

Libro de Resúmenes

XVIII Reunión del Grupo Regional Andalúz de la Sociedad Española de Química Analítica (GRASEQA 2025)



Libro de resúmenes de la XVIII reunión del Grupo Regional Andaluz de la Sociedad Española de Química Analítica.

Fecha y lugar de realización:

2 y 3 de octubre de 2025, Cádiz, España.

Edición:

Juan José García Guzmán
María Dolores Granado Castro
Belen Herce Sesa
Laura Cubillana Aguilera
Dolores Bellido Milla
José Antonio López López

Ilustración:

Juan José García Guzmán
Enrique Durán Guerrero

Reservado todos los derechos

ISBN:978-84-09-77351-0

Edita e Imprime: Comité Organizador GRASEQA 2025

Comité Organizador

Coordinador

Enrique Durán Guerrero

Vocales:

M. José Aliaño González

Dolores Bellido Milla

Ceferino Carrera Fernández

M. José Casanueva Marengo

Remedios Castro Mejías

Laura Cubillana Aguilera

Margarita I. Díaz de Alba

Estrella Espada Bellido

Gerardo Fernández Barbero

Marta Ferreiro González

M. Dolores Galindo Riaño

Juan José García Guzmán

M. Valme García Moreno

M. Dolores Granado Castro

Dominico A. Guillén Sánchez

Belén Herce Sesa

José Antonio López López

Carolina Mendiguchía Martínez

Carlos Moreno Aguilar

José María Palacios Santander

Miguel Palma Lovillo

Juan José Pinto Ganfornina

M. Carmen Rodríguez Dodero

Ana Ruiz Rodríguez

M. Mercedes Vázquez Espinosa

Comité Científico

Coordinador

M. Loreto Lunar Reyes. Universidad de Córdoba

Vocales:

Esteban Alonso Álvarez. Universidad de Sevilla

Ana María Ballesteros Gómez. Universidad de Córdoba

Enrique Durán Guerrero. Universidad de Cádiz

Tamara García Barrera. Universidad de Huelva

Juan Francisco García Reyes. Universidad de Jaén

Antonia Garrido Frenich. Universidad de Almería

Feliciano Priego Capote. Universidad de Córdoba

Elisa Vereda Alonso. Universidad de Málaga

Alberto Zafra Gómez. Universidad de Granada

Organizadores y patrocinadores

Organizadores



Patrocinadores



Diputación
de Cádiz



Agilent



ANDALUZA DE
INSTRUMENTACION, S.L.



Facultad de Ciencias
<http://ciencias.uca.es>
Biotecnología
Enología
Ingeniería Química
Matemáticas
Química



COSELA
THE LAB SOLUTION



Índice

Programa Científico	1
Ponencias invitadas	3
Comunicaciones orales	5
 Sesión 1. Inteligencia Artificial, Machine Learning y Quimiometría	5
CO_1-SpecAI: UNA PLATAFORMA DE ANÁLISIS ESPECTROSCÓPICO BAÑADA EN INTELIGENCIA ARTIFICIAL	6
CO_2-ESTRATEGIA ESTADÍSTICO ANALÍTICA PARA LA CUANTIFICACIÓN DE COMPUESTOS VOLÁTILES EN MATRICES DE ACEITE DE OLIVA VIRGEN	7
CO_3-COMBINING SALLE-GC-ORBITRAP-HRMS-BASED METABOLOMICS AND MULTI-TECHNIQUE DATA FUSION: AN INNOVATIVE APPROACH FOR HONEY BOTANICAL ORIGIN AUTHENTICATION	8
CO_4-OMICS TOOLS FOR FOOD AUTHENTICATION: DECODING THE IMPACT OF TERROIR ON PAPRIKA COMPOSITION AS A CASE STUDY	9
CO_5-PROCESAMIENTO COMPUTACIONAL DE IMÁGENES PARA SISTEMAS MICROFLUÍDICOS EN BIOANÁLISIS Y ANÁLISIS DE NANOPARTÍCULAS	10
CO_6-LA CALIDAD DEL ACEITE DE OLIVA VIRGEN EVALUADA MEDIANTE NMR DE SOBREMESA: UNA NUEVA VISIÓN ANALÍTICA	11
 Sesión 2. Seguridad Alimentaria y Control de Calidad	12
CO_7-EVALUACIÓN DE LA AUTENTICIDAD DEL ACEITE DE OLIVA VIRGEN MEDIANTE EL PERFILADO DE LA FRACCIÓN INSAPONIFICABLE USANDO CROMATOGRAFÍA DE FLUIDOS SUPERCRÍTICOS ACOPLADA A ESPECTROMETRÍA DE MASAS	13
CO_8-COMPUESTOS VOLÁTILES AZUFRADOS EN DESTILADOS DE VIÑO MEDIANTE EXTRACCIÓN POR SORCIÓN CON BARRA AGITADORA, CROMATOGRAFÍA DE GASES Y ESPECTROMETRÍA DE MASAS	14
CO_9-APROVECHANDO LOS BENEFICIOS DE LA VERDOLAGA A TRAVÉS DE LA EXTRACCIÓN RÁPIDA Y EFICIENTE DE SUS COMPUESTOS BIOACTIVOS	15
CO_10-DESARROLLO Y COMPARACIÓN DE MÉTODOS DE EXTRACCIÓN DE COMPUESTOS FENÓLICOS DESDE MADERA ENVINADA	16
CO_11-CARACTERIZACIÓN PROTEÓMICA DE MIEL DE ABEJAS SIN AGUIJÓN (MELIPONINI) MEDIANTE ESPECTROMETRÍA DE MASAS DE ALTA RESOLUCIÓN	17
CO_12-CREACIÓN DE UN BANCO DE MUESTRAS DE REFERENCIA PARA LA CLASIFICACIÓN INSTRUMENTAL DEL ACEITE DE OLIVA VIRGEN	18
CO_13-ESTUDIO COMPARATIVO DE TÉCNICAS DE IMAGEN HIPERESPECTRAL Y ESPECTROSCOPIA PORTÁTIL EN LA SELECCIÓN	

Índice

DE MUESTRAS DE ORUJO DE UVA BLANCA DESTINADAS A LA PRODUCCIÓN DE AFINANTES	19
 Sesión 3. Bioanálisis y Avances en Química Analítica para el Diagnóstico y la Salud	20
CO_14-ASSOCIATION OF NEONATAL OUTCOMES, METABOLIC RISK FACTORS AND METAL LEVELS IN CHILDREN WITH OBESITY	21
CO_15-BISFENOLES Y ENDOMETRIOSIS: AVANCES EN EL DIAGNÓSTICO PRECOZ A TRAVÉS DE TÉCNICAS ANALÍTICAS NO INVASIVAS	22
CO_16-BIOMONITORIZACIÓN DE PAHS EN TRABAJADORES EXPUESTOS OCUPACIONALMENTE MEDIANTE TÉCNICAS DE MUESTREO NO INVASIVAS	23
CO_17-DETERMINATION OF LITHIUM IN BLOOD VIA DIRECT ANALYSIS OF DRIED BLOOD SPOTS USING HR-CS-GFAAS	24
CO_18-AVANCES EN LA DETERMINACIÓN CONTINUA DE LACTATO EN SUERO HUMANO NO TRATADO: BIOSENSOR AMPEROMÉTRICO BASADO EN MULTIPOLÍMEROS ACOPLADO A UNA CELDA MICROFLUÍDICA DE BAJO COSTE IMPRESA EN 3D	25
CO_19-ENFOQUE ANALÍTICO MULTIPLATAFORMA PARA LA CARACTERIZACIÓN DE METABOLITOS, HORMONAS TIROIDEAS Y SELENOPROTEÍNAS EN LECHE MATERNA	26
CO_20-DEVELOPMENT AND VALIDATION OF AN ANALYTICAL METHOD FOR THE DETERMINATION OF ADVANCES GLYCATION END PRODUCTS IN HUMAN BIOFLUIDS	27
CO_21-ESTUDIO DEL METALOMA CEREBRAL POST- MORTEM EN MUESTRAS DE CORTEZA FRONTAL Y GANGLIOS BASALES DE PACIENTES CON ALZHEIMER CON EN DIFERENTES ESTADIOS DE BRAAK	28
 Sesión 4. Contaminantes Emergentes y Medio Ambiente	29
CO_22-DETERMINACIÓN DE ANTIBIÓTICOS Y SUS METABOLITOS EN MEJILLONES MEDIANTE EXTRACCIÓN POR DISPERSIÓN DE MATRIZ EN FASE SÓLIDA: APLICACIÓN EN ENSAYOS DE EXPOSICIÓN	30
CO_23-DESCONTAMINACIÓN MAGNÉTICA DE AGUAS Y SU REVALORIZACIÓN	31
CO_24-ESTRATEGIAS ANALÍTICAS PARA LA IDENTIFICACIÓN DE MICROPLÁSTICOS EN MUESTRAS AMBIENTALES MEDIANTE PY-GC-MS	32
CO_25-MONITORING MICROPLASTIC POLLUTION IN THE MEDITERRANEAN: ANALYSIS OF SEA SALT USING SWIR-HSI TECHNOLOGY	33
CO_26-NUEVO MÉTODO PARA LA DETERMINACIÓN DE PFAS TOTALES EN AGUAS CONTAMINADAS MEDIANTE MSPE-HR-CS-GFMS	34
CO_27-DETERMINACIÓN DE COMPUESTOS PERSISTENTES, MÓVILES Y TÓXICOS EN SISTEMAS ESTUARINOS Y MARINOS MEDIANTE EXTRACCIÓN EN FASE SÓLIDA Y CROMATOGRAFÍA LÍQUIDA	

Índice

ACOPLADA A ESPECTROMETRÍA DE MASAS DE ALTA RESOLUCIÓN	35
CO_28-ANÁLISIS DE PFAS Y OTROS CONTAMINANTES AMBIENTALES EN SUELO Y PLANTAS DE AVENA MEDIANTE GC/MS DE ALTA RESOLUCIÓN.	36
 Sesión 5. Avances en Instrumentación Analítica	37
CO_29-DETERMINACIÓN POTENCIOMÉTRICA SIMULTÁNEA Y EN FLUJO DE IONES SODIO Y POTASIO EN MUESTRAS REALES SIN TRATAR DE SUERO Y PLASMA EMPLEANDO UNA CELDA MICROFLUÍDICA 3D DE BAJO COSTE.	38
CO_30-INTEGRACIÓN DE LA PREPARACIÓN DE MUESTRA Y DETECCIÓN: AVANCES EN EL ANÁLISIS ELECTROQUÍMICO DE CODEÍNA EN MUESTRAS AMBIENTALES Y BIOLÓGICAS	39
CO_31-EXTRACCIONES MÁS SOSTENIBLES DE BIOPLAGUICIDAS: COMBINANDO TÉCNICAS DE MICROEXTRACCIÓN CON DISOLVENTES EUTÉCTICOS PROFUNDOS NATURALES (NADES)	40
CO_32-ANÁLISIS NO DIRIGIDO DE CONTAMINANTES ORGÁNICOS MEDIANTE ESPECTROMETRÍA DE MASAS DE ALTA RESOLUCIÓN: FLUJOS DE TRABAJO Y CASOS DE ESTUDIO	41
CO_33-ANÁLISIS DE MEDICAMENTOS Y DROGAS DE ABUSO EN SUPERFICIES DEL INTERIOR DE EDIFICIOS: DESARROLLO DE UN MÉTODO EFICIENTE BASADO EN DISOLVENTES SUPRAMOLECULARES	42
CO_34-ANÁLISIS ISOTÓPICO SIMULTÁNEO Y ESPECIE-ESPECÍFICO DE MERCURIO INORGÁNICO Y METILMERCURIO MEDIANTE ESPECTROMETRÍA DE MASAS ORBITRAP CON IONIZACIÓN SUAVE	43
CO_35-MATERIAL COMPUESTO DE POSOS DE CAFÉ Y MAGNETITA PARA LA ADSORCIÓN DE METALES EN MATRICES ACUOSAS	44
Pósteres	45
P_1-EVOLUCIÓN EN LA AUTENTIFICACIÓN DEL ACEITE DE OLIVA VIRGEN: LA INTEGRACIÓN DE MÉTODOS DE ANÁLISIS QUÍMICO Y APRENDIZAJE AUTOMÁTICO	46
P_2-INDEPENDENCIA DEL PERFIL CROMATOGRÁFICO FRENTE A LAS CONDICIONES DEL CROMATÓGRAFO: UN PASO HACIA LA AGNOSTIZACIÓN INSTRUMENTAL Y SU APLICACIÓN EN EL ANÁLISIS MULTIVARIANTE PARA LA DETECCIÓN DE ADULTERACIONES EN ACEITE DE OLIVA VIRGEN	47
P_3-EVALUACIÓN DEL USO DE SUBPRODUCTOS AGRONÓMICOS EN LA PRODUCCIÓN DE GRASA Y HARINA DE T. MOLITOR: IMPACTO EN EL PERFIL VOLÁTIL	48
P_4-EFECTO DE LA DIETA DE TENEBRIO MOLITOR EN LA COMPOSICIÓN QUÍMICA DE LAS HARINAS DE TENEBRIO MOLITOR: UN ENFOQUE ESPECTROSCÓPICO	49
P_5-USO DE PARED CELULAR DE UVA BLANCA EN EL AFINAMIENTO DE VINO TINTO: DESCIFRANDO EL MECANISMO MEDIANTE ESPECTROSCOPÍA VIBRACIONAL (ATR-FTIR)	50

Índice

P_6-CARACTERIZACIÓN LUMINISCENTE DE NANOCLÚSTERES METÁLICOS SINTETIZADOS CON OLIGONUCLEÓTIDOS COMO PLANTILLAS	51
P_7-UNVEILING THE ACETOGENIN PROFILE OF AVOCADO: LC-IMS-MS ANALYSIS OF BACON, FUERTE, AND HASS TISSUES (PEEL, PULP AND SEED)	52
P_8-EXPLORING THE GEOGRAPHIC INFLUENCE ON HASS AVOCADOS FROM THE IBERIAN PENINSULA VIA LC-IMS-MS METABOLOMICS	53
P_9-ULTRASONIDOS Y DIGESTIÓN IN VITRO: UN ENFOQUE ANALÍTICO PARA ESTUDIAR LA BIODISPONIBILIDAD DE METILXANTINAS EN CACAO	54
P_10-NON-STRUCTURAL CARBOHYDRATE COMPOSITION OF HASS AVOCADOS: EFFECTS OF POSTHARVEST COLD STORAGE VERSUS EXTENDED ON-TREE MATURATION	55
P_11-UHPLC-IMS-MS-BASED METABOLOMIC FINGERPRINTING OF DIFFERENT AVOCADO VARIETIES: INFLUENCE OF GENETIC ORIGIN	56
P_12-ANÁLISIS DE LA COMPOSICIÓN FENÓLICA Y VOLÁTIL DE MADERAS UTILIZADAS PARA EL ENVEJECIMIENTO DE VINAGRES DE JEREZ MEDIANTE UPLC Y DTD-GC-MS	57
P_13-ANÁLISIS CONTINUO DE LA DEGRADACIÓN DE ACEITES VEGETALES MEDIANTE ESTRATEGIAS COMBINADAS FTIR "ON-DEVICE"	58
P_14-DIFERENCIAS EN EL COMPORTAMIENTO ELECTROQUÍMICO DE ZUMOS DE NARANJA DE DISTINTA VARIEDAD	59
P_15-REVALORIZACIÓN DE SUBPRODUCTOS DE MANGO TOMMY ATKINS (MANGIFERA INDICA): ELABORACIÓN DE ALIMENTOS RICOS EN COMPUESTOS BIOACTIVOS	60
P_16-RELACIÓN ENTRE LA COMPOSICIÓN FENÓLICA Y EL POTENCIAL ANTIOXIDANTE DE SEMILLAS DE UVA	61
P_17-MAPEANDO LA DIVERSIDAD DE VINOS TINTOS ESPAÑOLES MEDIANTE UNA NUEVA HERRAMIENTA ESPECTROSCÓPICA PORTÁTIL QUE INTEGRA IA	62
P_18-EXTRACCIÓN VERDE DE TRIPTÓFANO EN SETAS SILVESTRES: VINCULANDO SU PODER ANTIOXIDANTE Y NEUROPROTECTOR	63
P_19-ACUMULACIÓN DE METALES EN SETAS DEL GÉNERO MORCHELLA TRAS EL INCENDIO DE SIERRA BERMEJA: UN ANÁLISIS DE RIESGO PARA LA SALUD	64
P_20-UNIFICANDO HUELLAS INSTRUMENTALES E IA PARA EL DESARROLLO DE ESTRATEGIAS SOSTENIBLES APLICADAS AL CONTROL DE CALIDAD DE ACEITES DE OLIVA	65
P_21-EVALUACIÓN DE LA CAPACIDAD ANTIOXIDANTE DE EXTRACTOS DE SETAS DE ALTO VALOR GASTRONÓMICO	66
P_22-EVALUACIÓN DE LA COMPOSICIÓN FENÓLICA, ACTIVIDAD ANTIOXIDANTE Y CONTENIDO MINERAL DE SALICORNIA SPP. DE LA COSTA DE CÁDIZ	67

Índice

P_23-USO DE PLATAFORMAS ANALÍTICAS COMPLEMENTARIAS PARA EL ESTUDIO DE LA FRACCIÓN FENÓLICA LIBRE E HIDROLIZABLE DE AVERRHOA CARAMBOLA	68
P_24-STOP HONEY FRAUD: AUTENTIFICACIÓN INTELIGENTE DE LA MIEL MEDIANTE NIRS Y APRENDIZAJE AUTOMÁTICO	69
P_25-USO DE HERRAMIENTAS QUIMIOMÉTRICAS PARA LA COMPARACIÓN DE LOS SISTEMAS DE ENVEJECIMIENTO, ESTÁTICO Y DINÁMICO, DE DESTILADOS DE MALTA EN SHERRY CASKS	70
P_26-MEJORA DE UN SENSOR POTENCIOMÉTRICO DE PH BASADO EN POLÍMEROS CONDUCTORES ELECTRODEPOSITADOS MEDIANTE VOLTAJES SINUSOIDALES PARA LA MONITORIZACIÓN DE MUESTRAS ALIMENTICIAS DE DIVERSO pH	71
P_27-EVALUACIÓN DE LA CAPACIDAD ANTIOXIDANTE DE ACEITES DE OLIVA VIRGEN MEDIANTE VOLTAMPEROMETRÍA DIFERENCIAL DE IMPULSOS	72
P_28-DETERMINACIÓN DE TERPENOIDES Y ESTEROLES LIBRES Y DERIVADOS EN RESIDUOS DE CAFÉ MEDIANTE CROMATOGRAFÍA DE LÍQUIDOS BIDIMENSIONAL - CROMATOGRAFÍA DE FLUIDOS SUPERCRÍTICOS ACOPLADA A ESPECTROMETRÍA DE MASAS DE ALTA RESOLUCIÓN	73
P_29-UNTARGETED ANALYTICAL STRATEGIES TO CLASSIFY HONEY BY BOTANICAL ORIGIN APPLYING HIGH-RESOLUTION MASS SPECTROMETRY CHEMICAL FINGERPRINTING	74
P_30-DETERMINACIÓN DE PARABENOS EN MUESTRAS DE PELO MEDIANTE UHPLC-MS/MS. ESTUDIO DE LA RELACIÓN ENTRE LA EXPOSICIÓN Y SU EFECTO EN EL DESARROLLO COGNITIVO EN NIÑOS (WISC-V)	75
P_31-DETERMINACIÓN DE ÁCIDOS BILIARES, HORMONAS SEXUALES Y BENZODIAZEPINAS EN PLASMA DE RATÓN	76
P_32-IMPACTO SOBRE EL METABOLISMO ENDÓGENO DE HORMONAS SEXUALES Y ÁCIDOS BILIARES EN MAMÍFEROS EXPUESTOS A BENZODIAZEPINAS	77
P_33-IDENTIFYING PESTICIDE EXPOSURE BIOMARKERS IN OLIVE GROVE WORKERS USING ANALYTICAL TOOLS	78
P_34-ADVERSE NEONATAL OUTCOMES PREDISPOSE TO EXACERBATED METABOLIC DISTURBANCES IN CHILDHOOD OBESITY	79
P_35-OPTIMIZATION OF AN ULTRASONIC-ASSISTED EXTRACTION METHOD FOR THE ELABORATION OF BIOACTIVE-ENRICHED EXTRACTS THROUGH THE VALORIZATION OF BEACH-CAST SEaweeds	80
P_36-IDENTIFYING METABOTYPES OF INSULIN RESISTANCE SEVERITY IN CHILDREN WITH METABOLIC SYNDROME	81
P_37-METABOLOMICS APPROACH TO THE POTENTIAL OF ERYTHROCYTES AS SENSITIVE AND RELIABLE SENSORS OF	

Índice

METABOLIC DISTURBANCES IN THE CROSSTALK BETWEEN CHILDHOOD OBESITY AND INSULIN RESISTANCE	82
P_38-METODOLOGÍAS (META-)ÓMICAS PARA EL ESTUDIO DE LA INFLUENCIA DEL MANGANESO EN EL EJE MICROBIOTA INTESTINAL-CEREBRO	83
P_39-DETERMINACIÓN DE METALES EN MUESTRAS DE SUERO DE PACIENTES CON CÁNCER COLORRECTAL MEDIANTE ESPECTROMETRÍA DE MASAS DE PLASMA DE ACOPLAMIENTO INDUCTIVO (ICP_MS)	84
P_40-CHARACTERIZATION OF THE BIOACTIVE PROFILE OF BEACH-CAST SEaweEDS USING A QUANTITATIVE AND LARGE-SCALE METABOLOMICS APPROACH	85
P_41-BIODISOLVENTES SUPRAMOLECULARES DE TWEEN 20: SÍNTESIS, CARACTERIZACIÓN Y APLICACIÓN A LA EXTRACCIÓN DE BIOACTIVOS DE PIEL DE NARANJA.	86
P_42-DESARROLLO E IMPLEMENTACIÓN DE UN NUEVO BIOSENSOR AMPEROMÉTRICO PARA LA DETECCIÓN DIRECTA DE GLUCOSA EN SUERO SANGUÍNEO	87
P_43-FITORREMEDIACIÓN DE COMPUESTOS ORGÁNICOS VOLÁTILES (VOCs) MEDIANTE JARDINES VERTICALES ACTIVOS (ALW). DETERMINACIÓN POR CROMATOGRAFÍA DE GASES Y ESPACIO DE CABEZA (HS-GC-FID). OPTIMIZACIÓN Y EVALUACIÓN	88
P_44-ESTUDIO DE LA EFICACIA DE SISTEMAS DOMÉSTICOS DE FILTRACIÓN DE AGUA PARA LA ELIMINACIÓN DE CONTAMINANTES EMERGENTES EN AGUAS DE ANDALUCÍA	89
P_45-METABOLIC PROFILING AND FUNCTIONAL PATHWAY ANALYSIS IN THE DIGESTIVE GLAND OF FRESHWATER MUSSELS (UNIO RAOVISIERI): IMPACT OF NANOPARTICLE EXPOSURE, AND THE PROTECTIVE ROLE OF SELENIUM	90
P_46-VALORIZACIÓN DE RESIDUOS DE BRÓCOLI COMO BIOSORBENTE EFICAZ DE IONES DE Pb(II)	91
P_47-CONTAMINANTES METÁLICOS EN MUESTRAS DE POLVO DE LA BAHÍA DE CÁDIZ	92
P_48-DETERMINACIÓN SIMULTÁNEA DE IONES Cu(II), Ni(II) Y Cd(II) EN AGUAS NATURALES MEDIANTE UNA MEMBRANA DE INCLUSIÓN POLIMÉRICA	93
P_49-MÉTODO AUTOMATIZADO BASADO EN SPE ONLINE-LC-MS/MS PARA LA DETERMINACIÓN ENANTIOSELECTIVA DE FÁRMACOS QUIRALES EN AGUAS RESIDUALES	94
P_50-MONITOREO DE PESTICIDAS EN SUELOS DE OLIVAR INTENSIVO Y ECOLÓGICO EN LA CUENCA MEDITERRÁNEA MEDIANTE LC-MS/MS	95
P_51-TÉCNICAS ANALÍTICAS EN LA EVALUACIÓN DE LA EFICIENCIA DE LA STEVENSITA PURIFICADA EN LA ELIMINACIÓN DE TETRACICLINAS Y SUS METABOLITOS EN AGUAS RESIDUALES	96

