industrial como son: extracción sólido-líquido (SLE) y extracción asistida por microondas (MAE). Para la optimización de las condiciones de extracción, se analizaron los factores de composición del disolvente, temperatura y tiempo. La eficiencia de extracción se evaluó a partir del contenido total de polifenoles (TPC) mediante el ensayo de poder antioxidante (ferric reducing antioxidant power, FRAP), y la cuantificación de compuestos fenólicos individuales determinados mediante cromatografía de líquidos de alta resolución (HPLC). Además, se evaluó la capacidad antioxidante de los extractos por voltamperometría diferencial de impulsos (DPV). Como resultado, el sistema NADES (cloruro de colina:glycerol, 1:5 m/m, 30% agua) obtuvo un mayor rendimiento de extracción que los solventes convencionales. Las técnicas y condiciones de extracción seleccionadas fueron MAE (10 min, 80°C), y SLE con agitación mecánica (2 horas, 80°C). La combinación MAE y NADES podría ser una alternativa ecológica y sostenible a los disolventes convencionales y las tecnologías de extracción tradicionales, especialmente en términos de rendimiento y velocidad de extracción. Por el contrario, SLE con agua o mezclas hidroetanólicas requiere temperaturas y tiempos más prolongados para lograr un rendimiento similar, pero son más fácilmente escalables.

**Referencias** 1. Tapia-Quirós, P.; Montenegro-Landívar, M.F.; Vecino, X.; Alvarino, T.; Cortina, J.L.; Saurina, J.; Granados, M.; Reig, M. A Green Approach to Phenolic Compounds Recovery from Olive Mill and Winery Wastes. *Sci. Total Environ.* 2022, 835, 155552, doi:10.1016/j.scitotenv.2022.155552. 2. Tapia-Quirós, P.; Granados, M.; Sentellas, S.; Saurina, J. Microwave-Assisted Extraction with Natural Deep Eutectic Solvents for Polyphenol Recovery from Agrifood Waste: Mature for Scaling-Up? *Sci. Total Environ.* 2024, 912, doi:10.1016/j.scitotenv.2023.168716.



## P138

### Determinación de biotoxinas marinas lipofílicas en moluscos bivalvos mediante LC-HRMS

Alejandro García Juan<sup>1</sup>, Sergio Armenta<sup>1</sup>, Raquel Herreros<sup>2</sup>, Olga Pardo<sup>1</sup>

*1. Universitat de València, Valencia, España*

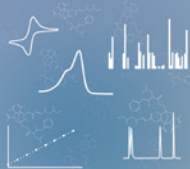
*2. Laboratorio de Salud Pública de Valencia, Valencia, España*

#### Resumen

Las biotoxinas marinas se producen durante floraciones de algas nocivas, acumulándose en moluscos bivalvos y representando riesgos para la salud humana cuando estos son ingeridos [1]. Estas toxinas se pueden clasificar como lipofílicas, hidrofílicas y anfifílicas. Entre las biotoxinas marinas lipofílicas (BMLs) destacan el ácido okadaico, dinofisistoxinas, pectenotoxinas, yesotoxinas y azaspirácidos. Dependiendo del tipo de BMLs, pueden provocar síntomas como diarrea, náuseas, vómitos o daños en las células del músculo cardíaco [2,3]. Por esta razón, es necesario desarrollar métodos analíticos para la identificación y determinación de las BMLs en bivalvos marinos con el fin garantizar la seguridad alimentaria. Además, el Reglamento N° 853/2004 del Parlamento Europeo y del Consejo establece límites máximos para las BMLs en moluscos bivalvos [4]. Este estudio presenta la validación de un método analítico para la determinación de 13 BMLs en muestras de mejillón mediante cromatografía líquida acoplada a espectrometría de masas de alta resolución (LC-HRMS). Los analitos se extraen mediante agitación en vórtex con metanol, seguida de una etapa de purificación mediante extracción en fase sólida (SPE). En el caso del ácido okadaico y las dinofisistoxinas, se requiere una hidrólisis alcalina previa a la SPE para determinar su contenido libre y total. El método se ha aplicado a 62 muestras reales, obteniendo resultados superiores al límite de cuantificación en 9 de ellas. Además, el análisis por LC-HRMS permite realizar un análisis retrospectivo en búsqueda de nuevas BMLs que puedan incluirse en el Reglamento y ofrece información valiosa para la identificación de posibles biotoxinas emergentes.

**Referencias** [1] L.T. Nielsen, P.J. Hansen, B. Krock et al. *Toxicon* 117 (2016) 84-93 [2] D.G. Barceloux. *Medical Toxicology of Natural Substances* (2008) [3] A. Tubaro, V. Dell'Ovo, S. Sosa et al. *Toxicon* 56 (2010) 163-172 [4] Reglamento (CE) N° 853/2004 del Parlamento Europeo y del Consejo de 29 de abril de 2004 por el que se establecen normas específicas de higiene de los alimentos de origen animal.

**Agradecimientos** Este trabajo ha sido apoyado por la Conselleria d'Educació, Universitats i Ocupació de la Generalitat Valenciana, proyecto CIAICO2022/217. A. García-Juan quiere agradecer el contrato INVESTIGO financiado por la Generalitat Valenciana.



## P139

### Estudio del metabolismo in vitro de las catinonas sintéticas 3-CMC Y 4-CMC.

Maria Garrigues Ruiz<sup>1</sup>, Helena Rodríguez Lledó<sup>1</sup>, Francesc A. Esteve Turrillas<sup>1</sup>, David Pérez Guaita<sup>1</sup>,  
Guillermo Quintás<sup>2</sup>

1. *Universitat de València, València, España*

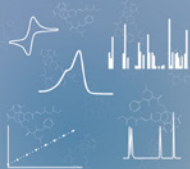
2. *Leitat Tehnological Center, Terrassa, España*

#### Resumen

Las catinonas sintéticas son sustancias derivadas de la catinona, un compuesto que se encuentra de forma natural en las hojas de la planta *Catha edulis*, caracterizadas por su capacidad psicoestimulante con efectos similares a la anfetamina dada su similitud estructural. Según datos del Observatorio Europeo de las Drogas y las Toxicomanías, las catinonas sintéticas suponen el segundo grupo de Nuevas Sustancias Psicoactivas (NPS) reportadas. Es por ello que su control supone un gran desafío para la Salud Pública dada la facilidad de acceso en mercados ilícitos, así como por sus efectos tóxicos y mortales notificados [1]. En este estudio se ha evaluado la toxicidad y el perfil metabólico de las catinonas sintéticas 3-CMC (3-clorometcatinona, CAS 1607439-32-6) y 4-CMC (4-clorometcatinona, CAS 1225843-86-6) empleando la línea celular hepática HepG2 como modelo in vitro. Se determinó la concentración inhibidora media máxima (IC50) mediante ensayos de viabilidad celular haciendo uso del reactivo bromuro de 3-(4,5-dimetiltiazol-2-il)-2,5,-difeníl tetrazolio (MTT) siguiendo el protocolo establecido por la norma ISO 10993 [2]. Respecto al estudio metabólico, las células fueron incubadas con la correspondiente catinona sintética a concentraciones de 0,5xIC50, IC50 y 2xIC50 disueltas en el medio de cultivo durante 24 horas. La extracción de los metabolitos de las células y del medio de cultivo se llevó a cabo precipitando el contenido proteico con acetonitrilo [3]. Los extractos fueron analizados por cromatografía líquida acoplada a espectrometría de masas en tándem de alta resolución (LC-HRMS/MS) en modo adquisición dependiente de datos (data dependent acquisition, DDA). Se observó que las principales vías de metabolización en ambas catinonas implican la hidroxilación, metilación y deshidratación. El conocimiento de las vías metabólicas es necesario para su uso como biomarcadores para la identificación del consumo abusivo de estas sustancias a partir de muestras biológicas.

**Agradecimientos** Los autores agradecen el apoyo financiero del proyecto PID2019-110788GB-I00 financiado por MCIN/AEI/10.13039/501100011033 y por la Delegación del Gobierno para el Plan Nacional sobre Drogas (Proyecto 20221030).

**Referencias** [1] European Monitoring Centre for Drugs and Drug Addiction, European Drug Report 2023: Trends and Developments. [2] International Organization for Standardization, Tests for in vitro cytotoxicity (2009) ISO 10993-5. [3] Martínez-Sena, T., Moro, E., Moreno-Torres, M., et al. Arch Toxicol 6 (2023) 1723-1738.



## P140

### Determinación de la radiopureza de materiales de construcción del detector de materia oscura (DS-50) para el experimento ArDM mediante técnicas de espectrometría de masas

Ana Barrado Olmedo<sup>1</sup>, Estefanía Conde Vilda<sup>1</sup>, Marta Fernández Díaz<sup>1</sup>, José Manuel Cobo<sup>1</sup>, Roberto Santorelli<sup>1</sup>, Fernando Jiménez Barredo<sup>2</sup>

1. CIEMAT, Madrid, España

2. CENIEH, Madrid, España

#### Resumen

La materia oscura es una de las principales componentes del Universo. De acuerdo con los datos del satélite PLANCK, la mayor parte de la densidad de energía de nuestro Universo está constituida por materia no bariónica, cuya naturaleza es desconocida. Tan sólo el 4,9% de dicha densidad de energía está compuesta por materia ordinaria o materia bariónica; mientras que algunas de las características fundamentales del Universo, como su estructura a gran escala y su expansión acelerada, pueden ser explicadas mediante la presencia de materia oscura (26,8%) y energía oscura (68,3%) respectivamente. Los detectores de Ar para búsqueda de materia oscura diseñados se basan en la detección de las partículas que la componen y que se supone que son partículas masivas con interacción débil (WIMPs). La tecnología de Argón líquido es una tecnología novedosa, aplicada hasta la fecha en algunos experimentos de física de partículas. Dentro de esta línea se enmarca el experimento ArDM (Argon Dark Matter) cuyo objetivo científico es buscar evidencia experimental de la existencia de materia oscura. DarkSide-50 (DS-50), el primer detector físico del programa DarkSide, con una masa activa de 50 kg de argón líquido, produjo sus primeros resultados de búsqueda WIMP utilizando argón de la atmósfera en diciembre de 2014. En 2015, DS-50 produjo los primeros resultados de búsqueda WIMP utilizando argón subterráneo de baja radiactividad. Los resultados de los estudios sobre estos detectores indican que, optimizando los parámetros de diseño, pureza del Ar y radiopureza de los materiales de construcción es posible aumentar la sensibilidad hasta conseguir la detección de la llamada materia oscura ligera (DarkSide-LowMass detector). Ello implica conocer y reducir al máximo las contribuciones al fondo instrumental provenientes de los materiales. El objetivo de este trabajo es evaluar la radiopureza de los distintos materiales de construcción de este detector, lo que se ha hecho siguiendo para ello la metodología de determinación a nivel de ultratrazas de  $^{238}\text{U}$ ,  $^{235}\text{U}$  y  $^{232}\text{Th}$  mediante espectrometría de masas con cuadrupolo y espectrometría de masas de alta resolución, con la cual se han alcanzado unos LD de 0.001 ppb para  $^{238}\text{U}$  y  $^{232}\text{Th}$  y de 0.02 ppt para el  $^{235}\text{U}$ .

• Design and construction of a new detector to measure ultra-low radioactive-isotope contamination of argon. DM Collaboration. Journal of Instrumentation 15 (02) 2020

• Sensitivity of future liquid argon dark matter search experiments to core-collapse supernova neutrinos. DM Collaboration. Journal of Cosmology and Astroparticle Physics 2021



## P141

### Development and application of a non-target screening strategy for the identification of organic contaminants in surface waters in the Guadalquivir river basin

Alfonso Fernández García<sup>1,2</sup>, Ana Belén Martínez Piernas<sup>3</sup>, David Moreno González<sup>1,2</sup>,  
Bienvenida Gilbert López<sup>1,2</sup>, Juan Francisco García Reyes<sup>1,2</sup>

1. *Universidad de Jaén, Jaén, España*

2. *Instituto Universitario de Investigación en Olivar y Aceites de Oliva, Jaén, España*

3. *Universidad de Málaga, Málaga, España*

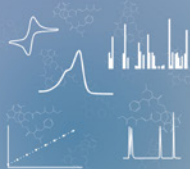
#### Resumen

Most surface waters are subjected to contamination by contaminants of emerging concern (CECs) and their transformation products (TPs), which could be, in some cases, more toxic, mobile, and persistent than parent compounds. In many small villages of rural areas without wastewater treatment plants (WWTPs) or with poorly secondary or tertiary treatments, organic contaminants like pharmaceuticals and personal care products (PPCPs) may be dumped into surface waters and involve a risk to aquatic ecosystems. In recent years, the scientific community has mainly addressed the monitoring of environmental contamination by applying analytical techniques based on liquid chromatography coupled with high-resolution mass spectrometry (LC-HRMS). Moreover, the development of novel non-target screening (NTS) approaches has expanded the scope of analysis beyond target compounds, allowing the discovery and monitoring of unknown contaminants. In this work, an NTS strategy using LC-HRMS and MS-DIAL as open-source software was applied to investigate the occurrence of CECs and their TPs in streams of the Guadalquivir River basin of the province of Jaén. This strategy was successfully applied to retrospectively analyze 36 water samples collected from 11 sampling points over 2 years of monitoring. A total of 66 candidates were tentatively identified, comprising PPCPs, drugs of abuse, industrial chemicals, transformation products, and other organic contaminants. Among them, 12 compounds were confirmed with reference standards, and 46 were tentatively identified with a high level of confidence. These results demonstrate the applicability of the developed NTS strategy for monitoring contaminants out of the scope of analysis.

#### Acknowledgements

A.F.G acknowledges funding from the University of Jaen for the predoctoral contract (Acción 8a, ref. RYC\_2\_2022). D.M.G and. B.G.L. acknowledge funding support from the MCIN/AEI/10.13039/501100011033 through the Ramón y Cajal program (RYC2022-035915-I and RYC2019-026581-I, respectively).





## P142

### Estudios de disipación y degradación de plastificantes no ftálicos en suelo

Raquel Capilla Flores, Rosalía López Ruíz, Francisco Javier Egea González, Roberto Romero González, Antonia Garrido Frenich  
*Universidad de Almería, Almería, España*

#### Resumen

La presencia del plástico es ubicua en el medio ambiente, siendo el suelo un importante sumidero de los mismos. Entre los componentes del plástico destacan los plastificantes (10 – 70 % del total). Sin embargo, la mayoría de información disponible sobre plastificantes en suelo se centra en la determinación de compuestos progenitores de la familia de los ftalatos. Debido a su toxicidad se están sustituyendo por otros plastificantes no ftálicos (PNFs) no estudiados hasta la fecha en suelo, por lo que es de gran interés investigar su presencia en dicha matriz. Por ello se estudió la disipación y degradación de dos PNFs en suelo, en concreto de 2,2,4-trimetil-1,3-pentanodiol diisobutirato (TXIB) y 1-hidrox ciclohexil fenil cetona (HCPK), por ser los compuestos encontrados en dicha matriz a mayores concentraciones (29,1 – 67,4  $\mu\text{g}/\text{kg}$ ) en un estudio previo. A tal fin se emplearon cromatografía de gases (GC) y de líquidos (LC) acopladas a espectrometría de masas de alta resolución (HRMS). El uso de HRMS permite el análisis retrospectivo de las muestras, buscando compuestos sospechosos (descritos previamente) y desconocidos, como son los metabolitos formados a partir de los compuestos progenitores y no descritos hasta la fecha. Durante la disipación, se evaluaron dos concentraciones (100 y 500  $\mu\text{g}/\text{kg}$ ) en dos tipos de suelo (franco y franco arcilloso) evaluando la persistencia de cada compuesto en suelo, mientras que para la degradación se utilizaron softwares de búsqueda de compuestos desconocidos (Compound Discoverer® y MassChemSite®) para identificar los metabolitos formados mediante análisis retrospectivo. Como resultado, TXIB y HCPK mostraron una rápida disipación siguiendo una cinética de primer orden, con un tiempo de vida media máximo de 3 días para la concentración más alta. A pesar de su baja persistencia en ambos suelos, el análisis retrospectivo reveló la presencia de metabolitos desde el día 1 hasta el día 10, siendo identificados tentativamente un metabolito de HCPK y ocho de TXIB, de los cuales dos fueron inequívocamente identificados: 2,2,4-trimetil-1,3-pentanodiol monoisobutirato (TMPM) y 2,2,4-trimetilpentan-1,3-diol (TMP). TMPM presenta niveles de toxicidad (en términos de dosis letal media oral en ratas) más altos que el compuesto progenitor, siendo importante el estudio de este tipo sustancias para aumentar la información relacionada con su degradación en suelo dado que no han sido estudiados.

Esta publicación forma parte del proyecto PID2022-137122OB-I00, financiado por MICIU/AEI/10.13039/501100011033/ y FEDER, UE. RCF agradece la subvención FPU21/00858, financiada por MICIU/AEI/10.13039/501100011033 y ESF+.



## P143

### Resistencia a cisplatino en células tumorales: caracterización de modelos celulares derivados de paciente utilizando herramientas bioanalíticas basadas en espectrometría de masas

Carlos López Portugués<sup>1,2</sup>, Lucía Gutiérrez Romero<sup>1,2</sup>, Borja Gallego<sup>1,2</sup>, René Rodríguez<sup>2</sup>,

María Montes Bayón<sup>1,2</sup>, Paula Díez<sup>1,2</sup>

1. Universidad de Oviedo, Oviedo, España

2. Instituto de Investigación Sanitaria del Principado de Asturias (ISPA), Oviedo, España

#### Resumen

Los osteosarcomas y el cáncer de ovario son malignidades agresivas heterogéneas que afectan a los huesos y los aparato reproductor femenino respectivamente. Sus opciones terapéuticas limitadas, principalmente compuestas por fármacos como cisplatino y doxorubicina, frecuentemente dan lugar a fenotipos resistentes y metástasis, comprometiendo la supervivencia del paciente [1,2]. Para la evaluación de dichas resistencias se han puesto a punto herramientas bioanalíticas que permitan comprender mejor los mecanismos celulares que median la resistencia a los fármacos. Se indujo resistencia a cisplatino y/o doxorubicina en líneas celulares de osteosarcoma (cinco comerciales y ocho derivadas de xenógrafos de pacientes, PDXCL) y de cancer de ovario (tres comerciales) mediante la exposición continua a concentraciones crecientes de fármacos. La viabilidad de las líneas celulares se evaluó después de 72 horas de exposición a los fármacos para determinar su índice de resistencia ( $IR = IC_{50} \text{ resistente} / IC_{50} \text{ parental}$ ). Además, se realizaron análisis proteómicos (LC-Q-TOF) para identificar predictores de respuesta al tratamiento a nivel proteico. La incorporación celular de cisplatino en las células parentales y resistentes se investigó en células individuales mediante espectrometría de masas con plasma de acoplamiento inductivo en la modalidad "single cell" (SC-ICP-MS). Se observó que después de 1-8 meses de exposición al cisplatino y doxorubicina, ~54% de las líneas celulares (5/5 comerciales y 2/8 PDXCL) desarrollaron resistencia estable al fármaco con valores de IR similares para el cisplatino ( $3.67 \pm 1.22$ ) y hasta 131 IR para el tratamiento con doxorubicina [3]. El análisis proteómico reportó 8.033 proteínas en común para los modelos parentales y resistentes al cisplatino y una firma común de 192 proteínas de respuesta al tratamiento. Además, se detectó hasta 10,4x más Pt en la condición parental vs. la contrapartida resistente al cisplatino (0,228 ft Pt/célula vs. 0,022 ft Pt/célula, respectivamente). Se observó una alta heterogeneidad en el desarrollo de resistencia a los fármacos, siendo las líneas PDXCL las más sensibles a los tratamientos. Además, las células parentales mostraron una mayor incorporación celular de Pt, lo que se correlacionaría con el incremento observado en la muerte celular. Finalmente, la identificación de una firma proteómica de respuesta al cisplatino presenta una aplicación potencial como herramienta de cribado de tratamientos en el osteosarcoma y el cáncer de ovario.

[1] A. Abarrategi, J. Tornín, L. Martínez-Cruzado, et al. *Stem Cells Int.* 2016 (2016), 3631764.

[2] C. López-Portugués, P. Díez, M. Montes-Bayón, *Proteomes*, 2024, 12(1), 8. [3] B. Gallego, D. Murillo, V. Rey, et al. *Int J Mol Sci*, 23 (2022), 6425.



## P144

### Comparación de sondas de marcaje elemental para anticuerpos y su empleo en estudios de cuantificación de biomoléculas.

Ángela De La Rosa Díaz<sup>1,2</sup>, Miguel Gómez Sánchez<sup>1</sup>, Rafael García López<sup>1</sup>, Mario Corte Rodríguez<sup>1,2</sup>,  
Félix Rodríguez Iglesias<sup>1</sup>, Jörg Bettmer<sup>1,2</sup>, María Montes Bayón<sup>1,2</sup>

1. Universidad de Oviedo, Oviedo, España

2. Instituto de Investigación Sanitaria del Principado de Asturias (ISPA), Oviedo, España

#### Resumen

El empleo de sondas de marcaje fluorescentes para anticuerpos es un campo de amplio interés en el análisis biomédico, particularmente en el campo de la citometría de flujo. Sin embargo, el creciente uso de la espectrometría de masas como sistema de detección de biomarcadores celulares ha impulsado el desarrollo de sondas de marcaje elemental que ofrezcan una sensibilidad adecuada y puedan competir en prestaciones con sus análogos fluorescentes [1]. En este trabajo, se plantea desarrollar una sonda metálica como alternativa a las opciones comerciales que actualmente existen para el marcaje de anticuerpos con lantánidos. La sonda diseñada consta de un grupo de unión específica al anticuerpo (maleimida) empleando los grupos tioles formados tras la reducción de éste y un agente quelante (tetrazaciclododecano funcionalizado) que permite formar un quelato con el ion lantánido. En este caso, como metal de marcaje se ha utilizado terbio, aunque la estrategia de marcaje sería extensible a cualquier otro elemento de elevado número atómico y baja energía de ionización. En este trabajo, se ha estudiado la capacidad de enlace del metal con la sonda, la posibilidad de enlazar la sonda a anticuerpos específicos y su empleo para la detección de biomoléculas empleando la cromatografía de exclusión por tamaños con detección molecular (UV/VIS) y elemental a través de la espectrometría de masas (ICP-MS). Como modelo para el marcaje, se ha utilizado un anticuerpo humanizado contra el marcador CD20, que se expresa en linfocitos y es una diana terapéutica contra la leucemia linfocítica crónica. Asimismo, se utilizó la espectrofotometría de absorción VIS-UV (NanoDrop) para cuantificar el anticuerpo recuperado tras el marcaje, de manera que la información combinada de todas las técnicas ha permitido obtener la estequiometría del metal en el anticuerpo para su posterior uso en aplicaciones cuantitativas.

[1] A. Fernández Asensio, M. Corte-Rodríguez, J. Bettmer, et al. *Talanta* 235 (2021) 122773.



## P145

### Determination of tartaric acid in ancient pottery as wine marker

Sonia Sentellas <sup>1,2,3</sup>, Raul Cabeza-Navarro <sup>1</sup>, Pere Castanyer <sup>6</sup>, Marc Bouzas <sup>8</sup>, Jose Francisco García <sup>1</sup>

*1. Universitat de Barcelona, Barcelona, España*

*2. Instituto de Investigación en Nutrición y Seguridad Alimentaria, St. Coloma de Gramanet, España*

*3. Serra Húnter Fellow, Barcelona, España*

*4. Universitat de Barcelona*

*5. Departament de Recerca i Universitats*

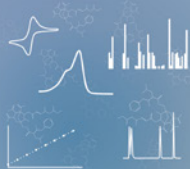
*6. Museu d'Arqueologia de Catalunya-Empuries, Girona, España*

*7. Generalitat de Catalunya*

*8. Universitat de Girona, Girona, España*

#### Resumen

Over the centuries in ancient times, Rome spread throughout the Mediterranean area influencing the life of all its people. Today, much of this legacy is located in archaeological sites and museums and offers a great opportunity to study the lifestyle of these people. Wine was part of the food consumed and it is very appreciated by the Romans, thus it was produced in many regions and became a key product in the Mediterranean trade. Wine was stored on ceramic containers named *dolia*, which are common findings in Roman villas. However, it is not the only product that *dolia* contained but they were used for the storage of many other products. Identifying the usage of *dolia* is key to understanding the economic activities and the way of living of these nations. Nevertheless, distinguishing what the content was is a difficult task with only archeological evidence and a more analytical approach is needed. In this work, a liquid chromatography coupled to tandem mass spectrometry (LC-MS/MS) method was established for the determination of tartaric acid, which is known to be an important component of wine in fragments of *dolia* from Roman sites. However, tartaric acid can be extensively found in several plants and fruits, and thus the presence of this compound in the studied pottery fragments cannot be considered unequivocal evidence of their use. Appropriate blank samples, exposed to the same environmental factors, are then required to be able to draw the correct conclusions. The strategy proposed here deals with using the outside part of the studied fragments as specific blank for comparison purposes. In addition, the detection of syringic acid obtained from malvidin hydrolysis, red wine pigment, can be used for confirmatory reasons. The optimized methodology was used for analyzing fragments of *dolia* from various archeological sites of localities from the province of Girona (Spain) such as Empúries, Sant Antoni de Calogne, and Banyoles. Some of the studied fragments showed a clear tartaric acid concentration gradient from inside to outside of the piece, suggesting that they may have contained wine in the past. On the contrary, the concentration of tartaric acid was below the limit of detection in other fragments, like the ones from Sant Antoni de Calonge, so the possibility that they contained wine can be ruled out.