Índice

P_52-DESARROLLO Y VALIDACIÓN DE UN MÉTODO MULTIRRESIDUO PARA LA DETERMINACIÓN DE ANTIBIÓTICOS Y SUS METABOLITOS EN LODOS DE DEPURADORA Y SUELOS	97
P_53-HOLOTHURIA TUBULOSA COMO BIOINDICADOR EN EL ESTUDIO DE LA CONTAMINACIÓN MARINA. ANÁLISIS DE ALTERADORES ENDOCRINOS QUÍMICOS MEDIANTE CROMATOGRAFÍA CG-MS/MS	98
P_54-MONITORIZACIÓN AMBIENTAL MEDIANTE METODOLOGÍAS ÓMICAS EN ESPACIOS NATURALES UTILIZANDO AVES COMO BIOINDICADORES DE CALIDAD AMBIENTAL	99
P_55-DETERMINATION OF OCTOCRYLENE, BENZOPHENONE-3 AND ITS DERIVATES IN SWIMMING POOL WATERS BY GAS CHROMATOGRAPHY-MASS SPECTROMETRY	101
P_56-ANALYTICAL METHOD FOR THE DETERMINATION OF GLYCOLS AND BISPHENOLS IN SURFACE WATERS USING SOLID-PHASE EXTRACTION AND GAS CHROMATOGRAPHY-MASS SPECTROMETRY	102
P_57-COMPARACIÓN DE MÉTODOS DE MUESTREO EN ESPACIO DE CABEZA PARA EL ANÁLISIS DE COMPUESTOS VOLÁTILES DE PASTAS DE CACAO DE COSTA RICA: UNA HERRAMIENTA PARA EXPLORAR SU ORIGEN	103
P_58-APPLICATION OF A GRAPHENE OXIDE SORBENT MODIFIED WITH MAGNETIC NANOPARTICLES FOR THE EXTRACTION OF PHARMACEUTICALS FROM WASTEWATER	104
P_59-AVANCES EN BIOANÁLISIS MEDIANTE ESTRATEGIAS DE MINIATURIZACIÓN Y CONTROL DINÁMICO CON TECNOLOGÍA RASPBERRY PI	105
P_60-EXTRACCIÓN MEDIANTE MICRO-ELECTROMEMBRANA (M-EME) EMPLEANDO MEMBRANAS LÍQUIDAS LIBRES PARA LA DETERMINACIÓN DE PARABENOS EN MUESTRAS BIOLÓGICAS Y MEDIOAMBIENTALES	106
P_61-DESARROLLO DE UN MÉTODO BASADO EN LA TÉCNICA HS-GC-IMS EN COMBINACIÓN CON ALGORITMOS DE APRENDIZAJE AUTOMÁTICO PARA LA DISCRIMINACIÓN DEL OLOR HUMANO	107
P_62-CONDICIONES EXPERIMENTALES PARA LA APLICACIÓN EN ARQUEOMETRÍA DE LA ESPECTROSCOPÍA DE FLUORESCENCIA DE RAYOS X	108
P_63-SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE BIODISOLVENTES SUPRAMOLECULARES OBTENIDOS A PARTIR DE LAURATO DE GLICERILO Y BENZOATO DE SODIO EN MEDIO ACUOSO	109
P_64-DETERMINACIÓN DE COMPUESTOS DE PREOCUPACIÓN EMERGENTE ASOCIADOS AL USO DE DISPOSITIVOS ELECTRÓNICOS MEDIANTE EL USO DE DISOLVENTES SUPRAMOLECULARES Y ESPECTROMETRÍA DE MASAS	110
P_65-EXTRACCIÓN ALL-IN-ONE CON DISOLVENTES SUPRAMOLECULARES PARA LA DETERMINACIÓN SIMULTÁNEA DE DOCE MICOTOXINAS REGULADAS EN CINCO CATEGORÍAS DE	

Índice

ALIMENTOS SÓLIDOS Y LÍQUIDOS	111
P_66-DESARROLLO Y CARACTERIZACIÓN DEL NUEVO MATERIAL SONOGEL-CARBONO CON MEDIADOR REDOX INTEGRADO Y REUTILIZABLE: SONOGEL-CARBONO/CARBON BLACK-AZUL DE PRUSIA	112
P_67-SÍNTESIS EN FASE SÓLIDA DE NANOESTRUCTURAS MAGNÉTICAS GRAFITIZADAS ASISTIDA POR LÁSER UV EN UN SOLO PASO COMO NUEVOS CATALIZADORES DE NANOENZIMAS	113
P_68-SENSOR ÓPTICO BASADO EN PUNTOS DE CARBONO PARA LA DETERMINACIÓN SIMULTÁNEA DE METALES MEDIANTE USO DE INTELIGENCIA ARTIFICIAL	114
P_69-DESARROLLO DE UN MÉTODO PARA LA SEPARACIÓN Y DETERMINACIÓN DE COBRE EN MUESTRAS SALINAS MEDIANTE MEMBRANAS DE INCLUSIÓN POLIMÉRICAS	115
P_70-POTENCIAL BIOACTIVO DE EXTRACTOS DE HOJAS DE OLIVO OBTENIDOS CON NADES: UN ENFOQUE HACIA LA ECONOMÍA CIRCULAR.	116
P_71-ANÁLISIS DE Cd(II) MEDIANTE UN SENSOR ÓPTICO BASADO EN UNA BASE DE SCHIFF INMOVILIZADA EN UNA MEMBRANA DE INCLUSIÓN POLIMÉRICA: APLICACIONES EN MUESTRAS DE AGUA Y PINTURAS ARTÍSTICAS	117
P_72-USO DE PRETRATAMIENTOS DE MUESTRA NO TÉRMICOS COMO ESTRATEGIA DE EXTRACCIÓN DE LOS COMPUESTOS FENÓLICOS DE LA HOJA DE MANGO	118
P_73-EMPLEO DE UN DISEÑO DE EXPERIMENTOS BOX-BEHNKEN PARA LA OPTIMIZACIÓN DE LA EXTRACCIÓN DE LOS COMPUESTOS FENÓLICOS DE LA HOJA DE AGUACATE MEDIANTE SONÓTRODO	119
P_74-OPTIMIZACIÓN DE CAMPOS ELÉCTRICOS PULSADOS COMO PRETRATAMIENTO DE EXTRACCIÓN DE COMPUESTOS FENÓLICOS EN HOJA DE GUAYABA	120
P_75-APLICACIÓN DE PRETRATAMIENTOS CON TECNOLOGÍAS EMERGENTES PARA MEJORAR LA EXTRACCIÓN DE COMPUESTOS FENÓLICOS CON ACTIVIDAD ANTIOXIDANTE Y ANTIDIABÉTICA EN HOJA DE GUAYABA	121
P_76-ESTUDIO COMPARATIVO DEL PERFIL VOLÁTIL DE MACROALGAS PROCEDENTES DEL MAR MEDITERRÁNEO Y EL OCÉANO ATLÁNTICO: EFECTOS DEL FILO Y LA ESTACIÓN	122
P_77-DISEÑO Y OPTIMIZACIÓN DE UN SENSOR ÓPTICO DESECHABLE PARA LA DETERMINACIÓN DE ZINC	123
P_78-USO Y OPTIMIZACIÓN DE DTD-GC-MS PARA EL ESTUDIO DE LOS COMPUESTOS VOLÁTILES APORTADOS POR LA MADERA Y SU TRATAMIENTO DE LAS BARRICAS SHERRY CASKS	124
P_79-INFLUENCIA DE LA SALINIDAD EN LA DETECCIÓN LUMINISCENTE DE ANTIBIÓTICOS DE USO EN ACUICULTURA	125
P_80-DISEÑO Y DESARROLLO DE UN SENSOR ELECTROQUÍMICO	

Índice

PARA LA MONITORIZACIÓN DE LITIO EN MUESTRAS REALES	126
P_81-INFLUENCIA DEL MÉTODO DE EXTRACCIÓN EN LA COMPOSICIÓN FENÓLICA Y EL PERFIL ELECTROQUÍMICO DE ORUJOS DE VINIFICACIÓN	127
P_82-ALGAS DE ARRIBAZÓN: DE PROBLEMA A OPORTUNIDAD	128
P_83-NUEVO MÉTODO DE EXTRACCIÓN DE COMPUESTOS VOLÁTILES EN MUESTRAS DE MADERA DE USO ENOLÓGICO, BASADO EN EL USO DE COLUMNAS VIGREAU	129
P_84-APLICACIÓN DE TÉCNICAS EXTRACTIVAS PARA LA OBTENCIÓN DE COMPUESTOS BIOACTIVOS A PARTIR DE HONGOS	130
P_85-COMPARACIÓN DE MÉTODOS BASADOS EN SBSE-GC-MS Y HS-SPME-GC-MS PARA LA DETERMINACIÓN DE ALCOHOLES SUPERIORES EN VINOS Y DERIVADOS	131
P_86-DESARROLLO Y VALIDACIÓN DE UN MÉTODO HILIC-MS/MS PARA LA DETERMINACIÓN DE PESTICIDAS POLARES Y SUS PRODUCTOS DE TRANSFORMACIÓN EN SUELOS DE OLIVAR	132
P_87-APLICACIÓN DE LA FUENTE DE PLASMA POR MICROTUBO FLEXIBLE (FμTP) PARA LA IONIZACIÓN EFICIENTE DE CONTAMINANTES ORGÁNICOS MEDIANTE LC-MS	133
P_88-MODELIZACIÓN DE LA ADSORCIÓN DE METALES SOBRE PÓLIPROPILENO RECICLADO EN COLUMNAS DE LECHO FIJO	134
P_89-INFOGEST 2.0 EN LA CÚRCUMA: BIODISPONIBILIDAD DE CÚRCUMINOIDES Y SESQUITERPENOS	135

JUEVES, 2 DE OCTUBRE DE 2025

08:30 Registro y Recogida de documentación.

Colocación de posters.

09:15 Inauguración de la Reunión.

09:30 Conferencia Plenaria

Luis Cuadros Rodríguez – Universidad de Granada.

Temática: Un enfoque inclusivo para la Química.

Analítica en la era de la inteligencia artificial.

10:30 Comunicaciones Orales S1.

11:45 Sesión de posters. Café.

12:15 Comunicaciones Orales S2.

13:45 Almuerzo Buffet y Sesión de Posters.

17:15 Comunicaciones orales S3.

18:15 Fin de la Jornada.

21:00 Cena de Gala-Baluarto de los Mártires (Cádiz).

Viernes, 3 DE OCTUBRE DE 2025

09:00 Comunicaciones orales S4.

10:30. Conferencia Plenaria.

Verónica Pino Estévez – Universidad de La Laguna

Temática: Métricas de Sostenibilidad en Química

Analítica: ¿non-stop?

11:15 Sesión Pósters. Café.

11:45 Comunicaciones orales S5.

13:15 Asamblea General GRASEQA.

14:15 Clausura de la Reunión, cóctel de despedida y entrega de premios.



NOMBRE: Luis Cuadros Rodríguez

CORREO ELECTRÓNICO: lcuadros@ugr.es

INSTITUCIÓN: Departamento de Química Analítica, Universidad de Granada

TÍTULO DE LA CONFERENCIA:

Un enfoque inclusivo para la Química Analítica en la era de la inteligencia artificial

RESUMEN:

La Química Analítica moderna es la ciencia interdisciplinar cuyo objetivo principal es la obtención de información química de sistemas materiales. La definición actualmente aceptada (IUPAC, 2021) incide en el término INFORMACIÓN, mientras que ya no contempla el término MEDIDA. El flujo de la información es lo que determina el proceso analítico, que se inicia con la adquisición (no la medida) de una señal analítica, de dimensionalidad variable, y tiene como objetivo principal transformar la información latente encerrada en dicha señal en información patente que pueda ser interpretada. Para ello, tradicionalmente la información de la señal se condensa en un único dato numérico (un escalar) cuyo valor está directamente ligado a la información diana, lo que da lugar a la estrategia univariable. Sin embargo, este enfoque adolece de algunos inconvenientes cuando se busca una determinación holística considerando un conjunto de características interdependientes del sistema material en estudio que convergen e interaccionan de forma simultánea. En estos casos, la aplicación de la estrategia multivariable se debería hacer inexcusable. En esta etapa es donde la quimiometría, ahora bajo el paraguas de la inteligencia artificial, permiten dar apoyo a este enfoque de forma factible. Ello permite disponer de modelos que difícilmente se pueden representar por una ecuación matemática, pero que ofrecen predicciones de gran calidad. Esta característica de "caja negra" causa desconfianza entre los químicos analíticos. Todos estos aspectos se pueden unificar mediante una única, sencilla e intuitiva ecuación básica de proceso, que aúna ambas estrategias de forma inclusiva, y que será presentada y discutida durante la exposición.



NOMBRE: Verónica Pino Estévez

CORREO ELECTRÓNICO: veropino@ull.edu.es

INSTITUCIÓN: Laboratorio de Materiales para Análisis Químico (MAT4LL), Departamento de Química, Unidad Departamental de Química Analítica, Universidad de La Laguna (ULL), Unidad de Investigación de Bioanalítica y Medio Ambiente, Instituto Universitario de Enfermedades Tropicales y Salud Pública de Canarias, ULL, Centro de Investigación Biomédica en Red de Enfermedades Infecciosas (Ciberinfec).

TÍTULO DE LA CONFERENCIA:

Métricas de Sostenibilidad en Química Analítica: ¿non-stop?

RESUMEN:

El concepto de la Química Verde, y más concretamente, los 12 principios que Anastas y Warner propusieron a modo de guía [1], supusieron sin duda una cimentación de aspectos de enorme relevancia en la preocupación medioambiental, que, de algún modo, venían ya promovidos a nivel social y científico desde principios de la década de los 70. No obstante, fue necesaria una adaptación de estos principios al campo de la Química Analítica, y, asimismo, al ámbito de la preparación analítica de muestras (por constituir, en la mayoría de los casos, la etapa más crítica del método analítico desde el punto de vista del impacto medioambiental). El establecimiento de principios de sostenibilidad en este campo, conjuntamente con la revolución que supuso en el área no sólo la microextracción, sino la miniaturización en su conjunto, y la automatización, derivó, de un modo natural, en el desarrollo de métricas que permitieran cuantificar el impacto medioambiental de un determinado método analítico. De este modo, se pretendía aportar un valor numérico que ayudase a evitar criterios cualitativos o afirmaciones genéricas y, además, con escalas visuales que pusieran el énfasis en aquellos aspectos de un determinado método que pudieran/debieran ser mejorados desde la perspectiva del impacto ambiental. Las métricas propuestas, que en el momento actual de madurez del tema pueden considerarse, incluso, como “la primera generación”, son de diversa índole y han ido madurando para considerar distintos aspectos, con diferentes puntos de vista según los investigadores que las proponían, así como con el objetivo de facilitar su uso para los usuarios de tales métricas, a la par que se ha ido minimizando la subjetividad de las mismas. En este contexto, es importante no sólo aportar una visión histórica de la evolución de las métricas y su importancia, sino además resulta de interés plantearse si el boom de nuevas métricas actuales sigue siendo necesario, si debe tener lugar ahora un periodo de reflexión y reconsideración de su uso o, todo lo contrario, permitir que sea el devenir científico quién decida qué métrica resulta más útil desde el punto de vista de éxito aplicativo.

[1] P.T. Anastas, J.C. Warner. *Oxford Univ. Press*, 1998.

Sesión 1. Inteligencia Artificial, Machine Learning y Quimiometría

CO_1-SpecAI: UNA PLATAFORMA DE ANÁLISIS ESPECTROSCÓPICO BASADA EN INTELIGENCIA ARTIFICIAL

J.L. Pérez-Calle, M. Ferreiro-González, M. Palma-Lovillo

Departamento de Química Analítica, Facultad de Ciencias, Universidad de Cádiz, Campus de Excelencia Internacional Agroalimentario (ceiA3), IVAGRO, 11510 Puerto Real, Cádiz, España.

joseluis.perezcalles@gm.uca.es

Keywords: espectroscopía, análisis multivariante, inteligencia artificial, aplicación web, clasificación automática, pretratamiento de datos

Abstract:

Las técnicas espectroscópicas han sido clave para la resolución de distintos problemas analíticos en múltiples sectores como el agroalimentario, farmacéutico y medioambiental, gracias a su simplicidad, rapidez, bajo coste, portabilidad y carácter no destructivo. Sin embargo, estas ventajas se acompañan de un reto importante: la generación de grandes volúmenes de datos en muy poco tiempo, cuyo tratamiento e interpretación continúa siendo un desafío debido a su complejidad. Para responder a esta necesidad, se ha desarrollado SpecAI, una plataforma web orientada al análisis de datos espectroscópicos asistido por inteligencia artificial. Su diseño intuitivo y accesible permite a usuarios sin experiencia aplicar un flujo completo de análisis sin necesidad de instalar software adicional. La herramienta actualmente integra tres módulos principales: i) Pretratamiento de datos, que incluye filtros de suavizado como el de Savitzky-Golay y derivadas de primer y segundo orden para mejorar la calidad de los espectros; ii) Análisis exploratorio, mediante Análisis de Componentes Principales (PCA) y Análisis de Clúster Jerárquico (HCA), útiles para identificar patrones y agrupaciones; y iii) Modelado predictivo, con algoritmos de clasificación avanzados como Máquinas de Vectores de Soporte (SVM), Bosques Aleatorios (RF) y Redes Neuronales Artificiales (ANN). Además, SpecAI incorpora visualización interactiva, un asistente inteligente y está en constante evolución, con nuevas funcionalidades en desarrollo. Todo esto facilita la aplicación de análisis avanzados en entornos académicos e industriales, permitiendo resultados fiables en tiempos reducidos.

CO_2-ESTRATEGIA ESTADÍSTICO ANALÍTICA PARA LA CUANTIFICACIÓN DE COMPUESTOS VOLÁTILES EN MATRICES DE ACEITE DE OLIVA VIRGEN

E.J. Díaz-Montaña^{1,2}, R. Aparicio-Ruiz¹, A. Lobo-Prieto¹, D.L. García-González³, M.T. Morales¹

¹Departamento de Química Analítica, Facultad de Farmacia, Universidad de Sevilla, Sevilla, España.

²Departamento de Química Física, Facultad de Farmacia, Universidad de Sevilla, Sevilla, España.

³Instituto de la Grasa (CSIC), Sevilla, España.

edmontana@us.es

Keywords: compuestos volátiles, aceite de oliva virgen, matriz oleosa, calibración externa con matriz coincidente, patrón interno, calibración por adición patrón

Abstract:

La determinación de compuestos volátiles en matrices oleosas, como el aceite de oliva virgen, representa un desafío analítico debido a la diversidad de familias químicas presentes, sus bajas concentraciones y la complejidad de la matriz. El objetivo principal del trabajo fue implementar procedimientos estadísticos para seleccionar el mejor método de cuantificación de volátiles en matrices de aceite de oliva virgen. Para ello, la linealidad se evaluó mediante diversos test estadísticos, como la F de Fisher, el test de Mandel o la t student con incertidumbre expandida y se determinaron los parámetros de validación. El análisis mostró que los errores de las variables eran homocedásticos, permitiendo la aplicación del ajuste lineal mediante mínimos cuadrados ordinarios (OLS) y no el ajuste por mínimos cuadrados ponderados (WLS). La calibración mediante patrón externo en matriz coincidente (EC) mostró los mejores resultados, con valores más bajos de LOD, LOQ y RSDb, la mejor exactitud y precisión. Las calibraciones mediante adición estándar, con y sin patrón interno, presentaron valores parecidos a los de EC, sin embargo, mostraron una mayor desviación estándar en todos los parámetros y requirieron de mayor tiempo de trabajo. Finalmente, la calibración mediante patrón externo en matriz coincidente con patrón interno mostró los peores resultados, con límites de detección y cuantificación significativamente más altos y una exactitud significativamente menor a las otras calibraciones. Finalmente, no se detectó efecto matriz, por lo que la metodología seleccionada para la cuantificación de volátiles en aceite de oliva virgen fue el ajuste OLS y la calibración EC.

**CO_3-COMBINING SALLE-GC-ORBITRAP-HRMS-BASED
METABOLOMICS AND MULTI-TECHNIQUE DATA FUSION: AN
INNOVATIVE APPROACH FOR HONEY BOTANICAL ORIGIN
AUTHENTICATION**

A.M. Navarro-Herrera, A. Rivera-Pérez, A. Garrido Frenich

Research Group “Analytical Chemistry of Contaminants”, Department of Chemistry and Physics, Research Centre for Mediterranean Intensive Agrosystems and Agrifood Biotechnology (CIAIMBITAL), Agrifood Campus of International Excellence (ceiA3), University of Almeria, E-04120, Almeria, Spain.

anh819@ual.es

Keywords: gas chromatography, high-resolution mass spectrometry, chemometrics, untargeted metabolomics, data fusion, fingerprinting

Abstract:

Honey is a natural product valued for its flavor, aroma, and health-promoting properties. Its botanical origin significantly influences its metabolite composition, sensory qualities, and market value. Therefore, reliable methods for verifying the floral source are essential to ensure quality and prevent fraud. This study employed an untargeted metabolomics approach using gas chromatography coupled with high-resolution mass spectrometry (GC-Orbitrap-HRMS) to distinguish among honeys of different botanical origins marketed in Spain: eucalyptus, rosemary, orange blossom, and multifloral. A salt-assisted liquid-liquid extraction (SALLE) was developed for sample preparation, followed by orthogonal partial least squares discriminant analysis (OPLS-DA). The models achieved strong validation metrics ($R^2Y > 0.8$, $Q^2 > 0.7$) and classification accuracy of 94-100%. Seven discriminant metabolites were identified in the study. Dehydrovomifoliol, 3-oxo- α -ionone, and 1,2-dihydro-1,1,6-trimethylnaphthalene were found in higher concentrations in eucalyptus honey, while caffeine and 4-ketoisophorone were significant markers for orange blossom honey. To distinguish monofloral from multifloral honeys, six key metabolites were identified: dehydrovomifoliol, 4-ketoisophorone, 3-oxo- α -ionone, 1,2-dihydro-1,1,6-trimethylnaphthalene, 3-oxo-7,8-dihydro- α -ionone, and 4-methyleneisophorone. Most of these were more abundant in monofloral samples (except dehydrovomifoliol and 3-oxo- α -ionone), suggesting greater chemical and sensory complexity. Furthermore, mid-level data fusion with previous ultra-high performance liquid chromatography coupled to high-resolution mass spectrometry (UHPLC-Q-Orbitrap-HRMS) results improved classification performance, demonstrating the complementarity of both techniques. This study showcases the potential of GC-Orbitrap-HRMS-based untargeted metabolomics for authenticating honey according to its botanical origin and identifying novel markers for commercial honey differentiation.

Acknowledgments: This research was funded by “PPITUAL, Junta de Andalucía-FEDER 2021-2027. Programa: 54.A” (P_FORT_GRUPOS_2023/43 and CPUENTE2023/21).

CO_4-OMICS TOOLS FOR FOOD AUTHENTICATION: DECODING THE IMPACT OF TERROIR ON PAPRIKA COMPOSITION AS A CASE STUDY

A. Rivera-Pérez^{1,2}, L. Lucini², M. Acosta Motos³, A. Garrido Frenich¹

¹ Research Group “Analytical Chemistry of Contaminants”, Department of Chemistry and Physics, Research Centre for Mediterranean Intensive Agrosystems and Agrifood Biotechnology (CIAIMBITAL), Agrifood Campus of International Excellence (ceiA3), University of Almeria, E-04120, Almeria, Spain.

² Department for Sustainable Food Process – DiSTAS, Università Cattolica del Sacro Cuore, Via Emilia Parmense 84, 29122 Piacenza, Italy.

³ La Margarita Food & Services. Diego Pérez Riquelme e Hijos S.L.U. Polígono Industrial La Jaira, 7, 30640, Abanilla, Murcia (Spain).

arp800@ual.es

Keywords: food authentication, metabolomics, chemometrics, fingerprinting, LC-HRMS, lipidomics

Abstract:

Paprika (*Capsicum annuum* L.) stands as a globally relevant spice due to its vibrant color and complex chemical profile. Its metabolomic and lipidomic composition is notably modulated by environmental conditions linked to the geographical origin, often described as the “terroir effect”. Originally a term from enology, terroir now extends to agri-food products to capture the influence of climate, soil properties, and farming practices on their chemical fingerprints. While paprika from countries like China and Zambia has been extensively characterized, other relevant producers remain underrepresented in the scientific literature. This study applies a dual untargeted metabolomics and lipidomics strategy, based on ultra-high-performance liquid chromatography coupled with quadrupole-Orbitrap high-resolution mass spectrometry (UHPLC-Q-Orbitrap-HRMS), to investigate paprika samples from Peru (Ica and Arequipa) and Zimbabwe. A total of 60 samples (30 per country) were profiled, revealing 27 discriminative compounds. Multivariate statistical tools (PCA and OPLS-DA) highlighted clear group separation, confirming that terroir significantly determines paprika’s chemical profile. Peruvian samples were enriched in carotenoid derivatives and specific fatty acids, such as capsanthin and stearidonic acid, respectively. In contrast, Zimbabwean paprika showed higher levels of capsaicinoids and a diverse range of phospholipids, compounds scarcely reported in previous paprika studies. These findings not only focused on the chemical understanding of paprika but also provided novel lipid markers to the field. This HRMS-based fingerprinting approach demonstrates high potential for ensuring traceability and origin authentication in the spice sector.

Agradecimientos: This research was funded by “PPITUAL, Junta de Andalucía-FEDER 2021-2027. Programa: 54.A”. Grant reference: CPUENTE2023/21.

CO_5-PROCESAMIENTO COMPUTACIONAL DE IMÁGENES PARA SISTEMAS MICROFLUÍDICOS EN BIOANÁLISIS Y ANÁLISIS DE NANOPARTÍCULAS

**Á. Écija-Arenas, V. Román-Pizarro, M.A. García-Granados,
J.M. Fernández-Romero**

Departamento de Química Analítica, Instituto Químico para la Energía y el Medioambiente (IQUEMA), Universidad de Córdoba, Campus de Rabanales, Edificio Anexo "Marie Curie", E-14071 Córdoba, España

q92ecara@uco.es

Keywords: procesamiento de imágenes, análisis digital de datos, lenguajes de programación científica, automatización, sistemas microfluídicos

Abstract:

La integración de entornos de desarrollo computacional para el análisis digital y tratamiento automatizado de datos mediante lenguajes de programación científica, como Python, en sistemas microfluídicos ha permitido avances clave en la adquisición, gestión y procesamiento de datos de imagen, con aplicaciones relevantes en el análisis de nanopartículas y en bioanálisis. Una de las técnicas que se beneficia de este procesamiento avanzado es la medida del plasmón de resonancia superficial por imagen (imaging surface plasmon resonance, iSPR). Mediante el estudio temporal de imágenes adquiridas en una superficie, es posible realizar determinaciones de compuestos de interés biológico, como purinas, o de nanopartículas en diversas matrices. En el caso de los sistemas basados en generación de gotas (droplet-based systems), que manipulan volúmenes discretos dentro de microcanales, se requiere un control riguroso y en tiempo real para garantizar reproducibilidad y eficiencia en ensayos químicos y biológicos. Dado que las gotas se desplazan a gran velocidad, es esencial el uso de algoritmos avanzados para el tratamiento de las señales generadas. La incorporación de plataformas computacionales integradas con cámaras facilita la captura automatizada y sistemática de imágenes. El procesamiento digital se basa en el análisis de intensidad lumínica o espectral a partir de señales RGB. La descomposición de la imagen en sus canales rojo, verde y azul permite cuantificar con precisión parámetros cromáticos asociados a la concentración de analitos. Este enfoque impulsa el desarrollo de sistemas tipo "lab-on-a-chip" más autónomos, inteligentes y eficientes, con potencial en salud pública, seguridad alimentaria y sostenibilidad ambiental.

Agradecimientos: Este trabajo ha sido financiado por la submodalidad 2.6 "UCOProyecta", del Plan Propio de Investigación "Enrique Aguilar Benítez de Lugo" 2024 y el proyecto "Plan Complementario de I+D+i en el área de Ciencias Marinas" (PCM_00121, ThinkInazul), cofinanciado por la Consejería de Universidades, Investigación e Innovación de la Junta de Andalucía y por la Unión Europea a través de los fondos Next Generation EU del Plan de Recuperación, Transformación y Resiliencia. Las opiniones y puntos de vista expresados son exclusivamente de los autores y no reflejan necesariamente los de la Unión Europea ni de la Comisión Europea.

**CO_6-LA CALIDAD DEL ACEITE DE OLIVA VIRGEN EVALUADA
MEDIANTE NMR DE SOBREMESA: UNA NUEVA VISIÓN ANALÍTICA**

**A. Arroyo Cerezo¹, A.M. Jiménez Carvelo¹, A. González Casad¹, J.A. Tello
Jiménez², M. Tello Liébana², J.R. Belmonte Sánchez³, L. Cuadros Rodríguez¹**

¹Departamento de Química Analítica, Universidad de Granada, Avda. Fuentenueva
s/n, 18071 Granada

²Laboratorio Juan Antonio Tello S.L., Pol Industrial Los Olivares, C. la Iruela, 8, 23009 Jaén

³Departamento de Química y Física, Universidad de Almería, Ctra. Sacramento s/n, 04120
Almería

arroyoc@ugr.es

Keywords: método analítico de cribado, resonancia magnética nuclear de baja frecuencia, autenticación de aceite de oliva virgen, análisis multivariable, quimiometría

Abstract:

La espectroscopia de resonancia magnética nuclear de baja frecuencia de campo (LF-NMR) posibilita la implantación y el uso de esta técnica analítica en laboratorios de control rutinario gracias a la existencia de instrumentación de sobremesa, que solventa las desventajas de la habitual NMR de alta frecuencia, como son la inversión económica y los requerimientos de espacio y mantenimiento. Los espectros LF-NMR recogen gran cantidad de información química del material medido, pudiendo ser considerados, tras un tratamiento de datos adecuado, como huellas instrumentales no específicas para su uso en el desarrollo de aplicaciones analíticas no dirigidas. En este escenario se enmarca el proyecto de colaboración público-privada NMR-Control (Ref.: CPP2021-008672), financiado por el Ministerio de Ciencia, Innovación y Universidades. Uno de los principales objetivos de esta iniciativa es la implementación de LF-NMR en laboratorios dedicados al control de la calidad del aceite de oliva. Esta comunicación presenta la estrategia adoptada, basado en el desarrollo de un método analítico de cribado siguiendo un enfoque integral que sería capaz de reducir al menos en un 30% el número de análisis requeridos en dicho laboratorio, suponiendo un importante ahorro de tiempo y costes. La implementación de LF-NMR y un adecuado análisis de los datos mediante la metodología de huellas instrumentales, se perfila como una innovación con alto impacto en el sector, ofreciendo una vía prometedora para optimizar los análisis en el control de la calidad de aceites de oliva virgen.

 Sesión 2. Seguridad Alimentaria y Control de Calidad

CO_7-EVALUACIÓN DE LA AUTENTICIDAD DEL ACEITE DE OLIVA VIRGEN MEDIANTE EL PERFILADO DE LA FRACCIÓN INSAPONIFICABLE USANDO CROMATOGRAFÍA DE FLUIDOS SUPERCRÍTICOS ACOPLADA A ESPECTROMETRÍA DE MASAS

I. Caño-Carrillo^{1,2}, B. Gilbert-López^{1,2}, A.R. Fernández-Alba³, J.F. García-Reyes^{1,2}

¹ Grupo de Investigación de Química Analítica (FQM-323), Departamento de Química Física y Analítica, Universidad de Jaén, Campus Las Lagunillas, 23071, Jaén, España.

² Instituto Universitario de Investigación en Olivar y Aceites de Oliva (INUO), Universidad de Jaén, Campus Las Lagunillas, 23071 Jaén, España.

³ Laboratorio de Referencia de la Unión Europea para Residuos de Plaguicidas en Frutas y Hortalizas, Universidad de Almería, Campus Agroalimentario de Excelencia Internacional (ceiA3), Ctra. Sacramento s/n, La Cañada de San Urbano, Almería, 04120, España.

icano@ujaen.es

Keywords: aceite de oliva virgen, autenticidad, fraude alimentario, cromatografía de fluidos supercríticos, espectrometría de masas

Abstract:

La fracción insaponificable es uno de los componentes más importantes para evaluar la autenticidad y calidad del aceite de oliva, ya que contiene una amplia gama de compuestos minoritarios que proporcionan una huella química característica. No obstante, los métodos analíticos oficiales actuales para el análisis de estos compuestos suelen implicar procedimientos complejos, laboriosos y que requieren mucho tiempo, como múltiples extracciones, fraccionamiento de la materia insaponificable y etapas de derivatización. En este estudio, se desarrolló un nuevo método basado en cromatografía de fluidos supercríticos acoplada a espectrometría de masas (SFC-MS) para el análisis simultáneo de componentes clave dentro de la fracción insaponificable, incluyendo esteroides, alcoholes triterpénicos, escualeno y estigmasta-3,5-dieno. Este enfoque permitió el análisis directo de muestras diluidas sin necesidad de fraccionamiento o derivatización previos, simplificando así el procedimiento y reduciendo el consumo de disolventes y reactivos. Además, la SFC puede considerarse una técnica alineada con los principios de la química verde debido al uso reducido de disolventes orgánicos, así como al carácter no inflamable, de bajo coste, no tóxico y reciclable del CO₂. El método desarrollado se aplicó al análisis de diversas muestras de aceite de oliva de distintas categorías y varios aceites vegetales de semillas, lo que permitió la identificación de diversos marcadores clave característicos de cada tipo de aceite. Los resultados obtenidos en este estudio destacan el notable potencial de SFC-MS para la evaluación de la autenticidad del aceite de oliva virgen.

CO_8-COMPUESTOS VOLÁTILES AZUFRADOS EN DESTILADOS DE VINO MEDIANTE EXTRACCIÓN POR SORCIÓN CON BARRA AGITADORA, CROMATOGRFÍA DE GASES Y ESPECTROMETRÍA DE MASAS

M. Silvosa, M.V. García-Moreno, R. Castro

Departamento de Química Analítica, Facultad de Ciencias-IVAGRO, Universidad de Cádiz,
Campus Agroalimentario de Excelencia Internacional, Apartado Postal 40, Pol. Río San
Pedro, 11510 Puerto Real, España
remedios.castro@uca.es

Keywords: compuestos volátiles azufrados, destilados de vino, dióxido de azufre, brandy de Jerez, SBSE

Abstract:

Se ha optimizado y validado un método de extracción por sorción sobre barra agitadora, cromatografía de gases y espectrometría de masas (SBSE-GC-MS) para la determinación de ocho compuestos volátiles azufrados en destilados de vino: sulfuro de dietilo (DES), disulfuro de dimetilo (DMDS), disulfuro de dietilo (DEDS), 2-tiofenocarboxaldehído (TC), sulfuro de dibutilo (DBS), disulfuro de dipropilo (DPDS), sulfuro de dipropilo (DPS) y trisulfuro de dimetilo (DMTS). Tras la optimización, las condiciones de extracción fueron: twister de polidimetilsiloxano (10 mm x 0,5 mm), 35 °C como temperatura de extracción, 10 mL como volumen de muestra, 7 % (v/v) como grado alcohólico, 47 min como tiempo de extracción, 10 % (p/v) de NaCl y 1 % (p/v) de AEDT. Los valores analíticos obtenidos fueron adecuados, con bajos límites de cuantificación y detección, y desviaciones estándar relativas para los valores de repetibilidad inter-twister e interdía entre 7,5 % y 21,8 % y entre 7,2 % y 27,5 %, respectivamente. La metodología se aplicó a 34 destilados: 15 destilados envejecidos durante diferentes periodos y 19 sin envejecer. Los compuestos volátiles azufrados más significativos fueron DBS, DMDS y DPS. El análisis de clusters (AC) agrupó las muestras atendiendo el uso o no de dióxido de azufre en la elaboración de los destilados. En general, se encontraron menores cantidades de compuestos volátiles azufrados en las muestras envejecidas en madera, aunque las elevadas desviaciones típicas obtenidas ponen de manifiesto que el contenido en volátiles azufrados depende de múltiples factores relacionados con el proceso de elaboración.

CO_9-APROVECHANDO LOS BENEFICIOS DE LA VERDOLAGA A TRAVÉS DE LA EXTRACCIÓN RÁPIDA Y EFICIENTE DE SUS COMPUESTOS BIOACTIVOS

M. Vázquez-Espinosa, C. Carrera, G. Fernández-Barbero, M. Palma-Lovillo

Departamento de Química Analítica, Facultad de Ciencias, IVAGRO, Universidad de Cádiz, Campus de Excelencia Internacional Agroalimentario (ceiA3), 11510 Puerto Real, España.

mercedes.vazquez@uca.es

Keywords: análisis agroalimentario, extracción asistida por ultrasonidos, compuestos bioactivos, *Portulaca oleracea* L., diseño de Box-Behnken, alimento funcional

Abstract:

En los últimos años ha crecido el interés por llevar una alimentación más saludable, con un mayor consumo de vegetales. En este contexto, la investigación sobre los compuestos bioactivos presentes en los alimentos se ha vuelto especialmente relevante debido a sus actividades biológicas, destacando sus propiedades antioxidantes, anticancerígenas, antiinflamatorias o antidiabéticas. La verdolaga (*Portulaca oleracea* L.) ha despertado atención por su alto valor nutricional, incluso superior al de muchas verduras de hoja verde comunes. Además de su uso tradicional como planta medicinal o alimento, se ha comprobado que contiene compuestos con propiedades farmacológicas. Debido a esto, se hace necesario el desarrollo de métodos analíticos rápidos, sencillos y eficaces que permitan la extracción de estos compuestos bioactivos de interés, con el fin de aprovechar sus efectos beneficiosos para la salud y añadir mayor valor al producto. Para ello, se empleó la extracción asistida por ultrasonidos y se optimizó el proceso mediante un diseño experimental de Box-Behnken, evaluando cinco factores (disolvente de extracción, temperatura, relación muestra:disolvente, potencia y ciclo), siendo los más influyentes el porcentaje de disolvente y la relación muestra:disolvente. Posteriormente se evaluó el tiempo de extracción, consiguiendo un método muy rápido que permitía obtener la mayor cantidad de compuestos bioactivos de interés en tan solo 5 minutos. El método desarrollado mostró una alta precisión y se aplicó con éxito a muestras reales para analizar la presencia de estos compuestos en distintas partes de la planta (tallo, hojas y flores) y en brotes germinados, destacando las hojas por su mayor concentración.

CO_10-DESARROLLO Y COMPARACIÓN DE MÉTODOS DE EXTRACCIÓN DE COMPUESTOS FENÓLICOS DESDE MADERA ENVINADA

F. Aragon-García¹, A. Ruiz-Rodríguez², M. Palma-Lovillo²

¹Edrington Group

²Departamento de Química Analítica, Facultad de Ciencias, Universidad de Cádiz, Campus de Excelencia Internacional Agroalimentario (ceiA3), IVAGRO, 11510 Puerto Real, Cádiz, España

fatima.aragon@uca.es

Keywords: madera, envinado, extracción, microondas, ultrasonidos

Abstract:

La madera desempeña un papel crucial en la elaboración de bebidas espirituosas, al actuar como medio de transferencia y transformación de compuestos químicos durante el envejecimiento del aguardiente. La madera, si bien está constituida mayoritariamente por lignina y celulosas, también contiene taninos y otros componentes menores como azúcares, resinas, ceras y grasas. Entre ellos, la lignina cobra especial relevancia debido a su descomposición térmica durante el tostado de la barrica, etapa en la que se generan compuestos fenólicos clave para el perfil sensorial del producto final. Por otro lado, previa a su utilización para el envejecimiento de aguardientes, se suele someter a un proceso de envinado, en el que uno o varios vinos son envejecidos y utilizados para envejecer la propia madera. La capacidad de absorción de compuestos desde los vinos es un factor necesario y crítico en la utilización posterior para el envejecimiento de los aguardientes. Esta interacción modifica la composición química de la madera, al enriquecerla con compuestos que posteriormente serán extraídos por el aguardiente durante su almacenamiento. Desde el punto de vista analítico, en este trabajo se planteó como objetivo estudiar la interacción vino-madera mediante la caracterización de los compuestos polifenólicos transferidos a la madera. Para ello, se ha evaluado la eficacia de dos técnicas de extracción: la extracción asistida por microondas (MAE) y la extracción asistida por ultrasonidos (UAE) y se han desarrollado los métodos analíticos para la determinación de los compuestos fenólicos absorbidos por la madera. La selección de las condiciones óptimas de extracción se ha realizado mediante un diseño de experimentos tipo Box-Behnken, el cual permitió optimizar parámetros como el tiempo, la temperatura y la proporción de disolvente, maximizando así la recuperación de los compuestos fenólicos de interés. Esta aproximación multivariante ha proporcionado un enfoque sistemático y robusto para el desarrollo de un método analítico eficiente y reproducible.

CO_11-CARACTERIZACIÓN PROTEÓMICA DE MIEL DE ABEJAS SIN AGUIJÓN (*MELIPONINI*) MEDIANTE ESPECTROMETRÍA DE MASAS DE ALTA RESOLUCIÓN

I. Punta¹, A. Escobar², F. Fernández², M. Umsza-Guez³,
M. Ferreiro-González¹, M. Palma-Lovillo¹

¹Departamento Química Analítica. Universidad de Cádiz

²Food Science Postgraduate Program, Faculty of Pharmacy, Federal University of Bahia,
Salvador 40170-100, Bahia, Brazil

³Departamento de Microbiología. Universidad de Cádiz

irene.punta@uca.es

Keywords: miel de *Meliponini*, proteómica, péptidos, autenticación, UHPLC-MS Orbitrap

Abstract:

La miel producida por abejas sin aguijón (*Meliponini*) presenta propiedades fisicoquímicas y sensoriales únicas, como mayor acidez y menor tendencia a la cristalización, en comparación con la miel de *Apis mellifera*. A pesar de su creciente valorización, especialmente en regiones tropicales y subtropicales, esta miel carece de reconocimiento normativo a nivel internacional y es susceptible de adulteraciones realizadas con mieles tradicionales. En este estudio se empleó un enfoque proteómico basado en espectrometría de masas de alta resolución (UHPLC-MS Orbitrap) para evaluar el potencial del perfil proteico como herramienta para la diferenciación de mieles procedentes de abejas *Meliponini* y *A. mellifera*. Los resultados demostraron que el perfil peptídico constituye una huella con alto potencial para la diferenciación entre especies productoras de miel, y puede ser clave para el desarrollo de metodologías de control de calidad más fiables, así como para respaldar estrategias de protección de origen. La aplicación de herramientas proteómicas en matrices complejas como la miel contribuye significativamente al desarrollo de nuevos métodos de caracterización y prevención de las adulteraciones en el ámbito alimentario.

CO_12-CREACIÓN DE UN BANCO DE MUESTRAS DE REFERENCIA PARA LA CLASIFICACIÓN INSTRUMENTAL DEL ACEITE DE OLIVA VIRGEN

M.J. Cardador, L. Arce

Departamento de Química Analítica, Campus de Excelencia Internacional Agroalimentario (ceiA3), Instituto para la Energía y el Medioambiente (IQUEMA). Universidad de Córdoba, 14071 Córdoba, España.

g22cadum@uco.es

Keywords: aceite de oliva virgen, banco de muestras, clasificación instrumental, modelos multivariantes, estándares de referencia

Abstract:

La clasificación del aceite de oliva virgen en sus categorías virgen extra, virgen y lampante se basa en análisis fisicoquímicos y una evaluación sensorial. No obstante, el elevado volumen de muestras durante la campaña provoca la saturación y agotamiento sensorial de los paneles de cata, comprometiendo la eficiencia del sistema actual. Esta situación ha generado una demanda creciente de métodos instrumentales que complementen y apoyen la labor del panel. En este contexto, este trabajo presenta la creación de un banco de muestras de aceite de oliva como estándares de referencia para el desarrollo, calibración y validación de modelos multivariantes de clasificación. Se abordan criterios esenciales como la necesidad de llevar a cabo una evaluación sensorial de las muestras por varios paneles, la representatividad de las categorías, y el diseño de muestreo. Dada la gran complejidad del sector, es necesario estudiar si este banco debe reflejar la diversidad real del mundo del aceite: origen geográfico, variedad, tipo de producción y campañas. También se proponen métodos para controlar su estabilidad. Este banco es clave para avanzar hacia una clasificación más reproducible y eficiente.

**CO_13-ESTUDIO COMPARATIVO DE TÉCNICAS DE IMAGEN
HIPERESPECTRAL Y ESPECTROSCOPIA PORTÁTIL EN LA
SELECCIÓN DE MUESTRAS DE ORUJO DE UVA BLANCA
DESTINADAS A LA PRODUCCIÓN DE AFINANTES**

**J. Gómez-Pérez¹, F.J. Rodríguez-Pulido¹, M.L. González-Miret Martín¹,
J.M. Hernández-Hierro¹, J. Nogales-Bueno², B. Baca-Bocanegra²**

¹Laboratorio de Color y Calidad de Alimentos, Departamento de Nutrición y Bromatología,
Toxicología y Medicina Legal, Facultad de Farmacia, Universidad de Sevilla.

²Departamento de Química Analítica, Facultad de Farmacia, Universidad de Sevilla, 41012
Sevilla (España)

jgomez11@us.es

Keywords: orujos, afinantes, microNIR; muestra vecina; PCA, cámara hiperespectral

Abstract:

Durante la elaboración de vino se genera orujo como subproducto, representando un problema por su gran volumen, pero también una oportunidad por su riqueza en biopolímeros. Su reutilización en el sector vitivinícola u otros ámbitos resulta de gran interés, aunque no todos los orujos presentan las mismas características ni sirven para los mismos fines. Conocer a priori su eventual comportamiento como afinante permitiría determinar su idoneidad antes de ser procesados, lo que supondría un avance en su revalorización. Se analizaron 111 muestras de orujo de tres variedades blancas: Pedro Ximénez (40), Moscatel (21) y Zalema (50). Se utilizaron tres dispositivos, una cámara hiperespectral NIR (900-1700 nm), una cámara hiperespectral (400-1000 nm) y un equipo MicroNIR (900-1700 nm) para obtener datos espectrales del orujo completo y de los hollejos, ya que estas últimos son de especial interés para futuras investigaciones y potencial uso como afinantes. Esto dio lugar a seis matrices espectrales que, combinadas como tres matrices aumentadas permitieron evaluar la heterogeneidad de la muestra (efecto matriz) y posteriormente, la influencia del equipo de medición (efecto dispositivo). A cada matriz se le aplicó un Análisis de Componentes Principales (PCA) y la selección de muestras representativas se realizó mediante la distancia de Mahalanobis a muestra vecina (NH). Finalmente, se compararon los resultados obtenidos, destacando las ventajas y limitaciones de cada dispositivo y presentación de muestra para una selección eficiente, económica y no destructiva.

 **Sesión 3. Bioanálisis y
Avances en Química
Analítica para el Diagnóstico
y la Salud**

CO_14-ASSOCIATION OF NEONATAL OUTCOMES, METABOLIC RISK FACTORS AND METAL LEVELS IN CHILDREN WITH OBESITY

L. Jurado-Sumariva, Á. González-Domínguez, J. Domínguez-Riscart, R.

González-Domínguez

Instituto de Investigación e Innovación Biomédica de Cádiz (INiBICA), Hospital Universitario Puerta del Mar, Universidad de Cádiz. 11009 Cádiz, Spain.

lucia.jurado@inibica.es

Keywords: childhood obesity, heavy metals, neonatal outcomes, trace elements

Abstract:

Adverse neonatal conditions may induce metabolic impairments that persist throughout lifespan and predispose to increased obesity risk. During these first stages of life, trace elements and heavy metals play a central role in regulating health status and participating in obesity pathophysiology. Thus, we hypothesize that neonatal outcomes might serve as reliable predictors of obesity-related metal anomalies occurring later in childhood. This study relies on a population comprising children with obesity, from whom birth metrics (i.e., gestational age, length, and weight at birth) were registered from medical records and blood samples were collected to evaluate insulin and glucose metabolism, inflammatory status, and metal biodistribution. Interestingly, higher gestational age and length at birth were associated with lower inflammation, insulinemia, and glycemia in childhood, as well as with lower levels of toxic heavy metals (i.e., arsenic, cadmium, lead) and greater levels of essential trace elements (i.e., zinc, selenium). Conversely, higher body mass index at birth predicted exacerbated failures in glucose homeostasis and an unfavorable multi-elemental profile, as reflected in negative associations with minerals involved in endocrine control (i.e., zinc, chromium, molybdenum, selenium). In summary, this study supports that even slight deviations in neonatal outcomes might have a strong influence later in metabolic health.

CO_15-BISFENOLES Y ENDOMETRIOSIS: AVANCES EN EL DIAGNÓSTICO PRECOZ A TRAVÉS DE TÉCNICAS ANALÍTICAS NO INVASIVAS

R. López-Ruiz, J. Marín-Sáez, R. Romero-González, A. Garrido Frenich

Grupo de Investigación “Química Analítica de Contaminantes”, Departamento de Química y Física, Centro de Investigación en Agroalimentación y Sistemas Intensivos Mediterráneos (CIAIMBITAL), Universidad de Almería, Campus de Excelencia Internacional Agroalimentario, ceiA3, E-04120 Almería, España.

rlr468@ual.es

Keywords: DBS, endometriosis, LC, MS, diagnóstico precoz

Abstract:

La endometriosis es una enfermedad que afecta a más del 15% de las mujeres a nivel global, causando dolor crónico y a menudo debilitante que impacta significativamente en la calidad de vida. Actualmente, no existe una cura definitiva y los tratamientos se limitan a la cirugía y al alivio de los síntomas. Si bien inicialmente se consideraban causas genéticas o relacionadas con la menstruación retrógrada, investigaciones recientes han destacado el papel significativo de factores ambientales, en particular los disruptores endocrinos (EDCs) como los bisfenoles, en su desarrollo y progresión. Este trabajo tiene como objetivo desarrollar y validar nuevos métodos analíticos para EDCs, específicamente bisfenoles, con el fin de ayudar a prevenir o reducir los efectos de la endometriosis. Para ello se evaluó la efectividad de la toma de muestra no invasiva, en concreto la gota de sangre seca (DBS), un método no utilizado previamente en este campo. Los bisfenoles se extrajeron de las muestras de DBS utilizando el método μ -QuEChERS y se analizaron mediante cromatografía de líquidos acoplada a espectrometría de masas (LC-MS). Se analizaron un total de doce bisfenoles, incluyendo bisfenol A, B y C, entre otros. El método analítico fue validado, con recuperaciones entre el 65% y el 101% y RSD inferiores al 15%. Se analizaron 50 muestras de mujeres sanas y con endometriosis, detectándose bisfenol A en la mayoría e identificándose también bisfenol S y F.

Agradecimientos:

Gracias al plan propio de la Universidad de Almería para la investigación y transferencia del conocimiento por el apoyo financiero al proyecto: EXPOFEM (P_LANZ_G_2024/001).