## P146

### Aplicación de la resina macroporosa Lewatit S7968 a la recuperación y purificación de polifenoles procedentes de residuos agroalimentarios

Sonia Sentellas <sup>1,2,3</sup>, Manal Ouchen <sup>1</sup>, Aina Mir-Cerdà <sup>1,2</sup>, Javier Saurina <sup>1,2</sup>, Jose Luis Beltrán <sup>1</sup>,  
Mercè Grandados <sup>1,2</sup>

1. *Universitat de Barcelona, Barcelona, España*

2. *Instituto de Investigación en Nutrición y Seguridad Alimentaria, Universitat de Barcelona,  
Santa Coloma de Gramenet, España*

3. *Programa Serra Húnter, Generalitat de Catalunya, Barcelona, España*

#### Resumen

La recuperación de compuestos bioactivos a partir de residuos agroalimentarios es una área de investigación muy activa en el marco de la economía circular. Recientemente, se han desarrollado muchas metodologías de extracción utilizando eco-solventes, siendo los solventes eutécticos profundos naturales (NaDES) un ejemplo de ellos. Los NaDES pueden proporcionar, en general, rendimientos de extracción superiores a otros sistemas más convencionales en estas aplicaciones, como las mezclas agua-etanol. Hay numerosos estudios sobre el uso de NaDES para la extracción de polifenoles, pero la información sobre la purificación de los extractos obtenidos es muy escasa [1,2]. Este estudio explora el uso de la resina macroporosa Lewatit S7968, un polímero de poliestireno-divinilbenceno, para la purificación de extractos NaDES procedentes de hojas de olivo. El estudio se centra en la purificación de polifenoles de extractos NaDES (cloruro de colina-glicerol, en una relación molar 1:5, 30% de agua) mediante metodología en columna. Las fracciones que eluyen de la columna son analizadas por cromatografía de líquidos de alta resolución con detección UV (HPLC-UV) para la determinación de polifenoles, y con el método del ácido 3,5-dinitrosalicílico (DNS) [3] para el análisis de azúcares. 3-Hidroxitirosol, ácido p-cumárico, oleuropeína, luteolina-7-O-glucósido, apigenina-7-O-glucósido y luteolina son algunos de los polifenoles identificados en mayor concentración en los extractos NaDES de hojas de olivo. Los resultados muestran una buena capacidad de sorción de la mayoría de polifenoles en la resina S7968. Para la etapa de desorción se han evaluado diferentes mezclas agua/etanol. Los resultados muestran que porcentajes de etanol a partir de 50% son adecuados para alcanzar una recuperación elevada de gran parte de polifenoles. El 3-hidroxitirosol es una excepción; la elución de este compuesto, de pequeño tamaño y relativamente polar, es más favorable cuando se utiliza un porcentaje de etanol inferior (e.g., 20%). Asimismo, se ha comprobado que se reduce significativamente el contenido en azúcares (glucosa y fructosa) en el extracto purificado.

[1] A. Mir-Cerdà, et al. *TrAC Trends in Analytical Chemistry*, 161 (2023) 116994. [2] P. Tapia-Quirós, M.F. Montenegro-Landívar, M. Reig, X. Vecino, J.L. Cortina, J. Saurina, M. Grandados. *Foods*, 11 (2022), 362. [3] R. Yildiz, M. Maskan. *International Journal of Gastronomy and Food Science*, 30 (2022), 100597.



## P147

### Estudio de diferentes muestreadores pasivos para la monitorización de contaminantes regulados y emergentes en el medio marino

Javier López Vázquez<sup>1</sup>, Tania Arias<sup>1</sup>, Begoña Pérez Fernández<sup>2</sup>, Lucía Viñas<sup>2</sup>, Rosa Montes<sup>1</sup>,  
Gabriela Castro<sup>1</sup>, María Ramil<sup>1</sup>, Isaac Rodríguez Pereiro<sup>1</sup>, José Benito Quintana<sup>1</sup>, Rosario Rodil<sup>1</sup>

1. *Universidade de Santiago de Compostela, Santiago De Compostela, España*

2. *IEO CSIC, Vigo, España*

#### Resumen

Las técnicas convencionales de monitorización basadas en la recolección de muestras puntuales no aportan información sobre la prevalencia de los contaminantes en el medio marino a lo largo del tiempo debido a la alta variabilidad en sus concentraciones. En cambio, los muestreadores pasivos están en constante interacción con los contaminantes del medio y permiten obtener valores integrados en el tiempo reduciendo los costes de muestreo [1]. El uso de muestreadores pasivos ha sido evaluado para diferentes familias de compuestos en agua dulce pero su evaluación en sistemas marinos ha sido muy limitada. En este trabajo se compararon muestreadores pasivos de diferentes tipos como elastómeros de silicona, muestreadores integradores de productos químicos orgánicos polares (POCIS) y gradientes difusivos en películas finas (DGT), los dos últimos con diferentes combinaciones, para el muestreo en medio marino de más de 30 contaminantes orgánicos regulados por la Directiva Marco de Agua y emergentes de la cuarta lista de observación de la Unión Europea. Para ello, se expusieron 7 configuraciones de muestreadores pasivos en tanques de agua marina a nivel de 1 µg/L de los compuestos estudiados durante 1 semana en agitación. Observándose que los muestreadores más adecuados fueron los POCIS con relleno de poliestireno-divinilbenceno y membrana de nylon, capaz de retener 21 compuestos, principalmente fármacos y productos de cuidado personal hidrofílicos (log Kow 0,5-3,2), así como el elastómero de silicona en formato barra, capaz de retener 15 compuestos, mayoritariamente plaguicidas hidrofóbicos (log Kow ≥3). En la actualidad se están desarrollando ensayos sumergiendo los dispositivos en una plataforma marina en la ría de Arousa durante dos semanas.

#### Agradecimientos

Estos resultados son parte del Programa de Ciencias Marinas de Galicia que forma Parte del Programa de Ciencias Marinas de los Planes Complementarios de I+D+I con las Comunidades autónomas, que se recogen en el apartado 17 del Plan de Recuperación, Transformación y Resiliencia, y está apoyado en esta Acción por la Xunta de Galicia, a través del Fondo Europeo Marítimo y de Pesca (FEMP), correspondiente al programa operativo 2014-2020 de Galicia y a través del Fondo Europeo Marítimo, de Pesca y de Acuicultura (FEMPA) para el período 2021-2027, en la misma Comunidad Autónoma. Agradecemos también a Clara Almécija Pereda y Cristian Simoes Fernández del Centro Tecnológico del Mar (CETMAR) por su colaboración para la colocación de los muestreadores en el medio.

#### Referencias

[1] K. Wille, et al. *Journal of Chromatography A* 1218 (2011) 9162-9173.



## P148

### Evaluación de diferentes estrategias de purificación y aislamiento de ARNm encapsulado en nanopartículas lipídicas: vacuna comirnaty® como caso de estudio.

Pilar Baena Álvarez<sup>1</sup>, Anabel Torrente Lopez<sup>2</sup>, Jesus Hermosilla Fernandez<sup>3</sup>, Antonio Salmerón García<sup>1</sup>,  
José Cabeza Barrera<sup>2</sup>, Natalia Navas Iglesias<sup>3</sup>

1. Departamento de Química Analítica e Instituto Biosanitario de Granada *ibs.Granada, Granada, España*

2. Facultad de Ciencias, Granada, España

3. Universidad de Granada, Granada, España

#### Resumen

La reciente pandemia provocada por el virus SARS-CoV2 ha puesto de manifiesto el éxito de una nueva estrategia de vacunación basada en la encapsulación del ARNm en nanopartículas lipídicas (ARNm-LNPs). Esto ha incrementado actualmente el interés en esta nueva tecnología, con numerosos estudios, incluido su uso como vacuna terapéutica. Como parte del proceso de fabricación, la calidad del ARNm debe controlarse antes de la encapsulación (como principio activo que es), pero también después de la formulación en el producto final (vacuna o vacuna terapéutica) [1]. Por tanto, es necesario poder extraer el ARNm de las LNPs, es decir “deformular” el producto final. En esta investigación se han comparado diferentes métodos de “deformulación” para extraer y purificar el ARNm con el objetivo de analizar posteriormente la integridad del mismo por cromatografía de líquidos acoplada a espectrometría de masas. Se han evaluado diferentes métodos de “deformulación”: ultrasonidos + disolventes orgánicos (cloroformo, cloroformo-fenol, e isopropanol). La eficacia de estos tratamientos se ha evaluado en términos de su capacidad para extraer y aislar el ARNm de la LNP, quedando libre de material lipídico. Esto se ha realizado mediante el análisis comprensivo de los extractos por espectroscopía UV (Detector de Diodos en Fila, DDF), dispersión dinámica de la luz (Dynamic Light Scattering, DLS), y microscopía electrónica de transmisión (Transmission Electron Microscopy, TEM). En este trabajo de investigación se discuten y resaltan las ventajas y desventajas de cada uno de estos métodos de “deformulación” del sistema ARNm-LNPs empleando muestras no caducadas de la vacuna Comirnaty® (Pfizer-BioNTech). No obstante, los resultados han indicado que el método por el que se aísla mayor cantidad de ARNm purificado es el tratamiento que emplea isopropanol, ya que se obtienen espectros de UV coincidentes con el espectro característico de los ARNm; los resultados por DLS muestran particulado de gran tamaño el cual se asigna a ARNm, y se corrobora por TEM. Se propone que este particulado de gran tamaño (alrededor de 1000 nm) se trata de material orgánico aglomerado de ARNm, coincidiendo con resultados encontrados en Bibliografía donde se demuestra que el ARNm se aglomera para estabilizarse [2].

#### Agradecimientos:

Al Servicio de Farmacia del Hospital Universitario Clínico San Cecilio (Granada), por la amable cesión de las muestras reconstituidas de Comirnaty®.

[1] C. Malburet, A. Carboni, S. Guinamand et al. *J. Chrom. A* 1714 (2024) 464545. [2] J. Szebeni, B. Kiss, T. Bozó et al. *ACS Nano* 17 (2023) 131147-131157.



## P149

### **Perspectivas para la valorización de residuos obtenidos durante la producción de aceite de oliva: caracterización, extracción, purificación y aplicaciones**

Aina Mir Cerdà<sup>1,2</sup>, Paulina Tapia Quirós<sup>1,1</sup>, Manal Ouchen<sup>1</sup>, José Luis Beltrán<sup>1</sup>, Óscar Núñez<sup>1,4</sup>, Mercè Granados<sup>1,2</sup>, Sònia Sentellas<sup>1,6</sup>, Javier Saurina<sup>1,2</sup>

1. *Universitat de Barcelona, Barcelona, España*

2. *Instituto de Investigación en Nutrición y Seguridad Alimentaria, Santa Coloma de Gramenet, España*

3. *Universitat Politècnica de Catalunya*

4. *Programa Serra Húnter, Barcelona, España*

5. *Generalitat de Catalunya*

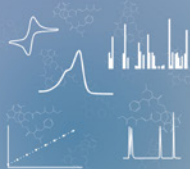
6. *Universitat de Barcelona, Santa, España*

7. *Programa Serra Húnter*

#### **Resumen**

En esta comunicación se aborda de forma integral la valorización de residuos agroalimentarios mediante la recuperación de compuestos de alto valor añadido, presentando ejemplos de las diferentes etapas del proceso, desde el residuo al producto final. El estudio se focaliza en los residuos generados en la producción de aceite de oliva, particularmente el alperujo y las hojas, como fuente potencial de compuestos fenólicos antioxidantes que pueden ser extraídos, purificados, y destinados a cosmética, nutraceútica, fortificación de alimentos, fitosanitarios o preparación de films bioactivos. Caracterización: el estudio de las muestras iniciales, los extractos resultantes de las etapas de preconcentración y purificación, y los productos finales se realiza en términos de actividad antioxidante (métodos espectroscópicos) e identificación y cuantificación de compuestos relevantes (cromatografía de líquidos). Paralelamente, también es importante evaluar las impurezas que puedan contener mediante métodos de determinación de azúcares, ácidos orgánicos, material proteico, etc. Extracción: se presentan resultados comparativos de técnicas convencionales y avanzadas combinadas con solventes eutécticos profundos o tradicionales. En este punto, es importante diferenciar el propósito del estudio ya que los criterios de elección de las condiciones de trabajo serán diferentes. Distinguiremos entre la caracterización analítica preliminar de las matrices y la recuperación de bioactivos para el desarrollo de aplicaciones futuras. En el primer caso, prima la recuperación cuantitativa de los analitos, mientras que, en el segundo, el compromiso entre la eficacia extractiva y los costes, teniendo siempre en cuenta la escalabilidad de los procesos. Preconcentración y purificación de compuestos fenólicos: se contempla desde el punto de vista de la valorización de los subproductos, por lo que los procedimientos investigados deberían ser fácilmente escalables. En este sentido se trabaja con sistemas de purificación basados en tecnologías de membranas (ultra- y nanofiltración, y ósmosis inversa) y cromatografía extractiva con resinas poliméricas funcionalizadas y no funcionalizadas. Aplicaciones: más allá de la obtención de preparados para usos en la industria química, agroalimentaria o farmacéutica, la preparación de films que puedan proteger los alimentos de forma más efectiva despierta cada vez más interés en la comunidad científica. En este sentido, mostraremos algunos films basados en carboximetilcelulosa o quitosano, que hemos obtenido a escala de laboratorio, y que incorporan extractos fenólicos con actividad antioxidante. Para más información podéis consultar nuestra página web de FFAST (Food & Art: Authentication and Sustainability Challenges) en <https://www.ub.edu/FFAST/>, y en Instagram (@foodandart\_faast, @recycle4antiox y @fisa.food).





## P150

### Identificación de los metabolitos de la 1,3-difenilguanidina y la 1,3-di-o-tolilguanidina mediante estudios de metabolismo in-vitro de hígado humano

Rosario Rodil Rodríguez, Andrea Estevez Danta, María Lage Díaz, Iago Riveiro Rodríguez, Rosa María Montes Goyanes, José Benito Quintana Álvarez  
*Universidad de Santiago de Compostela, Santiago De Compostela, España*

#### Resumen

La 1,3-difenil guanidina (DPG) y la 1,3-di-o-tolil guanidina (DTG) son aditivos de caucho ampliamente utilizados en reacciones de vulcanización, por ejemplo, en la producción de neumáticos. Debido a su uso a gran escala, estos compuestos se han detectado en el medio ambiente. Algunos estudios recientes sugieren que la DPG actúa como disruptor endocrino y ambos productos químicos están vinculados a la dermatitis alérgica. Sin embargo, solo unos pocos estudios han evaluado la potencial exposición humana, por lo que existe poca información sobre sus metabolitos [1]. Por lo tanto, en este trabajo se investigó la biotransformación in-vitro de fase I y II de DPG y DTG utilizando microsomas hepáticos humanos y citosólicos. Las muestras se analizaron utilizando cromatografía líquida acoplada a espectrometría de masas de alta resolución. Finalmente, se empleó un enfoque de tipo suspect screening para identificar los posibles metabolitos. Se identificaron cuatro productos metabólicos de fase I y dos de fase II para DPG y DTG. La hidroxilación del grupo benceno condujo a la formación de DPG y DTG monohidroxilado y dihidroxilado (DPG-227, DTG-255, DPG-243 y DTG-271). Posteriormente, las reacciones secundarias de fase I resultaron en la formación de un producto hidroxifenilurea (DPG-228 y DTG-256) y un derivado cíclico hidroxilo (DPG-225 y DTG-253). Además, también se identificaron productos de N-glucuronidación (DPG-387 y DTG-415) y O-glucuronidación (DPG-403 y DTG-431). Para ambos compuestos, se encontraron diferentes isómeros. Finalmente, la búsqueda de los metabolitos en muestras de orina permitió la identificación tentativa de un metabolito de fase I de DTG. En la actualidad, se está llevando a cabo una investigación adicional para confirmar la presencia de estos metabolitos en más muestras y determinar el alcance de la exposición a DTG y DPG.

**Agradecimientos:** Xunta de Galicia (ED431C 2021/06, ED481A-2020/258), Agencia Estatal de Investigación –MCIN/AEI/10.13039/501100011033 (ref. PID2020-117686RB-C32).

**Referencias** [1] Li, Z.M. et al. Environ. Sci. Tech. 57, (2023) 8883-8889.



## P151

### Cloración de los fármacos antipsicóticos amisulpride, sulpiride y tiapride en aguas

Rosa María Montes Goyanes<sup>1</sup>, Sandra Méndez Martínez<sup>1</sup>, Tania Arias Cailleau<sup>1</sup>, Cristina Álvarez García<sup>1</sup>, Idoia Beloqui Ezquer<sup>1</sup>, José Benito Quintana Álvarez<sup>1</sup>, Raquel Chaves<sup>2</sup>, Teresa Neuparth<sup>2</sup>, Miguel Santos<sup>2,3</sup>, Rosario Rodil Rodríguez<sup>1</sup>

1. *Universidade de Santiago de Compostela, Santiago De Compostela, España*

2. *Centro Interdisciplinar de Investigación Marina y Ambiental, Oporto, Portugal*

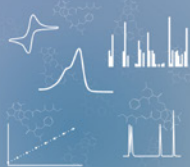
3. *Universidade do Porto, Oporto, Portugal*

#### Resumen

Los fármacos antipsicóticos son un grupo de medicamentos de uso frecuente en el tratamiento de procesos psiquiátricos (demencia, esquizofrenia o trastorno bipolar), así como otros procesos de distinta causa (vértigo, cuadros eméticos, dolor crónico neuropático, etc...). En las últimas décadas, los productos farmacéuticos y de cuidado personal forman parte de un grupo grande y diverso de compuestos orgánicos que han recibido una creciente preocupación internacional por sus propiedades persistentes y su impacto potencial en los ecosistemas y salud humana, incluso en concentraciones traza. En Europa y EE.UU., se han realizado estudios que evidencian la presencia de fármacos antipsicóticos como amisulprida y sulpirida en aguas superficiales [1], recursos que pueden utilizarse para producir agua potable. El objetivo principal de este trabajo es el estudio de procesos de oxidación de fármacos antipsicóticos como son la amisulprida, sulpirida y tiapride con hipoclorito sódico, el desinfectante más ampliamente usado en los procesos de tratamiento de aguas para consumo humano. Así, se estudiaron las cinéticas de degradación en función del pH, entre pH 4 y 10, observándose un importante efecto sobre la constante de velocidad de la reacción. También se identificaron tentativamente los productos de transformación (TPs) mediante cromatografía líquida (LC) y espectrometría de masas de alta resolución (HRMS) con un sistema cuadrupolar de tiempo de vuelo (QTOF). La ruta de transformación de estos fármacos consistió principalmente en formación de insaturaciones, hidroxilaciones y dealquilaciones. Además, se realizó una evaluación preliminar de la (eco)toxicidad de los tres fármacos y sus TP mediante herramientas de relación cuantitativa estructura-actividad (QSAR) observando que algunos TPs podrían ser más preocupantes que los compuestos precursores. Por lo que, se desarrolló una evaluación toxicológica mediante ensayos con embriones de pez cebra basados en la prueba estandarizada OECD TG 236 teniendo en cuenta la mortalidad, las anomalías morfológicas y las alteraciones del comportamiento sensoriomotor. Considerando los resultados obtenidos de los diferentes niveles de degradación de cada TP diana, se obtuvieron efectos estadísticamente no significativos ( $p > 0,05$ ) para todos los puntos finales.

**Agradecimientos** Los autores agradecen el soporte financiero de la Xunta de Galicia (ED431C2021/06) y de la Agencia Estatal de Investigación MCIN/AEI/10.13039/501100011033 (ref. PID2020-117686RB-C32).

**Referencias** [1] Alygizakis, N.A.; Gago-Ferrero, P.; Borova, V.L.; Pavlidou, A.; Hatzianestis, I.; Thomaidis, N.S. Occurrence and Spatial Distribution of 158 Pharmaceuticals, Drugs of Abuse and Related Metabolites in Offshore Seawater. *Sci. Total Environ.* 2016, 541, 1097–1105



## P152

### Determinación y destino medioambiental de pesticidas asociados a plásticos de uso agrícola.

Victoria Fernández Fernández<sup>1</sup>, Gabriela Castro Varela<sup>1</sup>, Miguel Cobo Golpe<sup>1</sup>, María Ramil Criado<sup>1</sup>, Isaac Rodríguez Pereiro<sup>1</sup>, Ignacio Bernabé<sup>2</sup>, María Ulagares De La Orden<sup>3</sup>, Enrique Blázquez Blázquez<sup>4</sup>, María Luisa Cerrada<sup>4</sup>, Joaquín Martínez Urreaga<sup>2</sup>

1. *Departamento de Química Analítica, Nutrición y Bromatología. Instituto de Investigación del Medio Acuático para Una Salud Global (iARCUS). Universidad de Santiago de Compostela. Rúa Constantino Candeira, 5. 15782 – Santiago de Compostela, Santiago De Compostela, España*

2. *Departamento de Ingeniería Química Industrial y del Medio Ambiente, ETSI Industriales, Universidad Politécnica de Madrid., Madrid, España*

3. *Departamento de Química Orgánica, Facultad de Óptica y Optometría, Universidad Complutense de Madrid., Madrid, España*

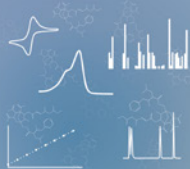
4. *Instituto de Ciencia y Tecnología de Polímeros, ICTP-CSIC. C/ Juan de la Cierva, 3. 28006 Madrid., Madrid, España*

#### Resumen

La industria agrícola emplea grandes cantidades de materiales plásticos para mejorar y aumentar la productividad de los cultivos, tales como mangueras de riego, cubiertas de invernaderos, tubos para protección de plantas y cintas de amarre, al tiempo que se reduce la demanda de agua y las tasas de aplicación de herbicidas. Estos materiales están expuestos a la gama de pesticidas (principalmente fungicidas e insecticidas) que se pulverizan sobre los cultivos. Dependiendo de las características de los compuestos empleados así como de los materiales plásticos, los plaguicidas pueden acumularse en los plásticos agrícolas durante varias campañas, hasta el final de su vida útil, alcanzando concentraciones superiores a las existentes en los suelos y cultivos circundantes [1]. En el marco de la economía circular, el reciclado de plásticos agrícolas se ha propuesto como una práctica sostenible para reducir el impacto ambiental de los materiales al final de su vida útil, evitando la generación de elementos de menor tamaño (meso y microplásticos) difíciles de recuperar del medio terrestre, y susceptibles de ser transportados directamente a otros compartimentos ambientales, es decir, a través de procesos de escorrentía y asociados a partículas de erosión del suelo; o indirectamente, tras su ingestión y excreción por animales silvestres y de granja. El objetivo principal de esta comunicación es estudiar la presencia de residuos de plaguicidas en plásticos agrícolas al final de su vida útil, así como evaluar la transferencia de estas sustancias a materias primas producidas a partir de plásticos reciclados, y su potencial para intercambiar estos compuestos con el medio acuático. Con esa finalidad, se ha determinado la presencia de plaguicidas en los extractos obtenidos de plásticos agrícolas envejecidos, artículos agrícolas nuevos procedentes de plástico virgen así como de plástico reciclado. El análisis de estas muestras se llevó a cabo mediante su extracción con disolventes orgánicos y su posterior análisis por cromatografía líquida acoplada a espectrometría de masas en tándem (LC-ESI-MS/MS), considerando una preselección de 30 plaguicidas basada en datos de consumo y presencia en suelos agrícolas.

**Referencias:** 1. M. Cobo-Golpe, P. Blanco, V. Fernández-Fernández, M. Ramil, I. Rodríguez. *Sci. Total Env.* 912 (2024) 169273

**Agradecimientos:** Proyectos TED2021-129962B-C42 y TED2021-130166B-I00 financiados por el Ministerio de Ciencia e Innovación de España, a través del programa UE Next Generation y ED431C2021/06, de la Xunta de Galicia, cofinanciado por el programa EU FEDER.