CO_16-BIOMONITORIZACIÓN DE PAHS EN TRABAJADORES EXPUESTOS OCUPACIONALMENTE MEDIANTE TÉCNICAS DE MUESTREO NO INVASIVAS

J. Marín-Sáez, R. López-Ruiz, R. Romero-González, A. Garrido Frenich

Grupo de Investigación “Química Analítica de Contaminantes”, Departamento de Química y Física, Centro de Investigación en Agroalimentación y Sistemas Intensivos Mediterráneos (CIAIMBITAL), Universidad de Almería, Campus de Excelencia Internacional Agroalimentario, ceiA3, E-04120 Almería, España.

jms485@ual.es

Keywords: PAHs, exposición, DBS, GC, MS, bomberos

Abstract:

Los hidrocarburos aromáticos policíclicos (PAHs) están clasificados como carcinógenos por la IARC, siendo el cáncer de pulmón, piel y vejiga los principalmente asociados. Aunque los PAHs se consideran contaminantes ubicuos, ciertas profesiones implican un nivel de exposición más elevado. El objetivo de este estudio fue desarrollar un procedimiento de muestreo sanguíneo no invasivo para el biomonitorio de 18 de los PAHs más comunes en población general y en personas expuestas ocupacionalmente. Se optimizó un procedimiento de muestreo mediante gotas de sangre seca (DBS) utilizando solo 50 µL de sangre capilar. Posteriormente, los PAHs se extrajeron mediante extracción sólido-líquido (SLE) y se analizaron mediante GC-Q-Orbitrap-HRMS. El método fue validado con recuperaciones que oscilaron entre el 61% y el 115% (y con RSDs inferiores al 19%) y límites de cuantificación (LOQ) de 1 a 25 ng/mL. El método se aplicó al análisis de 10 muestras de población en general, 20 muestras de cocineros que utilizan carbón vegetal y 10 de bomberos. Los resultados mostraron que, mientras los cocineros presentaban niveles de exposición similares a los de la población general, los bomberos estaban significativamente más expuestos. La aplicación del método propuesto confirmó su efectividad, revelando un claro riesgo de exposición en bomberos tras el servicio. Cabe destacar que este es el primer estudio que emplea DBS para el biomonitorio de PAHs en humanos.

Agradecimientos: Gracias al plan propio de la Universidad de Almería para la investigación y transferencia del conocimiento por el apoyo financiero al proyecto EXCOM (P_LANZ_2024/006).

CO_17-DETERMINATION OF LITHIUM IN BLOOD VIA DIRECT ANALYSIS OF DRIED BLOOD SPOTS USING HR-CS-GFAAS

**A. Doblado Onieva^{1,2}, L. Vázquez Palomo^{1,2}, M.M. López Guerrero^{1,2},
E.I. Vereda Alonso^{1,2}**

¹Departamento de Química Analítica, Facultad de Ciencias, Universidad de Málaga,
Campus de Teatinos, 29071, Málaga, España.

²Instituto Universitario de Materiales y Nanotecnología, IMANA, Universidad de Málaga,
Campus de Teatinos, 29071, Málaga, España.

dobladoonieva@uma.es

Keywords: Lithium, microsampling, DBS, HR-CS-GFAAS, bipolar disorder

Abstract:

Lithium is a key treatment for bipolar disorder, valued for its ability to stabilize mood, prevent relapse, and reduce suicide risk. However, due to its narrow therapeutic window and the high interindividual variability in its pharmacokinetics, careful monitoring is essential to prevent potential toxicity. Typically, lithium levels are measured every 3–6 months using venous blood samples. This approach presents challenges, especially in areas with limited resources, due to the need for venipuncture, sample stability, and cold storage during transport. To overcome these issues, alternative sampling methods like dried blood spots (DBS) and dried plasma spots (DPS) are being explored. These techniques simplify sample collection, improve stability, and reduce transport costs, making them suitable for remote healthcare settings. Additionally, DBS and DPS can assess lithium in both plasma and red blood cells, offering insights into drug distribution and therapeutic effectiveness. Recent studies using graphite furnace atomic absorption spectrometry (GFAAS) have shown that DBS and DPS allow accurate lithium quantification with reliable results under varied storage conditions. Despite these advancements, more analytical methods are needed to improve lithium detection. High-Resolution Continuum Source Graphite Furnace Atomic Absorption Spectrometry (HR-CS-GFAAS) stands out for its sensitivity, selectivity, and ease of use. This study introduces a novel method using HR-CS-GFAAS to measure lithium in DBS. Key parameters, including furnace temperature, chemical modifiers, and sample volume, were optimized. The goal is to validate a cost-effective, accurate, and practical technique that enhances lithium monitoring and supports better management of bipolar disorder.

CO_18-AVANCES EN LA DETERMINACIÓN CONTINUA DE LACTATO EN SUERO HUMANO NO TRATADO: BIOSENSOR AMPEROMÉTRICO BASADO EN MULTIPOLÍMEROS ACOPLADO A UNA CELDA MICROFLUÍDICA DE BAJO COSTE IMPRESA EN 3D

**A.J. Sainz-Calvo¹, A. Sierra-Padilla¹, D. Bellido-Milla¹, L. Blanco-Díaz¹,
J.J. Fernández-Alba², C. González-Macías², J.J. García-Guzmán¹,
J.M. Palacios-Santander¹ y L. Cubillana-Aguilera¹**

¹Departamento de Química Analítica, Instituto de Investigación en Microscopía Electrónica y Materiales (IMEYMAT), Facultad de Ciencias, Campus de Excelencia Internacional del Mar (CEIMAR) Universidad de Cádiz, Campus de Puerto Real, 11510 Puerto Real

²Departamento de Obstetricia y Ginecología. Hospital Universitario de Puerto Real

alvarojesus.sainz@uca.es

Keywords: lactato, biosensor, electrodos Sonogel-Carbono, celda microfluídica, análisis de suero sin tratamiento, impresión 3D

Abstract:

Se ha desarrollado un biosensor amperométrico para la determinación de lactato (LA) empleando un electrodo de Sonogel-Carbono como transductor electroquímico. Este dispositivo incorpora la enzima lactato oxidasa como elemento biorreceptor, inmovilizada bajo un sistema de multicapas poliméricas que actúan como barrera selectiva, previniendo fenómenos de saturación y mejorando la estabilidad del sensor. El biosensor muestra una alta sensibilidad ($1,74 \mu\text{A} \cdot \text{mM}^{-1} \cdot \text{cm}^{-2}$) y un amplio rango lineal de respuesta, que se extiende hasta los 20 mM de lactato, lo que lo hace adecuado para aplicaciones fisiológicas. Se evaluó su comportamiento en medio fisiológico, estudiando la influencia de potenciales interferentes como glucosa, ácido úrico, dopamina, ácido ascórbico, KCl, NaCl, CaCl_2 y BSA, con resultados que demuestran una buena selectividad. Para su implementación en flujo continuo, se diseñó y fabricó una celda microfluídica personalizada utilizando polietileno tereftalato de glicol (PETG), a través de un proceso rápido, económico y reproducible basado en impresión 3D. Esta celda permitió integrar el biosensor en un sistema funcional para análisis en tiempo real. El sistema desarrollado se aplicó con éxito en la monitorización de lactato en muestras de suero humano, tanto sintéticas como reales, obteniendo una excelente correlación con un método de referencia estándar. Los resultados obtenidos confirman la viabilidad del biosensor como una herramienta fiable, precisa y de bajo coste para aplicaciones clínicas y biomédicas, especialmente en el contexto de análisis rápido y continuo.

CO_19-ENFOQUE ANALÍTICO MULTIPLATAFORMA PARA LA CARACTERIZACIÓN DE METABOLITOS, HORMONAS TIROIDEAS Y SELENOPROTEÍNAS EN LECHE MATERNA

A. Arias-Borrego³, I. Velasco⁴, B. Soldevila⁴, T. García-Barrera^{1,2}

¹ Centro de Investigación en Recursos Naturales, Salud y Medio Ambiente (RENSMA).

² Departamento de Química, Facultad de Ciencias Experimentales, Universidad de Huelva, Campus El Carmen, Avenida de las Fuerzas Armadas, 21007, Huelva, España.

³ Departamento de Química Analítica, Facultad de Química, Universidad de Sevilla, 41012, España.

⁴ Departamento de Ginecología y Obstetricia, Hospital Universitari Germans Trias i Pujol, Badalona, España.

aarias1@us.es

Keywords: leche materna, selenoproteínas, hormonas tiroideas, metabolitos, microextracción en fase líquida

Abstract:

La leche materna (LM) es fundamental en los primeros meses de vida, especialmente para el desarrollo neurológico del lactante. Entre los micronutrientes esenciales, el yodo es crucial para la síntesis de hormonas tiroideas (TH), que regulan el metabolismo y el crecimiento. Su deficiencia puede afectar procesos metabólicos clave y la composición de la LM, alterando la biodisponibilidad de elementos traza como selenio, zinc y cobre. El selenio destaca por su papel en selenoproteínas con funciones antioxidantes y en la regulación tiroidea, esenciales para la homeostasis neonatal. Este estudio aplicó un enfoque analítico multiplataforma que incluye cromatografía de gases acoplada a espectrometría de masas (GC-MS), cromatografía líquida de ultra alta eficiencia con espectrometría de masas de tiempo de vuelo (UHPLC-QTOF-MS) y espectrometría de masas con plasma acoplado inductivamente (ICP-MS), para caracterizar metabolitos, elementos traza y selenoproteínas en LM. Se optimizó una técnica de microextracción líquida en fibra hueca asistida por ultrasonido (UA-HF-LPME), lo que permitió detectar TH, incluidas sus formas quirales, con diferente actividad biológica. Además, se identificó por primera vez la selenoproteína P en el calostro, resaltando su función en el transporte y regulación del selenio en neonatos. Los hallazgos destacan el valor de herramientas analíticas avanzadas para evaluar la calidad nutricional de la LM y su impacto en la salud infantil, además de facilitar la identificación de nuevos biomarcadores relacionados con deficiencias nutricionales y exposición a contaminantes, contribuyendo así al avance en investigación en nutrición y salud pública.

CO_20-DEVELOPMENT AND VALIDATION OF AN ANALYTICAL METHOD FOR THE DETERMINATION OF ADVANCES GLYCATION END PRODUCTS IN HUMAN BIOFLUIDS

A. Castillo-Luna^{1,2,3,4}, M. Calderón-Santiago^{1,2,3,4}, F. Priego-Capote^{1,2,3,4}

¹Departamento Química Analítica. Universidad de Córdoba

²Instituto Químico para la Energía y el Medioambiente (iQUEMA). Universidad de Córdoba, España

³Instituto Maimónides de Investigación Biomédica de Córdoba (IMIBIC), Hospital Universitario Reina Sofía, Córdoba, España

⁴Consorcio de Investigación Biomédica en Fragilidad y Envejecimiento Saludable, CIBERFES, Instituto de Salud Carlos III, España

t72calua@uco.es

Keywords: advanced glycation end products, analytical method, human biofluids, LC-MS/MS

Abstract:

Advanced Glycation End Products (AGEs) are a heterogeneous group of compounds that can be found in biofluids by endogenous and exogenous sources. These compounds are formed by an advanced stage of the Maillard reaction, which implies a non-enzymatic reaction between reducing sugars and molecules with free amino groups such as peptides. The biochemical relevance of AGEs and their levels may be of interest in the study of metabolic disorders as well as in other pathologies related to inflammation and oxidative stress, including cardiovascular diseases and type 2 diabetes mellitus. Recent research studies confirmed that a high concentration of AGEs increases the predisposition to suffer from chronic diseases such as renal failure, Alzheimer's disease, etc. Over years, many methods have been developed to detect and quantify individual or similarly structured AGEs (for instance, glyoxal and methylglyoxal). Nevertheless, there is no unique methods that include the main AGEs formed through different pathways such as glyoxal, methylglyoxal, 3-deoxyglucosone, N ϵ -carboxyethyl-lysine, N ϵ -carboxymethyl-lysine, pyrraline, glyoxal-lysine and methylglyoxal-lysine dimer and glyoxal and methylglyoxal hydroimidazolone. For these reasons, a method for their determination in human biofluids has been developed based on a derivatization reaction and determination with an LC-MS/MS device. We used o-phenylenediamine as derivatization reagent for the detection of glyoxal, methylglyoxal and 3-deoxyglucosone. Sample preparation was based on a clean-up step using μ -spincolumn with hydrophilic phase. The optimized method was applied to several human biofluids to determine physiological levels. We have detected and quantified AGEs concentrations in the ng/mL and pg/mL range in the different biofluid samples.

CO_21-ESTUDIO DEL METALOMA CEREBRAL POST- MORTEM EN MUESTRAS DE CORTEZA FRONTAL Y GANGLIOS BASALES DE PACIENTES CON ALZHEIMER CON EN DIFERENTES ESTADIOS DE BRAAK

B. Callejón-Leblic¹, C. Parra-Martínez¹, H. Rodrigo-Lara², I. Fernández Vega³, T. García-Barrera¹

¹Centro de Investigación de Recursos Naturales, Salud y Medio Ambiente (RENSMA).
Departamento de Química, Facultad de Ciencias Experimentales, Universidad de Huelva,
Avenida Fuerzas Armadas, 21007, Huelva, España

²Departamento de Neuropatología Banco de Cerebros de Murcia, Hospital Virgen de la
Arrixaca, 30120. Murcia, España

³BioBanco Principado de Asturias, Av. Hospital Universitario 33011. Oviedo, España
belen.callejon@dqcm.uhu.es

Keywords: metales, cerebro humano, corteza frontal, ganglios basales, post-mortem, espectrometría de masas con plasma acoplado inductivamente

Abstract:

La enfermedad de Alzheimer (EA) es una de las causas más importantes de demencia relacionada con la edad en el que el daño oxidativo es un componente clave. Aunque existen estudios que han vinculado posibles cambios en la homeostasis de elementos esenciales y la exposición a metales pesados con la patogénesis de la EA, se necesitan más investigaciones para determinar la relación real entre los metales y esta enfermedad. En este trabajo, analizamos los niveles de 15 elementos esenciales y tóxicos en 241 muestras cerebrales humanas mediante espectrometría de masas de plasma de acoplamiento inductivo (ICP-MS). Concretamente, determinamos el metaloma de la corteza frontal (CTX) y de los ganglios basales (BG) de cerebros de pacientes post-mortem con EA en diferentes etapas de Braak de la enfermedad, desde las etapas tempranas I y II hasta las etapas más avanzadas V y VI. Nuestros resultados mostraron una disfunción significativa en la homeostasis de metales en CTX y BG, concluyendo además que esta dishomeostasis depende de las etapas de Braak. Los niveles de Mg, Fe, Cu y Zn fueron los más abundantes en las diferentes regiones cerebrales de pacientes con EA, observándose una disminución en comparación con los niveles fisiológicos (por ejemplo, Mg en la CTX de las etapas de Braak más avanzadas). De forma similar, observamos una reducción significativa en los niveles de Se en las etapas Braak V-VI y niveles elevados de Al, especialmente en el BG, en los pacientes con EA, siendo más altos en las etapas avanzadas de la enfermedad. Por otra parte, encontramos niveles elevados de metales tóxicos (Cr, Pb, As y Cd) y elementos minoritarios como el V en pacientes con EA avanzada.



Sesión 4. Contaminantes Emergentes y Medio Ambiente

CO_22-DETERMINACIÓN DE ANTIBIÓTICOS Y SUS METABOLITOS EN MEJILLONES MEDIANTE EXTRACCIÓN POR DISPERSIÓN DE MATRIZ EN FASE SÓLIDA: APLICACIÓN EN ENSAYOS DE EXPOSICIÓN

C. Mejías¹, N. García-Criado¹, J.L. Santos¹, J. Martín¹, I. Aparicio¹, E. Alonso¹

¹ Departamento de Química Analítica, Escuela Politécnica Superior, Universidad de Sevilla

cmpadilla@us.es

Keywords: mejillones; antibióticos; metabolitos; MSPD; LC-MS/MS; fármacos

Abstract:

La presencia de antibióticos en los mariscos destinados al consumo humano puede suponer un riesgo para los consumidores. Además, algunos organismos marinos, como los mejillones, pueden resultar bioindicadores adecuados de contaminación marina. En este trabajo se propone una metodología analítica multiresiduo adecuada para la determinación de antibióticos y metabolitos en mejillones. Los compuestos objetivo incluyen tres sulfonamidas, trimetoprim (TMP) y seis de sus principales metabolitos. El tratamiento de las muestras consiste en su extracción y limpieza en un solo paso mediante dispersión de matriz en fase sólida (MSPD) con acetonitrilo como disolvente. La determinación se llevó a cabo mediante cromatografía de líquidos acoplada a espectrometría de masas en tándem. Se obtuvo una buena linealidad ($R^2 > 0,99$), exactitud (del 80,8 al 118%) y límites de cuantificación (inferiores a 5 ng/g (materia seca, ms)) para todos los compuestos seleccionados. El método se aplicó a la determinación de antibióticos en muestras de mejillones procedentes de un ensayo de exposición con agua de mar contaminada con TMP y sulfametoxazol (SMX). Ambos antibióticos se detectaron en las muestras analizadas con concentraciones de hasta 77,5 ng/g ms. El TMP se bioconcentró en mayor medida que el SMX, atribuible a su mayor hidrofobicidad. No se detectó ninguno de los metabolitos. Estos resultados demuestran que *Mytilus galloprovincialis* es un bioindicador adecuado para evaluar la contaminación marina.

Agradecimientos: Al Ministerio de Ciencia e Innovación-Agencia Estatal de Investigación (PID2020-117641RBI00 de MCIN/AEI/10.13039/501100011033) y a la Universidad de Sevilla (VIPPIT-US2021II.2A).

CO_23-DESCONTAMINACIÓN MAGNÉTICA DE AGUAS Y SU REVALORIZACIÓN

I. Morales-Benítez^{1,2}, M.M. López-Guerrero^{1,2}, E.I. Vereda-Alonso^{1,2}

¹Departamento Química Analítica. Universidad de Málaga.

²Instituto Universitario de Materiales y Nanotecnología.

irenemb@uma.es

Keywords: nanomateriales, descontaminación ambiental, tratamiento de aguas, extracción en fase sólida, metales pesados

Abstract:

La hidrosfera alberga una diversidad de organismos y compuestos en equilibrio, pero la actividad antropogénica está alterándolo. Entre los disruptores responsables, encontramos contaminantes de preocupación emergente, como microplásticos, PFAS u hormonas, pero también metales pesados. Estos últimos son tóxicos y bioacumulables; además, dependiendo de su especie metálica, su toxicidad y propiedades pueden variar, por lo que es crucial el desarrollo de nuevos métodos para el tratamiento, monitoreo, cuantificación y especiación a niveles ultratrazas en aguas. En este trabajo, se han sintetizado y aplicado nuevos nanomateriales magnéticos para resolver estos desafíos. Se han desarrollado nuevas metodologías para la determinación, cuantificación y especiación de varios metales pesados de interés (específicamente cromo, antimonio y arsénico). Los nanomateriales también pueden emplearse para la detección, el tratamiento y el monitoreo de contaminantes de creciente preocupación. Estos nuevos nanomateriales, se basan en el acoplamiento de nanopartículas magnéticas y óxido de grafeno verde con una funcionalización adicional para mejorar la selectividad. Se emplearon metodologías de extracción magnética en fase sólida (MSPE) acopladas a técnicas de espectroscopía atómica, alcanzando límites de detección (LOD) y de cuantificación (LOQ) de ppb y ppt. Estos nuevos métodos para controlar y cuantificar los contaminantes en aguas se validaron y emplearon con éxito en aguas de diverso origen, como aguas de ríos, mares, nacimientos, grifo, costas, lagos y canales de España, Canadá y Francia.

CO_24-ESTRATEGIAS ANALÍTICAS PARA LA IDENTIFICACIÓN DE MICROPLÁSTICOS EN MUESTRAS AMBIENTALES MEDIANTE PY-GC-MS

E. López Rodríguez, R. Romero González, A. Garrido Frenich

Grupo de Investigación FQM-170 “Química Analítica de Contaminantes”, Departamento de Química y Física. Universidad de Almería.

elopezr29@ual.es

Keywords: pirólisis, cromatografía de gases, espectrometría de masas, medio ambiente, microplásticos, biomicroplásticos

Abstract:

La versatilidad de los plásticos los ha convertido en un componente importante en el desarrollo de nuevos materiales debido a su elevada resistencia química y mecánica, lo que ha hecho aumentar exponencialmente su producción en las tres últimas décadas, como demuestran los datos de la Organización para la Cooperación y el Desarrollo Económico (OCDE). Sin embargo, su uso generalizado ha dado lugar a la generación y acumulación de importantes cantidades de residuos que difícilmente llegan a degradarse totalmente, haciéndolo parcialmente generando microplásticos (MPs). Estos fragmentos poseen un tamaño que oscila entre 2 mm y 0,1 μm , lo que los convierte en agentes altamente contaminantes y peligrosos debido a la facilidad con la que pueden propagarse por distintos ecosistemas y afectar a los organismos que en ellos habiten. Por ello, es necesario desarrollar metodologías que permitan su identificación para confirmar su presencia en el medio ambiente, proporcionar datos sobre su concentración y establecer límites de seguridad. En este estudio se ha desarrollado un método analítico basado en la pirólisis acoplada a cromatografía de gases y espectrometría de masas para la determinación simultánea de MPs y biomicroplásticos (BMPs) en agua, consiguiendo identificar 12 polímeros, 10 de ellos recogidos en la Decisión Delegada (UE) 2024/1441 de la Comisión de 11 de marzo de 2024 y 2 de ellos biodegradables, con un tiempo de análisis inferior a 26 minutos, proponiendo así una metodología alternativa a las técnicas de microespectroscopía.

CO_25-MONITORING MICROPLASTIC POLLUTION IN THE MEDITERRANEAN: ANALYSIS OF SEA SALT USING SWIR-HSI TECHNOLOGY

A.M. Jiménez Carvelo¹, M. Medina García¹, M.A. Martínez Domingo², E.M. Valero², E. Cruz³, D. Ballabio³, J.M. Amigo⁴

¹Department of Analytical Chemistry, Faculty of Science, University of Granada (Spain)

²Department of Optics, Faculty of Science, University of Granada (Spain)

³Department of Earth and Environmental Sciences, University of Milan (Italy)

⁴Department of Analytical Chemistry, University of the Basque Country (Spain)

amariajc@ugr.es

Keywords: hyperspectral imaging, machine learning, microplastics

Abstract:

The massive use of plastics in industry and the need to control the waste derived from these materials is nowadays one of the main problems worldwide. Plastic waste accumulates in seas and oceans where it undergoes a fragmentation process due to exposure to UV light and ambient temperature. These very small plastic fragments are called microplastics and represent more than 70% of marine litter. For this, many international organizations have developed action plans for the reduction and control of these pollutants. The presented study shows an innovative analytical methodology based on the application of hyperspectral imaging (HSI) together to machine learning methods to monitor the presence of these pollutants in the Mediterranean Sea, specifically in the region of Almeria (Spain). Natural salt samples, simulated salt and microplastics (PE, PET, PS, PVC) materials were analyzed and as a result, a hyperspectral image of each one was obtained. A hierarchical classification strategy was employed to detect and typify these four of the most common microplastics. Partial least square discriminant analysis as chemometric tool was employed. In the first step the spectra were classified between "microplastic-free salt" and "microplastics" classes, and the second one those spectra identified in the "microplastic" class are classified according to the type of microplastic involved. Once the strategy was validated, it was applied to monitor microplastics in salts from coastal saltworks.

**CO_26-NUEVO MÉTODO PARA LA DETERMINACIÓN DE PFAS
TOTALES EN AGUAS CONTAMINADAS MEDIANTE
MSPE-HR-CS-GFMAS**

**A. Muñoz-García^{1,2}, I. Sánchez-Trujillo¹, I. Cano-Jiménez¹, P. Montoro-Leal⁴,
M.M. López-Guerrero^{1,2}, C. Vereda-Alonso³, E.I. Vereda-Alonso^{1,2}**

¹Departamento de Química Analítica, Facultad de Ciencias, Universidad de Málaga.

²Instituto Universitario de Materiales y Nanotecnología (IMANA), Universidad de Málaga.

³Departamento de Ingeniería Química, Facultad de Ciencias, Universidad de Málaga.

⁴Departamento de Química Analítica y Tecnología de los Alimentos, Instituto Regional de Investigación Científica Aplicada (IRICA), Universidad de Ciudad Real.

andreamgar94@gmail.com

Keywords: PFAS, flúor orgánico total (TOF), MSPE, M@GO, HR-CS-GFMAS, nanomaterial sostenible

Abstract:

Las sustancias per- y polifluoroalquiladas (PFAS) son compuestos altamente utilizados en productos como recubrimientos hidrófugos, utensilios de cocina y envases, debido a su alta resistencia química, térmica y sus propiedades tensioactivas. Su uso masivo ha provocado una contaminación ambiental extendida y bioacumulación en organismos vivos. Aunque regulaciones como el Convenio de Estocolmo y la Directiva Marco del Agua limitan la presencia de algunos PFAS prioritarios (PFOS, PFOA, PFHxS), estas medidas solo abordan una mínima parte del amplio espectro de compuestos fluorados. Además, durante su degradación pueden generarse nuevas especies fluoradas a partir de precursores, lo que complica su control. La determinación individual resulta lenta, costosa y limitada frente a compuestos desconocidos o emergentes. Por ello, resulta clave implementar métodos rápidos y sensibles basados en parámetros sumatorios, como el flúor orgánico total (TOF), para una evaluación ambiental global más eficaz. En este trabajo se presenta un método rápido, sensible y sostenible para la cuantificación de TOF en aguas contaminadas con PFAS. El procedimiento combina extracción en fase sólida magnética (MSPE), utilizando óxido de grafeno magnético (M@GO), con espectrometría de absorción atómica de alta resolución y fuente continua en horno de grafito (HR-CS-GFAAS). El flúor orgánico se convierte estequiométricamente en GaF in situ, cuya banda de absorción molecular permite una detección precisa en niveles de ppb. El nanomaterial se obtiene por síntesis seca, sin disolventes, es reutilizable y permite un análisis en solo 3,5 minutos por réplica, lo que convierte esta propuesta en una herramienta eficiente para el monitoreo ambiental de PFAS.