## P153

### **Acoplamiento directo de una precolumna de protección a un espectrómetro de masas de alta resolución (Orbitrap) para la determinación de aminoácidos no derivatizados en orina**

Encarnación Rodríguez Gonzalo, María Teresa Fernández Del Campo García, Ana María Casas Ferreira, José Luis Pérez Pavón  
*Universidad de Salamanca, Salamanca, España*

#### **Resumen**

En este trabajo se ha desarrollado y validado un método de espectrometría de masas de alta resolución basado en el acoplamiento directo de una precolumna comercial a un espectrómetro de masas de alta resolución con un analizador Orbitrap para la determinación de aminoácidos en orina a sus niveles endógenos. Se han estudiado distintas precolumnas con materiales de relleno de diferente naturaleza química (fase reversa, intercambio catiónico, intercambio aniónico e interacciones hidrofílicas). Los mejores resultados, en términos de separación, mejora de la señal analítica y mejora de la morfología de los picos, se obtienen con la precolumna de interacciones hidrofílicas. También se han evaluado diferentes modos de adquisición en el Orbitrap. Los mejores resultados se obtienen con las modalidades de barrido de MS completo (Full-MS) combinado con el seguimiento de reacción en paralelo (Parallel Reaction Monitoring), PRM). Por un lado, se selecciona el modo Full-MS para aquellos analitos para los que es posible realizar su determinación por masa exacta, debido a que no presentan compuestos interferentes. El modo PRM se utiliza para aquellos compuestos que presentan interferencias isobáricas y para los cuales es necesario utilizar sus iones producto para su correcta cuantificación. El método desarrollado implica un tiempo total de análisis de 1.6 min y no requiere ningún proceso de derivatización previa de los aminoácidos. La validación se lleva a cabo utilizando orina sintética, con límites de detección se entre 0.003 y 1.50 mg/L, límites de cuantificación entre 0.10 y 4.95 mg/L, y recuperaciones entre el 80 y el 130% para todos los compuestos analizados. Se observó la existencia de efecto matriz; por lo que la cuantificación de los compuestos se realiza utilizando un protocolo de adición estándar de un punto y normalización con patrón interno con patrones internos marcados isotópicamente. Finalmente, se comprueba la aplicabilidad del método analizando muestras de orina de voluntarios sanos, con resultados consistentes con los descritos en trabajos previamente publicados. Por tanto, se demuestra que la metodología propuesta (precolumna-Orbitrap HRMS) es una alternativa de análisis rápida, selectiva y fiable para la determinación cuantitativa de aminoácidos en orina.

**Financiación:** PID2021-127679NB-I00, CTQ2017-87886-P, SA055P17.



## P154

### **Multideterminación de micotoxinas en alimentos sólidos y líquidos mediante disolventes supramoleculares combinados con LC-MS/MS.**

Luis Muñiz De Bustamante, Noelia Caballero Casero, Soledad Rubio Bravo  
*Universidad de Córdoba, Córdoba, España*

#### **Resumen**

El sistema de Alerta Rápida para Alimentos y Piensos (RASFF) permite el rápido intercambio de información entre países de la Unión Europea para la rápida detección de riesgos alimentarios. Según el último informe RASFF, las micotoxinas representan la tercera alerta más común de los 17 riesgos categorizados en productos alimentarios originarios de países miembros y no miembros de la UE. La Agencia Internacional de Investigación del Cáncer (IARC) ha clasificado las micotoxinas, de acuerdo con sus efectos tóxicos para el ser humano, en cancerígenos (grupo I), probablemente cancerígenos (grupo IIA) y posiblemente cancerígenos (grupo IIB). Esto ha llevado al establecimiento de legislación específica que regula el contenido máximo de cada micotoxina en diferentes alimentos ordenados según su composición nutricional. Por ello, es de vital importancia contar con métodos analíticos que permitan la multideterminación de micotoxinas en estos alimentos a las concentraciones legisladas. Actualmente, se utilizan QuEChERS, extracción en fase sólida y extracción por columna de inmunoafinidad como tratamiento de muestra, aunque no son aplicables simultáneamente a muestras sólidas y líquidas. Además, frecuentemente necesitan una etapa de purificación, incrementándose el consumo de disolventes orgánicos y el costo de los análisis. En esta investigación se propone el uso de disolventes supramoleculares (SUPRAS) para la microextracción de 12 micotoxinas reguladas por la UE y su posterior cuantificación mediante cromatografía líquida acoplada a espectrometría de masas en tándem. El método desarrollado fue optimizado y validado para cinco grupos de alimentos, sólidos y líquidos, basándose en los criterios de rendimiento para cada micotoxina según el Reglamento (UE) N° 519/2014. Gracias a las propiedades del SUPRAS, se llevó a cabo la extracción de los analitos y eliminación de los interferentes de la matriz simultáneamente. El método cumple con los requerimientos en cuanto a sensibilidad (límites de cuantificación entre 0,03-21,483 ng/mL), eficiencia de extracción (recuperaciones en el intervalo de 59-120%) y repetibilidad y reproducibilidad (desviación estándar relativa entre 3-19% y 0,3-20,1%, respectivamente). Además, este método está alineado con los principios de la química verde, siendo simple, rápido y de bajo coste; por lo que muestra potencial como alternativa a los actuales tratamientos de muestra para el análisis de rutina de micotoxinas en alimentos.

Los autores agradecen la ayuda PID2020-113743RB-I00 financiada por MICIU/AEI/10.13039/501100011033. L. Muñiz-Bustamante agradece la ayuda PRE2021-096892 financiada por MICIU/AEI/10.13039/501100011033 y por FSE Invierte en tu futuro. N. Caballero-Casero agradece la ayuda IJC2020-044941-I financiada por MICIU/AEI/10.13039/501100011033 y por Unión Europea NextGenerationEU/PRTR.



## P155

### Release of heavy metals from microplastics during in vitro fish gastrointestinal digestion

Eduardo Bolea Morales<sup>1</sup>, Luana S. Brunetti<sup>1,2</sup>, Emilio Cellini<sup>3</sup>, Silvestro A. Ruffolo<sup>2</sup>, Mauro F. La Russa<sup>2</sup>, Francisco Laborda<sup>1</sup>

1. *Group of Analytical Spectroscopy and Sensors (GEAS), Institute of Environmental Sciences (IUCA), University of Zaragoza, Pedro Cerbuna 12, Zaragoza, España*

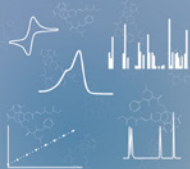
2. *Department of Biology, Ecology and Earth Sciences (DIBEST), University of Calabria, Pietro Bucci, 87036 Arcavacata di Rende, Cosenza, Italia*

3. *Regional Agency for the Environment -Calabria- (ARPACAL), Regional Marine Strategy Center (CRSM), Catanzaro, Italia*

#### Resumen

Plastic pollution represents a major environmental concern, especially in marine systems, being Mediterranean Sea the sixth largest accumulation area of marine plastic waste. The reduction of this waste caused by different processes, leads to the formation of microplastics (MPs), which are mistaken for food and ingested by fish. Microplastics are the main carriers of heavy metals (HM), both as additives used during plastic production or adsorbed from the environment. Since fish are at the top of the food chain in aquatic ecosystems, HMs can accumulate in their tissues and be transferred to humans through consumption, causing different toxic effects. Therefore, it is necessary to determine the role of microplastics as vectors of heavy metals during ingestion on fish as a bioindicator to evaluate the possible risk to human health. In vitro assays were performed on a fish model to study the release of HMs from microplastics during the digestion process. The protocol consisted of two steps that simulated both gastric and intestinal digestion in fishes. Three plastics (polyethylene (PE), polypropylene (PP) and polyvinyl chloride (PVC)) of different sizes were used as models to study the release of eight heavy metals (Pb, Cd, Cr, As, Sb, Sn, Zn and Hg) along the in vitro digestion. Both gastric and intestinal fluids were analyzed by ICP-MS. Microplastics collected from different contaminated areas of the Mediterranean Sea (southern Italy) were subjected to the same procedure and the fluids were analyzed. The most relevant results will be presented, and conclusions about the most significant effects found on the release of HMs during the fish digestion will be discussed.

This work was supported by the Spanish Ministry of Science and Innovation and the European Regional Development Fund [project PID2021-123203OB-I00 (AEI/FEDER)] and the Department of Science, University and Knowledge Society of the Government of Aragon (E29\_23R).



## P156

### Desarrollo de un método analítico para la determinación de citrinina en alimentos empleando UHPLC-MS/MS

Olga Pardo Marín, Paula Canet Moragón, Paloma Arjona Mudarra, Salvador Garrigues Mateo  
Universitat de València, Burjassot, España

#### Resumen

La citrinina es una micotoxina hepatonefrotóxica producida por varias especies de los géneros fúngicos *Aspergillus*, *Penicillium* y *Monascus* [1], que generalmente se forma principalmente en los cereales después de la cosecha, durante el almacenamiento. La citrinina también puede encontrarse en otros vegetales, como judías, frutas, zumos de frutas y vegetales, hierbas y especias, e incluso en productos lácteos en mal estado [2]. Tras la opinión en el año 2012 de la Autoridad Europea de Seguridad Alimentaria (EFSA) sobre el riesgo para la salud pública y animal derivado de la presencia de citrinina en los alimentos y los piensos, se considera un analito de interés. El presente estudio se centró en el desarrollo y validación de una metodología analítica para la determinación de citrinina en alimentos. El procedimiento propuesto se basa en la experiencia previa del grupo de investigación en el análisis de citrinina en complementos alimenticios a base de arroz rojo, basada en una extracción en fase sólida dispersiva (QuEChERS) seguida de un análisis mediante cromatografía líquida de ultra alto rendimiento acoplada a espectrometría de masas en tándem (UHPLC-ESI-MS/MS). El método se validó con éxito en términos de linealidad, límites de detección y cuantificación, efecto matriz, exactitud y precisión, cumpliendo con los criterios establecidos en el Reglamento de Ejecución (UE) 2023/2782 de la Comisión, de 14 de diciembre de 2023 que establece los métodos de muestreo y análisis para el control oficial de los niveles de micotoxinas en los productos alimenticios [3] y el Documento de Seguimiento para la determinación de micotoxinas en alimentos y piensos de la Dirección General de Salud y Seguridad Alimentaria (SANTE) [4].

#### Agradecimientos

Los autores agradecen la financiación obtenida de la Conselleria de Educación, Universidades y Empleo de la Generalitat Valencia a través del proyecto CIAICO/2022/217.

[1] P. López, M. de Nijsa, M. Spanjerb, et al. EFSA Support. (2017) [2] B. Xu, X. Jia, L. Gu et al. (2006) 271–285. [3] European Commission (EC), 2023a. Commission Implementing Regulation (EU) 2023/2782 of 14 December 2023 laying down the methods of sampling and analysis for the official control of the levels of mycotoxins in foodstuffs. Official Journal of the European Union (2023), p. L1-44. [4] European Commission (EC), 2023b. Guidance document on identification of mycotoxins and plant toxins in food and feed. [https://food.ec.europa.eu/document/download/f16cac78-9318-4f1f-b2faefb25d2f1880\\_e](https://food.ec.europa.eu/document/download/f16cac78-9318-4f1f-b2faefb25d2f1880_e)



## P157

### Determinación de biomarcadores de estrés oxidativo en orina mediante UPLC-MS/MS

Olga Pardo Marín<sup>1</sup>, Iván Clarós Garrido<sup>1</sup>, Paloma Arjona Mudarra<sup>1</sup>, Clara Coscollà Raga<sup>2</sup>,  
Borja Peris Camarasa<sup>2</sup>, Pablo Dualde Marín<sup>2</sup>, Francesc A. Esteve Turrillas<sup>1</sup>

1. *Universitat de València, Burjassot, España*

2. *FISABIO, Valencia, España*

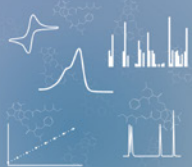
#### Resumen

La contaminación constituye la causa ambiental más importante de enfermedad y muerte prematura en el mundo actual [1]. Dicha contaminación contribuye al estrés oxidativo (EO), que forma parte de los eventos que participan en el desarrollo de enfermedades crónico-degenerativas, como la disfunción endotelial [2], lo que hace que el estudio del EO sea de especial interés. El EO resulta del ataque oxidativo de ciertos compuestos, como especies reactivas de oxígeno (ROS), hacia algunas moléculas como lípidos, proteínas o incluso el propio ADN. Como consecuencia, se forman moléculas llamadas biomarcadores, que pueden utilizarse para cuantificar la contribución de ROS al estrés oxidativo. Este estudio tuvo como objetivo validar un método analítico para la determinación de biomarcadores de estrés oxidativo en muestras de orina. En concreto, se desarrolló para determinar 8-hidroxi-2'-desoxiguanosina (8-OH-2'-dG) y del nucleósido 2'-desoxiguanosina (2dG). El interés de estos biomarcadores radica en que la determinación del 8-OH-2'-dG permite mantener un control sobre las exposiciones ambientales [3]. En cuanto al 2dG, al ser el precursor del 8-OH-2'-dG la ratio entre ambos permite obtener una visión global sobre el grado del EO. Para la detección de los biomarcadores se empleó cromatografía líquida de alta resolución acoplada a espectrometría de masas en tándem (UPLC-MS/MS). El método se validó en términos de linealidad, límites de detección (LOD), límites de cuantificación (LOQ), precisión, exactitud y efecto matriz. Los LODs obtenidos para el 8-OH-2'-dG y para el 2dG fueron 0.07 y 0.21 ng L<sup>-1</sup>, respectivamente. El método se aplicó a la determinación de estos biomarcadores en 512 orinas de una población representativa de la Comunidad Valenciana.

#### Referencias

[1] Fuller, R., Landrigan, P. J., Balakrishnan, K., Bathan, G., Bräuer, M., et al. (2022). Pollution and health: a progress update. *The Lancet. Planetary Health*, 6(6), e535-e547. [2] Carnevale, R., Sciarretta, S., Violi, F., Nocella, C., Perri, L., Peruzzi, M., Marullo, A. G. M., De Falco, E., Chimenti, I., Valenti, V., Biondi-Zoccai, G., & Frati, G. (2016). Acute Impact of Tobacco vs Electronic Cigarette Smoking on Oxidative Stress and Vascular Function. *Chest*, 150(3), 606-612. [3] Guo, C., Ding, P., Xie, C., Ye, C., Ye, M., Chi, P., Cao, X., Zhang, S., & Zheng, S. (2017). Potential application of the oxidative nucleic acid damage biomarkers in detection of diseases. *Oncotarget*, 8(43), 75767-77





## P158

### On-line aptamer affinity solid phase extraction capillary electrophoresis-mass spectrometry for the analysis of protein biomarkers at the intact level in biofluids and food

Laura Pont<sup>1,2</sup>, Hiba Salim<sup>1</sup>, María Vergara-Barberán<sup>1</sup>, Estela Giménez<sup>1</sup>, Victoria Sanz-Nebot<sup>1</sup>,  
Fernando Benavente<sup>1</sup>

1. Department of Chemical Engineering and Analytical Chemistry, Institute for Research on Nutrition and Food Safety (INSA·UB), University of Barcelona, Barcelona, España

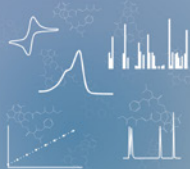
2. Serra Hùnter Program, Generalitat de Catalunya, Barcelona, España

#### Resumen

The analysis of protein biomarkers is of significant importance in biomedicine and food science. Nowadays, it is widely accepted that high performance separation techniques coupled to mass spectrometry (MS), such as liquid chromatography-mass spectrometry (LC-MS) and capillary electrophoresis-mass spectrometry (CE-MS), are the techniques of choice for reliable analysis of proteins, at the intact level or after enzymatic digestion for bottom-up peptide mapping. However, in many cases, the protein biomarkers of interest are found at very low concentration in highly complex samples, such as certain biological fluids or food contaminated with allergenic proteins. Several strategies have been described to enhance sensitivity in LC-MS and CE-MS, including the on-line coupling of solid-phase extraction for sample clean-up and analyte preconcentration from large volumes of sample. On-line solid-phase extraction capillary electrophoresis-mass spectrometry (SPE-CE-MS) is particularly advantageous, as it can be easily automated with valve-free microseparation set-ups in commercial CE instruments [1-2]. In this communication, I will present an overview of our latest developments in SPE-CE-MS using sorbents based on aptamers [2-5], which can be selected to recognize protein biomarkers with high affinity and selectivity. I will focus on various applications for the analysis of protein biomarkers at the intact level, which are related to neurodegenerative and infectious diseases, as well as food allergies [2,4-5]. The integration of aptamer affinity, electrophoretic separation, and MS detection enables high-selectivity, high-sensitivity, and accurate quantification, while avoiding false positives through the unequivocal identification of the intact protein of interest.

**References** [1] L. Pont, R. Pero-Gascon, E. Gimenez, V. Sanz-Nebot, F. Benavente, *Anal Chim Acta*, 1079 (2019) 1. [2] R. Pero-Gascon, F. Benavente, Z. Minic, M. V. Berezovski, V. Sanz-Nebot, *Anal. Chem*, 92 (2020) 1525. [3] H. Salim, R. Pero-Gascon, E. Giménez, F. Benavente, *Anal. Chem.*, 94 (2022) 6948. [4] M. Vergara-Barberán, E. F. Simó-Alfonso, J. M. Herrero-Martínez, F. Benavente, *Talanta*, 259 (2023) 124542. [5] M. Vergara-Barberán, L. Pont, H. Salim, E. Giménez, F. Benavente, *Adv. Samp. Prep.*, 7 (2023) 100082.

**Acknowledgments** These studies were supported by grant PID2021-127137OB-I00 funded by MCIN/AEI/10.13039/501100011033 and by "ERDF A way of making Europe". HS thanks the Generalitat de Catalunya for a FI PhD fellowship The Bioanalysis group of the UB is part of the INSA UB Maria de Maeztu Unit of Excellence (Grant CEX 2021001234 M) funded by MCIN/AEI/FEDER, UE.



## P159

### Nueva estrategia analítica para determinar revumenib en muestras clínicas complejas: un prometedor quimioterapéutico en la lucha contra la leucemia mieloide aguda

Rosa Carmen Rodríguez Martín-Doimeadios<sup>1</sup>, Sergio Fernández Trujillo<sup>2</sup>, Gregorio Castañeda Peñalvo<sup>2</sup>, Juana Rodríguez Flores<sup>2</sup>

1. Universidad de Castilla-La Mancha, Toledo, España

2. Universidad de Castilla-La Mancha, Ciudad Real, España

#### Resumen

Los inhibidores de la menina son una nueva clase de candidatos a fármacos quimioterapéuticos para luchar contra la leucemia mieloide aguda (LMA). Entre estos compuestos, el revumenib está siendo empleado como una terapia dirigida prometedora a pacientes de LMA que no respondían a los tratamientos convencionales [1]. Sin embargo, no todos respondieron bien al mismo, por lo que, la seguridad sigue siendo un motivo de preocupación y se requiere una vigilancia del paciente en caso de que sea necesaria una reducción/interrupción de la dosis. Con el fin de poder mitigar este tipo de efectos adversos, sería de gran utilidad poder realizar un tratamiento personalizado a cada paciente ajustando la dosificación. Para ello es necesario contar con nuevas estrategias que proporcionen información para la monitorización de este fármaco en fluidos biológicos de una manera sencilla y fiable en laboratorios de rutina, convirtiéndose en un gran desafío para la Química Analítica actual. En este contexto, en el presente trabajo se ha desarrollado una metodología rápida y sencilla para detectar, identificar y determinar revumenib en suero sanguíneo utilizando la electroforesis capilar con detector de matriz de diodos. Se han optimizado diferentes parámetros instrumentales y condiciones químicas para conseguir la determinación de este compuesto en menos de 5 minutos de análisis con límites de detección en el orden de ng mL<sup>-1</sup>. Además, este enfoque puede ser caracterizado como una estrategia verde en el campo bioanalítico basada en evaluaciones empleando diferentes herramientas métricas de química verde como AGREEprep y AGREE [2]. Estos hallazgos podrían utilizarse como una herramienta médica innovadora y aplicarse con éxito en el seguimiento terapéutico de revumenib en laboratorios clínicos, así como para la toma de decisiones en ensayos y/o fases (pre)clínicas futuras.

**Referencias** [1] G.C. Issa, I. Aldoss, J. DiPersio et al. Nature 615 (2023) 920. [2] F. Pena-Pereira, W. Wojnowski, M. Tobiszewski. Anal Chem 92(14) (2020) 10076.

**Agradecimientos** Los autores agradecen la financiación del Ministerio de Ciencia e Innovación (PID2022-138761NB-I00), la Junta de Comunidades de Castilla-La Mancha (JCCM) (SBPLY/23/180225/000153) y el Plan Propio de Investigación de la Universidad de Castilla-La Mancha (2022-GRIN-34415), con cofinanciación FEDER. Sergio Fernández Trujillo agradece a la JCCM por su contrato post-doctoral, SBPLY/22/180502/000068.



## P160

### Muestreo no invasivo en la determinación de biomarcadores de neuroblastoma en orina de bebé mediante CE-UV

Jose Grau <sup>1</sup>, Magdalena Fabjanowicz <sup>2</sup>, Justyna Plotka-Wasyłka <sup>2</sup>

1. *Universitat de València, Valencia, España*

2. *Universidad Tecnológica de Gdansk, Gdansk, Polonia*

#### Resumen

Los niveles de ácido vanilmandélico, ácido homovanílico y ácido 5-hidroxiindolacético en orina se incrementan en pacientes con neuroblastoma, una enfermedad que se produce principalmente antes de los 5 años [1]. Por esa razón, se ha desarrollado un método para la determinación de estos analitos en muestras de orina de bebé. Con el objetivo de reducir la invasividad y el estrés producido durante la etapa de muestreo, se utilizaron pañales desechables para la obtención de la orina. Posteriormente, los analitos son extraídos únicamente utilizando agua y la medida se realiza con un equipo de electroforesis capilar acoplado a un detector ultravioleta (CE-UV). Las variables instrumentales y del proceso de preparación de muestra fueron optimizadas y el método fue validado obteniendo límites de detección de 1.65 µg mL<sup>-1</sup> para los tres compuestos y desviaciones estándares relativas menores al 15 % tanto para la repetibilidad intradía como interdía. Una vez validado, el método fue aplicado a muestras reales provenientes de pacientes sanos. Por último, el carácter verde del método fue evaluado (analytical greenness metric for sample preparation (AGREEPrep) [2] y green analytical procedure index (GAPI)) [3] junto con la practicidad del mismo (i.e., blue applicability grade index (BAGI) [4]) comparando los resultados obtenidos con métodos previos de la Bibliografía.

**Agradecimientos** J.G. agradece al Ministerio de Ciencia, Innovación y Universidades y a Next Generation-EU por su beca postdoctoral.

**Referencias** [1] M. Harding, R.J. Deyell, T. Blydt-Hansen, *Cancer Rep.* 5 (2022) 1569. [2] W. Wojnowski, M. Tobiszewski, F. Pena-Pereira, E. Psillakis, *TrAC Trends Anal. Chem.* 149 (2022) 116553. [3] J. Płotka-Wasyłka, *Talanta* 181 (2018) 204–209. [4] N. Manousi, W. Wojnowski, J. Płotka-Wasyłka, V. Samanidou, *Green Chem.* 25 (2023) 7598–7604.