**CO_27-DETERMINACIÓN DE COMPUESTOS PERSISTENTES,
MÓVILES Y TÓXICOS EN SISTEMAS ESTUARINOS Y MARINOS
MEDIANTE EXTRACCIÓN EN FASE SÓLIDA Y CROMATOGRAFÍA
LÍQUIDA ACOPLADA A ESPECTROMETRÍA DE MASAS DE ALTA
RESOLUCIÓN**

**L. Freemantle, R. Ríos-Quintero, M.G. Pintado-Herrera, E. González-Mazo,
P.A. Lara-Martín**

Departamento Química Física. Universidad de Cádiz

lillie.freemantle@uca.es

Keywords: PMTs, SPE, cromatografía líquida

Abstract:

Los compuestos persistentes, móviles y tóxicos (PMT) representan una clase emergente de contaminantes que, debido a su alta polaridad, movilidad y estabilidad química, presentan limitaciones para su eliminación mediante tratamientos convencionales de depuración y complican su análisis. Su detección en entornos estuarinos y marinos, caracterizados por elevada salinidad y complejidad matricial, requiere metodologías analíticas específicas y altamente sensibles. En este estudio se desarrolló un método basado en extracción en fase sólida (SPE) y cromatografía líquida acoplada a espectrometría de masas de alta resolución (LC-HRMS), optimizado para la detección de PMTs en matrices complejas. Se evaluaron cinco tipos de cartuchos SPE: ISOLUTE ENV+, adecuado para la retención de compuestos polares y semipolares mediante mecanismos no iónicos; WAX, adecuado para la retención de aniones débiles; WCX, para cationes débiles; PFAS WAX, diseñado para compuestos muy polares como las sustancias perfluoroalquiladas; y Oasis HLB, un sorbente mixto hidrofóbico-hidrofílico de uso amplio. La separación cromatográfica se comparó empleando tres columnas: ACQUITY UPLC HSS T3, de fase reversa con grupos C18 polarizados; Luna Polar Pesticides, también de fase reversa pero optimizada para pesticidas polares; y ACQUITY UPLC BEH Amide, de tipo HILIC (Hydrophilic Interaction Liquid Chromatography), una modalidad que utiliza fases polares y condiciones con alto contenido de disolvente orgánico para favorecer la retención de analitos muy polares que no se retienen en fases reversas convencionales. El método fue validado mediante el análisis de muestras recolectadas en un sistema fluvio-estuarino del sur de España, caracterizado por gradientes salinos y presión antropogénica. La selección de los materiales de extracción y condiciones cromatográficas fue clave para lograr una recuperación y separación adecuadas de los compuestos en una matriz acuática compleja.

**CO_28-ANÁLISIS DE PFAS Y OTROS CONTAMINANTES
AMBIENTALES EN SUELO Y PLANTAS DE AVENA MEDIANTE
GC/MS DE ALTA RESOLUCIÓN.**

**J.J. Rivero¹, S. Nieto², M. Giardina², M. Curtis²,
L. Wong³, G. Black³, T. Young³**

¹ Agilent Technologies, Madrid, España

² Agilent Technologies, Santa Clara, CA

³ Department of Civil and Environmental Engineering, UC Davis, Davis, CA

jose.rivero@agilent.com

Keywords: PFAS, GC/MS alta resolución, GC/Q-TOF, GC 8890, MassHunter Unknowns Analysis, GC/Q-TOF Screener

Abstract:

Las sustancias perfluoroalquiladas y polifluoroalquiladas (PFAS) son contaminantes orgánicos sintéticos persistentes con potencial de bioacumularse. El suelo es un reservorio importante de PFAS, así como de muchos otros contaminantes ambientales persistentes, y por lo tanto puede contribuir a la contaminación de las aguas subterráneas, la atmósfera y la biota. Por lo tanto, para comprender mejor el origen y el transporte de estos contaminantes, se han evaluado extractos de suelo y plantas. Este estudio describe diferentes enfoques para la extracción y el análisis de PFAS y otros contaminantes ambientales en suelo y plantas mediante GC/Q-TOF. Para la aplicación del Método, se tomaron muestras de suelo y plantas de avena de dos campos de California que históricamente han recibido biosólidos. Las muestras de suelo y plantas se extrajeron con cloruro de metileno (DCM) para inyecciones líquidas o se sometieron a microextracción en fase sólida en espacio de cabeza (HS-SPME). El análisis por GC/MS se realizó con un GC 8890 acoplado a un Q-TOF de alta resolución 7250. La deconvolución cromatográfica y la búsqueda en bibliotecas se realizaron con el software MassHunter Unknowns Analysis y la biblioteca NIST23 EI. El cribado de sospechosos se realizó con la herramienta GC/Q-TOF Screener del software de análisis cuantitativo MassHunter y bibliotecas de masas precisas para pesticidas y PFAS. Se han evaluado diversas fibras SPME para la extracción de PFAS y otros contaminantes ambientales del suelo. La fibra DVB-CWR-PDMS mostró una eficiencia superior en la extracción de compuestos de diversas clases químicas. La SPME mostró una mayor sensibilidad para la extracción de algunos de los PFAS volátiles, mientras que la extracción con DCM fue más eficiente para la extracción de contaminantes más pesados, como PCB y retardantes de llama. Además de los PFAS y pesticidas detectados mediante la metodología de cribado dirigido, basada en la base de datos y bibliotecas personales de compuestos (PCDL) de masa precisa de estos contaminantes, se identificaron otros contaminantes, como PCB, HAP y retardantes de llama, en muestras de suelo y plantas mediante el cribado no dirigido y la biblioteca NIST23. La mayoría de estos contaminantes se detectaron solo en el suelo, pero también se encontraron pesticidas y algunos HAP en muestras de plantas. Durante la presentación se muestran la evaluación de diferentes metodologías para la extracción y análisis de PFAS y otros contaminantes en suelo y plantas utilizando GC/MS de alta resolución.

Sesión 5. Avances en Instrumentación Analítica

CO_29-DETERMINACIÓN POTENCIOMÉTRICA SIMULTÁNEA Y EN FLUJO DE IONES SODIO Y POTASIO EN MUESTRAS REALES SIN TRATAR DE SUERO Y PLASMA EMPLEANDO UNA CELDA MICROFLUÍDICA 3D DE BAJO COSTE.

M. Jiménez Rodríguez, A. Cordero Hernández, A.J. Sainz Calvo, V. García Rodríguez, J.M. Palacios Santander, L. Cubillana Aguilera, J.J. García Guzmán, D. Bellido Milla

Departamento de Química Analítica, Instituto de Investigación en Microscopía Electrónica y Materiales (IMEYMAT), Facultad de Ciencias, Campus de Excelencia Internacional del Mar (CEIMAR) Universidad de Cádiz, Campus de Puerto Real, 11510 Puerto Real.

juanjo.garciaguzman@uca.es

Keywords: sensores potenciométricos, monitorización en continuo, fabricación aditiva

Abstract:

La promoción de la e-Health busca mejorar la salud pública mediante el diagnóstico temprano y el monitoreo continuo de biomarcadores. En este contexto, los sensores electroquímicos emergen como una solución eficaz, permitiendo la detección rápida y fiable de diversos analitos de interés clínico, especialmente los iones, fundamentales en numerosos procesos fisiológicos y patologías. Este trabajo presenta el exitoso desarrollo de dos sensores potenciométricos para la determinación conjunta de iones sodio (Na^+) y potasio (K^+). Se utilizaron electrodos Sonogel-Carbono con nanotubos de carbono de pared múltiple y membranas selectivas de iones específicas para cada catión. Los sensores demostraron un rango operativo adecuado para la cuantificación precisa de estos iones en muestras biomédicas. Además, los dispositivos exhibieron una repetibilidad, reproducibilidad y reversibilidad excelentes, con desviaciones estándar relativas (%RSD) inferiores al 5%, y una selectividad excepcional frente a otras sustancias interferentes presentes en matrices clínicas. Los sensores se aplicaron exitosamente para la determinación simultánea de Na^+ y K^+ en muestras no tratadas de plasma y suero humano, utilizando una celda microfluídica 3D obtenida mediante fabricación aditiva en nuestro laboratorio y bajo condiciones de flujo continuo. Los resultados analíticos obtenidos mostraron un margen de error inferior al 5% en comparación con métodos de referencia, lo que subraya la fiabilidad y el potencial de aplicación de estos sensores en el diagnóstico clínico.

CO_30-INTEGRACIÓN DE LA PREPARACIÓN DE MUESTRA Y DETECCIÓN: AVANCES EN EL ANÁLISIS ELECTROQUÍMICO DE CODEÍNA EN MUESTRAS AMBIENTALES Y BIOLÓGICAS

M. L. Soriano, R. Lucena, S. Cárdenas

Affordable and Sustainable Sample Preparation (AS2P) Research Group, Analytical Chemistry Department, Chemical Institute for Energy and Environment (IQUEMA), University of Cordoba, E-14071, Cordoba, Spain.

ga2sodom@uco.es

Keywords: drugs, electrochemistry, sample preparation, graphene quantum dots, carbon quantum dots

Abstract:

La detección rápida y precisa de fármacos como la codeína en matrices complejas es crucial en toxicología forense y clínica. Aunque los métodos electroanalíticos ofrecen ventajas, sigue siendo necesario integrar la etapa de preparación de muestra con la detección electroquímica. En este estudio, se propone un método novedoso para detectar codeína en matrices complejas utilizando electrodos serigrafiados de carbono (SPCEs) modificados con nanopuntos de carbono. Se comparó el comportamiento electroquímico de nanopuntos de carbono (CNDs), puntos cuánticos de carbono (CQDs) y puntos cuánticos de grafeno (GQDs) como modificadores de los electrodos. Los GQDs mostraron excelentes propiedades electrocatalíticas, al igual que ocurría con los CQDs funcionalizados con un complejo de Ru(II), permitiendo detectar la codeína a bajas concentraciones. Los sensores se aplicaron al análisis de codeína en fluidos biológicos como saliva y orina, en bebidas, así como en muestras de agua ambiental. Para el tratamiento de estas muestras, se emplearon varias técnicas de extracción como la extracción líquido-líquido y la microextracción en película delgada, integrando la preparación de la muestra con la etapa de detección en este último caso. Los sensores desarrollados destacan por su alta sensibilidad, selectividad y bajo coste, lo que los convierte en herramientas prometedoras para aplicaciones rápidas en entornos forenses y clínicos. Esta investigación demuestra la eficacia de combinar la preparación de muestra con la detección electroquímica empleando SPCEs modificados con nanomateriales.

Agradecimientos: Se agradece la financiación recibida en el marco del proyecto PID2023-146313OB-I00 (MCIN/AEI/10.13039/501100011033).

**CO_31-EXTRACCIONES MÁS SOSTENIBLES DE BIOPLAGUICIDAS:
COMBINANDO TÉCNICAS DE MICROEXTRACCIÓN CON
DISOLVENTES EUTÉCTICOS PROFUNDOS NATURALES (NADES)**

A. Reyes-Ávila, L. Carbonell-Rozas, R. Romero-González, A. 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), Campus de Excelencia Internacional Agroalimentario (ceiA3), Universidad de Almería, 04120 Almería, España

ara494@ual.es

Keywords: bioplaguicidas, NADES, DLLME-SFOD, química verde, agua

Abstract:

La extracción de bioplaguicidas, utilizados como alternativa a los plaguicidas convencionales, en muestras agroalimentarias se realiza empleando disolventes orgánicos, que no cumplen los principios de la química analítica verde. Para minimizar este efecto, se ha evaluado la combinación de técnicas de microextracción y disolventes más sostenibles. Se ha estudiado la extracción de bioplaguicidas (rotenona, piretrinas, 1,8-cineol, etc.) usando microextracción líquido-líquido dispersiva junto con la formación de una gota orgánica flotante (DLLME-SFOD) en muestras de agua. Como disolvente de extracción se ha utilizado 1-dodecanol, que solidifica a temperatura ambiente, y como disolvente dispersivo se han evaluado diferentes disolventes eutécticos profundos naturales (NADES) hidrofílicos. Para su determinación se utilizó cromatografía de líquidos y de gases acopladas a un analizador de masas de alta resolución tipo cuadrupolo (Q)-Orbitrap. Tras una optimización univariable, se seleccionó como NADES óptimo cloruro de colina:urea:agua (relación molar 1:2:3), y como sal óptima sulfato de sodio. Seguidamente, se realizó una optimización multivariable mediante un diseño compuesto central (CCD). Se evaluaron volumen de extracción, entre 50-150 μ L; volumen de dispersivo, entre 0.5-2 mL; cantidad de sal, entre 0.5-2 g; y tiempo de extracción, entre 5-20 min. Los valores óptimos obtenidos fueron 120 μ L de volumen de extracción óptimo, 2 mL de volumen de dispersivo, 0.5 g de sal y 20 min de tiempo de extracción. Los bioplaguicidas estudiados se recuperaron entre el 70.9-109.1% con una precisión aceptable. Se ha demostrado que se pueden extraer bioplaguicidas de muestras de agua con buenos valores de recuperación empleando técnicas y disolventes más sostenibles.

CO_32-ANÁLISIS NO DIRIGIDO DE CONTAMINANTES ORGÁNICOS MEDIANTE ESPECTROMETRÍA DE MASAS DE ALTA RESOLUCIÓN: FLUJOS DE TRABAJO Y CASOS DE ESTUDIO

P.A. Lara-Martín, M.G. Pintado-Herrera

Departamento de Química Física, Universidad de Cádiz.

pablo.lara@uca.es

Keywords: contaminantes orgánicos, espectrometría de masas, cromatografía de gases, cromatografía líquida, agua, lodos

Abstract:

Actualmente hay más de 150 millones de sustancias químicas registradas, de las que se estima que 350000 se producen y usan a gran escala a nivel global. Muchas de estas sustancias tienen el potencial de acceder al medioambiente y causar efectos negativos sobre el mismo. El análisis no dirigido (NTS) mediante espectrometría de masas de alta resolución (HRMS) constituye una poderosa herramienta para la identificación de un muy amplio espectro de contaminantes orgánicos en todo tipo de matrices ambientales. En este trabajo exponemos algunos de los flujos de trabajo usados para llevar a cabo tal caracterización y su aplicación a varios tipos de aguas y matrices sólidas (lodos y sedimentos). Así, se han podido caracterizar más de 500 contaminantes derivados de aguas residuales en aguas atlánticas, desde fármacos a productos de higiene personal y sustancias de uso industrial. También ha sido posible la identificación de 42 sustancias persistentes, móviles y tóxicas (PMTs) en agua de lluvia. La aplicación de NTS a matrices sólidas ha revelado la presencia de más de 50 nuevas sustancias en sedimentos de la Bahía de Cádiz, así como permitido la semi-cuantificación (a niveles de ng/g) de hasta 382 contaminantes en lodos de depuradora procedentes de un estudio a nivel nacional realizado en Suiza. El rápido desarrollo de instrumentos HRMS en combinación con herramientas NTS más avanzadas permitirá seguir aumentando el número de sustancias identificadas en el medio ambiente, promoviendo la priorización para estudios más detallados y ayudando así al desarrollo de políticas sobre su regulación.

CO_33-ANÁLISIS DE MEDICAMENTOS Y DROGAS DE ABUSO EN SUPERFICIES DEL INTERIOR DE EDIFICIOS: DESARROLLO DE UN MÉTODO EFICIENTE BASADO EN DISOLVENTES SUPRAMOLECULARES

C. de Dios-Pérez, A. Ballesteros-Gómez, S. Rubio-Bravo

Departamento de Química Analítica, Instituto Químico para la Energía y el Medioambiente.
Universidad de Córdoba, 14014 Córdoba, España.

q52dipec@uco.es

Keywords: disolventes supramoleculares, espectrometría de masas de alta resolución, drogas, medicamentos, polvo interior

Abstract:

Se ha confirmado recientemente la presencia de fármacos, drogas de abuso y estimulantes en el polvo doméstico, lo que plantea una vía de exposición relevante para la salud humana. Sin embargo, aún existe escasa información cuantitativa al respecto. Este estudio presenta un enfoque innovador y más sostenible para el análisis de contaminantes orgánicos en polvo del interior de edificios, basado en el uso de disolventes supramoleculares (SUPRAS). Esta técnica permite una extracción eficiente y limpieza de las muestras en un solo paso, reduciendo considerablemente el uso de disolventes (~200 µL por muestra) y el tiempo de preparación (30 minutos). El uso de SUPRAS y el análisis por cromatografía líquida acoplada a espectrometría de masas de alta resolución (LC-HRMS) permitió cuantificar 23 compuestos en 43 muestras de polvo de edificios públicos. Todas las superficies analizadas contenían al menos un contaminante. La cafeína y la nicotina se detectaron en todas las muestras, alcanzando concentraciones medianas de 5,720 y 19,380 ng·g⁻¹, respectivamente. Entre los medicamentos y drogas, el paracetamol y la cocaína presentaron las mayores frecuencias de detección (100 % y 98 %). El cálculo de la ingesta diaria estimada por ingestión de polvo mostró niveles generalmente bajos de exposición, aunque los espacios como bares y restaurantes registraron concentraciones notablemente más altas. Estos hallazgos subrayan la necesidad de considerar el polvo como una fuente adicional de exposición involuntaria y fomentar estudios que integren otras vías como la inhalación y el contacto dérmico para una evaluación integral del riesgo de exposición a contaminantes.

Agradecimientos: Los autores agradecen la financiación recibida de MCIU/AEI/10.13039/501100011033/ FEDER, UE (proyecto PDI 2023-149488OB-I00).

CO_34-ANÁLISIS ISOTÓPICO SIMULTÁNEO Y ESPECIE-ESPECÍFICO DE MERCURIO INORGÁNICO Y METILMERCURIO MEDIANTE ESPECTROMETRÍA DE MASAS ORBITRAP CON IONIZACIÓN SUAVE

A.R. López^{1,2}, G. Roncoroni², D. Monticelli²

¹University School for Advanced Studies IUSS Pavia, 27100 Pavia, Italy

²Università degli Studi dell'Insubria, Dipartimento di Scienza e Alta Tecnologia, via Valleggio
11, 22100 Como, Italy.

alejandro.ruiz@iusspavia.it

Keywords: relación isotópica, metilmercurio, espectrometría de masas de alta resolución, ESI-Orbitrap, especiación

Abstract:

El uso de la composición isotópica del mercurio (Hg) para identificar sus fuentes y rastrear su movimiento en el medio ambiente ha aumentado recientemente. Las relaciones isotópicas específicas de cada especie química son particularmente útiles para revelar procesos de transformación como la metilación y la desmetilación. Por tanto, diferenciar los perfiles isotópicos del mercurio inorgánico (iHg) y su principal forma orgánica, el metilmercurio (MeHg), es fundamental para comprender su dinámica ambiental [1]. El análisis isotópico especie-específico del Hg suele basarse en la separación cromatográfica combinada con espectrometría de masas con plasma acoplado inductivamente y detectores multi-collector (MC-ICPMS), en configuraciones tanto on-line como off-line. Aunque estos métodos son eficaces, requieren una preparación de muestras laboriosa—como derivatización y extracción con disolventes—y el uso de instrumentación avanzada, incluyendo cromatografía de gases (GC) [2] o cromatografía líquida de alta resolución (HPLC) [3] acopladas a MC-ICPMS. Además, la naturaleza transitoria de las señales en los análisis on-line puede limitar la precisión. Presentamos un enfoque novedoso basado en ionización suave que permite mediciones directas y específicas por especie de las relaciones isotópicas, preservando la integridad molecular. El método consiste en formar complejos con iHg y MeHg, introducirlos en una fuente de ionización por electrospray (ESI), inducir disociación por colisión y medir directamente sus perfiles isotópicos utilizando un espectrómetro de masas Orbitrap™. Esto elimina la necesidad de derivatización y separación cromatográfica, simplificando la preparación de la muestra y reduciendo el tiempo total de análisis. Presentamos el estado actual del desarrollo y validación del método, evaluando su precisión y reproducibilidad. Además, comparamos esta técnica con los métodos convencionales, destacando sus principales ventajas y posibles desafíos. Esta estrategia también muestra potencial para aplicarse a otros elementos, ofreciendo una herramienta más eficiente para investigar la especiación metálica y el fraccionamiento isotópico en sistemas tanto naturales como contaminados.

[1] M.T. K. Tsui, J.D. Blum, S.Y. Kwon, *Science of the Total Environment*, 716, 2020, 135386.

[2] L. Suárez-Criado, S. Queipo-Abad, P. Rodríguez-González, J.I. García Alonso, *Journal of Analytical Atomic Spectrometry*, 39, 2024, 508-517.

[3] J. Entwistle, D. Malinovsky, P.J.H. Dunn, H. Goenaga-Infante, *Journal of Analytical Atomic Spectrometry*, 33, 2018, 1645–1654.

CO_35-MATERIAL COMPUESTO DE POSOS DE CAFÉ Y MAGNETITA PARA LA ADSORCIÓN DE METALES EN MATRICES ACUOSAS

**A.J. Ruiz Sánchez, M.M. López Guerrero, A. Olmo Marín, I. Sánchez Trujillo,
E.I. Vereda Alonso¹**

Departamento de Química Analítica, Facultad de Ciencias, Universidad de Málaga, Campus de Teatinos S/N, 29071 Málaga. Instituto Universitario de Materiales y Nanotecnología, IMANA, Universidad de Málaga, Campus de Teatinos, 29071, Málaga

ajruizs@uma.es

Keywords: posos de café, nanopartículas magnéticas, magnetita, metales pesados

Abstract:

La valorización de residuos lignocelulósicos como los posos de café (PC) constituye una estrategia sostenible para el desarrollo de materiales funcionales en el ámbito del tratamiento y análisis de aguas. Los PC presentan una matriz porosa rica en grupos funcionales (carboxilo, hidroxilo, etc.) con alta afinidad por especies metálicas. En este estudio se ha diseñado y caracterizado un material compuesto magnético, obtenido mediante la impregnación de nanopartículas de magnetita, Fe_3O_4 (MNPs) sobre PC (MNP-Café) con el fin de emplearlo como adsorbente de metales traza en disoluciones acuosas. La síntesis se llevó a cabo mediante métodos solvotermales, promoviendo la formación in situ y fijación de nanopartículas de magnetita dentro de la estructura tridimensional del residuo orgánico. El material resultante fue caracterizado estructural y morfológicamente mediante difracción de rayos X y microscopía electrónica de barrido y transmisión, confirmando la presencia de nanopartículas de magnetita dentro de la matriz orgánica. La eficiencia de la adsorción del MNP-Café se evaluó frente a diversos cationes metálicos en función del pH, observándose un comportamiento dependiente del valor de pH y una alta capacidad de retención para distintos iones evaluados. La funcionalidad magnética del material permitió su recuperación rápida mediante separación externa. Los resultados sugieren que el MNP-Café constituye una alternativa viable y de bajo coste para la preconcentración y eliminación de metales en procesos de análisis y tratamiento de aguas.

Agradecimientos: Los autores agradecen al Ministerio de Ciencia e Innovación (Proyecto PID2021-126794OB100) y a la Junta de Andalucía (Proyecto FQM-117-G-FEDER) por su apoyo financiero.

Pósteres

P_1-EVOLUCIÓN EN LA AUTENTIFICACIÓN DEL ACEITE DE OLIVA VIRGEN: LA INTEGRACIÓN DE MÉTODOS DE ANÁLISIS QUÍMICO Y APRENDIZAJE AUTOMÁTICO

**C. Cabeza Rodríguez, E.A. Roca Nasser, L. Cuadros Rodríguez,
A.M. Jiménez Carvelo**

Departamento de Química Analítica, Universidad de Granada, Avda. Fuentenueva s/n,
18071 Granada

celiacquez@ugr.es

Keywords: autentificación aceite de oliva virgen, fracción metil-transesterificada, huella instrumental agnostizada, quimiometría y aprendizaje automático

Abstract:

El aceite de oliva virgen se obtiene directamente del fruto del olivo utilizando únicamente procedimientos mecánicos. Debido a las condiciones técnicas particulares a mantener durante este proceso de obtención, este aceite es más caro que otros aceites vegetales comestibles. Por ello, es candidato a sufrir adulteraciones con aceites de menor calidad, con el fin de reducir costes y aumentar el beneficio económico.

El proceso analítico aplicado en este estudio se basa en el uso de la metodología analítica de huellas instrumentales, junto con herramientas de aprendizaje automático. En primer lugar, se obtuvo la fracción metil-transesterificada de distintos aceites vegetales (aceite de oliva virgen, orujo de oliva y girasol refinado), así como de mezclas de aceite de oliva virgen extra con los otros aceites vegetales. Seguidamente se adquirieron los cromatogramas HPLC-CAD en modalidad de fase normal. Tras ello, se procesaron las señales cromatográficas, que fueron sometidas a un proceso de agnostización instrumental para obtener las correspondientes huellas cromatográficas. Se aplicaron diferentes métodos de aprendizaje con objeto de desarrollar modelos multivariantes, capaces de discriminar aceites de oliva de otros aceites vegetales. Entre los métodos de aprendizaje se encuentran el análisis de componentes principales (PCA), el análisis discriminante mediante regresión parcial por mínimos cuadrados (PLS-DA) y el sistema de aprendizaje automático mediante vectores soporte (SVM). Los resultados demostraron que la metodología de huellas instrumentales junto con métodos de aprendizaje automático es una estrategia rápida y fiable para la autentificación inequívoca del aceite de oliva virgen.

P_2-INDEPENDENCIA DEL PERFIL CROMATOGRÁFICO FRENTE A LAS CONDICIONES DEL CROMATÓGRAFO: UN PASO HACIA LA AGNOSTIZACIÓN INSTRUMENTAL Y SU APLICACIÓN EN EL ANÁLISIS MULTIVARIANTE PARA LA DETECCIÓN DE ADULTERACIONES EN ACEITE DE OLIVA VIRGEN

**C. Cabeza Rodríguez, A. Munguía Ubierna, A. González Casado,
L. Cuadros Rodríguez, A.M. Jiménez Carvelo**

Departamento de Química Analítica, Facultad de Ciencias, Universidad de Granada, Av.
Fuente Nueva s/n, E-18071 Granada (España)

celiacquez@ugr.es

Keywords: adulteración de aceite de oliva virgen, método analítico ISO/TS 22115, huella instrumental de la fracción lipídica, agnostización, quimiometría y aprendizaje automático

Abstract:

La comparabilidad de señales cromatográficas y la construcción de bases de datos universales de cromatogramas se ven obstaculizadas por la dependencia de estas señales respecto al instrumento utilizado (marca y modelo), al laboratorio en el que se generan (operador) y al momento específico de su adquisición (estado particular de mantenimiento). Esta situación complica la comparación de cromatogramas obtenidos a partir de una misma muestra, ya que pueden surgir diferencias notables entre ellos. Una posible solución consistiría en estandarizar dichas señales, haciéndolas independientes tanto del equipo como de su estado operativo. Esta comunicación presenta una propuesta enfocada en la cromatografía de gases, y en concreto en el método ISO/TS 22115, con el fin de desarrollar una estrategia común (agnostización) y de aplicación genérica que permitiría desarrollar la primera base de datos global de huellas instrumentales cromatográficas de aceite de oliva. Con el objetivo de reducir la influencia del cromatógrafo en los resultados, se plantea el empleo de estándares químicos compuestos por: (i) un patrón interno, y (ii) una mezcla patrón externa. El patrón interno es empleado para normalizar las intensidades adquiridas (eje Y) y el patrón externo para normalizar los tiempos de retención (eje X) mediante una transferencia a un dominio de índices normalizados de retención. Como ejemplo práctico, las huellas instrumentales agnostizadas de aceite de oliva fueron empleadas para generar un modelo multivariable que permita discriminar entre aceites de oliva virgen y otros aceites vegetales, usando para ello métodos de aprendizaje automático.

**P_3-EVALUACIÓN DEL USO DE SUBPRODUCTOS
AGRONÓMICOS EN LA PRODUCCIÓN DE GRASA Y HARINA DE
T. MOLITOR: IMPACTO EN EL PERFIL VOLÁTIL**

**C. Ubeda¹, M.L. Morales¹, R.M. Callejón¹, D. Gutiérrez-Praena²,
J.R. Aguilera-Velázquez³, R. Santana-Villalona², R. Ríos-Reina¹,
M.P. Segura-Borrego¹**

¹Área de Nutrición y Bromatología, Departamento de Nutrición y Bromatología,
Toxicología y Medicina Legal, Facultad de Farmacia, Universidad de Sevilla.

²Departamento de Nutrición y Bromatología, Toxicología y Medicina Legal, Área de
Toxicología, Facultad de Farmacia, Universidad de Sevilla.

³Departamento de Bioquímica y Biología Molecular, Facultad de Farmacia, Universidad
de Sevilla.

c_ubeda@us.es

Keywords: *Tenebrio molitor*, proteínas alternativas, economía circular, composición volátil

Abstract:

Desde la aprobación por parte de la Comisión Europea en 2021 de la comercialización de *Tenebrio molitor* para consumo humano las publicaciones con esta temática han aumentado en gran medida. La explotación de este insecto presenta numerosas ventajas ambientales e incluso nutricionales, como fuente de proteínas de alta calidad, que justifican el creciente interés en su investigación. Además, en el marco de la economía circular, son capaces de alimentarse de gran variedad de sustratos, permitiendo el uso de muchos subproductos del sector agroalimentario. Sin embargo, el consumidor actual aprecia no solo la calidad nutricional y el respeto al medio ambiente, sino también la calidad sensorial, en la que el aroma, determinado por los compuestos volátiles del producto, desempeña un papel destacado. Así, el presente trabajo explora el uso de subproductos agroalimentarios, en concreto alperujo estabilizado (ALP), sustrato agotado de crecimiento de setas (*Pleurotus ostreatus*) (SAP) y triturado de hoja de olivo (OLF) en diferentes porcentajes (20-100 %) como sustratos alimentarios alternativo para *T. molitor*. El objetivo del estudio fue conocer los efectos del uso de cada subproducto en el perfil volátil de la harina y aceite obtenido del procesado de las larvas del insecto. Para ello, los compuestos volátiles fueron extraídos con Microextracción en Fase Sólida (SPME) y analizados por GC-MS. Los resultados mostraron que la alimentación de *T. molitor* influyó significativamente en el perfil volátil de la grasa y la harina del insecto, destacando la alta presencia de pirazinas debido al proceso de elaboración de los productos.

**P_4-EFECTO DE LA DIETA DE *TENEBRIO MOLITOR* EN LA
COMPOSICIÓN QUÍMICA DE LAS HARINAS DE *TENEBRIO
MOLITOR*: UN ENFOQUE ESPECTROSCÓPICO**

**C. Ubeda¹, R.M. Callejón¹, M.L. Morales¹, D. Gutiérrez-Praena²,
J.R. Aguilera-Velázquez³, R. Santana-Villalona², M.P. Segura-Borrego¹,
R. Ríos-Reina¹**

¹Área de Nutrición y Bromatología, Departamento de Nutrición y Bromatología,
Toxicología y Medicina Legal, Facultad de Farmacia, Universidad de Sevilla

²Área de Toxicología, Departamento de Nutrición y Bromatología, Toxicología y Medicina
Legal, Facultad de Farmacia, Universidad de Sevilla

³Departamento de Bioquímica y Biología Molecular, Facultad de Farmacia, Universidad
de Sevilla

c_ubeda@us.es

Keywords: *Tenebrio molitor*, espectroscopía, infrarrojo, autenticación, economía circular

Abstract:

La producción de alimentos, principalmente la carne animal, desempeña un papel fundamental en la generación de gases de efecto invernadero (GEI), a la vez que aporta solo el 37% de la ingesta total de proteínas y el 18% del total de calorías, por lo tanto, es necesario explorar fuentes alternativas de proteínas, como por ejemplo, el empleo de insectos. En este sentido, la larva de *Tenebrio molitor* es, además, capaz de alimentarse con diversos sustratos, lo cual hace muy interesante tener técnicas que pongan de manifiesto la alimentación recibida, con fines de autenticación y procedencia futuras. En este sentido, el empleo de técnicas espectroscópicas se presenta como una herramienta que ha demostrado ser de gran utilidad en la identificación y clasificación de alimentos para verificación de su identidad. De esta manera el objetivo de este trabajo fue la búsqueda de patrones que permitieran diferenciar triturados y harinas de *T.molitor* según la alimentación recibida mediante el análisis por espectroscopía infrarrojo cercano (NIR) y medio (MIR). Para ello, se utilizó alperujo estabilizado (ALP), sustrato agotado de *Pleorotus ostreatus* (POS) y triturado de hoja de olivo (OLF) mezclados con salvado de trigo (dieta control), en diferentes porcentajes (20-100%). Los resultados mostraron espectros distintos según el subproducto agronómico ingerido por el insecto, observándose con mayor claridad en los triturados que en las harinas. Esto puso de manifiesto que las moléculas clave para su clasificación estaban más presentes en la fracción grasa del producto.

**P_5-USO DE PARED CELULAR DE UVA BLANCA EN EL
AFINAMIENTO DE VINO TINTO: DESCIFRANDO EL MECANISMO
MEDIANTE ESPECTROSCOPIA VIBRACIONAL (ATR-FTIR)**

**J. Gómez-Pérez¹, J.M. Hernández-Hierro¹, B. Baca-Bocanegra²,
J. Nogales-Bueno², K.B Bec³, C.W. Huck³**

¹Laboratorio de Color y Calidad de Alimentos, Departamento de Nutrición y Bromatología, Toxicología y Medicina Legal, Facultad de Farmacia, Universidad de Sevilla.

²Departamento de Química Analítica, Facultad de Farmacia, Universidad de Sevilla.

³Institute of Analytical Chemistry and Radiochemistry, University of Innsbruck, Innsbruck, Austria

jgomez11@us.es

Keywords: tratamientos espectrales, ATR-FTIR, PCA, afinantes, economía circular, orujos

Abstract:

El afinado de vinos tintos es una etapa crucial para eliminar componentes no deseados y que pueden afectar negativamente a su calidad. Las estrategias seguidas en los últimos años han derivado en el uso de agentes afinantes vegetales. Entre estos, el uso de afinantes procedentes de partes de la uva, aparece como alternativa razonable para evitar posibles problemas de alergenicidad que pueden dar otras proteínas vegetales y de esta forma promover una estrategia de economía circular. En este trabajo, agentes afinantes de pared celular obtenida de orujos de diferentes variedades de uva blanca (Pedro Ximénez, Moscatel y Zalema) han sido utilizados para el afinado de un vino tinto. Tanto los agentes afinantes como los posos obtenidos tras el afinado han sido medidos mediante espectroscopía de infrarrojo medio por transformada de Fourier y reflectancia total atenuada (ATR-FTIR). Los espectros obtenidos han sido pretratados con diferentes tratamientos espectrales y estudiados mediante análisis de componentes principales (PCA). Como resultado se han encontrado diferencias entre las diferentes muestras analizadas, así como las bandas espectrales causantes de estas diferencias. Por último, las evidencias encontradas se han utilizado para explicar las diferencias en los procesos de afinado realizados con cada pared celular.

Agradecimientos: Financiado por la Junta de Andalucía [ProyExcel_00602] y el Ministerio de Ciencia y Tecnología de España [PID 2021-127126OB-C22]. Estancia financiada por VII Plan de Investigación y Transferencia de la Universidad de Sevilla 2024. (III.2A). Convocatoria del Programa de Ayudas para Estancias Breves en Centros de Investigación Nacionales y Extranjeros.

P_6-CARACTERIZACIÓN LUMINISCENTE DE NANOCLÚSTERES METÁLICOS SINTETIZADOS CON OLIGONUCLEÓTIDOS COMO PLANTILLAS

**J.M. Fernández-Romero¹, I. Sánchez-Garrido¹, V. Román-Pizarro¹,
M.A. García-Granados¹, A. Écija-Arenas¹**

¹ Departamento de Química Analítica, Instituto Químico para la Energía y el Medioambiente (IQUEMA), Universidad de Córdoba, Campus de Rabanales, Edificio Anexo "Marie Curie", E-14071 Córdoba, España.

ga1feroj@uco.es

Keywords: nanoclústeres metálicos, oligonucleótidos, modulación de luminiscencia, xenobióticos, análisis medioambiental

Abstract:

El empleo de nanoclústeres metálicos (MeNCs) luminiscentes sintetizados utilizando oligonucleótidos como plantillas ofrece una plataforma versátil para la determinación de compuestos xenobióticos en matrices ambientales y agroalimentarias. Gracias a su capacidad para formar estructuras macromoleculares, los oligonucleótidos se han utilizado en este trabajo de investigación para favorecer la nucleación de iones Ag^+ y así propiciar la formación de OLG-AgNCs. Estos nanomateriales tienen capacidad luminiscente, adquiriendo propiedades ópticas únicas. La luminiscencia de los OLG-AgNCs puede ser modulada durante el proceso de síntesis modificando distintas variables en el proceso de síntesis, como puede ser la longitud de la cadena de oligonucleótidos o las bases nitrogenadas que forman parte de esta. La modificación de secuencias de oligonucleótidos o la funcionalización superficial de los OLG-AgNCs también favorece la interacción para su reconocimiento selectivo con diferentes grupos de compuestos xenobióticos cuya detección es fundamental por su impacto sobre la salud humana y el medio ambiente. En este estudio se han estudiado las interacciones de OLG-AgNCs con antibióticos de diferentes familias, como tetraciclinas, fluoroquinolonas y aminoglucósidos, así como derivados tiólicos. Las técnicas espectroscópicas aplicadas a estos sistemas permiten evaluar cambios en la intensidad de la emisión luminiscente, así como en la relación ratiométrica de las longitudes de onda de los OLG-AgNCs y la presencia de los contaminantes objetivo, lo que posibilita su cuantificación. Esta estrategia ofrece ventajas significativas en comparación con métodos tradicionales, destacando por su sensibilidad, selectividad y potencial de miniaturización, lo que la posiciona como una herramienta prometedora para la monitorización en análisis medioambiental.

Agradecimientos: Financiación: Este trabajo ha sido financiado por la submodalidad 2.6 "UCOProyecta", del Plan Propio de Investigación "Enrique Aguilar Benítez de Lugo" 2024 y el proyecto "Plan Complementario de I+D+i en el área de Ciencias Marinas" (PCM_00121, ThinkInazul), cofinanciado por la Consejería de Universidades, Investigación e Innovación de la Junta de Andalucía y por la Unión Europea a través de los fondos Next Generation EU del Plan de Recuperación, Transformación y Resiliencia. Las opiniones y puntos de vista expresados son exclusivamente de los autores y no reflejan necesariamente los de la Unión Europea ni de la Comisión Europea.

**P_7-UNVEILING THE ACETOGENIN PROFILE OF AVOCADO:
LC-IMS-MS ANALYSIS OF BACON, FUERTE, AND HASS TISSUES
(PEEL, PULP AND SEED)**

**M.G. Beiro-Valenzuela¹, L. Olmo-García¹, S. Rodríguez-Rodríguez¹,
A. Mohamed-Barara¹, R.P Monasterio¹, I. Serrano-García¹,
E. Hurtado-Fernández², R. Pedreschi³, A. Carrasco-Pancorbo¹**

¹Department of Analytical Chemistry, Faculty of Sciences, University of Granada,
Granada, Spain.

²Department of Biological and Health Sciences, Faculty of Health Sciences, Loyola
University (Universidad Loyola Andalucía), Sevilla, Spain.

³Facultad de Ciencias Agronómicas y de los Alimentos, Escuela de Agronomía, Pontificia
Universidad Católica de Valparaíso, Quillota, Chile.

emhurtado@uloyola.es

Keywords: avocado, acetogenins, LC-IMS-MS/MS

Abstract:

Acetogenins are bioactive compounds derived from C-18 fatty acids, naturally found in avocado tissues such as peel, pulp, seeds, and leaves. Known for their defensive role against herbivores and fungi, they also exhibit antimicrobial effects, including inhibition of bacterial spore germination and listericidal activity. These characteristics have sparked interest in their use as natural food preservatives, supporting clean label and sustainability initiatives. This study focused on optimizing acetogenin extraction, chromatographic separation and detection conditions, evaluating their tissue distribution across cultivars, and assessing content variation during fruit ripening. Samples from Bacon, Fuerte, and Hass avocados were analyzed using LC-IMS-MS. In total, 180 samples were processed at four ripening stages, with five replicates per tissue and variety (each replicate comprising six fruits). Various solvents and cycles were tested for improved extraction. The most effective protocol involved a single methanol-based solid-liquid cycle without further clean-up. Chromatographic conditions, including column type, flow rate, and temperature, were fine-tuned for optimal resolution. 21 acetogenins, including isomers, and three fatty acid derivatives were tentatively identified. Experimental collision cross section (CCS) values for these metabolites were reported for the first time, supporting improved annotation accuracy in future studies. Quantitative results showed distinct varietal and tissue-specific profiles. AcO-avocadene was predominant in Bacon seeds, while Fuerte and Hass seeds were richer in persenone B. In both the peel and pulp, dominant compounds varied by cultivar. PCA suggested acetogenins could serve as varietal markers. This work advances analytical strategies for acetogenins and supports their potential in the valorization of avocado by-products.

P_8-EXPLORING THE GEOGRAPHIC INFLUENCE ON HASS AVOCADOS FROM THE IBERIAN PENINSULA VIA LC-IMS-MS METABOLOMICS

I. Serrano-García¹, M.G. Beiro-Valenzuela¹, R. Pedreschi²,
J.J. González-Fernández³, J.I. Hormaza³, L. Olmo-García¹,
A. Carrasco-Pancorbo¹

¹Department of Analytical Chemistry, Faculty of Sciences, University of Granada,
Granada, Spain

²Escuela de Agronomía, Facultad de Ciencias Agronómicas y de los Alimentos, Pontificia
Universidad Católica de Valparaíso, Quillota, Chile

³Institute for Mediterranean and Subtropical Horticulture (La Mayora-CSIC), Málaga,
Spain

alegriac@ugr.es

Keywords: Hass avocado mesocarp, geographical origin, plant metabolomics

Abstract:

Spain leads avocado production in Europe, with Andalusia as the main growing area. In response to rising market demand and climate-related shifts, cultivation has expanded to new regions, including Valencia, the northern Atlantic coast (Galicia and Asturias), and southern Portugal. This geographical diversification introduces new environmental variables that may influence fruit quality and composition. Therefore, this study aimed to characterize the metabolic profiles of Hass avocados from different Iberian regions and explore the potential of ion mobility spectrometry (IMS) within non-targeted metabolomics for geographic origin tracing. A total of 480 Hass avocados were collected from eight different regions across the Iberian Peninsula. Using UHPLC-TimsTOF MS/MS, over 100 primary and secondary metabolites were tentatively identified in the mesocarp, with phenolic compounds representing the most abundant class. IMS enabled the resolution of isomeric species and supported the development of a preliminary experimental database with Collision Cross Section (CCS) values for avocado metabolites. PCA revealed clustering trends broadly associated with geographical proximity, while two-class OPLS-DA models helped define origin-specific metabolic fingerprints. Notably, avocados from northern regions (Galicia and Asturias) showed relatively similar profiles, whereas those from southern and eastern areas (Malaga, Cadiz, Granada, Algarve, and Valencia) exhibited more diverse and distinct metabolic signatures. These findings provide new insights into how edaphoclimatic factors shape avocado composition. They have important implications for the avocado industry, potentially guiding improved agricultural and post-harvest practices. Additionally, this knowledge could support the promotion of Spanish avocados in the market, enhancing authenticity and consumer trust.

P_9-ULTRASONIDOS Y DIGESTIÓN IN VITRO: UN ENFOQUE ANALÍTICO PARA ESTUDIAR LA BIODISPONIBILIDAD DE METILXANTINAS EN CACAO

**C. Carrera¹, L. Rivera-Manzorro², M.J. Aliaño-González¹, F.A. Macías²,
M. Palma-Lovillo¹, N. Chinchilla²**

¹Departamento de Química Analítica, Facultad de Ciencias, Instituto de Investigación Vitivinícola y Agroalimentaria (IVAGRO), Universidad de Cádiz, Campus Agroalimentario de Excelencia Internacional (ceiA3), 11510 Puerto Real, España

²Departamento de Química Orgánica, Facultad de Ciencias, Instituto de Biomoléculas (INBIO), Universidad de Cádiz, 11510 Puerto Real, España

ceferino.carrera@uca.es

Keywords: cacao, metilxantinas, USE; HPLC, digestión, biodisponibilidad

Abstract:

El cacao en polvo es una fuente natural de compuestos bioactivos con propiedades antioxidantes y estimulantes, entre los que destacan la cafeína y la teobromina. En este trabajo se ha estudiado la biodisponibilidad de estos compuestos tras un proceso de digestión humana simulada in vitro, siguiendo el protocolo INFOGEST 2.0, como paso clave en la evaluación de su potencial funcional.

Inicialmente se desarrolló y optimizó un método de extracción por ultrasonidos (USE) mediante un diseño Box-Behnken (BBD-RSM), considerando cuatro variables: concentración de etanol, temperatura, amplitud y ciclo. Las condiciones óptimas obtenidas fueron 0.5 g de cacao en polvo con 20 mL de EtOH al 68%, a 50.1°C, con una amplitud del 36%, ciclo de 0.3 s⁻¹ durante 10 minutos. Bajo estas condiciones, el método mostró buena repetibilidad y precisión intermedia (C.V. < 5%). Posteriormente, se aplicó este método a seis muestras comerciales de cacao desgrasado en polvo, seleccionando tres con mayor contenido en metilxantinas para su evaluación digestiva. Se llevó a cabo una digestión simulada en tres fases (oral, gástrica e intestinal) y los extractos obtenidos en cada etapa fueron analizados. Las concentraciones de metilxantinas se compararon con los valores iniciales para estimar la biodisponibilidad, obteniéndose valores entre el 46 % y el 70 % según la muestra. Estos resultados reflejan una variabilidad significativa en la estabilidad de los compuestos según el producto comercial y sugieren que ciertos ingredientes o formulaciones podrían favorecer su disponibilidad intestinal, abriendo nuevas perspectivas en el diseño de alimentos funcionales derivados del cacao.

**P_10-NON-STRUCTURAL CARBOHYDRATE COMPOSITION OF
HASS AVOCADOS: EFFECTS OF POSTHARVEST COLD
STORAGE VERSUS EXTENDED ON-TREE MATURATION**

**M.G. Beiro-Valenzuela¹, I. Serrano-García¹, A.M. Martín-Reyes¹,
R.P. Monasterio¹, E. Hurtado-Fernández², R. Pedreschi³, L. Olmo-García¹,
A. Carrasco-Pancorbo¹**

¹Department of Analytical Chemistry, Faculty of Sciences, University of Granada, Spain

²Department of Biological and Health Sciences, Faculty of Health Sciences, Loyola
University (Universidad Loyola Andalucía), Sevilla

³Escuela de Agronomía, Facultad de Ciencias Agronómicas y de los Alimentos, Pontificia
Universidad Católica de Valparaíso, Quillota, Chile
alegriac@ugr.es

Keywords: avocado, HILIC-MS, carbohydrates

Abstract:

Avocado is appreciated worldwide for its nutritional benefits, but meeting increasing demand often requires prolonged cold storage during import, which can affect its quality. As a climacteric fruit, avocado ripen after harvest, with non-structural carbohydrates playing a key role in this process. However, the associated biochemical mechanisms remain unclear. This study aimed to evaluate the impact of cold storage and prolonged on-tree maturation on the non-structural carbohydrate profile of ripe Hass avocados. Approximately 125 fruits were harvested and stored under refrigerated conditions simulating commercial logistics. Every 10 days, some fruits were left to ripen at room temperature. Simultaneously, fresh avocados harvested after extended on-tree maturation were collected at the same intervals and ripened similarly. Five time points were assessed, with five biological replicates each, totalling 50 samples (five fruits per replicate). Samples underwent ultrasound-assisted extraction (EtOH:H₂O, 60:40, v/v) and were analysed by HILIC-MS. The results showed that seven-carbon sugars, such as perseitol and D-mannoheptulose, increased progressively during cold storage. In contrast, six-carbon sugars —glucose, fructose, and sucrose— were more abundant in avocados that remained longer on the tree. Notably, perseitol remained stable in these fruits but increased during cold storage, while D-mannoheptulose showed a temporary increase before decreasing in the on-tree maturation group. PCA revealed a clear separation between treatments, corroborating compositional differences. These results provide new insights into sugar metabolism in avocado and highlight how handling practices influence pulp composition. This knowledge is key to optimise postharvest management, improve quality and promote sustainability along the avocado supply chain.

P_11-UHPLC-IMS-MS-BASED METABOLOMIC FINGERPRINTING OF DIFFERENT AVOCADO VARIETIES: INFLUENCE OF GENETIC ORIGIN

M.G. Beiro-Valenzuela¹, L. Olmo-García¹, I. López-Alcázar¹,
S. Rodríguez- Rodríguez¹, C.M. Sánchez-Arévalo¹, E. Hurtado-Fernández²,
R. Pedreschi³, J.J. González-Fernández⁴, J.I. Hormaza⁴,
A. Carrasco-Pancorbo¹

¹Department of Analytical Chemistry, Faculty of Sciences, University of Granada,
Granada, Spain

²Department of Biological and Health Sciences, Faculty of Health Sciences, Loyola
University (Universidad Loyola Andalucía), Sevilla

³Escuela de Agronomía, Facultad de Ciencias Agronómicas y de los Alimentos, Pontificia
Universidad Católica de Valparaíso, Quillota, Chile

⁴Institute for Mediterranean and Subtropical Horticulture (La Mayora-CSIC), Málaga,
Spain

emhurtado@uloyola.es

Keywords: avocado varieties, UHPLC-IMS-MS, genetic origin

Abstract:

The global avocado market is dominated by the Hass variety due to its excellent organoleptic quality, transport resistance, extended postharvest life, and visible ripening through skin colour changes. However, many less-studied varieties could offer promising commercial, agronomic and nutritional alternatives. Before market introduction, it is essential to determine how these varieties align with or differ from Hass in composition. This study assessed the compositional profiles of 32 avocado varieties, which were grouped into four categories based on their genetic origin: Hass mutations, Hass descendants, non-related varieties, and those of unknown pedigree. Untargeted metabolomics was applied to analyze methanolic extracts from mesocarp samples using an advanced UHPLC-TimsTOF MS/MS platform incorporating ion mobility spectrometry (IMS). This approach enhanced isomer resolution and improved annotation confidence by integrating collision cross section (CCS) values as an additional descriptor, allowing comparison against in-house and public databases as well as in silico predicted values. Over 100 metabolites were tentatively identified, with phenolic compounds, fatty acids, and flavonoids among the most prominent classes detected. PCA revealed clustering patterns related to genetic origin: Hass mutations formed a compact and well-defined group, clearly separated from the rest. Non-related varieties appeared widely dispersed across the score plot, reflecting their high compositional diversity. Varieties of unknown pedigree showed a scattered distribution, with several overlapping with the group of Hass descendants, which were moderately clustered. Overall, this knowledge can guide the selection and introduction of new avocado varieties that meet existing trade standards, while preserving the identity and quality of the product.