## P161

### MÉTODOS colorimétricos para la determinación de clorato en medio acuoso

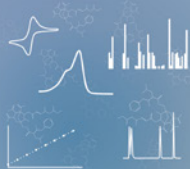
Ainara Cirion , Maider Vidal , Ane Bordagaray , Miren Ostra , Rosa Garcia-Arrona  
*Universidad del País Vasco UPV/EHU, San Sebastián-Donostia, España*

#### Resumen

La etapa de desinfección en la industria alimentaria tiene, como fin, eliminar microorganismos patógenos y mejorar la calidad del producto. Sin embargo, el uso de desinfectantes clorados en el agua de procesado puede originar contaminación con subproductos como el clorato, clorito o perclorato, que pueden ser absorbidos por los alimentos. El clorato, en concreto, puede provocar problemas hormonales y para su determinación no existen métodos colorimétricos establecidos, fiables y selectivos. [1] El análisis por cromatografía iónica y espectrofotometría, mediante reactivos como la orto-tolidina o el índigo carmín, son los métodos más comunes para el análisis de clorato. El índigo carmín no es cancerígeno, por lo que parece más apropiado. De cualquier forma, parece que no es selectivo, ya que reacciona tanto con clorato como con clorito. Por otro lado, se ha encontrado que el análisis colorimétrico de clorito se puede realizar con nanopartículas de plata (AgNPs). Así, se han creado modelos de calibración multivariable, tanto para clorato como para clorito, mediante su reacción con índigo carmín y con AgNPs, que presentan bajos errores de calibración y predicción. La aplicación de estos modelos a muestras reales, en cambio, no funciona, y creemos que es por la elevada reactividad de las AgNPs. Alternativamente, se ha encontrado que el sulfato de manganeso parece selectivo al clorato. Así, la idea es usar los procedimientos que conocemos para la medida de clorato en placa de microtitulación con el objetivo de desarrollar un sistema de detección múltiple para su análisis mediante imagen digital con smartphone. El índigo carmín reacciona tanto con clorato como clorito, pero parece que modificando las condiciones del medio (pH o contenido en Fe(II)) puede cambiar la selectividad. El sulfato de manganeso implica calentar la muestra, a lo que tendremos que hacer frente, y la orto-tolidina es cancerígena, pero las cantidades a necesitar en placa serían muy reducidas. El objetivo futuro es usar como soporte para las muestras papel y/o polímeros, con lo que es esperable tener que usar cantidades de reactivo iguales o menores a los 5  $\mu$ L. Se pretende así crear un sensor colorimétrico para clorato que sea transportable, con procesamiento de imagen automatizable, rápido, sencillo y preciso.

[1] G. Sansebastiano, R. Zoni, R. Bigliardi. *Food Safety* (2007) 253-280.

**Agradecimientos:** Los autores agradecen el apoyo financiero de la Diputación Foral de Gipuzkoa (2022-CIEN-000062-01 y 2023-CIEN-000072-04-01 que financia el contrato UPV/EHU PIFG 22/35) y del Gobierno Vasco (proyecto IT1662-22).



## P162

### Detección de contaminantes persistentes, móviles y tóxicos en matrices acuosas mediante cromatografía de líquidos y espectrometría de masas de alta resolución

Mauricio Perin<sup>1</sup>, Sandra Méndez Martínez<sup>1</sup>, Maria Del Rosario Rodil Rodríguez<sup>1</sup>, Lubertus Bijlsma<sup>2</sup>, Elena Pitarch<sup>2</sup>, Vicenç Acuña<sup>3</sup>, Joaquim Comas<sup>3</sup>, Rosa Maria Montes Goyanes<sup>1</sup>, José Benito Quintana Alvarez<sup>1</sup>

1. *Instituto de Investigación del Medio Acuático para una Salud Global (iARCUS), Universidad de Santiago de Compostela, Santiago De Compostela, España*

2. *Química Analítica en Salud Pública y Medio Ambiente, Instituto Universitario de Plaguicidas y Aguas (IUPA), Universitat Jaume I, Castellón, España*

3. *Instituto Catalán de Investigación del Agua, Girona, España*

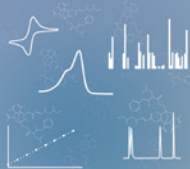
#### Resumen

Las sustancias persistentes, móviles y tóxicas (PMTs) son motivo de gran preocupación en el ciclo del agua debido a sus propiedades inherentes [1]. Esta categoría de compuestos ha llamado la atención de las autoridades europeas, que las sitúan en un nivel de preocupación similar al de los productos químicos persistentes, bioacumulables y tóxicos (PBT) regulados por REACH. El proyecto NePMTune ([www.nepmtune.webnode.es](http://www.nepmtune.webnode.es)) tiene como objetivo identificar y estudiar el comportamiento de los PMTs en matrices como aguas y polvo urbano, así como, proponer estrategias para su mitigación. Como parte de las actividades del proyecto, se elaboró una estrategia de detección de sospechosos (suspect screening) para analizar la presencia y los orígenes de PMTs en diversas matrices acuosas (agua de río, aguas residuales crudas y tratadas, escorrentía urbana y lixiviado de vertederos). Se generó una biblioteca para la identificación de sospechosos, compuesta por 1100 compuestos químicos, mediante una estrategia de priorización fundamentada en los criterios de toxicidad (T), persistencia (P) y movilidad (M). Se analizaron 47 muestras de los diversos tipos citados anteriormente recogidas en 2023 en distintos puntos de la geografía española. Tras la liofilización, como etapa de preconcentración, se llevó a cabo el screening mediante cromatografía líquida de modo mixto acoplada a espectrometría de masas de alta resolución (MMLC-HRMS), complementada por la determinación de movilidad iónica (IM-HRMS). Se identificaron un total 98 PMTs, (de los cuales 53 con nivel 1, 30 a nivel 2, y 15 a nivel 3, de acuerdo con los niveles propuestos en la literatura [2]). Además, de los PMTs detectados con nivel 2 y 3 en las muestras, 29 pudieron ser confirmados con un nivel de confianza adicional, utilizando la collision cross section (CCS) obtenido por IM-HRMS. Los compuestos encontrados con mayor frecuencia (>70%) fueron el ácido p-cumensulfónico y la 1,3-di-o-tolylguanidina, y los fármacos, N-desmetilvenlafaxina, tapentadol y tramadol. Actualmente se están desarrollando métodos cuantitativos para los compuestos más prevalentes.

#### Agradecimientos:

Financiado por la Agencia Estatal de Investigación–MCIN/AEI/10.13039/501100011033 y la Unión Europea a través de los fondos NextGeneration/PRTR (refs. TED2021-129200B-C41, TED2021-129200B-C42 y TED2021-129200B-C43), y la Xunta de Galicia (ED431C 2021/06). L. Bijlsma agradece el contrato RYC2020-028936-I financiado por MCIN/AEI/ 10.13039/501100011033 y por “ESF Investing in your future”.

[1] R. Montes et al., *Molecules* (2022) 27:3915 [2] E. L. Schymanski et al., *Anal Bioanal Chem* (2015) 407:6237–6255



## P163

### **Determinación enantioselectiva de los principales antibióticos fluoroquinolonas y sus metabolitos en aguas residuales y superficiales.**

Carmen Mejías Padilla, Noelia García Criado, Juan Luis Santos Morcillo, Julia Martín Bueno, Irene Aparicio Gómez, Esteban Alonso Álvarez  
*Universidad de Sevilla, Sevilla, España*

#### **Resumen**

Existe una creciente preocupación por el uso excesivo y el mal uso de los antibióticos, ya que están resultando en un incremento en la resistencia a los antibióticos que amenaza el tratamiento de infecciones. Las fluoroquinolonas son antibióticos de preocupación ambiental. Han sido incluidos en la lista de antimicrobianos de importancia crítica por la Organización Mundial de la Salud y han sido incluidos en la lista de vigilancia de sustancias de la Unión Europea en el ámbito de la política de aguas. Algunas fluoroquinolonas son compuestos quirales. La quiralidad tiene un gran impacto en el medioambiente porque, aunque los procesos físicos y químicos afectan de la misma manera a ambos enantiómeros, pueden actuar de forma diferente con otras moléculas quirales, lo que puede dar lugar a diferentes comportamientos biológicos y toxicológicos [1]. Sin embargo, a pesar de que los métodos analíticos enantioselectivos son requeridos para una correcta evaluación del riesgo medioambiental, apenas se han descrito. En este trabajo, se ha desarrollado y validado un método analítico para la determinación enantioselectiva automatizada de fluoroquinolonas y sus metabolitos en muestras de aguas residuales y superficiales [2]. Las fluoroquinolonas objetivo se seleccionaron por su uso extendido en humanos (ciprofloxacina y ofloxacina (OFL)) o en veterinaria (flumequina (FLU)). El método analítico se basó en la extracción en fase sólida en línea con cromatografía de líquidos acoplada a espectrometría de masas en tándem (LC-MS/MS). Los valores de exactitud oscilaron entre el 61,4 a 122% en aguas residuales y de 73,4 a 119% en aguas superficiales. La precisión, expresada como desviación estándar relativa, fue inferior al 13,6% en todos los compuestos en todas las matrices. Los límites de cuantificación del método de cuantificación del método se situaron entre 0,2 y 50 ng/L para todos los compuestos en aguas residuales y aguas superficiales. La aplicación del método en muestras reveló la transformación enantioselectiva de (S)-OFL en (R)-OFL en aguas superficial y la prevalencia del metabolito OH-FLU D2 con respecto a OH-FLU D1 en aguas residuales influentes.

#### **Agradecimientos**

Estos resultados son parte del proyecto I+D+i PID2020-117641RB-I00, financiado por MICIU/AEI/10.13039/501100011033, del proyecto US-1254283 financiado por la Junta de Andalucía, Consejería de Economía y Conocimiento y del contrato predoctoral de Carmen Mejías VIPPIT-US2021II.2A de la Universidad de Sevilla.

#### **Referencias**

[1] C. Mejías, M. Arenas, J. Martín, et al. *Rev Environ Contam Toxicol.* 260 (2022) 3. [2] C. Mejías, J.L. Santos, J. Martín, et al. *Microchem J.* 185 (2023) 108217.



## P164

### **Desarrollo de un método para la detección (screening) de contaminantes persistentes, móviles y tóxicos en muestras de polvo doméstico**

Mauricio Perin , Sandra Méndez Martínez, Maria Del Rosario Rodil Rodriguez, Rosa Maria Montes Goyanes, José Benito Quintana Alvarez  
*Instituto de Investigación del Medio Acuático para una Salud Global (iARCUS), Universidad de Santiago de Compostela, Santiago De Compostela, España*

#### **Resumen**

Las sustancias persistentes, móviles y tóxicas (PMTs) están convirtiéndose en un motivo de preocupación en el medio ambiente debido a sus propiedades intrínsecas, que hacen posible su dispersión en el medio acuático [1,2]. El proyecto NePMTune ([www.nepmtune.webnode.es](http://www.nepmtune.webnode.es)) tiene como objetivo identificar y estudiar la presencia de PMTs en diferentes matrices, entre ellas el polvo urbano y doméstico, así como, proponer estrategias para su mitigación. Por ello, en este trabajo se estudiaron las condiciones de extracción de polvo doméstico con diferentes sustancias PMT modelo con diferentes propiedades físico-químicas. Para la optimización del proceso de extracción, se utilizaron muestras de polvo doméstico adicionadas con 28 PMTs (incluyendo fármacos, plaguicidas, aditivos plásticos, etc.) empleando extracción asistida de ultrasonidos (USAE). Se probaron distintas composiciones del disolvente de extracción (mezclas de agua y metanol) y pH (ácido, básico y neutro) con el fin de obtener la máxima eficacia de extracción de los compuestos. Finalmente, la USAE consistió en pesar 1 g de polvo doméstico en tubo falcon de 50 mL, luego se agregaron 10 mL de disolución de extracción (metanol, 2% de ácido fórmico). La mezcla se ultrasonizó durante 30 minutos y luego se centrifugó a 2500 rpm durante 15 minutos. Se recolectaron 7 mL de sobrenadante, se evaporó a sequedad y, finalmente, el extracto se reconstituyó en 0.7 mL de agua:acetonitrilo (1:1). Posteriormente, se aplicó esta metodología para el screening de PMTs en diferentes muestras de polvo empleando detección con cromatografía líquida de modo mixto acoplada a espectrometría de masas de cuadrupolo de tiempo de vuelo (MMLC-QTOF-MS). Para ello, se utilizó una biblioteca de sospechosos, que contiene aproximadamente 1100 compuestos priorizados en base a criterios de toxicidad (T), persistencia (P) y movilidad (M). Los resultados preliminares han permitido la identificación de compuestos tales como la 1,3-di-o-tolilguanidina, la 1,3-difenilguanidina, o la N,N-dietil-meta-toluamida (DEET), entre otros.

#### **Agradecimientos**

Financiado por la Agencia Estatal de Investigación–MCIN/AEI/10.13039/501100011033 y la Unión Europea a través de los fondos NextGeneration/PRTR (refs. TED2021-129200B-C41), y la Xunta de Galicia (ED431C 2021/06).

- [1] T. Reemtsma et al., *Environmental Science and Technology* 50 (2016) 10308–10315.  
[2] R. Montes et al., *Science of the Total Environment* 885 (2023) 163737.



## P165

### Determinación de la calidad de los alimentos mediante el análisis de la ruta de degradación del ATP

Javier Camacho Aguayo<sup>1,2</sup>, Mario Domínguez García<sup>1</sup>, María Sola<sup>1</sup>, Carmen Adiego<sup>1</sup>,

Susana de Marcos<sup>1,2</sup>, Javier Galban<sup>1,2</sup>

1. Universidad de Zaragoza, Zaragoza, España

2. Instituto de Nanociencia y Materiales de Aragón (INMA), ZARAGOZA, España

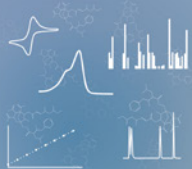
#### Resumen

Los componentes bioquímicos esenciales de los animales destinados al consumo humano comienzan inevitablemente a degradarse desde el inicio del procesamiento, lo que se traduce no solo en una pérdida de calidad sino también en una posible causa de problemas de salud a quienes los consumen. Es por ello que se necesitan métodos de análisis rápido y sencillos para establecer la frescura de los alimentos y su idoneidad para el consumo. La concentración de nucleótidos es uno de los parámetros que puede emplearse como indicador de calidad de estos. En concreto, la presencia de metabolitos que se obtienen por degradación del ATP en el músculo a través de una secuencia de reacciones enzimáticas en cascada: ATP-->Inosina Monofosfato--Fosfatasa Alcalina--> Inosina --Purina Nucleósido Fosforilasa--> Hipoxantina --Xantina Oxidasa--> Xantina--Xantina Oxidasa--> A. Úrico. La determinación de los intermedios: Inosina Monofosfato (IMP) o Inosina (Ino); o de los productos finales: Hipoxantina (Hx) y Xantina (Xa), permiten determinar la fase y estado de estos alimentos. Para ello, utilizando las propias enzimas de la ruta de degradación se ha desarrollado una metodología que permite la cuantificación de cada uno de analitos en un rango de 1 a 20  $\mu\text{M}$  (DER=3.6% n=3) de una forma sencilla y rápida empleando el acoplamiento de la reacción indicadora HRP-colorante:  $\text{H}_2\text{O}_2 + \text{HRP} + \text{Amplex Red} \rightarrow \text{Amplex RedRed}$  También se ha estudiado la formación in-situ de CuNMs durante la reacción utilizando las propiedades reductoras de estos analitos obteniendo resultados prometedores.

#### Agradecimientos

Este trabajo forma parte del proyecto de I+D+i PID2022-139235OB-I00 financiado por MICIN/AEI/10.13039/501100011033 y por FEDER "Una manera de hacer Europa", y las ayudas del Gobierno de Aragón a los grupos de investigación E-25\_23R





## P166

### Profiling of olive oil phytosterols by liquid chromatography/time-of-flight mass spectrometry using different atmospheric-pressure ionization sources

Juan Francisco Garcia Reyes, Irene Caño Carrillo, Cristina Ruiz Samblás, Bienvenida Gilbert López  
*Universidad de Jaén, Jaén, España*

#### Resumen

The International Olive Oil Council (IOC) has developed different analytical methods to assess the quality of olive oils and to detect fraudulent activities. Among these methods, the analysis of sterols is a procedure based on separating the unsaponifiable fraction by thin-layer chromatography or liquid chromatography (HPLC), followed by a derivatization step and the subsequent analysis of the sterol fraction by gas chromatography (GC). The whole process is tedious and time-consuming. The aim of this work is the development of a straightforward LC-MS method for sterol and triterpenic alcohol analysis, as an alternative to the use of the official method. To this end, a total of 9 sterols and 4 triterpenic alcohols were selected for analysis. The main difficulty faced was the co-elution of several isobaric species: fucosterol/ $\Delta$ -5-avenasterol, uvaol/erythrodiol,  $\beta$ -sitosterol/ $\Delta$ -7-stigmastenol. Therefore, seven columns with different stationary phases were evaluated using several combinations of mobile phases. Among all the options tested, the results obtained with three columns should be highlighted; each of them was able to solve one of the coelutions produced: a pentafluorophenyl (PFP) column allowed to differentiate between fucosterol and  $\Delta$ -5-avenasterol, an SB-Phenyl column separated erythrodiol and uvaol, and  $\beta$ -sitosterol and  $\Delta$ -7-stigmastenol were resolved with a Poroshell C18 column. The column selection was carried out considering the criteria established by the regulation used to discriminate some oil varieties from others. This regulation establishes that the combined content of fucosterol and  $\Delta$ -5-avenasterol constitutes part of the so-called apparent  $\beta$ -sitosterol. It also sets the erythrodiol and uvaol content as the sum of both compounds. For this reason, the Poroshell C18 column was selected as it was able to separate  $\Delta$ -7-stigmastenol and  $\beta$ -sitosterol, the latter being one of the most abundant sterols in olive oil. For LC-MS analysis, APCI was selected as ionization source because of the non-polar character of the compounds. An alternative source based on dielectric barrier discharge ionization (DBDI) was also proposed as an alternative to conventional sources. Differences in the sterol profile of different oils (virgin olive oil, olive pomace oil, sunflower oil) could be observed. Further research will involve the implementation of chemometric techniques to figure out adulterations in olive oil according to sterol content.



## P167

### Test colorimétrico enzimático para la determinación de atropina utilizando un smartphone

Mario Domínguez García, Susana de Marcos, Javier Galbán, Isabel Sanz-Vicente  
*Universidad de Zaragoza, Zaragoza, España*

#### Resumen

Los alcaloides tropánicos son compuestos presentes en un gran número de alimentos y cereales. Los más estudiados, debido a sus aplicaciones en la industria farmacéutica, ya que actúan como inhibidores no selectivos de los receptores muscarínicos de la acetilcolina, son la atropina y la escopolamina. Sin embargo, debido a sus efectos adversos para la salud, se consideran sustancias indeseables en alimentos y piensos, por lo que la Autoridad Europea de Seguridad Alimentaria (EFSA) establece una dosis máxima de referencia de 0,016 mg/kg-día expresada como la suma de atropina y escopolamina. Los métodos analíticos utilizados actualmente para la determinación de estos compuestos basan en el uso de técnicas de separación acopladas a espectrometría de masas. Estas técnicas, aunque proporcionan resultados satisfactorios, son procedimientos lentos por lo que uno de los retos planteados es el desarrollo de métodos de respuesta rápida que requieran un mínimo tratamiento de la muestra. En este trabajo se presenta un método rápido para la determinación enzimática de atropina, ya que se ha demostrado, por primera vez, que la determinación de atropina puede realizarse acoplando la reacción enzimática de tropina con Tropinona Reductasa a una reacción indicadora.  $\text{Atropina} + \text{NaOH} \rightarrow \text{Tropina} + \text{NAD} + \text{Tropinona}$   $\text{Reductasa} \rightarrow \text{NADH} + \text{Tropinona}$   $\text{NADH} + \text{Diaforasa} + \text{INT} \rightarrow \text{INTred}$  En esta reacción, el NADH formado reduce el colorante Cloruro de Iodonitrotetrazolio (INT) a una especie rojiza, cuyas coordenadas RGB, obtenidas con un smartphone, pueden correlacionarse con la concentración de atropina. Las tiras reactivas se han preparado inmovilizando el NAD, el colorante y la Diaforasa en un soporte de celulosa de fabricación casera. Además, se han abordado eficazmente los problemas comunes asociados a las medidas con teléfonos inteligentes, como la influencia de la iluminación y las variaciones en los modelos de dispositivos móviles. Se ha demostrado que utilizando la coordenada G, el ensayo muestra una respuesta lineal con la concentración de atropina que oscila entre  $6 \cdot 10^{-6}$  M y  $1 \cdot 10^{-4}$  M con una RSD del 1,4% ( $n=5$ ,  $[\text{Atropina}] = 10^{-4}$  M). El método se ha aplicado a la determinación de atropina en muestras de trigo sarraceno y alimentos infantiles con buenos resultados.

#### Agradecimientos

Este trabajo forma parte de los proyectos PID2019-105408GB-I00 y PID2022-139235OB-I00 financiados por MCIN/AEI /10.13039/501100011033/ y por FEDER "Una manera de hacer Europa", y las ayudas del Gobierno de Aragón a los grupos de investigación E-25\_23R.



## P168

### Estudio ecotoxicológico de un nanomaterial de plata usado como aditivo en piensos mediante técnicas basadas en la detección de células individuales

Maria Sierra Jiménez García-Alcalá<sup>1</sup>, Mariam Bakir Laso<sup>1</sup>, Francisco Laborda García<sup>1</sup>, Vera I. Slaveykova<sup>2</sup>

1. Grupo de Espectroscopía Analítica y Sensores (GEAS), Instituto de Ciencias Ambientales (IUCA) Universidad de Zaragoza, Zaragoza, España

2. Environmental Biogeochemistry and Ecotoxicology, Department F.-A. Forel for Environmental and Aquatic Sciences, Faculty of Sciences, University of Geneva, Ginebra, Suiza

#### Resumen

La utilización de la plata en sus diversas formas, incluyendo iones plata ( $\text{Ag}^+$ ) y nanopartículas de plata (AgNPs) es una alternativa prometedora al uso tradicional de antibióticos ampliamente utilizados como aditivos alimenticios en la ganadería, pudiendo además contribuir al descenso de la resistencia a los antibióticos. El presente estudio tiene como objetivo evaluar la ecotoxicidad potencial de un nanomaterial basado en plata (Ag-caolín), el pienso suplementado con el nanomaterial y las heces de cerdos alimentados con dicho pienso, ya que estas últimas son las que finalmente llegan al medio ambiente. Para ello, se expuso al alga verde *Raphidocellis subcapitata* a distintas diluciones de extractos acuosos de Ag-caolín, pienso suplementado y heces, además de disoluciones de  $\text{Ag}^+$  y AgNPs como controles a efectos comparativos, durante 72 h. Dada la complejidad de los materiales, se utilizaron técnicas de análisis de células individuales. Los cambios en el número de células y la fluorescencia de la clorofila se estudiaron mediante citometría de flujo (FCM), mientras que la acumulación de plata en las células expuestas se realizó mediante espectrometría de masas con plasma de acoplamiento inductivo en modo de detección de células individuales (SC-ICP-MS). Los cambios en la morfología celular se observaron mediante un lector multimodo de imágenes celulares. Los resultados revelaron que incluso a bajas concentraciones de Ag-caolín ( $10 \mu\text{g L}^{-1}$ ) se observó una pérdida de fluorescencia clorofílica tras 48 h de exposición. Además, se observó una inhibición completa del crecimiento en presencia de este material, similar a los resultados obtenidos para la exposición a  $\text{Ag}^+$ . En el caso del pienso suplementado, se requirieron  $50 \mu\text{g L}^{-1}$  para una inhibición completa del crecimiento. Sin embargo, el comportamiento fue diferente para las heces. La inhibición fue muy baja para  $50 \mu\text{g L}^{-1}$ , ya que la mayor parte de la plata liberada lo hizo en formas más estables de plata ( $\text{Ag}_2\text{S}$ ,  $\text{AgCl}$ ...), que han demostrado ser menos tóxicas que la  $\text{Ag}^+$ . La absorción de plata por las células se confirmó con todas las muestras mediante SC-ICP-MS. Estos resultados, ponen de manifiesto que el uso del nanomaterial Ag-caolín como suplemento en piensos va a tener un bajo impacto medioambiental.

#### Agradecimientos

Este trabajo ha sido subvencionado por el Ministerio de Ciencia e Innovación y el Fondo Europeo de Desarrollo Regional, proyecto RTI2018-096111-B-I00 (MICINN/FEDER), el Gobierno de Aragón (E29\_23R), el proyecto EFA 183/16/OUTBIOTICS ,programa Interreg-POCTEFA 2014-2020 financiado por el fondo FEDER y la Fundación Bancaria Ibercaja-CAI (CB 11/22).



## P169

### Hacia Un modelo global para la detección de la enfermedad renal diabética utilizando ATR-FTIR

Víctor Navarro Esteve<sup>1</sup>, Ángel Sánchez Illana<sup>1</sup>, Jose Portolés Pérez<sup>2</sup>, Maria Marqués Vidas<sup>2</sup>, Bayden Wood<sup>3</sup>, Iris Viejo Bolano<sup>4</sup>, Francisco Valero Mena<sup>4</sup>, Antonio J. Sánchez López<sup>5</sup>, David Pérez Guaita<sup>1</sup>

1. *Departamento de Química Analítica Universitat de València, Burjassot, España*

2. *Hospital Universitario Puerta de Hierro, Majadahonda, España*

3. *Centre for Biospectroscopy, Monash University, Clayton, Australia*

4. *Hospital Universitario La Fe, Valencia, España*

5. *Biobanco HUPHM / IDIPHISA, Majadahonda, España*

#### Resumen

La presencia de microproteinuria (i.e. >30 mg/l de proteína) se considera un marcador temprano de la enfermedad renal diabética (ERD). Sin embargo, las herramientas de detección existentes muestran una especificidad y sensibilidad insuficientes. Como alternativa, recientemente hemos desarrollado una nueva metodología asumible económicamente basada en la predicción quimiométrica de la microalbuminuria a partir del espectro infrarrojo (IR) de extractos de proteínas de orina [1]. Este enfoque requiere la adquisición de un conjunto sustancial de muestras para la calibración y validación del modelo bajo varios parámetros experimentales. Nuestro objetivo es evaluar la capacidad de esta metodología para establecer modelos robustos para el diagnóstico de ERD. Para ello, se compararon dos conjuntos de datos obtenidos en diferentes laboratorios por diferente personal. Uno de ellos, adquirido en la Universidad de Monash (Melbourne, Australia) estaba compuesto por 155 muestras de ERD y 22 muestras control masculinas de una recolección de orina de 24 horas. El otro, adquirido en la Universitat de València, estaba compuesto por 35 muestras de ERD y 27 muestras control de orina puntual equilibradas por género. Las proteínas fueron preconcentradas usando filtros de celulosa regenerada o de polietersulfona de 10 kDa y se depositaron diferentes volúmenes sobre el cristal ATR de dos espectrómetros FTIR distintos. Primero, el modelo realizado con el conjunto australiano se validó con las muestras españolas, obteniendo valores de sensibilidad y especificidad del 82.9% y 88.5%, respectivamente. Estos valores mejoraron al 96.8% y 100.0% cuando se calibró y probó un modelo global con un conjunto combinado que integraba muestras de ambos países. El vector de regresión ilustró que las características discriminativas concordaban con el perfil espectral de la proteína. En general, los modelos globales demostraron superar a aquellos obtenidos utilizando muestras del mismo país. La metodología ha demostrado ser robusta, minimizando los efectos de la variabilidad de la muestra y del instrumento. Esto representa un paso crucial hacia su traslación para el diagnóstico cualitativo de ERD en el mundo real.

[1] Z. Richardson, A. Kincses, E. Ekinci, D. Perez-Guaita, K. Jandeleit-Dahm, B.R. Wood, ATR-FTIR Spectroscopy for Early Detection of Diabetic Kidney Disease, *Analysis & Sensing* 3 (2023) e202200094. <https://doi.org/10.1002/anse.202200094>.

**Agradecimientos** V.NE agradece la ayuda PRE2021-098833 financiada por MICIN/AEI/10.13039/501100011033 y el FSE+. Ayuda JDC2022-049354-I financiada por MCIN/AEI/10.13039/501100011033 y por la "Unión Europea NextGenerationEU/PRTR". Ayuda RYC2019-026556-I y PID2020-119326RA-I00 financiada por MCIN/AEI/10.13039/501100011033. Estudio financiado por el Instituto de Salud Carlos III (ISCIII) mediante el proyecto PI23/00135 y cofinanciado por la Unión Europea.



## P170

### Nuevo método de determinación de antimonio en aguas contaminadas mediante GFAAS

Andrea Muñoz García, Juan Carlos García Mesa, Irene Morales Benítez,  
Claudia Aguilar López, María Del Mar López Guerrero, Elisa Isabel Vereda Alonso  
*Universidad de Málaga, Málaga, España*

#### Resumen

El antimonio (Sb) es un metaloide naturalmente asociado con sulfuros en yacimientos hidrotermales y sedimentos. Es ampliamente utilizado en diversas industrias, lo cual explica su presencia en residuos industriales y aguas contaminadas. Sus principales estados de oxidación son (III) y (V), siendo el Sb(III) mucho más tóxico debido a su carcinogenicidad. La Unión Europea (UE) especifica un límite de 5  $\mu\text{g/L}$  para el Sb en agua, mientras que la Organización Mundial de la Salud (OMS) establece un límite máximo de 20  $\mu\text{g/L}$  para la forma Sb(III) en agua potable. En este trabajo se ha desarrollado un método para la cuantificación de antimonio presente en muestras reales de aguas residuales y/o potables, mediante una preconcentración de las muestras por extracción en fase sólida magnética (MSPE). Para ello se ha sintetizado, caracterizado y utilizando como material adsorbente un nuevo óxido de grafeno magnético funcionalizado, M@GONIO. Dicho material posee en su estructura grupos amonio cuaternarios, lo que la hace selectiva a las especies de antimonio. Se han estudiado diversas variables químicas (pH, concentración de eluyente) e instrumentales (programa de horno, caudales) mediante diseños de experimentos uni y multivariantes. Como sistema de detección se empleó una generación de hidruros acoplada a la Espectroscopía de Absorción Atómica con horno de grafito (GFAAS).



## P171

### Uso de TXRF y $\mu$ -XRF en estudios de laboratorio relacionados con la presencia y adsorción de metales en (micro)plásticos

EVA Margui Garbulosa<sup>1</sup>, ROMAN Lehner<sup>2</sup>, IGNACIO Queralt Mitjans<sup>3</sup>

1. UNIVERSIDAD DE GIRONA, Girona, España

2. Sail & Explore Association, Bern, Suiza

3. IDAEA-CSIC, Barcelona, España

#### Resumen

La presencia de micro-plásticos en el océano se ha convertido en un problema emergente de preocupación internacional en los últimos años. Desde un punto de vista analítico, es de especial interés contar con técnicas eficientes para identificar el tipo de polímero, pero también obtener información sobre su composición elemental. Algunos metales y compuestos organometálicos están presentes en los catalizadores empleados en la polimerización o se añaden a la matriz de polímero para optimizar las propiedades o darles color. Algunos de estos aditivos no están químicamente ligados a las moléculas de polímero, y pueden filtrarse al medio ambiente y ser una fuente de contaminación. Asimismo, la presencia de micro-plásticos en entornos acuáticos ha suscitado preocupación sobre la posible acumulación de contaminantes en su superficie. En este trabajo, se evalúa el potencial de la técnica de micro fluorescencia de rayos X ( $\mu$ -XRF) y la técnica de fluorescencia de rayos X por reflexión total (TXRF) en estudios relacionados con la presencia y adsorción/desorción de metales en micro-plásticos. Por un lado, se desarrolló un método de  $\mu$ -XRF para el análisis multielemental de muestras de plástico (polímeros: PE, PS, PP, PET, PC). El procedimiento de calibración se estableció empleando un conjunto de tres materiales de referencia certificados y varios patrones de calibración secundarios, previamente caracterizados por digestión y análisis mediante ICP-OES. La evaluación espectral se realizó mediante modelo de corrección de parámetros fundamentales, para compensar variaciones de grosor de las muestras. Los resultados mostraron que con el método de  $\mu$ -XRF era posible la determinación de la mayoría de los elementos presentes en plásticos, con límites de cuantificación en el rango de 10-50 mg/kg y sin tratamiento alguno de la muestra. El método se aplicó al análisis multielemental de un conjunto de (micro)plásticos recolectados en el océano Atlántico (Azores) y el mar Mediterráneo. Los resultados mostraron la presencia de metales relevantes para el medio ambiente como Pb y Cr en algunas de las muestras analizadas. Por otro lado, se desarrolló también un método de TXRF para la determinación del contenido de metales en muestras líquidas obtenidas en estudios de adsorción y desorción de metales en microplásticos comerciales. Los resultados se compararon con los obtenidos mediante ICP-OES e ICP-MS. Se encontró que la adsorción de metales en microplásticos depende mayoritariamente de la matriz de plástico y del tipo de metal investigado.

#### Agradecimientos

El trabajo se enmarca en las tareas del proyecto PID2021-127326OB-I00, financiado por MCIN/AEI/10.13039/501100011033.



## P172

### Determination of synthetic cathinones in oral fluids using a molecular imprinting polymer and gas chromatography-mass spectrometry

Francesc A. Esteve Turrillas, Paloma Arjona Mudarra, Miguel Muñoz Bartual, Salvador Garrigues  
*Department of Analytical Chemistry, University of Valencia, Burjassot, España*

#### Resumen

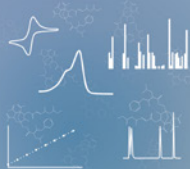
Analytical procedures for toxicological analysis of new psychoactive substances in biological fluids are mainly based on gas and liquid chromatography coupled with mass spectrometry methodologies, which usually requires a sample pre-treatment based on liquid-liquid microextraction or solid-phase extraction (SPE) [1]. Molecularly imprinted polymers (MIP) are synthetic elements of recognition capable of interacting with a target analyte to obtain selective SPE sorbents [2]. In this study, MIPs were produced by polymerization by precipitation, adjusting polymerization reagents and its ratio to obtain the highest selectivity, evaluated by the imprinting factor.  $\alpha$ -PHiP was chosen as template, methacrylic acid as monomer, and ethylene glycol dimethacrylate as cross-linker in a 1:4:100 ratio, respectively. Acetonitrile and azobisisobutyronitrile were employed as porogen and initiator, providing spherical particles with an average diameter of 1.5-2.0  $\mu\text{m}$ , compatible with standard SPE procedures. Imprinted and non-imprinted polymers were characterized by attenuated total reflectance Fourier-transform infrared spectroscopy (ATR-FTIR) and scanning electron microscopy (SEM). The synthesized MIP sorbent has been employed in the selective SPE of seven synthetic cathinones:  $\alpha$ -PVP,  $\alpha$ -PHiP, 4-Cl- $\alpha$ -PVP, MPHP, PV9, 3,4-MDPHP, and TH-PVP. The extraction efficiency of the developed MIPs was investigated by the evaluation of several parameters such as: sorbent amount, sample pH, cleaning solution, and nature and volume of elution solvent. Synthetic cathinones determination was carried out by gas chromatography-mass spectrometry determination (GC-MS), using  $\alpha$ -PVP-D8 as internal standard and providing a sample limit of quantification of 5  $\mu\text{g L}^{-1}$ . Recoveries were performed in spiked oral fluids providing quantitative recoveries and high precision with relative standard deviation values lower than 20 %. The proposed MIP sorbent allowed the high selective extraction of synthetic cathinones from oral fluids, which ensures the correct identification of the substance of abuse consumed.

#### Acknowledgements

Authors gratefully acknowledge the financial support of the project PID2019-110788GB-I00 funded by MCIN/AEI/10.13039/501100011033 and Project PND2022I030 funded by Delegación del Gobierno Español para el Plan Nacional sobre Drogas

#### References

- [1] F.A. Esteve-Turrillas, S. Armenta, M. de la Guardia, Sample preparation strategies for the determination of psychoactive substances in biological fluids, *J. Chromatogr. A* 1633 (2020) 461615.
- [2] F.M. Suzaei, S.M. Daryanavard, A. Abdel-Rehim, et al., *Chem. Pap.* 77 (2023) 619–655.



## P173

### **Desarrollo y validación de un método no separativo para la determinación simultánea de nucleósidos metilados en orina mediante inyección directa en un espectrómetro de masas en tándem (MS/MS) con triple cuadrupolo.**

Myriam Bustamante Rangel, Carmen Mena Iglesias, Diego García Gómez, María Teresa Fernández Del Campo García, José Luis Pérez Pavón  
*Universidad de Salamanca, Salamanca, España*

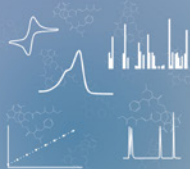
#### **Resumen**

Se ha desarrollado y validado un método rápido basado en espectrometría de masas en tándem (MS/MS) sin separación cromatográfica para la determinación simultánea de nucleósidos metilados en orina. Los compuestos estudiados son 1-metiladenosina, 1-metilguanosina, 1-metilinosina, 2'-O-metilcitidina y 2'-O-metilguanosina. La inyección directa en el espectrómetro de masas genera una única señal de conjunto, a partir de la cual se realiza la identificación y cuantificación utilizando dos transiciones propias de cada compuesto. Para la confirmación de los resultados cuantitativos se ha desarrollado un método de cromatografía líquida de interacciones hidrofílicas acoplada a espectrometría de masas en tándem (HILIC-MS/MS) con una fase estacionaria de tipo doblemente iónica. El tratamiento realizado a las muestras de orina es sencillo, consistiendo únicamente en una centrifugación y posterior dilución en agua. Esto hace que el tiempo total de análisis sea muy corto, lo que supone una notable ventaja respecto a métodos cromatográficos descritos. La validación se llevó a cabo en orina natural, con límites de cuantificación entre 14 y 80  $\mu\text{g L}^{-1}$ . La precisión se evaluó en términos de reproducibilidad y repetibilidad, obteniendo valores de desviación estándar relativa inferiores a 19 % y 9 %, respectivamente. Se confirmó la influencia de la matriz, por lo que la cuantificación se llevó a cabo utilizando el método de adición estándar de un punto. Se realizaron estudios de recuperación, encontrándose valores entre 80 y 120 %. Para demostrar la aplicabilidad del método se determinaron los analitos seleccionados en la orina de voluntarios sanos utilizando ambos métodos: no separativo y separativo. Se obtuvieron resultados comparables, lo que demuestra que la metodología no separativa aquí propuesta es adecuada para un análisis rápido y confiable biomarcadores endógenos en este tipo de muestras.

#### **Financiación:**

Ministerio de Economía y Competitividad de España (Proyecto No. PID2021-127679NB-I00).





## P174

### **extracción, preconcentración y determinación de arsénico en agua potable mediante GFAAS**

Álvaro Doblado Onieva, Irene Morales Benítez, Irene Sánchez Trujillo, María Del Mar López Guerrero,  
Elisa Isabel Vereda Alonso

*Dpto. Química Analítica, Facultad de Ciencias, Universidad de Málaga, Málaga, España*

#### **Resumen**

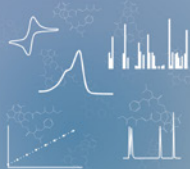
El arsénico, un potente veneno natural y uno de los principales contaminantes medioambientales, continúa siendo objeto de estudio a nivel mundial debido a su gran impacto negativo que presenta para la salud humana y el medioambiente [1], estableciendo por ello, la Organización Mundial de la Salud, un consumo máximo diario en  $10 \mu\text{g L}^{-1}$  [2]. Por ello la importancia de desarrollar nuevos métodos que sean capaces de determinar concentraciones cada vez más bajas, de forma fácil y rápida. La extracción magnética en fase sólida (MSPE) es una variante de la extracción en fase sólida que presenta ventajas como: rapidez, facilidad de uso, automatización y se pueden conseguir elevados factores de preconcentración, aumentando así la selectividad, sensibilidad y precisión del método. En este trabajo, se presenta un método de extracción magnética en fase sólida con un sistema de generación de hidruros acoplado a espectroscopía de absorción atómica de horno de grafito (MSPE-HG-GFAAS). Este método se basa en la retención del arsénico en un reactor anudado relleno con un nuevo material basado en nanopartículas magnéticas (MNP) acopladas a óxido de grafeno (GO) funcionalizado con grupos amonio cuaternarios (M@GONIO). Se ha llevado a cabo la optimización de las variables físicas y químicas obteniendo un elevado rendimiento por muestra,  $10,6 \text{ h}^{-1}$ . Por otro lado, el factor de concentración obtenido fue de 2,5. Este nuevo nanomaterial es un prometedor absorbente de aniones, como se ha podido ver en este trabajo con especies aniónicas como son las especies de arsénico.

#### **Agradecimientos**

Los autores agradecen al Ministerio de Ciencia e Innovación de España, Proyecto PID2021-126794OB I00, al Plan Propio de la Universidad de Málaga Proyecto (B4-2023\_19 y CEI-MAR por apoyar económicamente este estudio.

#### **Referencias**

[1] J. R. Meliker and J. O. Nriagu, "Arsenic," in *International Encyclopedia of Public Health*, Elsevier, 2008, pp. 233–238. doi: 10.1016/B978-012373960-5.00295-1. [2] E. Terlecka, "Arsenic Speciation Analysis in Water Samples: A Review of The Hyphenated Techniques," *Environ Monit Assess*, vol. 107, no. 1–3, pp. 259–284, Aug. 2005, doi: 10.1007/s10661-005-3109-z.



## P175

### Control de calidad y seguridad alimentaria basado en la detección óptica de aminas biogénicas en alimentos

Inmaculada Ortiz Gómez, Candela Melendreras, Pablo Álvarez García, Elena Lastra Bengochea, Francisco Javier García Alonso, Jose Manuel Costa Fernández, Ana Soldado  
*Universidad de Oviedo, Oviedo, España*

#### Resumen

Las aminas biogénicas son pequeñas moléculas orgánicas que surgen como resultado de la descarboxilación enzimática de aminoácidos o la aminación y transaminación de aldehídos y cetonas. En alimentos frescos, la concentración de aminas biogénicas aumenta significativamente si estos no se almacenan correctamente por lo que se emplean como marcadores en aplicaciones de calidad y seguridad alimentaria [1]. En este trabajo se ha diseñado una membrana sensora basada en papel que contiene inmovilizado como elemento de reconocimiento un metal organic framework (MOF) de cobre sensible a aminas biogénicas. El MOF inmovilizado en papel presenta un color verde característico y una emisión de fluorescencia a 525 nm. En presencia de bajas concentraciones de amina biogénica gas, el MOF cambia de color de verde a marrón siendo este cambio de color proporcional a la concentración de amina gaseosa. Además, la intensidad de fluorescencia del MOF disminuye considerablemente tras exponer los discos de celulosa a pequeñas cantidades de amina volátil. La membrana sensora desarrollada muestra una respuesta rápida a la presencia de aminas volátiles con gran sensibilidad bajo diferentes condiciones de temperatura y humedad siendo un método muy valioso para evaluar la frescura de los alimentos y salvaguardar la seguridad alimentaria. La cuantificación colorimétrica de aminas biogénicas en alimentos es posible mediante análisis de color de una fotografía de la membrana sensora tras su exposición a aminas biogénicas [2]. Los resultados obtenidos de este trabajo mostraron un buen rango lineal y una alta sensibilidad a la presencia de vapores de cadaverina, putrescina, dimetilamina, etanolamina, metilamina y trimetilamina. Además, la membrana sensora desarrollada se aplicó con éxito para monitorizar en tiempo real el deterioro de muestras de pescado sin ningún tratamiento previo de la muestra pudiéndose utilizar ésta como etiqueta inteligente para el envasado de alimentos.

[1] M.D. Allendorf, et al. *Chem. Soc. Rev.* 38 (2009) 1330–1352. [2] K. Cantrell, et al. *Anal. Chem.* (2010), 531-542.

Los autores agradecen al Ministerio de Ciencia e Innovación, proyectos Ref. PID2020-117282RB-I00 y PID2022-142323NB-I00, financiados por MCIN/AEI/10.13039/501100011033/ y por «ERDF A way of making Europe. I. Ortiz-Gómez también agradece al Ministerio de Universidades MCIN/AEI/10.13039/501100011033 y a la Unión Europea «NextGenerationEU»/PRTR».



## P176

### El reto de desarrollar un método multirresiduo para 250 plaguicidas por cromatografía de gases-espectrometría de masas de alta resolución en leche de origen animal y vegetal

Marta Vargas Perez<sup>1</sup>, Osmar D. Prestes<sup>2</sup>, Roberto Romero<sup>1</sup>, Antonia Garrido Frenich<sup>1</sup>

1. Universidad de Almería, Almería, España

2. Universidade Federal de Santa Maria (UFSM), Santa Maria, Brasil

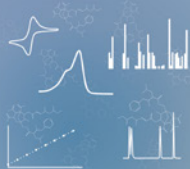
#### Resumen

La leche y sus productos derivados desempeñan un papel importante en la dieta por ser una fuente esencial de nutrientes. El uso de sustitutos vegetales de los productos lácteos, como bebidas de soja, coco y avena, ha aumentado en los últimos años debido a intolerancias, como a la lactosa, y a la preocupación de los consumidores por el impacto ambiental de la producción láctea. En este sentido, los plaguicidas, que son la principal herramienta para proteger los cultivos de plagas, pueden llegar a contaminar la leche. Sin embargo, los métodos disponibles en la actualidad para la extracción de plaguicidas implican, por lo general, técnicas de preparación de muestra que requieren mucho tiempo y múltiples etapas.

El propósito de este estudio ha sido desarrollar un método multirresiduo simplificado y robusto aplicable en leche de origen animal y vegetal. Para la extracción de los plaguicidas se aplicó y optimizó una versión modificada del método QuEChERS a fin de eliminar el elevado contenido proteico y de lípidos. Para ello se usó acetato de etilo acidificado, por su capacidad de precipitar proteínas y lípidos, a una temperatura de 0°C, por su poder de eliminación de los lípidos y una etapa de limpieza en un solo paso, utilizando el formato de placa de pocillos Enhanced Matrix Removal-Lipid (EMR-lipid). La determinación se realizó mediante cromatografía de gases acoplada a espectrometría de masas de alta resolución precisa (GC-Q-Orbitrap-MS). Como matrices representativas se seleccionaron leche de vaca, coco y formulación infantil, observando que la leche de vaca y formulación infantil presentaron un efecto matriz similar pero menor al presentado por la leche de coco. El método fue evaluado con éxito para 250 plaguicidas en leche de vaca siguiendo la guía SANTE 11312/2021, mostrando recuperaciones, precisión intradía e interdía aceptables. Los límites de detección y cuantificación del método fueron de 5 y 10 µg/L. Adicionalmente, las matrices de leche de coco y formulación infantil fueron verificadas. El método se aplicó con éxito a 30 muestras comerciales (leche entera, semi y desnatada, evaporada, fresca, enriquecida en omega 3, calcio, con y sin lactosa, soja, almendra, horchata), identificando el plaguicida fenazaquina en muestra de horchata a un nivel de concentración superior al límite máximo de residuos, mientras que en el resto no se encontraron plaguicidas por encima del límite de detección.

#### Agradecimientos:

Los autores agradecen al PPIT-UAL, Junta de Andalucía-FEDER 2021-2027. Programa: 54.A por su apoyo financiero.



## P177

### **Determinación de DNA de sésamo basado en el empleo de nanopartículas de oro funcionalizadas y un software de análisis de color**

Inmaculada Ortiz Gómez<sup>1</sup>, Pablo Llano Suarez<sup>1</sup>, Adrian Sanchez Visedo<sup>1</sup>, Marta Prado <sup>2</sup>, María Teresa Fernández Argüelles<sup>1</sup>, Jose Manuel Costa Fernández<sup>1</sup>, Ana Soldado <sup>1</sup>

1. *Universidad de Oviedo, Oviedo, España*

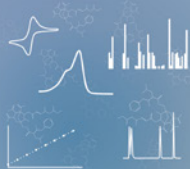
2. *International Iberian Nanotechnology Laboratory, Braga, Portugal*

#### **Resumen**

El sésamo es ampliamente utilizado en la cocina oriental, sin embargo, está emergiendo como uno de los alérgenos más comunes después del cacahuete. Esto hace necesario controlar las trazas y cantidades de sésamo presentes en los alimentos para minimizar la exposición de personas con alergia o intolerancia al sésamo [1]. Por lo tanto, se necesita un método simple y económico para verificar de manera rápida y precisa la presencia de sésamo en alimentos. En este trabajo presentamos un nuevo método colorimétrico basado en nanopartículas de oro bioconjugadas para la determinación de DNA de sésamo [2]. El sensor colorimétrico desarrollado presenta buena sensibilidad, especificidad, precisión y exactitud en la detección de DNA de sésamo. Para realizar una detección a simple vista de DNA de sésamo, se emplearon nanopartículas de oro (AuNPs), aprovechando las excelentes características optoelectrónicas que ofrecen estos nanomateriales. Además, se empleó un software de análisis de color para poder llevar a cabo la cuantificación de DNA de sésamo de forma rápida y sencilla sin necesidad de equipamiento de laboratorio específico mejorando por tanto las prestaciones analíticas de la detección. Este enfoque permitió el desarrollo de un método sensible, robusto y de bajo coste para la determinación de sésamo en productos alimenticios.

[1] A. Adatia, et al. *J. Asthma Allergy*, (2017), 141-151. [2] A. Sánchez-Visedo, et al. *Microchim. Acta*, (2020), 187-192.

Los autores agradecen al Ministerio de Ciencia e Innovación, proyectos Ref. PID2020-117282RB-I00 y PID2022-142323NB-I00, financiados por MCIN/AEI/10.13039/501100011033/ y por «ERDF A way of making Europe. I. Ortiz-Gómez también agradece al Ministerio de Universidades MCIN/AEI/10.13039/501100011033 y a la Unión Europea «NextGenerationEU»/PRTR».