P_12-ANÁLISIS DE LA COMPOSICIÓN FENÓLICA Y VOLÁTIL DE MADERAS UTILIZADAS PARA EL ENVEJECIMIENTO DE VINAGRES DE JEREZ MEDIANTE UPLC Y DTD-GC-MS

M. García-Oliva, R. Castro-Mejías, M.V. García-Moreno

Departamento Química Analítica. Universidad de Cádiz

valme.garcia@uca.es

Keywords: madera, composición fenólica, composición volátil, Vinagre de Jerez, DTD-GC-MS, UPLC

Abstract:

Se ha estudiado la composición volátil y fenólica de duelas de maderas de barricas de 16.7 L de capacidad, de tres tipos distintos de roble (*Quercus alba*, *Quercus petraea* y *Quercus pirenaica*), y castaño, tostado medio, y que previo a contener el vinagre, fueron envinadas con vino oloroso. Como testigo se utilizaron barricas no envinadas. El objetivo buscado ha sido establecer diferencias entre la composición fenólica y volátil de las maderas empleadas para envejecer vinagre de jerez atendiendo a dos factores: origen botánico y el envinado previo de la madera, tras optimización del proceso extractivo. Las condiciones optimizadas de la extracción por ultrasonidos fueron: 5 gramos de muestra en 25 mL de disolución hidroalcohólica al 75%, durante 25 minutos a 70°C. El análisis de la composición en compuestos volátiles se realizó mediante cromatografía de gases con desorción térmica directa y detección por espectrometría de masas (DTD-GC-MS) y por SBSE-GC-MS, y el análisis de la composición fenólica por UPLC. La componente fenólica tras el envinado mostraba una disminución de su concentración en todas las maderas estudiadas. La fracción volátil también mostraba una disminución de la concentración en aquellos compuestos procedentes de la madera (furfural), mientras que otros compuestos podrían aumentar su concentración o incluso aparecer en las maderas envinadas (caprato de etilo, acetato de etilo). Estos resultados mostraron que las maderas envinadas cambian su composición, cediendo unos compuestos al vino del envinado, y tomando otros que pueden llegar a transferir a la bebida que posteriormente envejezca en ella.

P_13-ANÁLISIS CONTINUO DE LA DEGRADACIÓN DE ACEITES VEGETALES MEDIANTE ESTRATEGIAS COMBINADAS FTIR “ON-DEVICE”

A. Lobo-Prieto¹, N. Tena¹, R. Aparicio-Ruiz¹, E.J. Díaz-Montaña¹, E. Rodríguez-Juan¹, M.T. Morales¹, D.L. García-González²

¹Departamento de Química Analítica, Universidad de Sevilla, Sevilla, España.

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

alobo2@us.es

Keywords: espectroscopía, oxidación, aceites vegetales, patrones de ácidos grasos, fotooxidación, incubación

Abstract:

La espectroscopía infrarroja por transformada de Fourier (FTIR) es una técnica eficaz para monitorizar los cambios químicos en aceites comestibles a lo largo de su vida útil. Este estudio propone tres estrategias analíticas basadas en la combinación de accesorios FTIR con distintos procedimientos de incubación para evaluar el progreso de la degradación de aceites vírgenes de oliva y aguacate bajo condiciones de temperatura moderada (35 °C) y exposición a la luz (17000 lux). Además, varios estándares lipídicos se usaron como modelos moleculares, y se sometieron a las mismas condiciones de incubación que los aceites vegetales. Mientras el análisis convencional ATR-FTIR reveló solo cambios espectrales menores, las estrategias integradas en el dispositivo—ATR-FTIR con control de temperatura y mesh cell-FTIR—permitieron una adquisición espectral continua informando sobre la susceptibilidad del aceite a la degradación. La aplicación conjunta de ambas estrategias ofreció una visión integral de los cambios químicos. La técnica ATR-FTIR detectó cambios en las bandas asociadas a triglicéridos, mientras que mesh cell-FTIR por absorciones relacionadas con la oxidación. Destacaron las bandas asignadas a hidroperóxidos, ácidos grasos libres y dobles enlaces cis, con las mayores pendientes de formación. La trioleína mostró menos cambios espectrales en comparación con los aceites, observándose valores de pendientes en los ácidos grasos libres 16 veces más bajos. Estos hallazgos resaltan la influencia de los compuestos menores en el comportamiento espectral de los aceites expuestos a luz y calor moderado debido a la influencia de la matriz, más compleja, en el desarrollo del proceso oxidativo.

**P_14-DIFERENCIAS EN EL COMPORTAMIENTO
ELECTROQUÍMICO DE ZUMOS DE NARANJA DE DISTINTA
VARIEDAD**

D. Hernanz¹, C.M. Stinco², A.M. Benítez-González², M.J. Jara-Palacios¹

¹Departamento de Química Analítica. Universidad de Sevilla

²Área de Nutrición y Bromatología. Universidad de Sevilla

vila@us.es

Keywords: voltametría cíclica, potencial antioxidante, zumo de naranja

Abstract:

La voltamperometría cíclica es una técnica electroquímica que se ha empleado con éxito para la evaluación de las propiedades antioxidantes de diferentes matrices y en estudios de caracterización. El carácter antioxidante del zumo de naranja se debe principalmente a su contenido en vitamina C, carotenoides, flavonoides y otros compuestos fenólicos. Se ha evaluado el potencial antioxidante de zumos de naranja procedentes de 22 variedades mediante voltametría cíclica, así como las propiedades electroquímicas de la hesperidina, flavonoide mayoritario en naranja, y de la vitamina C. Se ha considerado la información integral del voltamperograma, así como los principales parámetros electroquímicos. En los voltamperogramas de los zumos se distinguen tres picos de oxidación, el primero que se produce aproximadamente a +0,28 V, seguido de un segundo pico alrededor de +0,43 V y un tercero a +0.73 V. El primero podría estar relacionado con la oxidación del ácido ascórbico, mientras que los dos picos posteriores podrían ser atribuidos a procesos de oxidación relacionados con la hesperidina y la naringina. Los zumos de naranja presentan un comportamiento electroquímico anódico significativamente diferente ($p < 0,05$) en función de la variedad, observándose esta diferencia principalmente en el rango de potenciales comprendido entre 0,32 y 0,45 V. La concentración de fenoles totales, así como el contenido en vitamina C también es diferente significativamente ($p < 0,05$) entre variedades. El análisis de regresión mostró que los valores de IPa1 e IPa1 se correlacionan positivamente con la concentración de vitamina C.

**P_15-REVALORIZACIÓN DE SUBPRODUCTOS DE MANGO
TOMMY ATKINS (MANGIFERA INDICA): ELABORACIÓN DE
ALIMENTOS RICOS EN COMPUESTOS BIOACTIVOS**

**D. Hernanz¹, F. Albernaz-Lobo², C.M. Stinco³, A.M. Benitez-González³,
M.J. Jara-Palacios¹**

¹Departamento de Química Analítica. Universidad de Sevilla

²Faculdade de Nutrição, Universidade Federal do Estado do Rio de Janeiro. Brasil

³Área de Nutrición y Bromatología. Universidad de Sevilla

vila@us.es

Keywords: subproductos de mango (*Mangifera indica* L.), Compuestos bioactivos, bioaccesibilidad, alimentos enriquecidos

Abstract:

La industria agroalimentaria genera anualmente miles de toneladas de residuos, cuya gestión sostenible representa uno de sus principales desafíos. En este contexto, adquieren relevancia los estudios orientados a la revalorización de subproductos, con el objetivo de obtener compuestos y productos de alto valor añadido para distintos sectores de la industria, en línea con los principios de la economía circular. El mango de la variedad Tommy Atkins (*Mangifera indica*), ampliamente cultivado a nivel mundial, genera durante su procesamiento industrial una gran cantidad de subproductos que, por su alto contenido en compuestos bioactivos, representan una oportunidad de aprovechamiento. Entre ellos destacan la piel, el hueso y restos de pulpa, ricos en carotenoides, compuestos fenólicos y vitamina C. En este estudio, se elaboraron cinco formulaciones de cupcakes en las que se sustituyó un porcentaje de la harina de trigo por harinas derivadas de dichos subproductos. La bioaccesibilidad de los cupcakes se evaluó mediante un modelo gastrointestinal estático in vitro, siguiendo el protocolo INFOGEST 2.0. La bioaccesibilidad de los compuestos fenólicos se calculó como la relación entre la concentración media de cada compuesto en las muestras elaboradas con harinas de mango deshidratado y su concentración en la digesta tras la simulación gastrointestinal, utilizando UHPLC-DAD para su cuantificación. Los resultados mostraron que los ácidos fenólicos fueron los compuestos más bioaccesibles, seguidos por la mangiferina, los derivados galloílicos y los flavonoles, siendo mayor la bioaccesibilidad en los cupcakes elaborados con harina de pulpa.

P_16-RELACIÓN ENTRE LA COMPOSICIÓN FENÓLICA Y EL POTENCIAL ANTIOXIDANTE DE SEMILLAS DE UVA

M.J. Jara-Palacios, B. Baca-Bocanegra, J. Nogales-Bueno, A. Alcázar, F. De Pablos, D. Hernanz

Departamento de Química Analítica. Universidad de Sevilla

mjara@us.es

Keywords: subproductos de vinificación, semillas, voltamperometría cíclica, antioxidante

Abstract:

Las semillas de uva se generan en la vinificación como un subproducto que puede ser revalorizado por su gran contenido en compuestos fenólicos con propiedades antioxidantes. El objetivo de este trabajo es evaluar la relación entre la composición fenólica de semillas de uva y su potencial antioxidante total medido mediante voltamperometría cíclica. Las semillas procedentes de orujos de vinificación se clasificaron en 4 tipos, dependiendo del porcentaje de variedad tinta (Tempranillo) y blanca (Airén): Tipo I, 100 % Tempranillo, Tipo II, 90 % Tempranillo, Tipo III, 45 % Tempranillo y 55 % Airén, y Tipo IV, 35 % Tempranillo y 65 % Airén. La metodología de extracción fenólica, determinación fenólica (UHPLC-DAD) y determinación del potencial antioxidante total (voltamperometría cíclica) se realizó como se describe en trabajos previos del grupo (Jara-Palacios et al., 2017, 2018 y 2020). A partir del voltamperograma obtenido para cada medida se extrajeron los parámetros electroquímicos (I_{pa} , I_{pc} , E_{pa} y E_{pc}). Un análisis de regresión mostró que los parámetros electroquímicos I_{pa2} y Q_2 están correlacionados positivamente con el contenido de fenoles totales, con la concentración de flavanoles y con dos flavonoles (rutina e isorhamnetina 3-O-glucósido). Las semillas con mayor porcentaje de Tempranillo (100 y 90 %) presentaron menores valores de E_{pa} y mayores valores de I_{pa} y Q_2 . Finalmente, un análisis discriminante permitió clasificar las muestras de semillas entre tintas vs blanca-tintas, siendo los parámetros electroquímicos I_{pa2} y Q_2 y los principales compuestos fenólicos los que mayor peso tuvieron.

[1] M.J. Jara-Palacios, M.L. Escudero-Gilete, J.M. Hernández-Hierro, F.J. Heredia, D. Hernanz, *Talanta*, 165, 2017, 211-215.

[2] M.J. Jara-Palacios, S. Gonçalves, D. Hernanz, F.J. Heredia, A. Romano, *Food Res. Int.*, 109, 2018, 433-439.

[3] M.J. Jara-Palacios, S. Gonçalves, F.J. Heredia, D. Hernanz, A. Romano, *Antioxidants*, 9, 2020, 675.

**P_17-MAPEANDO LA DIVERSIDAD DE VINOS TINTOS
ESPAÑOLES MEDIANTE UNA NUEVA HERRAMIENTA
ESPECTROSCÓPICA PORTÁTIL QUE INTEGRA IA**

R. Ríos-Reina, P. Alés-Barandiarán, M.P. Segura-Borrego, R. Callejón

Área de Nutrición y Bromatología, Facultad de Farmacia, Universidad de Sevilla

rrios5@us.es

Keywords: vino, autenticidad, IA, DOP, espectroscopia, quimiometría

Abstract:

La autenticación del origen y categoría de los vinos tintos es fundamental para garantizar la calidad, combatir el fraude y reforzar la trazabilidad en el sector vitivinícola. En este trabajo se explora el potencial de una herramienta portátil innovadora que integra espectroscopía UV-Vis con algoritmos de inteligencia artificial para la clasificación de vinos tintos españoles según criterios como su Denominación de Origen Protegida (DOP), variedad de uva, añada o tipo de envejecimiento, entre otras. Se analizaron 60 muestras comerciales representativas de ocho DOPs: Bierzo, Cigales, Jumilla, León, Priorat, Ribera del Duero, Rioja y La Mancha. Los espectros UV-Vis obtenidos a partir de vinos diluidos fueron procesados mediante técnicas quimiométricas integradas en el propio prototipo. Los primeros modelos han mostrado una capacidad de discriminación prometedora, especialmente en la diferenciación de vinos de distintas DOPs, como, por ejemplo, en la clasificación entre muestras de las DOPs Rioja y Ribera del Duero, evidenciando el potencial de esta tecnología. La herramienta destaca además por su rapidez, portabilidad y carácter no destructivo, lo que la convierte en una alternativa atractiva a los métodos analíticos convencionales. Este estudio constituye una primera aproximación experimental que demuestra la viabilidad del enfoque espectroscópico portátil en vitivinicultura, y abre nuevas perspectivas para su aplicación futura en tareas de autenticación y control de calidad.

P_18-EXTRACCIÓN VERDE DE TRIPTÓFANO EN SETAS SILVESTRES: VINCULANDO SU PODER ANTIOXIDANTE Y NEUROPROTECTOR

A. Ruiz-López¹, E. Ortega-Caneda¹, E. Espada-Bellido¹, N. Chinchilla²,
M. Palma-Lovillo¹, M.J. Aliaño-González^{1,3}, G. Fernández-Barbero¹,
C. Carrera¹

¹Departamento de Química Analítica, Facultad de Ciencias, Instituto de Investigación Vitivinícola y Agroalimentaria (IVAGRO), Universidad de Cádiz, Campus de Excelencia Internacional Agroalimentario (ceiA3), 11510 Puerto Real, Cádiz, España

²Departamento de Química Orgánica, Facultad de Ciencias, Instituto de Biomoléculas (INBIO), Universidad de Cádiz, Campus de Excelencia Internacional Agroalimentario (ceiA3), 11510 Puerto Real, Cádiz, España

³MED—Mediterranean Institute for Agriculture, Environment and Development, CHANGE—Global Change and Sustainability Institute, Faculdade de Ciências e Tecnologia, Universidade do Algarve, Campus de Gambelas, Ed. 8, 8005-139 Faro, Portugal

estrella.espada@uca.es

Keywords: compuestos bioactivos, triptófano, setas, extracción asistida por ultrasonidos, acetilcolinesterasa, capacidad antioxidante

Abstract:

El consumo de setas ha aumentado en países donde no estaban tan integrados en la dieta, como es el caso de España, debido a sus numerosas propiedades terapéuticas, como la regulación de diversos procesos biológicos o la reducción de la probabilidad de padecer enfermedades como el cáncer o la enfermedad de Alzheimer. Este estudio aborda la cuantificación de triptófano, un aminoácido esencial y precursor de neurotransmisores como serotonina y melatonina, en hongos silvestres del género *Lactarius* y *Boletus*. Dado que el estudio previo sobre el contenido de triptófano en setas es limitado, en este trabajo se ha desarrollado y optimizado un método de extracción ecológico mediante ultrasonidos (UAE) para la recuperación eficiente del compuesto. La cuantificación se realizó mediante UHPLC-DAD-FLR, permitiendo determinar concentraciones que oscilan entre 0,042 mg/g y 0,742 mg/g en 26 muestras analizadas. Se evaluó además la actividad antioxidante mediante los ensayos DPPH y ABTS, con resultados que variaron de 17,7% a 71,6% y de 7,2% a 24,9%, respectivamente, así como la inhibición de la acetilcolinesterasa (AChE), con porcentajes que alcanzaron hasta 49,8%. El análisis de clúster jerárquico reveló correlaciones significativas entre la concentración de triptófano, la especie de seta, su localización geográfica y las propiedades de los extractos. Esto resalta la importancia del triptófano en los beneficios fisiológicos de estos hongos y su potencial como fuente de compuestos bioactivos.

P_19-ACUMULACIÓN DE METALES EN SETAS DEL GÉNERO *MORCHELLA* TRAS EL INCENDIO DE SIERRA BERMEJA: UN ANÁLISIS DE RIESGO PARA LA SALUD

**E. Ortega-Caneda¹, A.R. López¹, E. Espada-Bellido¹, D. Monticelli²,
G. Fernández-Barbero¹, J.G. López-Castillo³**

¹Departamento de Química Analítica, Facultad de Ciencias, Universidad de Cádiz, Instituto de Investigación Vitivinícola y Agroalimentaria (IVAGRO), CP 11510 Puerto Real, Cádiz, España.

²Departamento de Ciencia y Alta Tecnología, Università degli Studi dell'Insubria, CP 22100 , Como, Italia.

³Unidad de Protección de la Salud, Distrito Sanitario Granada-Metropolitano, Consejería de Salud y Familias, Junta de Andalucía, CP 18150 Gójar, Granada, España.

elena.ortegacaneda@alum.uca.es

Keywords: metales, setas, *Morchella*, incendio, seguridad alimentaria

Abstract:

Las setas del género *Morchella* son setas comestibles de elevado valor gastronómico y comercial, consideradas un lujo de muy difícil obtención. Tras el pasado incendio de Sierra Bermeja en 2021, hubo una fructificación explosiva de las mismas, despertando el interés de muchos micólogos especializados. No obstante, el fuego es capaz de alterar las propiedades del suelo y, por tanto, afectar a la composición mineral de las setas crecidas en este lugar, las cuales pueden acumular metales esenciales y tóxicos del medio que posteriormente se introducen en el cuerpo al consumirlas. En el presente trabajo, se determinó el contenido de nueve metales esenciales y no esenciales (hierro, magnesio, potasio, calcio, aluminio, cobre, cinc, cromo y níquel) presentes en doce muestras de *Morchella*, y sus respectivos suelos de fructificación, recogidas en zonas afectadas por el incendio y otras localizaciones no afectadas. Las muestras fueron digeridas mediante el método previamente optimizado de digestión ácida asistida por microondas y se determinó el contenido metálico mediante FAAS, ICP_OES e ICP_MS. Los resultados obtenidos han demostrado que las muestras de la zona quemada de Sierra Bermeja presentan niveles de Fe, Mg, Al, Cr y Ni considerablemente superiores a las muestras de otras localizaciones, mientras que el contenido de Ca, K, Cu y Zn no varió. La ingesta diaria estimada de metales (EDIM) e índice de riesgo para la salud (HRI) concluyen que las *Morchella* de Sierra Bermeja superan los niveles seguros de Fe, Al, Cr y Ni, por lo que no se deberían comercializar ni consumir.

**P_20-UNIFICANDO HUELLAS INSTRUMENTALES E IA PARA EL
DESARROLLO DE ESTRATEGIAS SOSTENIBLES APLICADAS AL
CONTROL DE CALIDAD DE ACEITES DE OLIVA**

**E.A. Roca-Nasser¹, G. Jiménez-Hernández¹, A. Munguía-Ubierna¹,
L. Cuadros-Rodríguez¹, A. González-Casado¹, J. Olmedo-Hernández²,
A. Guzmán-Vico³, F. Ballesteros-Moreno⁴, J.A. García-Mesa⁵,
A.M. Jiménez-Carvelo¹**

¹Departamento de Química Analítica, Facultad de Ciencias, Universidad de Granada, Av.
Fuente Nueva s/n, E-18071 Granada (España).

²Fundación para la Promoción y el Desarrollo del Olivar y del Aceite de Oliva, C/Sierra
Morena, 13, CP 23620, Mengíbar (Jaén).

³Cooperativas Agro-alimentarias de Andalucía, C/Demetrio de los Ríos, 15, CP 41003,
Sevilla (España).

⁴Consejo Regulador de la Denominación de Origen Sierra de Segura, Polígono Industrial
Llanos de Armijo S/N, CP 23360, La Puerta de Segura (Jaén).

⁵Instituto Andaluz de Investigación y Formación Agraria, Pesquera, Alimentaria y de la
Producción Ecológica, Ctra. Bailén-Motril, km 18, 5 23620, Mengíbar (Jaén)

erocan@ugr.es

Keywords: aceite de oliva, autenticación, quimiometría, inteligencia artificial

Abstract:

El valor superior del aceite de oliva frente a otros aceites vegetales ha provocado que su adulteración resulte económicamente viable. Tal práctica está expresamente prohibida por la legislación española, lo que ha generado una creciente necesidad por el desarrollo de soluciones eficaces para asegurar la calidad del aceite de oliva. Actualmente, los métodos empleados para verificar la pureza, autenticidad y calidad de aceites de oliva requieren la determinación de más de 50 parámetros distintos, lo que conlleva un elevado consumo de disolventes, reactivos químicos y tiempo. Por lo tanto, el desarrollo de métodos optimizados sería ideal para cumplir tanto con los objetivos que propone la Química Analítica Verde (GAC) y el Pacto Verde Europeo. La metodología empleada se basa en la transesterificación de aceites vegetales, seguida de la obtención de su huella instrumental (señal analítica inespecífica que contiene toda la información química de interés de la muestra bajo estudio) mediante cromatografía líquida acoplada a detectores de ultravioleta (UV) y de aerosol cargado (CAD). Adicionalmente, se ha desarrollado una estrategia de estandarización de señales cromatográficas denominada agnostización, la cual permite generar huellas instrumentales independientes del instrumento utilizado y del momento en que se haya realizado el análisis. El resultado de la combinación de huellas instrumentales agnostizadas y herramientas propias de la inteligencia artificial ha sido el desarrollo de métodos capaces de evaluar la pureza de aceites de oliva y detectar la presencia de posibles adulteraciones de éste con aceites vegetales de menor calidad.

P_21-EVALUACIÓN DE LA CAPACIDAD ANTIOXIDANTE DE EXTRACTOS DE SETAS DE ALTO VALOR GASTRONÓMICO

**E. Ortega-Caneda¹, E. Espada-Bellido¹, R.M. Mateos², C. Carrera¹,
N. Chinchilla³, G. Fernández-Barbero¹, M. Palma-Lovillo¹**

¹Departamento de Química Analítica, Facultad de Ciencias, Universidad de Cádiz, Instituto de Investigación Vitivinícola y Agroalimentaria (IVAGRO), 11510 Puerto Real, Cádiz, España.

²Área de Bioquímica y Biología Molecular, Departamento de Biomedicina, Biotecnología y Salud Pública, Universidad de Cádiz, 11510 Puerto Real, Cádiz, España.

³Grupo de Aleopatía, Departamento de Química Orgánica, Facultad de Ciencias, Universidad de Cádiz, Instituto de Biomoléculas (INBIO), Campus de Excelencia Internacional (ceiA3), 11510 Puerto Real, Cádiz, España.

elena.ortegacaneda@alum.uca.es

Keywords: setas, *Morchella*, triptófano, capacidad antioxidante, aplicaciones terapéuticas

Abstract:

Las setas han sido siempre valoradas por su sabor y versatilidad en la cocina, pero también por sus beneficios nutricionales y medicinales. En concreto las setas comestibles del género *Morchella* son de elevado valor gastronómico y comercial, que se han utilizado como medicina tradicional en China desde hace miles de años. Presentan numerosas aplicaciones terapéuticas, destacando por sus propiedades antibacterianas, antioxidantes, antiinflamatorias y antidiabéticas entre otras. Estas propiedades se deben a su preciado perfil nutricional y a la presencia de compuestos bioactivos como el triptófano, implicado en procesos biológicos como la neurotransmisión y la capacidad antioxidante. Por lo tanto, se ha determinado la concentración de triptófano en doce muestras de *Morchella* recolectadas en diferentes localizaciones geográficas de Andalucía. La extracción del triptófano se realizó mediante extracción asistida por ultrasonidos (UAE) optimizada con un diseño Box-Behnken (BBD). La cuantificación de la concentración de triptófano se realizó mediante cromatografía líquida de ultra alta resolución (UHPLC), obteniéndose valores elevados de este aminoácido esencial.

Por otro lado, se ha evaluado la capacidad antioxidante "in vitro" de los extractos de *Morchella* mediante los métodos espectrofotométricos de DPPH y ABTS, demostrando buenos resultados de capacidad antioxidante. También se evaluó la actividad inhibidora de la enzima acetilcolinesterasa, obteniéndose de nuevo valores elevados de inhibición. Por otro lado, se ha estudiado la actividad antioxidante "in vivo" del extracto de *Morchella* frente al estrés provocado por hiperglucemia en un modelo celular de fibroblastos humanos, con el fin de comprobar el potencial beneficioso de dichas setas a nivel celular.