## P178

### **Aplicación de la desorción térmica y la cromatografía de gases con detección mediante espectrometría de masas en tándem para la identificación y cuantificación de microplásticos en matrices ambientales**

Laura Martín Pozo, Juan Luis Santos, Julia Martín, Irene Aparicio, Esteban Alonso  
*Departamento de Química Analítica, Escuela Politécnica Superior, Universidad de Sevilla, Sevilla, España*

#### **Resumen**

La contaminación por plásticos es una seria preocupación ambiental. La creciente producción y el manejo inadecuado de estos materiales han resultado en la acumulación de microplásticos (partículas de menos de 5 mm) en ecosistemas acuáticos, terrestres y en los organismos que los habitan [1,2]. Por lo tanto, la identificación y cuantificación precisa de los microplásticos en muestras ambientales es crucial para comprender la magnitud del problema y desarrollar estrategias efectivas de mitigación. En este estudio se describe el desarrollo de un método analítico para el análisis cualitativo y cuantitativo de varios tipos de microplásticos comúnmente encontrados en muestras ambientales. Se utilizó la desorción térmica acoplada a cromatografía de gases con detección mediante espectrometría de masas en tándem (TDU-GC-MS/MS) para llevar a cabo la determinación. Se seleccionaron los compuestos más característicos resultantes de la desorción, iones precursores y sus productos, para cada tipo de polímero plástico. Además, se emplearon librerías para confirmar la identidad de los microplásticos detectados. El método mostró buena linealidad ( $\%R^2 > 98\%$  y  $\%Plof > 5\%$ ) y buena sensibilidad ( $LOQ < 50\mu g$ ) para los microplásticos estudiados. El método desarrollado es aplicable para el análisis de microplásticos en una amplia variedad de muestras ambientales complejas, como agua de mar, arena y lodos de depuradora, entre otras.

[1] N. Ali, M. H. Khan, M. Ali, et al. *Sci. Total Environ.* 913 (2024) 169484. [2] S. Sonkeshwar, B. Tanay, M. Gaurav., et al. *Land Degrad. Dev.* (2024) 1-19.

#### **Agradecimientos**

Estos resultados son parte del proyecto I+D+i PAIDI P20\_00556 financiado por la Junta de Andalucía (Consejería de Economía, Conocimiento, Empresas y Universidad). L. Martín-Pozo agradece la ayuda para contratos Juan de la Cierva FJC2021-047238-I financiada por MCIN/AEI/10.13039/501100011033 y por la Unión Europea NextGenerationEU/PRTR.



## P179

### Determinación de compuestos de silicio en aceite de pirólisis de plásticos mediante cromatografía y espectrometría de masas

Francisco Calderón Celis, Montserrat Redondo Velasco, Francisco Baños Costa, Mariella Moldovan Feier, Jorge Ruiz Encinar  
*Universidad de Oviedo, Oviedo, España*

#### Resumen

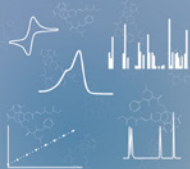
A pesar de la enorme demanda de plásticos, con una continua creciente demanda, actualmente los plásticos reciclados representan menos de un 9% del total de la producción global [1]. Esta situación reclama de tecnologías de reciclado de plásticos que puedan crear además un valor añadido. Recientemente, la pirólisis de los plásticos ha surgido como una alternativa en el reciclado de residuos plásticos [2]. Entre los productos resultantes de la pirólisis de residuos plásticos se encuentra el aceite de pirólisis. Este aceite puede utilizarse, por ejemplo, como combustible o como polímero para producir nuevos plásticos. Sin embargo, durante el proceso de pirólisis pueden formarse algunos productos desconocidos. Entre ellos se encuentran productos halogenados o compuestos de silicio. Su presencia puede afectar a los productos finales de reciclaje de este aceite, como combustibles o polímeros para producir nuevos plásticos. Pueden provocar problemas de corrosión (formación de SiO<sub>2</sub>) en los motores, o pueden dañar los catalizadores utilizados a lo largo de la producción industrial. Debido a este problema, es necesario detectar rápidamente la presencia de compuestos de silicio en los aceites de pirólisis de plástico y caracterizarlos [3]. Para llevar a cabo la caracterización cuantitativa de compuestos de silicio en aceite de pirólisis de plásticos, hemos desarrollado una metodología empleando cromatografía de gases (GC) acoplada a espectrometría de masas elemental en tándem (ICP-MS/MS). Mediante esta metodología, se ha logrado determinar las especies de silicio, así como el silicio total presente en muestras reales de aceite de pirólisis. La cuantificación de las especies de silicio se llevó a cabo mediante separación cromatográfica empleando patrón interno, mientras que el análisis de cuantificación total de silicio se realizó con una línea de transferencia y el uso de calibración externa. También se evaluó el efecto matriz de la muestra mediante adiciones estándar. La concentración de silicio en las muestras se comparó con valores de referencia obtenidos mediante espectroscopia de fluorescencia de rayos X (XRF). En las condiciones óptimas del método se obtuvo un límite de detección inferior a 1 ppb.

[1] V. Janssens. *PlasticsEurope (2022) Plastics - The Facts, 2022*

[2] S. Kartik et al. *TSEP, 2022, 23, 101316.*

[3] M. Kusenberget al. *Waste Management, 2022, 138, 83.*

Los autores agradecen el apoyo económico del Ministerio de Ciencia e Innovación (PID2020-117282RB-I00 y PID2022-142323NB-I00), financiados por MCIN/AEI/10.13039/501100011033/ y por "ERDF A way of making Europe".



## P180

### **Determination of antioxidant activity (DPPH And ABTS Methods) and total phenolic content (Folin-Ciocalteu and Fast Blue BB assays) of different teas and infusions by digital image analysis.**

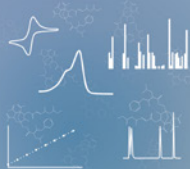
Maidier Zugazua Ganado, Ane Bordagaray , Rosa Garcia Arrona, Miren Ostra , Maidier Vidal  
*UPV/EHU, Donostia-San Sebastian, España*

#### **Resumen**

Tea and infusions are two of the most consumed beverages in the world. One of the reasons for their high consumption is the functional properties provided by polyphenols and other antioxidants present in them [1]. There is no assigned standard method for the determination of antioxidant activity (AA) in food, so more than one method is usually used for it in different researches. In this study, DPPH [2] and ABTS [3] methods have been used for the determination of AA; the reference spectrophotometric techniques have been adapted and validated to DIA techniques. Moreover, based on DIA, previously validated Folin-Ciocalteu (FC) [4] and Fast Blue BB (FBBB) [5] assays have been used for total phenolic content (TPC) determination. The four methods have been used for the determination of AA and TPC in 29 different tea and infusion samples. The adaptation of the two antioxidant determination methods was possible; two linear methods were obtained by DIA with R<sup>2</sup> values of 0.996 and 0.999, low detection and quantification limits (LOD and LOQ), a precision and accuracy below 5% and no significant difference ( $p > 0.05$ ) between techniques. Regarding sample analysis, higher or lower AA was not evident depending on the technique but rather depending on the infusion. In general, infusions containing a percentage of tea (T1-8) showed higher AA and TPC than other plant and aromatized fruit infusions. Through the PCA, the possible relation of some ingredients with different techniques could be observed. The four methods showed a strong linear correlation with each other.

**Acknowledgment** This work was funded by the Basque Government (Research Group IT1662-22 and predoctoral IKERTALENT Scholarship Program)

**References** [1] R. Cleverdon, Y. Elhalaby, M. McAlpine, et al. *Beverages*. Vol. 4, num. 1, (2018): 15. [2] Prior, R. L., Wu, X., et al. *J. Agric. Food Chem.* Vol. 53, num. 10, (2005): 4290-4302. [3] Re, Roberta, et al. *Free Radic Biol Med.* Vol. 26, num. 9-10, (1999): 1231-1237. [4] V.L. Singleton, R. Orthofer, & R.M. Lamuela-Raventós, et al. *Methods in Enzymology*, 299, (1999): 152–178. [5] M. Medina, et al. *J. Funct. Foods*. Vol. 3, num. 2, (2011): 79-87.



## P181

### Determinación de pesticidas neonicotinoides en muestras alimentarias de origen vegetal mediante fluorescencia molecular fotoinducida

Nielene María Mora Díez, María Isabel Rodríguez Cáceres, Julio Salguero Hernández,  
David Simón García  
*Universidad de Extremadura, Badajoz, España*

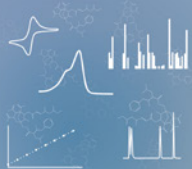
#### Resumen

El imidacloprid (IMI) es el segundo pesticida más vendido en el mundo y el neonicotinoide más utilizado en agricultura. Sin embargo, este pesticida contribuye a la contaminación de aguas superficiales y subterráneas debido a su filtración y lixiviación, lo que afecta peligrosamente a la salud de animales y humanos [1]. Debido a su uso descontrolado, la Comisión Europea estableció sus límites máximos de residuos en muestras vegetales (Reglamento (UE) 2021/1881) [2]. El objetivo de este estudio ha sido la aplicación y optimización de un método previamente desarrollado [3] a la determinación de IMI en presencia de su principal metabolito, el ácido 6-cloronicotínico (6-ACN) en muestras vegetales (tomates, pimiento y pepino) sin pelar y sin lavar, utilizando fluorescencia molecular fotoinducida. Se modificó ligeramente el método, utilizando acetonitrilo para extraer el IMI de las muestras vegetales y posteriormente se realizó una extracción en fase sólida con cartuchos C18. Las recuperaciones estuvieron entre el 95,2 y el 101,4 % para muestras vegetales contaminadas con imidacloprid. Al comprobar que existía efecto matriz, se aplicó el método de adición patrón. Las rectas de calibrado presentaron una linealidad satisfactoria ( $R^2 \geq 0,9969$ ) en los rangos de concentración de 0 - 1,5 mg/L. Una vez optimizado el método para muestras vegetales, se determinó IMI en presencia de 6-ACN. Se comprobó que todas las muestras vegetales estudiadas, sin lavar ni pelar, contenían IMI. Afortunadamente, en todos los casos las concentraciones de IMI encontradas se mantuvieron por debajo de los LMR establecidos por la Comisión Europea [2].

**Agradecimientos** Los autores agradecen la financiación de este trabajo al Proyecto PID2020-112996GB100 (Ministerio de Ciencia e Innovación de España) cofinanciado por los Fondos Europeos FEDER

**Referencias** [1] Z. Liu, J. Liu, K. Wang, W. Li, W. Shelver, L. Li, X. Q., J. Li, T. Xu. *Anal. Biochem.* 485 (2015) 28–33. [2] Reglamento (UE) 2021/1881 de la Comisión de 26 de octubre de 2021. Disponible en: [https://ec.europa.eu/food/plant/pesticides/eu-pesticides\\_database/start/screen/mrls/details?lg\\_code=EN&pest\\_res\\_id\\_list=326&product\\_id\\_list=116,117,122](https://ec.europa.eu/food/plant/pesticides/eu-pesticides_database/start/screen/mrls/details?lg_code=EN&pest_res_id_list=326&product_id_list=116,117,122) (última consulta: 30/04/2024). [3] M.I. Rodríguez-Cáceres, N.M. Mora-Díez, D. Simón-García, (2022) Estudio espectrofluorimétrico del pesticida imidacloprid y su principal metabolito el ácido 6-cloronicotínico. Presentado en el XXXVI Encontro Galego Português de Química. ISBN: 978-84-09-45895-0





## P182

### Determinación de pesticidas carbámicos mediante HPLC-DAD en muestras de agua de río y mosto

Nielene María Mora Diez, María Isabel Rodríguez Cáceres, Miguel Angel Vicho Mendoza  
*Universidad de Extremadura, Badajoz, España*

#### Resumen

Los carbamatos son insecticidas cuya actividad se basa en la inhibición de la enzima acetilcolinesterasa, provocando la acumulación de acetilcolina, que produce convulsiones, palpitos y otros efectos adversos, llegando en casos extremos a causar la muerte. Por otro lado, los carbamatos son tóxicos para el ser humano, de ahí que algunos estén regulados por la U.E. Se han establecido unos límites máximos de residuos para ellos según el tipo de alimento en el que se encuentren [1]. Existen varias técnicas para el estudio de los pesticidas de la familia de los carbamatos entre las que se encuentran fluorescencia, FIA, espectrofotometría, cromatografía de gases, cromatografía de líquidos, etc. En este estudio se ha realizado la separación de los analitos Pirimicarb, Bendiocarb, Etiofencarb, Fenobucarb y Carbaril mediante la técnica de Cromatografía Líquida de Alta Eficacia (HPLC) con detector fotométrico. Estos analitos no habían sido determinados conjuntamente mediante HPLC UV-Visible, aunque sí mediante técnicas separativas pero con detector de masas [2]. Se optimizaron las condiciones cromatográficas para la separación de la mezcla de pesticidas. Una vez desarrollado el método y establecidas las correspondientes rectas de calibrado, se procedió a aplicarlo en muestras de agua de río y de mosto blanco. En el caso de las muestras de mosto blanco fue necesario aplicar el método de adición patrón, debido al efecto matriz; el cual no se apreció al analizar las muestras de agua de río.

**Agradecimientos** Los autores agradecen la financiación de este trabajo al Proyecto PID2020-112996GB100 (Ministerio de Ciencia e Innovación de España) cofinanciado por los Fondos Europeos FEDER

**Referencias** [1] Comisión Europea, 2005 Pesticides Database v3. Disponible en: <https://ec.europa.eu/food/plant/pesticides/eu-pesticides-database/start/screen/mrls>. [2] K. Russo, D. Lucchetti, D. Triolone, P. Di Giustino, M. Mancuso, D. Delfino, B. Neri. *Phytochemistry Letters* 46 (2021) 153–161.



## P183

### **Determinación conjunta de metabolitos endógenos procedentes de estrés oxidativo y nitrativo en orina mediante cromatografía líquida de modo mixto con espectrometría de masas en tándem.**

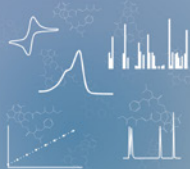
Eliseo Herrero Hernández, Myriam Bustamante Rangel, Marta Martín García, Encarnación Rodríguez Gonzalo, José Luis Pérez Pavón  
*Universidad de Salamanca, Salamanca, España*

#### **Resumen**

La determinación de ciertos compuestos endógenos de interés como biomarcadores de estrés oxidativo y nitrativo juega un papel crucial para comprender y evaluar el impacto de diversos factores fisiopatológicos en los sistemas biológicos. En este trabajo se propone un nuevo método de análisis basado en el uso de una fase estacionaria de modalidad mixta acoplada a espectrometría de masas en tándem de triple cuadrupolo, para la determinación conjunta de compuestos endógenos procedentes del estrés oxidativo y nitrativo. Los compuestos en estudio son 8-hidroxidesoxiguanosina (8-OHdG), 8-hidroxiguanosina (8-OHG) y 8-hidroxiguanina (8-OHGua) compuestos asociados al daño oxidativo del ADN o ARN, junto con 3-nitrotirosina (3-NT) y su metabolito 3-nitro-4-ácido hidroxifenilacético (NHPA), asociados con el estrés nitrativo de las proteínas. La diferencia en los niveles endógenos en que se encuentran ambos tipos de compuestos en muestra de orina condiciona que se aborden diferentes estrategias para su determinación. En el caso de los compuestos derivados de estrés nitrativo, 3-NT y NHPA, cuyo nivel endógeno es muy bajo, se ha desarrollado una etapa de preconcentración mediante SPE utilizando LiChrolut EN (un copolímero de poliestireno-divinilbenceno) como sorbente. En cambio, para la determinación de marcadores de estrés oxidativo, 8-OHG, 8-OHdG y 8-OHGua, el tratamiento previo de la orina es sencillo y consiste únicamente en centrifugación y posterior dilución en agua. La separación se llevó a cabo en una fase estacionaria de pentafluorofenilo con grupos flúor fuertemente electronegativos para proporcionar selectividad polar para compuestos catiónicos, y detección mediante espectrometría de masas en tándem. Las características analíticas del método desarrollado permiten considerarlo como un método reproducible (% CV < 13%) y sensible, con límites de detección inferiores a 0.1 ppb para los biomarcadores de estrés nitrativo, 3-NT y NHPA, y del orden de 0.5 ppb para los biomarcadores de estrés oxidativo, 8-OHG, 8-OHdG y 8-OHGua. El método desarrollado, una vez optimizado, ha sido aplicado al análisis de muestras de orina procedentes de voluntarios sanos. Se han podido cuantificar 4 de los 5 biomarcadores estudiados en concentraciones similares a las descritas en Bibliografía. Como forma de confirmación, una de las muestras de orina fue analizada simultáneamente mediante un método cromatográfico diferente basado en HILIC/MS-MS, con resultados muy similares. Esto pone de manifiesto la validez del método desarrollado para el análisis conjunto de estos biomarcadores endógenos en orina.

#### **Financiación**

Ministerio de Ciencia e Innovación, PID2021-127679NB-100



## P184

### Fluorescencia intrínseca de aminoácidos aromáticos para el análisis de biofármacos proteicos: pembrolizumab y vosoritida

Anabel Torrente López<sup>1</sup>, Manuel Garcia Rodriguez<sup>1</sup>, Maria Jose Sánchez Salvador<sup>1</sup>, Antonio Salmerón Garcia<sup>2</sup>, Jose Cabeza Barrera<sup>2</sup>, Susana Clemente Bautista<sup>3</sup>, Beatriz García Palop<sup>3</sup>, Maria Josep Cabañas Poy<sup>3</sup>, Natalia Navas Iglesias<sup>1</sup>

1. UGR, Granada, España

2. Hospital Universitario San Cecilio, Granada, España

3. Hospital Val d'Hebron, Barcelona, España

#### Resumen

Actualmente, las terapias basadas en medicamentos de base proteica están en continuo crecimiento, suponiendo una importante clase de medicamentos biotecnológicos. Dada su naturaleza proteica, son medicamentos frágiles con numerosos atributos críticos que deben de ser evaluados durante todas las etapas de su vida, desde su desarrollo y producción, hasta la manipulación previa a la administración al paciente. A esta clase de medicamentos pertenecen el anticuerpo monoclonal terapéutico pembrolizumab (Keytruda® 25 mg/mL) y el péptido terapéutico vosoritida (Voxzogo®). Pembrolizumab se incluye en la clase muy innovadora de los anticuerpos de puntos de control inmunológico, y se dirige frente a la proteína de superficie PD1, fue inicialmente aprobado para el melanoma (2014), pero actualmente está indicado en un amplio abanico de tumores, incluido el carcinoma pulmonar. Vosoritida, fue comercializado en España en marzo de 2023, y es la primera terapia que se autoriza para el tratamiento de la acondroplasia en paciente a partir de 4 meses de edad cuyos huesos siguen creciendo. Ambos son de uso hospitalario, y deben de ser manipulados -reconstituidos/diluidos- previamente a su administración al paciente. Es importante por tanto disponer de métodos rápidos y sencillos que permitan evaluar la estabilidad de sus preparaciones hospitalarias, de manera que se garantice la seguridad y eficacia de los tratamientos. En este trabajo, se presentan los resultados del uso de la fluorescencia intrínseca de los aminoácidos aromáticos triptófano y tiroxina para evaluar la estructura terciaria de pembrolizumab y el contenido proteico de vosoritida respectivamente, en sus preparaciones farmacéuticas hospitalarias, es decir, tras dilución con NaCl 0.9 % en el caso de pembrolizumab (a 1 y 10 mg/mL), y tras reconstitución con agua para inyectables en jeringa precargada en el caso de vosoritida (a 0,8 y 2,0 mg/mL). Tras la obtención de los espectros de fluorescencia, se calcula del centro de masas para evaluar la estructura terciaria de pembrolizumab. El contenido proteico en las disoluciones reconstituidas de vosoritida se obtiene a partir de los máximos de emisión/excitación de la tirosina, ya que carece de triptofano. En este trabajo se comenta las ventajas e inconvenientes de esta metodología de análisis de proteínas y péptidos.

#### Agradecimientos

C-EXP-277-UGR23 (Proyectos Plan Operativo FEDER Andalucía 2021-2027) UGR Fondos FEDER. Al Servicio de Farmacia del Hospital Universitario Clínico San Cecilio (Granada), por la amable cesión de las muestras de pembrolizumab y al Servicio de Farmacia Pediátrica del Hospital Val d'Hebron por las muestras de vosoritida.



## P185

### **Determinación de microplásticos en presencia de grandes cantidades de partículas empleando espectrometría IR mediante láser de cascada cuántica**

Adrián López Rosales, Borja De La Fuente Ferreiro, José Manuel Andrade Garda,  
Soledad Muniategui Lorenzo

*Grupo QANAP, Instituto Universitario de Medio Ambiente, Universidade da Coruña, A Coruña, España*

#### **Resumen**

Determinar la presencia de microplásticos (MPs) en muestras de diferentes compartimentos ecológicos es un tópico relevante en los estudios ambientales actuales. La determinación de MPs en muchas de estas matrices mediante técnicas microespectroscópicas debe afrontar una enorme cantidad de partículas (>30.000) sobre el soporte de medida (algo muy común en muestras de sedimento), incluso tras haber realizado procesos de separación previos. Como todas ellas deberían analizarse para discriminar los MPs, el elevado tiempo necesario hace inviable su medida mediante algunos sistemas instrumentales (espectrometría Raman, microscopio infrarrojo con monodetector, etc.). Incluso microscopios con FPA (focal plane array), los más rápidos, sólo miden áreas de 1 cm<sup>2</sup>, lo que no permite abordar los soportes habituales (filtros de 47 mm diámetro). La microespectrometría de reflectancia basada en láser de cascada cuántica (QCL-IR), probablemente el sistema más rápido actualmente (aprox. 8.000-9.000 partículas/día), tampoco puede abordar la caracterización de todas las partículas en este tipo de muestras en un tiempo razonable (necesita varios días para cada una).

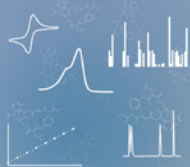
Una posibilidad para soslayar el problema es analizar una alícuota de la suspensión final resultante de tratar la muestra, pero existen serios problemas de representatividad y los errores que se cometen al extrapolar son muy elevados (en el rango 50-100 %).

La alternativa más aceptada analiza parte de las partículas depositadas en el soporte ("submuestreo"). Diversos estudios plantean estrategias aleatorias para filtros, basadas en áreas o partículas; pero no siempre son aplicables a la instrumentación disponible. Otros sugieren pautas espaciales regulares constituidas por muchas pequeñas áreas que abarcan un porcentaje del área del soporte, pero no tienen en cuenta posibles agrupamientos heterogéneos de las partículas.

Este trabajo plantea una estrategia de submuestreo rápida, sencilla y efectiva. Aunque está especialmente diseñada para sistemas QCL-IR (utilizando portaobjetos reflectantes rectangulares) es aplicable a otros dispositivos. Además, la estrategia permite elegir el % de área del soporte a muestrear con un conocimiento aproximado del error que se comete, lo que es de interés para aplicaciones donde las muestras tengan muchas partículas (suelos, sedimentos, etc.) o deba abordarse un número elevado de muestras.

#### **Agradecimientos**

Se agradece la financiación concedida al proyecto Europeo LabPlas (H2020, Ref. 101003954) y al proyecto SplashMare (Ministerio de Ciencia e Innovación, Agencia Estatal de Investigación, PID2022-138421OB-C21, cofinanciado por FEDER). A la Xunta de Galicia por la financiación "Consolidación e Estructuración de Unidades de Investigación Competitivas" (Ref. ED431C 2021/56).



## P186

### Estudio de la seguridad alimentaria del uso de bolsas de hidratación de PUT mediante el análisis de migración de compuestos volátiles y no volátiles

Carlos Jiménez Estremera<sup>1,2</sup>, Javier Blázquez-Martín<sup>3,4</sup>, Cristina Nerín De La Puerta<sup>1,2</sup>,  
Celia Domeño Recalde<sup>1</sup>

1. Universidad de Zaragoza, Zaragoza, España

2. Instituto de Investigación en Ingeniería de Aragón (I3A), Zaragoza, España

3. Universidad de la Rioja, Logroño, España

4. Centro Nacional de Tecnologías del Envase, Logroño, España

#### Resumen

Las bolsas de hidratación son un material utilizado habitualmente por deportistas, el ejército y bomberos, y en diferentes situaciones de emergencia donde la hidratación es vital. Estas bolsas tienen diseños diferentes, pero suelen estar fabricadas con poliuretano termoestable (PUT), considerado como material ideal porque tiene buena resistencia mecánica y térmica y es impermeable.

Al igual que todos los materiales destinados al contacto con alimentos, tienen que ser seguros para el consumidor y cumplir las funciones básicas, como la de contener y proteger el contenido del medio exterior. Además, el envase tiene que conservar las propiedades organolépticas del alimento que contiene. Para garantizar la seguridad del envase se debe cumplir la legislación europea que dicta el Reglamento (UE) n°10/2011 sobre materiales plásticos destinados a entrar en contacto con alimentos.

Nuestra investigación pretende abordar estas preocupaciones mediante un enfoque químico analítico. Se ha analizado la migración de bolsas de PUT disponibles en el mercado y bolsas ya reutilizadas por deportistas para estudiar la degradación del material. Los simulantes utilizados son etanol al 20%, ácido acético al 3% (exigidos por la legislación para agua y bebidas isotónicas) y agua mineral y agua del grifo para reproducir condiciones reales de uso. Se identificó y cuantificó especies volátiles mediante SPME-GC-MS y no volátiles mediante UPLC-IMS-QTOF. Además, se investigan los efectos de la reutilización y el uso extremo sobre la migración química.

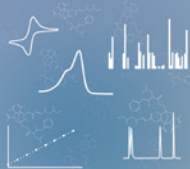
Los posibles riesgos para la salud asociados a los compuestos migrantes se han evaluado mediante valoraciones de toxicidad. Los resultados de este estudio facilitarán las recomendaciones para la utilización segura de las bolsas de hidratación en diferentes escenarios. Por tanto esta investigación contribuirá a garantizar más la salud pública y la integridad de los líquidos contenidos.

#### Referencias:

[1] Thermoplastic polyurethane-based shape memory polymers with potential biomedical application: The effect of TPU soft-segment on shape memory effect and cytocompatibility. Nasim Sabahi a, Iman Roohani b,c, Chun H. Wang a, Ehsan Farajzadeh d, Xiaopeng Li a,\*. Polymer 283 (2023) 126189 <https://doi.org/10.1016/j.polymer.2023.126189>

[2] Aznar, M., Domeño, C., Nerín, C., & Bosetti, O. (2015). Set-off of non volatile compounds from printing inks in food packaging materials and the role of lacquers to avoid migration. Dyes and Pigments, 114(C), 85–92. <https://doi.org/10.1016/j.dyepig.2014.10.019>

[3] VERA, Paula, CANELLAS, Elena, SU, Qi Zhi, MERCADO, Daniel and NERÍN, Cristina, 2023. Migration of volatile substances from recycled high density polyethylene to milk products. Food Packaging and Shelf Life. 1 March 2023. Vol. 35. DOI 10.1016/j.fpsl.2022.101020



## P187

### Estudio de la degradación de fármacos quirales en suelos tratados con lodos de depuradora o regados con agua residual

Marina Arenas , Juan Luis Santos , Julia Martín , Irene Aparicio , Esteban Alonso  
*Escuela Politécnica Superior, Universidad de Sevilla, Sevilla, España*

#### Resumen

La presencia y el destino de fármacos quirales en el medioambiente despierta una preocupación creciente, ya que pueden presentar diferente biotransformación, bioacumulación y ecotoxicidad [1]. Sus principales rutas de introducción en el medioambiente son los residuos domésticos que terminan en la red de saneamiento urbana. Aunque la mayoría se administran en su forma racémica, los fármacos quirales pueden sufrir alteraciones en la fracción enantiomérica durante procesos de degradación específicos [2], como los que pueden ocurrir en las plantas de tratamiento de aguas residuales. Los tratamientos recibidos en estas instalaciones no eliminan por completo los residuos farmacológicos y tienden a acumularse en los lodos que a veces se reutilizan como fertilizantes agrícolas [3]. El presente trabajo se centra en los  $\beta$ -bloqueantes, un grupo terapéutico de especial preocupación debido a su uso prolongado al emplearse en el tratamiento de enfermedades crónicas [4]. El atenolol, el metoprolol y el propranolol son los  $\beta$ -bloqueantes más ampliamente utilizados. Todos ellos son compuestos quirales. Algunos estudios han investigado la cinética de degradación de estos fármacos en el suelo, pero sin tener en consideración su carácter enantiomérico. Este estudio explora los efectos en su degradación enantioselectiva de la aplicación de lodo compostado o digerido al suelo agrícola o su riego con agua residual tratada. Los resultados mostraron que los enantiómeros del atenolol presentaban una rápida degradación con una disipación completa en ocho días siguiendo una cinética de primer orden. El metoprolol y el propranolol, más persistentes, se ajustaron a modelos cinéticos bifásicos y con fase de retardo. Además, se encontraron diferencias en la cinética de degradación de los enantiómeros. El estudio también destaca la importancia de las enmiendas orgánicas, en particular de los lodos digeridos, para acelerar la degradación de estos contaminantes.

#### Agradecimientos

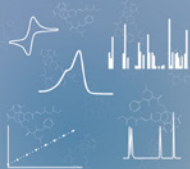
Este trabajo fue financiado por la Junta de Andalucía (Consejería de Economía y Conocimiento (Project I+D+i FEDER Andalucía nº. US-1254283) y por el Ministerio de Universidades a través del contrato predoctoral FPU (FPU20/00540).

[1] V.K. Vashistha, A. Kumar, *Chirality* 32 (2020) 722–735.

[2] E. Sanganyado, Z. Lu, Q. Fu et al., *Water Res.* 124 (2017) 527–542.

[3] C.A. Kinney, E.T. Furlong, S.L. Werner et al., *Environ. Toxicol. Chem.* 25 (2006) 317–326.

[4] M. Arenas, J.L. Santos, J. Martín et al., *Anal. Chim. Acta.* 1261 (2023) 341224.



## P188

### **Acoplamiento de un material de acceso restringido (RAM) con espectrometría de masas en tándem para la determinación rápida en orina de metabolitos de retardantes de llama**

Gabriela Cristina Chango Lescano, Ana Ballester Caudet, Diego García Gómez, Carmelo García Pinto, Encarnación Rodríguez Gonzalo, José Luis Pérez Pavón  
*Universidad de Salamanca, Salamanca, España*

#### **Resumen**

Los retardantes de llama derivados de ésteres organofosforados (OPFRs) se utilizan para reducir la inflamabilidad de diversos materiales, como muebles, aparatos electrónicos y textiles. El fosfato de trifenilo (TPHP) y el fosfato de tris(1,3-dicloro-2-propilo) (TDCIPP) son los OPFRs más abundantes. Diversos estudios han asociado estos compuestos con efectos nocivos en la reproducción, lo que ha suscitado la preocupación sobre su posible efecto en la salud humana. La determinación en orina de sus respectivos metabolitos dialquilados (DPHP y BDCIPP) es esencial para evaluar la bioacumulación, la persistencia y su toxicidad en organismos vivos. Esta información es crucial para que las agencias reguladoras tomen decisiones informadas sobre la seguridad y el uso de estos OPFRs.

En este trabajo, se describe un método novedoso, rápido y no separativo que permite determinar simultáneamente DPHP y BDCIPP en orina humana. El método se basa en el análisis de 500  $\mu\text{L}$  de muestra mediante un material de acceso restringido (RAM) acoplado en línea con un espectrómetro de masas triple cuádruplo (QqQ), sin necesidad de separación cromatográfica, lo que reduce el tiempo de análisis a menos de 5 minutos. Es necesario introducir un pretratamiento basado en SPE para reducir el efecto de matriz ( $\approx 20\%$ ) y lograr límites de cuantificación ( $\approx 0,1 \text{ ng/mL}$ ) por debajo del intervalo habitual de concentraciones en orina para sujetos no expuestos. La metodología completa fue validada mediante el análisis de cinco muestras de orina certificadas proporcionadas por el Centro Toxicológico de Quebec, encontrándose exactitudes satisfactorias, con valores que oscilaron entre el 86% y el 108%. El método desarrollado se utilizó posteriormente para el análisis de diez muestras de orina de individuos no expuestos siendo los resultados positivos en BDCIPP para una de las muestras ( $0,26 \pm 0,05 \text{ nmol / mmol creatinina}$ ) y en DPHP para cinco de ellas (de  $0,17 \pm 0,03$  a  $0,45 \pm 0,05 \text{ nmol / mmol creatinina}$ ).

En Resumen, el acoplamiento directo de un RAM con QqQ para la determinación de metabolitos de OPFRs en orina presenta una fiabilidad, precisión, y sensibilidad adecuadas. Además, cabe destacar que, por primera vez para este tipo de compuestos, se evita la separación cromatográfica, resultando en un tiempo de análisis notablemente corto, que hace que el método sea apropiado para su aplicación en laboratorios de rutina. Por lo tanto, puede concluirse que el método aquí desarrollado podría ser una herramienta rápida, no intrusiva y eficiente para estudios poblacionales y futuros proyectos de investigación relacionados con los OPFRs.



## P189

### Determinación enzimática simultánea de hipoxantina y xantina.

Isabel Sanz-Vicente <sup>1,2</sup>, Javier Camacho-Aguayo <sup>1</sup>, Mario Domínguez García<sup>1</sup>, Juan Albareda <sup>1</sup>,  
Susana de Marcos <sup>1,2</sup>, Javier Galbán <sup>1,2</sup>  
1. Universidad de Zaragoza, Zaragoza, España  
2. Instituto de Nanomateriales de Aragón, Zaragoza, España

#### Resumen

Un parámetro indicador de calidad y frescura de los alimentos, especialmente los de origen animal, es la medida de la concentración de nucleótidos (ATP). Su degradación implica una secuencia de reacciones enzimáticas en cascada (entre paréntesis se indica la enzima implicada).

ATP→ADP→AMP→Inosina Monofosfato(PA)→Inosina(PN)→Hipoxantina(XO)→Xantina(XO)→  
Ácido úrico PA (fosfatasa alcalina) PN (purina nucleósido fosforilasa) XO (xantina oxidasa)

A lo largo del proceso de degradación, disminuyen las concentraciones de productos intermedios y se acumulan las de los productos finales, Xantina (Xa) o Hipoxantina (Hx). Se han propuesto diferentes parámetros para establecer la frescura de los alimentos, como la propia concentración de Xa e Hx por lo que existen en el mercado ensayos enzimáticos para la determinación de algunos de estos compuestos. Sin embargo, estos kits, no discriminan entre Hx y Xa[1].

Se ha puesto a punto una metodología que permite la determinación de hipoxantina y xantina acoplado la reacción enzimática con Xantina Oxidasa (que produce peróxidos) a una reacción indicadora basada en la reacción con la enzima peroxidasa (HRP) y un colorante, Amplex Red.

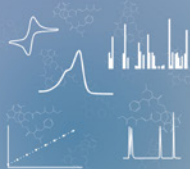
Durante el estudio de optimización se observó que hipoxantina y xantina tienen cinéticas diferentes lo que ha permitido la determinación diferenciada de ambos compuestos en mezclas de ambos (pH=6, [XO]=0.1 u/mL) con errores inferiores 15%.

#### Agradecimientos:

Este trabajo forma parte del proyecto de I+D+i PID2022-139235OB-I00 financiado por MICIN/AEI/10.13039/501100011033 y por FEDER "Una manera de hacer Europa", y las ayudas del Gobierno de Aragón a los grupos de investigación E-25\_23R

[1] Gui, M.; Binzhao; Song, J.; Zhang, Z.; Hui, P.; Li, P. Sci. Food Agric. 94 (2014) 2057 doi: 10.1002/jsfa.6524





## P190

### Simbióticos productores de ácidos grasos de cadena corta para el tratamiento de la obesidad infantil

Rosa María Alonso Rojas<sup>1</sup>, Arrate Rivas Macho<sup>1</sup>, Lorena Sanz Arriazu<sup>2</sup>, Carlos Izuriaga Echeverría<sup>2</sup>,  
Ola Arafat Arafat<sup>2</sup>

1. Universidad del País Vasco (UPV/EHU), Leioa, España

2. DNA Catcher, Pamplona, España

#### Resumen

La prevalencia de la obesidad infantil ha alcanzado proporciones epidémicas. Se calcula que más de 340 millones de niños de entre 5 y 19 años y más de 39 millones de niños menores de cinco años tienen sobrepeso o son obesos [1].

Las opciones terapéuticas de la obesidad infantil radican principalmente en la modificación de la dieta y el aumento de la actividad física. Debido a la dificultad que supone implementarlas a edades tan tempranas y a que no existe ningún medicamento aprobado para su tratamiento, se están investigando otras alternativas; como el uso de probióticos, prebióticos o simbióticos [2].

Numerosos estudios han demostrado la relación de la microbiota intestinal y la desregulación de la misma con la obesidad. Microorganismos presentes en la microbiota llevan a cabo la fermentación de sustratos no digeribles, produciendo metabolitos como vitaminas, antioxidantes y ácidos grasos de cadena corta (SCFAs); que tienen un impacto directo en la salud del hospedador [3]. Los SCFAs como el ácido acético, ácido propiónico y ácido butírico desempeñan un papel clave en la regulación del apetito y del metabolismo lipídico; y en la reducción de la inflamación [4].

El objetivo de este trabajo es la producción de un simbiótico constituido por uno o varios probióticos (*Bifidobacterium* o *Clostridium*) junto con sus prebióticos más apropiados (inulina, pectina, almidón y glucomanano) para lograr la generación de un perfil de SCFAs que contribuya al tratamiento de la obesidad infantil.

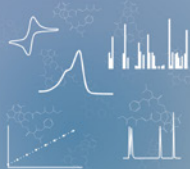
Se ha desarrollado y validado un método para la determinación de estos ácidos en medio de cultivo, mediante cromatografía gaseosa- espectrometría de masas (GC-MS). La combinación de la bacteria *Bifidobacterium longum* junto con pectina ha proporcionado la mayor concentración de ácido acético, regulador del apetito.

#### Agradecimientos

Los autores agradecen al Departamento de Educación del Gobierno Vasco por su financiación (proyecto IT673-22) y Arrate Rivas agradece a Lanbide (Servicio Vasco de Empleo) por su financiación (Next Generation EU).

#### Bibliografía

- [1] J. Miregard, P. Nowicka, C. Nylander. *Int. J. Pediatr.* 112 (2023) 1269-1274.
- [2] A. Alkhatib, C. Tsang, A. Tiss, et al. *Nutrients.* 9 (2017) 1-18.
- [3] M. Damián, N. G. Cortes-Pérez, E. T. Quintana, et al. *Microorganisms.* 10 (2022) 1065-1078.
- [4] T. A. Houtman, H. A. Eckermann, H. Smidt, et al. *Sci. Rep.* 12(2022) 1-13.



## P191

### **Características analíticas de la determinación enzimática de xantina. Referencias para su implementación en el control de la calidad de alimentos.**

Angel Lopez Molinero, Marcos Oyarzabal , Javier Galban  
*UNIVERSIDAD DE ZARAGOZA, Zaragoza, España*

#### **Resumen**

El desarrollo de índices de calidad en alimentos es una prioridad analítica que se orienta hacia metodología rápida y eficiente. A través de ensayos dirigidos a la detección de productos de degradación como ácidos, aminos o aminos volátiles. En alimentos como carnes, o pescados que son especialmente sensibles la transformación de nucleótidos (ATP) a compuestos intermedios como IMP(Inosina Monofosfato), Inosina, y otros compuestos finales como HipoXantina, Xantina y ácido úrico, son posibles objetivos analíticos. Que además se beneficia cuando incluye la diferenciación entre ellos [1].

En este trabajo se estudian las características analíticas de la determinación de la Xantina basada en un procedimiento enzimático con dos reacciones consecutivas. Una primera de oxidación mediante Xantina Oxidasa, que produce ác. úrico y peróxidos (HP). Estos últimos, son detectados en la reacción enzimática, con HRP, de oxidación del colorante Amplex Red (AR). El producto puede ser medido espectrofotométricamente.

El estudio evalúa y optimiza las condiciones de reacción. Mediante diseño de experimentos se puede modelizar la influencia de las variables, con una correlación 0,965 entre valores teóricos y experimentales de respuesta. En condiciones óptimas de pH 8, y [enzima] XO a 0,18 U/ml, la absorbancia a 572 nm, y 200 s de tiempo de reacción, se presenta sensibilidad 32455,79 Abs/mol.L-1, con LD 8,9E-07, LQ 3,0E-06 y máximo lineal hasta 3,0E-05 mol/L de Xantina, respectivamente. La repetibilidad de la medida y precisión del método a diversos valores de concentración y días (3) de experimentos, están en el rango, %dsr, 1,6- 2,3, respectivamente.

El estudio cinético de la reacción permite diferenciar y caracterizar las oxidaciones del AR y de la Xantina, a menor velocidad. El efecto salino de NaCl, y fosfatos, sobre la cinética pone manifiesto la influencia e interferencia sobre la oxidación de la Xantina. El procedimiento desarrollado ha sido aplicado a una muestra de suero salino reforzada con muestra patrón. La recuperación cuantitativa del analito añadido está en el rango 98-102 %.

#### **Agradecimiento**

Este trabajo ha sido desarrollado con la financiación del proyecto: PID2022-139235OB-IOO, de la UE-AEI y también DGA, proyecto E25-23R, N&SB.

#### **Bibliografía**

1.S.P.R.Chandra, D.Rooma, Enzyme and Microbial. Technology, 57 (2014) 55–62.



## P192

### Determination of pharmaceutical and illicit drugs in wastewater by solid-phase extraction and liquid chromatography-tandem mass spectrometry

Miguel Muñoz Bartual<sup>1</sup>, Paloma Arjona Mudarra<sup>1</sup>, Montserrat Piñaga Solé<sup>2</sup>, Nuria María Mateo Paredes<sup>2</sup>, Salvador Garrigues<sup>1</sup>, Francesc A. Esteve Turrillas<sup>1</sup>

1. Department of Analytical Chemistry. University of Valencia, Burjassot, España

2. Environmental, Health and Safety Services. University of Valencia, Burjassot, España

#### Resumen

The widespread popularity of illicit drugs in society, combined with the easy accessibility and misuse of pharmaceuticals, primarily used for mental disorders treatment, has led to the need to gain knowledge of drug trends and usage patterns to initiate prevention campaigns or develop effective interventions [1, 2]. In this sense, monitoring the presence of illicit and pharmaceutical drugs in wastewater has emerged as a powerful tool for determining consumption patterns and to relate it with the incidence of mental health problems within a specific population group [3]. In this study, an analytical method has been developed to determine the presence of thirty-six psychoactive substances, including stimulants, benzodiazepines, commonly used antidepressants and opioids. The proposed approach combines in-situ wastewater sampling, a solid phase extraction (SPE) step using an ExtraBond Polymeric ECX commercial phase, followed by liquid chromatography coupled with tandem mass spectrometry determination. Extraction and elution conditions were evaluated to obtain the best extraction efficiencies. The developed method was fully validated in terms of linearity, sensitivity, precision, accuracy and matrix effects providing appropriate results. Moreover, the proposed procedure was applied to the determination of target compounds in wastewater samples collected at different locations from Campus of Valencia University between 2023 and 2024 for estimating substance consumption by the university community and evaluation of ongoing awareness actions. The proposed analytical strategy has been demonstrated to be suitable for monitoring the prevalence of psychoactive substances, providing insight into temporal and spatial trends of drug use through wastewater surveillance.

#### Acknowledgements:

This work has been financed by the Spanish Delegación del Gobierno para el Plan Nacional sobre Drogas, Project PND2022I030.

#### References:

- [1] A.L.N. van Nuijs, S. Castiglioni, I. Tarcomnicu, et al. *Sci. Total Environ.* 409 (2011) 3564–3577
- [2] T. Boogaerts, F. Ahmed, P.M. Choi, et al. *Sci. Total Environ.* 789 (2021) 148047.
- [3] M. Laimou-Geraniou, D. Heath, E. Heath. *Tren. Environ. Anal. Chem.* 37 (2023) e00192.



## P193

### Perfil de compuestos volátiles en avispones y nidos para la diferenciación de colonias de *Vespa velutina*

Omaira De La Hera Fernández, Rosa Maria Alonso  
*Universidad del País Vasco (UPV/EHU), Leioa, España*

#### Resumen

Los insectos eusociales son aquellos que muestran un comportamiento social más avanzado e incluyen algunas especies de termitas, hormigas, abejas, avispa y avispones. Se caracterizan por tener, normalmente, una única colonia de grandes dimensiones compuesta de cientos a miles de individuos y que se organizan en castas, con diferentes funciones asignadas dentro de la colonia. Dentro de este grupo se encuentra la especie invasora *Vespa velutina*. Las castas de esta especie se dividen en reina, obreras y machos. El funcionamiento correcto de la colonia precisa de la comunicación entre los individuos que la componen [1].

Las señales químicas (o feromonas) son la comunicación más empleada por estos insectos como alarma y diferenciación entre individuos que pertenecen o no a la colonia. Estas señales corresponden a los compuestos secretados por las diferentes glándulas que los avispones poseen y que depositan en el nido, lo que posibilitaría la caracterización de cada colonia [2,3].

Con el fin de demostrar esta hipótesis, en este trabajo se han obtenido los perfiles de compuestos volátiles de la capa externa cuatro nidos secundarios procedentes de diferentes localizaciones del País Vasco y 20 avispones de cada uno de los nidos.

Para ello, una homogenizada las muestras de nido y avispon se aplicó un método de extracción sólido-líquido con hexano y la mezcla acetona:metanol (50:50 v/v) como extractantes. Los extractos fueron analizados mediante GC-MS. Los perfiles de volátiles obtenidos fueron tratados con métodos quimiométricos como PCA y PLS-DA con el objetivo de establecer los agrupamientos existentes y los posibles marcadores que proporcionan diferencias estadísticamente significativas entre las diferentes colonias de *Vespa velutina* analizadas.

Se han observado agrupamientos de los avispones en función de los nidos a los que pertenecen, y así mismo los nidos mostraron agrupamientos en función de su localización geográfica. Esta información supone una ampliación del conocimiento existente sobre de esta especie, lo que podría ser aplicado al desarrollo de métodos de control más eficaces basados en señales químicas.

#### Agradecimientos

Los autores agradecen al Departamento de Educación del Gobierno Vasco por su financiación (proyectos PUE 2018\_1\_0007, PUE 2021\_1\_008 e IT1673-22)

#### Bibliografía

- [1] J. Billen. Proc. Neth. Entomol. Soc. Meet, 17 (2006) 9-25
- [2] J. Billen, E. D. Morgan. Pheromone Communication in Social Insects (1ª edición), (1998) 3-33
- [3] O. Erturk, E. Bagdatli. Biología, 74(7), (2019) 797-812.



## P194

### Estudio estacional de la presencia de antibióticos en los puntos de la red natura 2000 del curso central del río tajo en castilla-la mancha

Cristina De Los Reyes Ramos<sup>1</sup>, Alfonso Fernández <sup>2</sup>, María Jiménez Moreno<sup>1</sup>,  
Nuria Rodríguez Fariñas<sup>1</sup>, Francisco Javier Guzmán Bernardo<sup>1</sup>, David Moreno González<sup>2</sup>,  
Beatriz Larraz Iribas<sup>1</sup>, Susana Seseña Prieto<sup>1</sup>, Rosa Del Carmen Rodríguez Martín-Doimeadios<sup>1</sup>

1. *Universidad de Castilla La Mancha, Toledo, España*

2. *Universidad de Jaén, Jaén, España*

#### Resumen

El creciente consumo de fármacos en medicina y veterinaria genera descargas de estos productos que las estaciones depuradoras convencionales no son capaces de eliminar, lo cual se traduce a menudo en su presencia en los cuerpos de agua. Entre ellos, los antibióticos son de especial interés por su impacto en los organismos acuáticos y la cada vez más preocupante resistencia bacteriana a los mismos. De hecho, varios de ellos se han incluido en las listas de vigilancia de la directiva marco de aguas de la Unión Europea [1].

Para garantizar la supervivencia de las especies y hábitats más valiosos y amenazados de Europa, surge la red de espacios protegidos red Natura 2000 [2]. En la cuenca media del río Tajo existen varios de ellos por el peligro que supone la contaminación que proviene de zonas muy pobladas y de actividades industriales. A pesar de la problemática existente en cuanto a presencia de antibióticos en estos espacios protegidos relacionados con el río Tajo, la información disponible es escasa.

En este trabajo se ha investigado la presencia y distribución de 24 antibióticos en aguas superficiales de 11 puntos de la Red Natura 2000 situados en la cuenca media del Tajo en Castilla-La Mancha con un plan de muestreo de un año entre el verano de 2022 y la primavera de 2023. Para el análisis se utilizó extracción en fase sólida con cartuchos Oasis HLB® y posteriormente cromatografía líquida acoplado a espectrometría de masas (Q-Exactive Orbitrap; Thermo Fisher Scientific), con ionización positiva [3].

De los 24 antibióticos analizados, 13 se detectaron en alguna de las muestras. La suma de las concentraciones encontradas en los 11 puntos de muestreo osciló entre 1,5 y 5,0 ng mL<sup>-1</sup>. En todos los muestreos se observó una importante contribución del río Jarama a la presencia de antibióticos en el Tajo, que solo pudo depurarse parcialmente en el tramo estudiado. Sulfametoxazol fue el más detectado (42 muestras) y Clindamicina, incluido en la 4ª lista de vigilancia, se encontró en todas las muestras aguas abajo de la desembocadura del río Jarama.

#### Agradecimientos

Ministerio de Ciencia e Innovación (PID2022-138761NB-I00), Junta de Comunidades de Castilla-La Mancha (SBPLY/23/180225/000153), Universidad de Castilla-La Mancha/FEDER (2022-GRIN-34415) y Cátedra del Tajo UCLM-Soliss.

#### Referencias

[1] Comisión Europea. Decisión de Ejecución 2022/1307/UE de conformidad con la Directiva 2008/105/CE. [2] Natura 2000 Network Viewer. <https://natura2000.eea.europa.eu/>. [3] J. Robles-Molina, B. Gilbert-López, J.F., García-Reyes, A. Molina-Díaz, Sci. Tot. Env., 479 (2014) 247-257



## P195

### Comparación del perfil fenólico de aceites de oliva vírgenes provenientes de olivares sometidos a distintos regímenes agronómicos

Lucía Olmo García<sup>1</sup>, María Rodríguez Gómez<sup>1</sup>, Romina Monasterio<sup>1</sup>, Irene Serrano García<sup>1</sup>,  
María Gemma Beiro Valenzuela<sup>1</sup>, Daniel Martín Vertedor<sup>2</sup>, Alegría Carrasco Pancorbo<sup>1</sup>  
*Universidad de Granada, Granada, España*  
*Centro de Investigaciones Científicas y Tecnológicas de Extremadura (CICYTEX), Badajoz, España*

#### Resumen

La olivicultura está transitando una serie de cambios debido a la necesidad de aumentar la producción para satisfacer la creciente demanda de aceite de oliva y disminuir los costes de producción. El aumento de densidad de las plantaciones es una de las estrategias que se están imponiendo, aunque aún no se ha estudiado en profundidad cómo afecta la intensificación del cultivo a la composición y calidad del aceite.

El objetivo del presente trabajo ha sido evaluar la influencia del tipo de cultivo en la fracción de compuestos fenólicos del aceite de oliva virgen. Para ello se ha aplicado un método LC-ESI-MS para el análisis de aceites provenientes de una misma variedad (Arbequina) cultivada con distintas densidades de plantación en la misma zona geográfica; este diseño experimental reducía al máximo la influencia de variables genéticas y edafoclimáticas. Las muestras estudiadas incluyen aceites obtenidos a partir de frutos en dos estados de madurez, procedentes de olivos jóvenes y adultos, cultivados en tres regímenes distintos (tradicional, intensivo y superintensivo o seto), de dos campañas consecutivas (2021 y 2022).

Se observaron perfiles fenólicos similares en todos los aceites estudiados, donde predominaban los compuestos pertenecientes a la familia de secoiridoides, que representaba en torno al 90% de la composición fenólica total. Los aceites procedentes de cultivos tradicionales presentaron un contenido fenólico notablemente superior en comparación a los procedentes de cultivos tipo intensivo y seto. No obstante, en los aceites procedentes de cultivos intensificados encontramos una mayor presencia de familias de fenoles minoritarias (fenoles simples, ácidos fenólicos, flavonoides y lignanos).

El estudio de los resultados mediante PCA reveló la existencia de un agrupamiento natural de las muestras procedentes del cultivo tradicional, por un lado, y de los cultivos con mayor densidad de plantación, por otro. Entre los compuestos con mayor influencia en el grupo de muestras "tradicional" se pueden resaltar la hidroxioleaceína, oleaceína, oleocantal y un isómero de la oleuropeína aglicona, mientras que los aceites procedentes de cultivos intensivos y en seto, presentaban mayores concentraciones de acetoxipinoresinol, ácido vanílico y diosmetina.

Por otro lado, también se observaron diferencias en el perfil fenólico de los aceites estudiados en función del año de cosecha y del estado de madurez de los frutos, corroborando hallazgos previamente descritos en Bibliografía. En cambio, no se observaron diferencias con respecto a la edad del árbol, lo cual demuestra la viabilidad del empleo de olivos en edades tempranas para la obtención de aceite.



## P196

### Empleo de una aproximación no dirigida LC-IMS-MS para investigar el perfil metabólico de frutos de aguacate cultivados en diversas regiones de la Península Ibérica

Irene Serrano García<sup>1</sup>, Lucía Olmo García<sup>1</sup>, María Gemma Beiro Valenzuela<sup>1</sup>, Romina Monasterio<sup>1</sup>,  
José Jorge González Fernández<sup>2</sup>, José Ignacio Hormaza<sup>2</sup>, Romina Pedreschi<sup>3</sup>,  
Alegria Carrasco Pancorbo<sup>1</sup>

1. Universidad de Granada, Granada, España

2. Instituto de Hortofruticultura Subtropical y Mediterránea (IHSM), Algarrobo, España

3. Pontificia Universidad Católica de Valparaíso, Santiago, Chile

#### Resumen

El crecimiento exponencial en la demanda está llevando al sector del aguacate a expandir su cultivo hacia nuevas regiones con condiciones climáticas variadas. En los últimos años, España se ha convertido en el principal productor de Europa rozando las 20,000 hectáreas cultivadas.

El objetivo del presente trabajo ha sido evaluar la influencia del origen geográfico en el metaboloma del aguacate empleando una aproximación metabolómica no dirigida. Para ello, se analizaron aguacates de la variedad predominante en el mercado (Hass) cultivados en ocho regiones productoras de la Península Ibérica mediante un potente método LC-IMS-MS/MS. En total, se estudiaron 64 muestras, contando con un promedio de 8 réplicas por origen geográfico. Cada una de esas réplicas provenía de 5-7 frutos distintos (más de 400 aguacates) en su estado de madurez de consumo.

En primer lugar, se llevó a cabo la caracterización completa del extracto metanólico de los frutos debidamente procesados y liofilizados, identificando numerosos compuestos pertenecientes a diversas clases químicas en los perfiles (aminoácidos, compuestos fenólicos, azúcares, ácidos orgánicos, sesquiterpenoides, vitaminas, nucleósidos, bases nitrogenadas, etc.). La integración de la movilidad iónica facilitó el desarrollo de una biblioteca experimental de CCS que permite aumentar la fiabilidad de la anotación de metabolitos.

En una etapa posterior, los datos generados se estudiaron mediante el empleo de diversas herramientas quimiométricas. Primero, haciendo uso de estadística multivariante no supervisada (PCA y HCA) se observó que las muestras se agrupaban naturalmente por proximidad geográfica, encontrando las diferencias más significativas entre regiones ubicadas en los extremos norte y sur. No obstante, cada región mostraba patrones metabólicos discernibles, incluso entre las áreas más cercanas. Por lo tanto, en una etapa posterior, se diseñaron varios modelos de análisis discriminante parcial ortogonal de dos clases (OPLS-DA) para describir la composición característica de cada zona productora.

De esta forma, la metabolómica no dirigida combinada con herramientas quimiométricas ha demostrado su eficacia en la evaluación de la trazabilidad del origen del aguacate, revelando similitudes entre las regiones cercanas, pero también perfiles metabólicos únicos moldeados por las condiciones de cultivo específicas de cada región. Esto ofrece una valiosa perspectiva sobre la diversidad metabólica del aguacate y su relación con el entorno geográfico.



## P197

### Estudio de la evolución cuantitativa de fitoquímicos de interés del mesocarpio del aguacate durante su maduración: targeted LC-MS para comparar variedades hass, fuerte y bacon

Irene Serrano García<sup>1</sup>, Carlos Saavedra Morillas<sup>1</sup>, María Gemma Beiro Valenzuela<sup>1</sup>, Romina Monasterio<sup>1</sup>, Elena Hurtado Fernández<sup>2</sup>, José Jorge González Fernández<sup>3</sup>, José Ignacio Hormaza<sup>3</sup>, Romina Pedreschi<sup>4</sup>, Lucía Olmo García<sup>1</sup>, Alegría Carrasco Pancorbo<sup>1</sup>

1. Universidad de Granada, Granada, España

2. Universidad Loyola, Sevilla, España

3. Instituto de Hortofruticultura Subtropical y Mediterránea (IHSM), Algarrobo, España

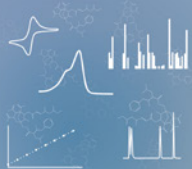
4. Pontificia Universidad Católica de Valparaíso, Valparaíso, Chile

#### Resumen

La maduración del aguacate es un proceso complejo que implica cambios fisicoquímicos significativos hasta que el fruto alcanza una calidad óptima para el consumo. Hasta la fecha, poco se conoce acerca de cómo afecta la maduración a muchos metabolitos específicos y si dichos cambios son similares independientemente de la variedad que se considere. En este estudio, se empleó una metodología targeted RP-LC-MS para estudiar la evolución cuantitativa de 30 compuestos pertenecientes a diversas clases químicas, considerando cuatro estados de maduración (desde frutos inmaduros hasta sobremaduros) de las variedades de aguacate Hass, Fuerte y Bacon. La extracción de los metabolitos se realizó empleando una mezcla de etanol-agua (80:20 v/v), posibilitando la extracción simultánea de compuestos fenólicos, aminoácidos, nucleósidos, vitaminas, fitohormonas, iridoides y otros metabolitos aún desconocidos.

Se detectaron diferencias metabólicas significativas entre las variedades, así como cambios cuantitativos notables en ciertos compuestos a lo largo del proceso de maduración. En general, los compuestos fenólicos tendieron a aumentar durante el reblandecimiento de los frutos, aunque algunos, como la epicatequina y el ácido clorogénico, mostraron comportamientos distintos. Por otro lado, la evolución de los aminoácidos y sus derivados varió considerablemente según el cultivar, siendo Fuerte la variedad con las concentraciones más altas y las fluctuaciones más pronunciadas. Tanto la uridina como el ácido abscísico exhibieron un incremento constante, mientras que la concentración de la penstemida disminuía a medida que avanzaba la maduración. Además, se identificaron varios metabolitos que podrían servir como marcadores distintivos para cada variedad. El presente estudio proporciona datos esenciales para comprender el proceso de maduración del aguacate y la diversidad entre distintos cultivares, lo cual es de gran relevancia tanto para la investigación académica como para la industria agroalimentaria. Estudios futuros que incorporen metodologías multiómicas podrán profundizar notablemente en la comprensión de las transformaciones fisicoquímicas que tienen lugar durante la maduración del aguacate, facilitando un análisis más exhaustivo de las dinámicas subyacentes a este proceso.





## P198

### Estudio de las alteraciones del perfil lipídico durante el envejecimiento visual mediante espectrometría de masas de alta resolución

Clara De Lorenzo Gonzalez<sup>1</sup>, Oumeyma Sabry El Makkas<sup>2</sup>, Jorge R. Álvarez-Buylla<sup>2</sup>,

Beatriz Fernandez<sup>1</sup>, Lara Lobo<sup>1</sup>, Rosario Pereiro<sup>1</sup>, Héctor González-Iglesias<sup>2</sup>

1. Dpto. de Química Física y Analítica, Universidad de Oviedo, Oviedo, España

2. Instituto de Productos Lácteos de Asturias (IPLA-CSIC), Villaviciosa, Villaviciosa, España

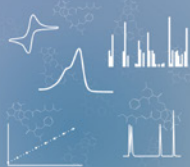
#### Resumen

El envejecimiento poblacional contribuye al desarrollo y progresión de las enfermedades neurodegenerativas asociadas a la edad. Este tipo de patologías presentan características y patrones moleculares comunes caracterizados por la acumulación anormal de proteínas, la degeneración neuronal selectiva, la alteración del metabolismo lipídico y la consecuente muerte celular. Estos procesos neurodegenerativos pueden afectar al sistema visual, con la consecuente pérdida de visión, como ocurre durante la progresión de la degeneración macular asociada a la edad (DMAE). La DMAE es la principal causa de ceguera irreversible en personas mayores de 60 años y su prevalencia aumenta con la edad. Durante el inicio de la DMAE se observa una acumulación progresiva de lípidos bajo el epitelio pigmentario de la retina. Para interpretar el efecto de los cambios endógenos en el metabolismo de los lípidos en la DMAE, es imprescindible desarrollar metodologías analíticas de alto rendimiento que proporcionen información sobre el perfil lipídico a nivel sistémico (i.e., suero o sangre). Hoy en día, técnicas ómicas como la lipidómica, proporciona gran cantidad de datos moleculares ayudando a elucidar los procesos moleculares implicados en el origen y progresión de una enfermedad.

En este estudio se ha desarrollado una metodología de análisis de molécula pequeña para el estudio lipidómico del suero humano mediante cromatografía líquida acoplada a espectrometría de masas de alta resolución (LC-HRMS). Se han evaluado diferentes métodos de extracción líquido-líquido (utilizando mezclas de MeOH, MTBE e isopropanol como disolventes orgánicos) y sólido-líquido, empleándose una mezcla de patrones internos marcados isotópicamente durante todo el proceso experimental. Las condiciones instrumentales y la separación cromatográfica se han evaluado en los modos de ionización positiva y negativa. Para los diferentes métodos de extracción de lípidos en el suero de ratón se ha determinado el número de características moleculares obtenidas en modo MS1 y se llevó a cabo la detección de especies únicas de lípidos plasmáticos en modo MS/MS. Finalmente, se llevó a cabo el análisis de muestras de suero de pacientes con DMAE e individuos sanos, utilizándose la librería generada para la obtención de abundancias relativas y su comparación.

#### Agradecimientos

Proyectos PID2022-137319OB-C21 y PID2022-137319OB-C22 (MCIN/AEI/10.13039/501100011033/) y ayuda para contratos predoctorales para la formación de doctores (Ref. PRE2022-000181).



## P199

### **Lipidómica y transcriptómica de la incorporación de ácido erúxico en la biosíntesis de triacilgliceroles durante la maduración de las semillas de Pennycress (*Thlaspi arvense*).**

Ana Claver<sup>1</sup>, María A. Luján<sup>1</sup>, José M. Escuin<sup>2</sup>, Marion Schilling<sup>3</sup>, Juliette Jouhet<sup>3</sup>, María Savirón<sup>4</sup>, M. Victoria López<sup>1</sup>, Carmen Jarne<sup>5</sup>, Vicente L. Cebolla<sup>2</sup>, Miguel Alfonso<sup>2</sup>

*1 Estación Experimental Aula Dei (EEAD), CSIC, Zaragoza*

*2 Instituto de Carboquímica (ICB), CSIC, Zaragoza*

*3 Laboratoire de Physiologie Cellulaire Végétale, Univ. Grenoble Alpes-CNRS-CEA-INRAE, Grenoble, France*

*4 Centro de Química y Materiales (CEQMA), CSIC-Universidad de Zaragoza, Zaragoza*

*5 Departamento de Química Analítica, Universidad de Zaragoza, Zaragoza*

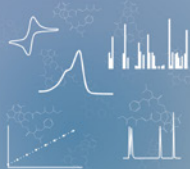
*Thlaspi arvense* (Pennycress) es una materia prima emergente para la producción de biocombustibles debido al alto contenido de aceite de sus semillas, enriquecidas en ácido erúxico. Los triglicéridos (TAG) constituyen el 80-90% de los lípidos totales y constituyen el principal reservorio de ácido erúxico. Hemos estudiado los mecanismos de incorporación del ácido erúxico al TAG, en función de la maduración de la semilla de Pennycress. Para ello, se ha realizado un exhaustivo estudio lipidómico a fin de analizar el contenido de glicerolípidos y la distribución de grupos acilo durante las diferentes etapas de maduración de las semillas. La lipidómica se basa en LC-MS con triple cuadrupolo (QqQ) y en HPTLC-MS con trampa de iones (IT). Los perfiles cuantitativos de 12 clases de glicerolípidos y sus correspondientes especies moleculares se obtuvieron mediante LC-ESI (+)-MS/MS (QqQ) utilizando Multiple Reaction Monitoring.

En el caso de HPTLC-MS (IT), la identificación estructural de las especies moleculares de TAG se llevó a cabo obteniendo los espectros ESI-MS y MS/MS de iones seleccionados directamente a partir de la banda separada de TAG en la placa cromatográfica, utilizando una interfaz automática basada en extracción/elución de banda. Esto ha permitido obtener, en algunos casos, un análisis posicional de la cadena acilo en sn-2 en TAG. En concreto, se ha demostrado que 18:2 está en la posición sn-2 en algunas de las especies TAG abundantes en todas las etapas de maduración. Asimismo, también se obtuvieron perfiles de intensidad HPTLC-ESI(+)-MS normalizados, proporcionando la abundancia relativa de especies TAG.

Este estudio se completó con un análisis transcriptómico integrativo de la expresión génica para identificar qué genes de qué rutas biosintéticas de TAG en el aceite de semilla están actuando en cada etapa de maduración. Los resultados combinados de lipidómica y transcriptómica apuntan a un modelo en el que una fuerte coordinación temporal entre rutas e isoformas en cada ruta, tanto en la expresión como en la incorporación del grupo acilo, contribuye a la síntesis de TAG en Pennycress [1]. Los resultados de LC-MS y HPTLC-MS fueron coherentes y complementarios. Los perfiles obtenidos por HPTLC-MS se correlacionaron con los resultados cuantitativos obtenidos de LC-MS. Los resultados de ambas técnicas confirman la incorporación de 22:1 al TAG ya en la etapa inicial de maduración de la semilla (G), así como el incremento de especies de ácidos grasos de cadena larga 20:1, 22:1 y 24:1 a medida que aumenta la maduración.

#### **Referencias**

[1] Claver A, Luján MA, Escuin JM, Schilling M, Jouhet J, Savirón M, López MV, Picorel R, Jarne C, Cebolla VL and Alfonso M. *Front. Plant Sci.* 2024, 15:1386023, doi: 10.3389/fpls.2024.1386023



## P200

### Ensayo de amplificación acoplado a nanopartículas de oro para detección de especies marinas

Patricia Alcázara, María Luisa Fernández-Sánchez, José Manuel Costa-Fernández, Yaisel J Borrellb, Ruth Coyab, María Teresa Fernández-Argüellesa  
*a Departamento de Química Física y Analítica, Universidad de Oviedo, España*  
*b Departamento de Biología Funcional, Universidad de Oviedo, España*

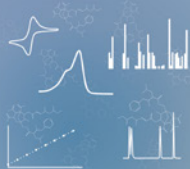
En el Norte de España hay diversos tipos de pesquerías artesanales como la pesca del pulpo, *Octopus vulgaris*, que es importante conservar. En la actualidad, este tipo de pesquerías está seriamente amenazada por factores relacionados con el cambio climático y la sobreexplotación de los recursos pesqueros, entre otros. La falta de datos biológicos de las pesquerías es alarmantemente escasa, y además muchas especies capturadas no se registran adecuadamente, pudiendo ser de especies no reglamentadas. Es urgente desarrollar herramientas de trazabilidad que avalen, por una parte, las ecoetiquetas de las pesquerías artesanales, y por otra parte que ayuden a luchar contra la pesca ilegal[1].

En los últimos años, las nano-biotecnologías y técnicas basadas en ADN se han combinado para la detección de secuencias genéticas de especies de interés. En este trabajo se presenta una metodología basada en nanopartículas de oro para detección colorimétrica de la especie *Octopus vulgaris*. Las nanopartículas de oro presentan un fenómeno denominado Resonancia del Plasmón Superficial, por el que los cambios en su estado de agregación provocan cambios de color. Para aumentar la sensibilidad de este ensayo, se utiliza una técnica de amplificación isotérmica basada en enzimas de ADN sintéticos (MNAzymes, o enzimas de ácidos nucleicos multicomponentes) [2]. El posterior acoplamiento de este ensayo a un sistema microfluídico de detección visual podría permitir detecciones, cuantificaciones y estimaciones sobre la diversidad y trazabilidad de especies marinas relevantes con esfuerzos mínimos de muestreo. Estos datos permitirían a los reguladores, investigadores y pescadores conocer mejor la dinámica, biología y características de la comercialización de las especies marinas del Principado de Asturias.

[1] Hilborn R, Amoroso RO, Anderson CM, Baum JK, Branch TA, Costello C, et al. Effective fisheries management instrumental in improving fish stock status. *Proc Natl Acad Sci U S A.* 2020;117(4):2218-24.

[2] Sánchez-Visedo A, Gallego-Martínez B, Royo LJ, Soldado A, Valledor M, Campo JC, et al. MNAzymes and gold nanoparticles as isothermal signal amplification strategy for visual detection of miRNA. *Microchim Acta.* 2023;190(8):1–11.

**Agradecimientos:** este proyecto ha sido financiado por el proyecto Eye-Fish-Track (MCINN-22-PDC 2022-133730-100)



## P201

### Validation of different strategies of optical POCs for biomarkers of the quorum sensing system of *Staphylococcus aureus*

**A. Narváez**<sup>1</sup>, C.Ferrero<sup>2,4</sup>, C. Cabello<sup>1</sup>, F. J. Acevedo<sup>1</sup>, J.P. Salvador<sup>2,4</sup>, M.P. Marco<sup>2,4</sup>,  
E. Domínguez<sup>3</sup> and M. Torre<sup>1</sup>

*1*University of Alcalá, Bioanalysis and Biosensor group, 28805, Alcalá de Henares, Spain

*2*Spanish National Research Council, (CSIC), Nanobiotechnology for Diagnostics (Nb4D) Group,  
08034 Barcelona, Spain

*3* Spanish National Research Council, (CSIC), Madrid, Spain

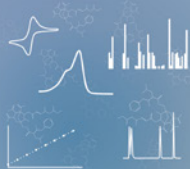
*4* Networking Research Centre on Biomaterials, Bioengineering and Nanomedicine (CIBER-BBN)

*Staphylococcus aureus* is a Gram-positive pathogen responsible for many human infections, both nosocomial and community-acquired. The main quorum sensing autoinducers of this microorganism are four peptides called AIPs.

In this work, an optical transduction PoC has been developed using two different approaches: (i) for home use, where the end user is the patient, to be used with a smart phone, and (ii) for use in healthcare facilities, based on screen-printed electrodes and fibre optics. In both cases, a displacement ELISA method has been developed to have a simple, fast, reliable and reproducible detection of AIP3 and AIP1. These molecules are peptides biosynthesized by the pathogen as part of its Quorum Sensing system, and have the potential to be used as biomarkers of infection, by analysing, in clinical samples (ex. sputum and clinical isolates from patients with lung involvement, especially those with cystic fibrosis, CF), showing an excellent sensitivity (nM) and recoveries within 80-110% range. The developed PoCs allow rapid diagnosis of multi-resistant pathogens during the colonization stage and before infection develops, contributing to a significant reduction in antibiotics and medical supplies expenditure, control and mitigation of disease exacerbation and, consequently, the economic loss derived from patients' sick leave.

#### **Acknowledgements:**

Financial support from the Spanish Ministry for Science, Innovation and Universities PID2021-126257OB-C22 is acknowledged.



## P202

### Design and electrochemical characterization of DNA-Ag-NCs as labels for immunoassays

A. Narváez<sup>1</sup>, C. Cabello, Ó. Esteban<sup>1</sup>, J.R. de Lucas<sup>1</sup>, J. Acevedo<sup>1</sup>, J. Parellada<sup>1</sup>, M. Torre<sup>1</sup> and E. Dominguez<sup>2</sup>

*1*University of Alcalá, Bioanalysis and Biosensor group, 28805, Alcalá de Henares, Spain

*2* Spanish National Research Council, (CSIC), Madrid, Spain

The oligonucleotide-templated nanoclusters are versatile markers with smaller size than QDs, especially those based on Ag (DNA-Ag-NCs), better biocompatibility and better conjugation chemistries. Despite they are used as an excellent alternative to traditional fluorophores due to the simplicity of modulating the emission color (from the visible spectrum to the near IR) by designing the ssDNA sequence, little research has been done on their unique electrochemical properties. This fact gives them the unique quality of being able to design dual signal systems for qualitative and quantitative analysis[1].

In this work, the electrochemical characterization (CV & LSV) of these DNA-Ag nanoclusters is pursued. The results show a different reduction profile for both red-only and two components of blue- and red-emitting DNA-Ag-NCs. Furthermore, we show that the blue-emitting component is responsible for the electrocatalysis of H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> as proposed elsewhere[2]. Then, the presence of H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> in solution allows the amplification of the electrochemical response of these DNA-Ag-NCs, increasing the sensitivity of the system when these nanoclusters are used as markers for the design of electrochemical biosensors.

#### References

[1] Y. Cao et al., *Biosensors and Bioelectronics*, 2019,130, 132-138,

[2] K. L. Schroeder, R. V. Goreham, and T. Nann, *Nanomaterials*, 2019, 9, (8),2-9

#### Acknowledgements:

Financial support from the Spanish Ministry for Science, Innovation and Universities PID2021-126257OB-C22 is acknowledged.