**P_22-EVALUACIÓN DE LA COMPOSICIÓN FENÓLICA,
ACTIVIDAD ANTIOXIDANTE Y CONTENIDO MINERAL DE
SALICORNIA SPP. DE LA COSTA DE CÁDIZ**

**M.C. Razola Díaz^{1,2}, A.M. Gómez Caravaca^{2,3}, B. García-Villanova¹,
E.J. Guerra-Hernández¹, V. Verardo^{1,2}**

¹Campus de Cartuja, Departamento de Nutrición y Bromatología, Universidad de Granada, 18071 Granada

²Centro de Investigación Biomédica, Instituto de Nutrición y Tecnología de los Alimentos 'José Mataix', Universidad de Granada, Avda del Conocimiento 19, 18016 Granada

³Departamento de Química Analítica, Facultad de Ciencias, Universidad de Granada, Avda. Fuentenueva s/n, 18071 Granada

vitooverardo@ugr.es

Keywords: *Salicornia*; compuestos fenólicos; actividad antioxidante; HPLC-ESI-TOF-MS

Abstract:

Salicornia spp. es una planta halófila con potencial funcional y nutracéutico. El objetivo del presente estudio fue caracterizar su composición fenólica, actividad antioxidante y perfil mineral utilizando técnicas analíticas avanzadas. Se determinaron un total de $15,18 \pm 0,87$ mg equivalentes de ácido gálico (EAG)/g muestra seca mediante Folin-Ciocalteu. La actividad antioxidante fue elevada, con valores de $22,24 \pm 1,01$, $26,95 \pm 1,79$ y $38,73 \pm 3,22$ mg de equivalente de Trolox/g muestra para DPPH, ABTS y FRAP, respectivamente. El análisis por HPLC-ESI-TOF-MS identificó un total de 28 compuestos fenólicos de los cuales 8 se describen por primera vez en *Salicornia*. Entre ellos destacan cinco derivados de flavonoides, un derivado de ácido fenólico, y un lignan glicósido. La cuantificación reveló un contenido fenólico total de $8,68 \pm 0,35$ mg/g muestra seca siendo el 84% derivados de ácidos fenólicos, mayormente derivados de ácido cafeoilquínico. Además, el contenido mineral se analizó mediante ICP-MS revelando como elementos mayoritarios el sodio (104 mg/g muestra) y el potasio (7,81 mg/g), seguidos por el fósforo (2,7 mg/g) y el calcio (2,1 mg/g). Los resultados respaldan el uso de *Salicornia* como fuente de antioxidantes y minerales con aplicaciones potenciales en la industria alimentaria y nutracéutica.

**P_23-USO DE PLATAFORMAS ANALÍTICAS COMPLEMENTARIAS
PARA EL ESTUDIO DE LA FRACCIÓN FENÓLICA LIBRE E
HIDROLIZABLE DE *AVERRHOA CARAMBOLA***

M.C. Razola-Díaz^{1,2}, C. Paz-Gómez³, V. Verardo^{1,2}, A.M. Gómez Caravaca³

¹Departamento de Nutrición y Bromatología, Campus de Cartuja, Universidad de Granada, 18071 Granada

²Centro de Investigación Biomédica, Instituto de Nutrición y Tecnología de los Alimentos 'José Mataix', Universidad de Granada, Avda del Conocimiento 19, 18016 Granada

³Departamento de Química Analítica, Facultad de Ciencias, Universidad de Granada, Avda. Fuentenueva s/n, 18071 Granada

vito.verardo@ugr.es

Keywords: *Averrhoa carambola*; compuestos fenólicos; HPLC-ESI-qTOF-MS; HPLC-FLD

Abstract:

La carambola (*Averrhoa carambola*) es una fruta tropical valorada por su sabor y potencial antioxidante, aunque su perfil fitoquímico aún está poco explorado. En este estudio, se realizó por primera vez una caracterización exhaustiva de los compuestos fenólicos tanto libres como hidrolizables presentes en esta fruta, utilizando cromatografía líquida acoplada a espectrometría de masas de alta resolución (HPLC-ESI-qTOF-MS). Se identificaron un total de 42 compuestos fenólicos libres, incluyendo tres que se describen por primera vez en *carambola*. Además, se identificaron 21 compuestos fenólicos hidrolizables, de los cuales 12 no habían sido previamente determinados en esta matriz. Entre los nuevos compuestos destacan diversos derivados de kaempferol, lo que refuerza el potencial antioxidante de la fruta. El contenido total de compuestos fenólicos fue de 3,7 mg/g de fruta seca para la fracción libre y 1,37 mg/g para la fracción hidrolizable. Dentro de la fracción libre, los carambolasidos (dihydrochalcone C-glucósidos) representaron el 87% del contenido fenólico. Por otro lado, el análisis por HPLC-FLD reveló una presencia significativa de procianidinas, con un contenido de 3,03 mg/g de flavan-3-oles, siendo el 60% catequina / epicatequina. Estos resultados revelan que la carambola posee una composición fenólica más compleja de lo previamente documentado, con una abundancia notable de compuestos bioactivos como carambolasidos, kaempferol y flavan-3-oles. Esta riqueza fitoquímica respalda su potencial como fruta funcional con aplicaciones nutraceuticas y antioxidantes.

P_24-STOP HONEY FRAUD: AUTENTIFICACIÓN INTELIGENTE DE LA MIEL MEDIANTE NIRS Y APRENDIZAJE AUTOMÁTICO

L. Gomez-García, J.L. Pérez-Calle, M. Palma-Lovillo, M. Ferreiro-González

Departamento de Química Analítica, Facultad de Ciencias, Universidad de Cádiz,
Campus de Excelencia Internacional Agroalimentario (ceiA3), IVAGRO, 11510 Puerto
Real, Cádiz, España.

joseluis.perezcalles@gm.uca.es

Keywords: miel, autenticación, origen botánico, NIRS, aprendizaje automático, fraude alimentario

Abstract:

La miel es un producto natural considerado puro, al que no se le puede añadir ni retirar ninguna sustancia, por lo que su calidad depende fundamentalmente de su origen botánico y geográfico. La creación de Denominaciones de Origen Protegidas (DOP) y la creciente demanda de mieles de alta calidad han elevado su precio en comparación con otros edulcorantes comúnmente utilizados, lo que la convierte en un producto especialmente vulnerable a la adulteración. Actualmente, el control del fraude en la miel constituye un desafío a nivel de la Unión Europea. El último informe elaborado en colaboración con la Oficina Europea de Lucha contra el Fraude reveló que el 85 % de las empresas importadoras presentaron algún resultado positivo en adulteración. Esta práctica ilegal no solo supone un fraude económico y un engaño al consumidor, sino que también pone en riesgo la sostenibilidad de la apicultura y la seguridad alimentaria. Por esta razón, se requieren métodos analíticos rápidos, robustos, automatizables y no destructivos que permitan verificar la autenticidad de las mieles, protegiendo tanto al consumidor como a los productores frente a la competencia desleal. El presente trabajo evalúa el potencial de la espectroscopía de infrarrojo cercano (NIRS), en combinación con algoritmos de aprendizaje automático, para desarrollar modelos predictivos capaces de clasificar automáticamente mieles de distinto origen botánico. En este estudio se han analizado principalmente muestras de mieles de los tipos milflores, girasol, azahar y cantueso. Entre los modelos empleados se encuentran las máquinas de vectores de soporte con función de base radial (SVM-RBF), los modelos de bosque aleatorio (RF) y el análisis discriminante lineal (LDA), alcanzando clasificaciones correctas superiores al 70 % en la autenticación del origen botánico de las muestras.

**P_25-USO DE HERRAMIENTAS QUIMIOMÉTRICAS PARA LA
COMPARACIÓN DE LOS SISTEMAS DE ENVEJECIMIENTO,
ESTÁTICO Y DINÁMICO, DE DESTILADOS DE MALTA EN
SHERRY CASKS**

D. Butrón^{1,2}, M.J. Valcarcel³, M.V. García-Moreno¹, D.A. Guillén-Sánchez¹

¹Departamento de Química Analítica, Facultad de Ciencias, Instituto Investigación Vitivinícola y Agroalimentaria (IVAGRO), Universidad de Cádiz, Campus Universitario de Puerto Real, 11510 Puerto Real, Cádiz, Spain

²Bodegas Fundador S.L.U., C/San Ildefonso, nº 3, 11403 Jerez de la Frontera, Cádiz, Spain

³Oeno R&D FL, 11402 Jerez de la Frontera, Cádiz, Spain

dominico.guillen@gm.uca.es

Keywords: envejecimiento, whisky, Sherry cask

Abstract:

El envejecimiento es crucial en la producción de whisky, donde el tipo de barrica y el método de envejecimiento definen las características finales del producto. Tradicionalmente, el whisky se envejece de forma estática, manteniendo el aguardiente de malta en barricas sin movimiento durante un tiempo determinado. Por otro lado, el envejecimiento dinámico, como el sistema de Solera y Criaderas del Brandy de Jerez, implica la transferencia periódica del destilado entre barricas, promoviendo una mezcla y maduración más uniformes. Este trabajo se centra en la caracterización fisicoquímica de aguardientes de malta envejecidos tanto de forma estática (en barricas Sherry Cask®, típico del whisky) como dinámica. Un aspecto clave es evaluar si el envejecimiento dinámico se alinea con la normativa europea, que dictamina la edad de un whisky mezclado por su componente más joven, o si se aproxima más a la edad promedio de los componentes. Nuestro objetivo es determinar las características de estos destilados y cómo los parámetros fisicoquímicos se relacionan con la edad media. Utilizando herramientas quimiométricas modelos de clasificación, para diferenciar los destilados según su edad real o media y comprobar si son convergentes y modelos de regresión para comparar los parámetros fisicoquímicos analizados con los diferentes niveles de vejez. Estos modelos serán herramientas valiosas para la industria y el control de calidad, permitiendo una mejor comprensión de los procesos de envejecimiento y sus efectos en el producto final.

**P_26-MEJORA DE UN SENSOR POTENCIOMÉTRICO DE PH
BASADO EN POLÍMEROS CONDUCTORES
ELECTRODEPOSITADOS MEDIANTE VOLTAJES SINUSOIDALES
PARA LA MONITORIZACIÓN DE MUESTRAS ALIMENTICIAS DE
DIVERSO pH**

**A.J. Sainz-Calvo, A. Sierra-Padilla, D. Bellido-Milla, L. Cubillana-Aguilera,
J.J. García-Guzmán y J.M. Palacios-Santander**

Departamento de Química Analítica, Instituto de Investigación en Microscopía
Electrónica y Materiales (IMEYMAT), Facultad de Ciencias, Campus de
Excelencia Internacional del Mar (CEIMAR) Universidad de Cádiz, Campus de
Puerto Real, 11510 Puerto Real

alvarojesus.sainz@uca.es

Keywords: pH-sensor, sonogel-carbon, PEDOT:PSS, PANI, sinusoidal voltages, agrifood monitoring, continuous flow

Abstract:

El pH es un parámetro químico relevante en el ámbito agroalimentario, ya que influye en la calidad del producto, el crecimiento microbiano y diversos procesos industriales. Esto ha motivado el desarrollo de métodos alternativos para su determinación, que sean económicos, precisos y viables para medidas in situ. Las técnicas electroquímicas, como la potenciometría, ofrecen ventajas en este sentido, aunque los pH-metros convencionales presentan limitaciones para su uso fuera del laboratorio. En este trabajo se desarrolló un sensor potenciométrico miniaturizado, basado en electrodos de Sonogel-Carbono modificados con polianilina, poli(3,4-etilendioxitiofeno) y poli(4-estirensulfonato de sodio). La modificación se realizó mediante la aplicación de voltajes sinusoidales. Se llevaron a cabo calibraciones con disoluciones patrón en el rango de pH 2–12 para distintas configuraciones, así como estudios de repetibilidad, reproducibilidad y reversibilidad. Además, se evaluó la selectividad del sensor frente a interferentes comunes en muestras agroalimentarias, como iones inorgánicos y compuestos orgánicos. Los resultados indicaron una alta sensibilidad y selectividad hacia protones en el rango de concentraciones evaluado. Finalmente, el sensor se aplicó a la determinación de pH en muestras reales como zumo de naranja, limón y batido de fresa, confirmando su utilidad para medidas directas en matrices complejas. Los resultados validan el potencial de este sensor como una herramienta portátil, precisa y eficaz para la monitorización de pH en el sector agroalimentario.

P_27-EVALUACIÓN DE LA CAPACIDAD ANTIOXIDANTE DE ACEITES DE OLIVA VIRGEN MEDIANTE VOLTAMPEROMETRÍA DIFERENCIAL DE IMPULSOS

**M. Jiménez-Rodríguez, J.J García-Guzmán, A. Sainz-Calvo, C.
Betanzos-Rivero, L. Cubillana-Aguilera, J.M. Palacios-Santander,
D. Bellido-Milla**

Departamento de Química Analítica, Instituto de Investigación en Microscopía Electrónica y Materiales (IMEYMAT), Facultad de Ciencias, Campus de Excelencia Internacional del Mar (CEIMAR) Universidad de Cádiz, Campus de Puerto Real, 11510 Puerto Real.

dolores.milla@uca.es

Keywords: aceite de oliva, índice electroquímico, capacidad antioxidante

Abstract:

El aceite de oliva es un producto emblemático de la dieta mediterránea que ha ganado popularidad mundial en las últimas décadas debido a su valor nutricional, beneficios para la salud, sabor distintivo y cualidades sensoriales. Estas propiedades se atribuyen a su alta proporción de ácidos grasos insaturados y a sus compuestos fenólicos con propiedades antioxidantes. En este trabajo, se propone un método electroanalítico para determinar la capacidad antioxidante en aceites de oliva virgen al alcance del consumidor. El método consiste en una extracción de la fase polar del aceite, seguida de una evaluación mediante voltamperometría diferencial de impulsos con un electrodo Sonogel-Carbono, que permite determinar un índice electroquímico (IE) basado en la relación entre la corriente de pico anódica y el potencial de oxidación. Los resultados de los IE se comparan con los resultados obtenidos mediante métodos espectrofotométricos que emplean los radicales ABTS y DPPH. Los análisis estadísticos muestran una alta correlación entre el IE y los métodos espectrofotométricos, con coeficientes de correlación de Pearson de 0,9662 para ABTS y 0,9319 para DPPH, indicando que el IE es una herramienta rápida, sencilla, económica y respetuosa con el medio ambiente para evaluar la capacidad antioxidante del aceite de oliva. El método propuesto ofrece una alternativa eficiente frente a las técnicas tradicionales, facilitando su uso en el control de calidad y en estudios de salud relacionados con el consumo de aceite de oliva.

P_28-DETERMINACIÓN DE TERPENOIDES Y ESTEROLES LIBRES Y DERIVADOS EN RESIDUOS DE CAFÉ MEDIANTE CROMATOGRAFÍA DE LÍQUIDOS BIDIMENSIONAL - CROMATOGRAFÍA DE FLUIDOS SUPERCRÍTICOS ACOPLADA A ESPECTROMETRÍA DE MASAS DE ALTA RESOLUCIÓN

I. Caño-Carrillo^{1,2}, M. Batteau³, L. Bruna⁴, B. Gilbert-López^{1,2}, J.F. García-Reyes^{1,2}, G. Chatel⁴, K. Faure³

¹Grupo de Investigación de Química Analítica (FQM-323), Departamento de Química Física y Analítica, Universidad de Jaén, Campus Las Lagunillas, 23071, Jaén, España.

²Instituto Universitario de Investigación en Olivar y Aceites de Oliva (INUO), Universidad de Jaén, Campus Las Lagunillas, 23071 Jaén, España.

³Universidad Claude Bernard Lyon 1, ISA UMR 5280, CNRS, 5 rue de la Doua, F-69100 Villeurbanne, Francia.

⁴Universidad Savoie Mont Blanc, CNRS, EDYTEM, F-73000, Chambéry, Francia.

icano@ujaen.es

Keywords: residuos de café, esteroides, diterpenos, cromatografía de líquidos, cromatografía de fluidos supercríticos, LCxSFC-HRMS

Abstract:

Los posos de café (Spent Coffee Grounds - SCGs) constituyen un residuo de gran relevancia a nivel global, generado a partir del consumo de millones de toneladas de café cada año en todo el mundo. En un contexto de creciente interés por la reducción del desperdicio alimentario, los SCGs representan una valiosa oportunidad de revalorización dada la abundancia de compuestos bioactivos presentes. No obstante, la elevada complejidad de esta matriz requiere del uso de técnicas avanzadas de separación para una caracterización precisa. En este sentido, el presente trabajo propone el desarrollo de un método en línea de cromatografía líquida bidimensional en fase reversa acoplada a cromatografía de fluidos supercríticos y detección mediante espectrometría de masas de alta resolución (RPLC x SFC-HRMS) para el análisis simultáneo de derivados de esteroides y diterpenos en residuos de café. El acoplamiento en línea entre ambas dimensiones se llevó a cabo mediante un prototipo de interfase desarrollada en el laboratorio. Asimismo, se analizó el extracto intacto de SCGs (sin saponificar ni derivatizar) con el objetivo de evaluar de manera conjunta las fracciones libre y esterificada de estos compuestos lipídicos. El enfoque desarrollado permitió la resolución de varios compuestos isoméricos derivados de esteroides y diterpenoides, así como el análisis de diversos productos de oxidación de esteroides. El método propuesto demostró un alto potencial para el análisis simultáneo de múltiples clases lipídicas en SCGs, abriendo nuevas vías para su revalorización, especialmente en aplicaciones con importancia en el ámbito de la salud.

P_29-UNTARGETED ANALYTICAL STRATEGIES TO CLASSIFY HONEY BY BOTANICAL ORIGIN APPLYING HIGH-RESOLUTION MASS SPECTROMETRY CHEMICAL FINGERPRINTING

A. Rivera-Pérez, A.M. Navarro-Herrera, A. Garrido Frenich

Research Group “Analytical Chemistry of Contaminants”, Department of Chemistry and Physics, Research Centre for Mediterranean Intensive Agrosystems and Agrifood Biotechnology (CIAIMBITAL), Agrifood Campus of International Excellence (ceiA3), University of Almeria, E-04120, Almeria, Spain.

arp800@ual.es

Keywords: food authentication, metabolomics, marker discovery, LC-HRMS, chemometrics

Abstract:

The authentication of honey based on botanical origin is key to ensuring traceability, protecting consumers, and avoiding commercial fraud. However, the variability introduced by floral sources, environmental conditions, and processing makes this task complex. In this study, an untargeted metabolomics approach was applied to classify and differentiate honey types according to their botanical origin. A total of 40 commercial honey samples (eucalyptus, rosemary, orange blossom, and multifloral) were analyzed using ultra-high-performance liquid chromatography coupled with quadrupole-Orbitrap high-resolution mass spectrometry (UHPLC-Q-OrbitraP_HRMS). The experimental workflow included sample preparation, chromatographic separation, high-resolution acquisition, and multivariate statistical analysis. Clear metabolomic differences were observed across honey types. Principal component analysis (PCA) and hierarchical clustering (HCA) revealed strong variability, especially among multifloral samples. Supervised models based on orthogonal partial least squares discriminant analysis (OPLS-DA) achieved excellent classification performance ($R^2Y = 0.929\text{--}0.981$, $Q^2 = 0.868\text{--}0.952$), allowing the identification of 15 key metabolite markers. Eucalyptus honey showed higher levels of L-proline, N-(1-deoxy-1-fructosyl)phenylalanine, and L-pyroglutamic acid, while rosemary honey was enriched in L-phenylalanine and raffinose. Orange blossom honey exhibited an intermediate profile with lower Amadori compound content. Multifloral honey was characterized by higher levels of trigonelline and fructosyl amino acids. The application of UHPLC-Q-OrbitraP_HRMS fingerprinting combined with chemometric tools provides a robust strategy for honey authentication and classification. These findings contribute to better quality control and food fraud prevention by offering a reliable method for botanical origin verification.

Agradecimientos: This research was funded by “PPITUAL, Junta de Andalucía-FEDER 2021-2027. Programa: 54.A”. Grant reference: CPUENTE2023/21.

P_30-DETERMINACIÓN DE PARABENOS EN MUESTRAS DE PELO MEDIANTE UHPLC-MS/MS. ESTUDIO DE LA RELACIÓN ENTRE LA EXPOSICIÓN Y SU EFECTO EN EL DESARROLLO COGNITIVO EN NIÑOS (WISC-V)

A. Zafra-Gómez^{1,2,3}, P. González-Palacios^{3,4}, V. Ramírez⁵, V. Almazán⁶, M.A. Baca⁷, P. González-Domenech⁸, C. Samaniego^{2,3,4}, A. María Rivas^{2,3,4}

¹Departamento de Química Analítica, Universidad de Granada, 18071 Granada, España.

²Instituto de Investigación Biosanitaria, ibs. GRANADA, 18014 Granada, España.

³José Mataix Verdú” Instituto de Nutrición y Tecnología de los Alimentos (INYTA), Centro de Investigaciones Biomédicas (CIBM), Universidad de Granada, 18100 Granada, España.

⁴Departamento de Nutrición y Bromatología, Facultad de Farmacia, Universidad de Granada, 18071 Granada, España.

⁵GENYO, Centro para la Investigación Genómica y Oncológica: Pfizer/Universidad de Granada, Avenida de la Ilustración, 114, 18016 Granada, España.

⁶Centro de Salud de Maracena, Servicio Andaluz de Salud, Granada, España.

⁷Departamento de Psiquiatría, Facultad de Medicina, Universidad de Granada, España.

⁸MenSana, Granada, España.

azafra@ugr.es

Keywords: UHPLC-MS/MS, parabenos, pelo, exposición, desarrollo cognitivo, edad infantil

Abstract:

Los trastornos del neurodesarrollo se asocian con múltiples factores ambientales, entre ellos, la exposición a alteradores endocrinos [1]. Este estudio evalúa la posible relación entre los niveles de exposición a 6 parabenos y el rendimiento cognitivo en niños (6-12 años). Se reclutaron participantes en centros educativos y sanitarios de la provincia de Granada y se tomaron muestras de pelo individuales. Se llevó a cabo el análisis de parabenos mediante UHPLC-MS/MS. El tratamiento de muestra comenzó con el lavado utilizando SDS, el liofilizado y el triturado en molino de bolas de la muestra. La extracción se llevó a cabo mediante una digestión con ácido acético:metanol (20:80, v/v) durante 12 h a 38°C. Se evaluaron cognitivamente a un total de 101 niños/as con la “Escala de Inteligencia de Wechsler para Niños” (WISC-V, de sus siglas en inglés). Como resultado se observó que una mayor exposición a parabenos totales se asocia estadísticamente con un aumento significativo en el índice de velocidad de procesamiento (OR = 0.05; p = 0.023) en el sexo masculino, no obstante, en el sexo femenino se observa un riesgo claro de la disminución del índice por su exposición (OR = 2.35), sin niveles de significancia, consecuencia clara del dimorfismo sexual. Estos hallazgos subrayan la necesidad de ampliar la investigación sobre los posibles efectos neurotóxicos de los parabenos en etapas tempranas del desarrollo y promueven la vigilancia en el uso cotidiano de estos compuestos.

[1] J. Skarha, C. Messerlian, D. Bellinger, L. Mínguez-Alarcón, M.E. Romano, J.B. Ford, P.L. Williams, A.M. Calafat, R. Hauser, J.M. Braun. *Environmental Epidemiology*, 4(1), 2020, e082.

P_31-DETERMINACIÓN DE ÁCIDOS BILIARES, HORMONAS SEXUALES Y BENZODIAZEPINAS EN PLASMA DE RATÓN

**A. Baig, N. Aranda-Merino, M. Ramos-Payán, M.A. Bello-López,
R. Fernández-Torres**

Departamento de Química Analítica. Facultad de Química. Universidad de Sevilla

rutf@us.es

Keywords: benzodiazepinas, ácidos biliares, hormonas sexuales, UPLC-QTOF

Abstract:

Numerosas investigaciones demuestran que la presencia de contaminantes emergentes en el medioambiente tienen un impacto significativo sobre los seres vivos que los habitan. Las benzodiazepinas, como diazepam y lorazepam, son principios activos farmacológicos que presentan un tiempo de vida media prolongado y efectos importantes sobre el metabolismo endógeno de mamíferos. En este trabajo se ha desarrollado un método para el análisis simultáneo de ácidos biliares, hormonas sexuales y benzodiazepinas y su posterior aplicación en plasma de ratón. El análisis se llevó a cabo utilizando un equipo UPLC-QTOF, empleando una columna Acquity® BEH- C18, con una fase móvil compuesta por agua (0,1% ácido fórmico) y acetonitrilo (0,01% ácido fórmico) en modo gradiente durante 33 min para lograr la separación de los compuestos. Posteriormente, se aplicó a muestras de un experimento de exposición controlada a benzodiazepinas, administrando los fármacos a través de la dieta. 50 µL de plasma se extrajeron con una mezcla de agua:metanol (1:1, v/v), con posterior centrifugación y eliminación de fosfolípidos con cartuchos ISOLUTE PLD+ (Biotage, 50 mg/1 mL). El extracto resultante se evaporó y se reconstituyó en una mezcla de agua:acetonitrilo (1:1, v/v), se centrifugó (15 minutos a 15 000 rpm) y se transfirió a un vial para su inyección en el sistema cromatográfico. Los resultados mostraron cambios evidentes tanto en los valores cuantitativos de algunos compuestos como en los perfiles generales de los diferentes grupos experimentales evaluados.

Agradecimientos: Financiación recibida proyecto PID2021-123073NB-C22 y PID2021-123073NB-C21 del Ministerio de Ciencia e Innovación-Agencia Estatal de Investigación y RED2022-134079-T) del Ministerio de Ciencia, Innovación y Universidades.

P_32-IMPACTO SOBRE EL METABOLISMO ENDÓGENO DE HORMONAS SEXUALES Y ÁCIDOS BILIARES EN MAMÍFEROS EXPUESTOS A BENZODIAZEPINAS

A. Baig¹, N. Aranda-Merino¹, N. Abril², T. García Barrera³, M. Ramos-Payán¹,
M.A. Bello-López¹, R. Fernandez-Torres¹

¹Departamento de Química Analítica. Facultad Química, Universidad de Sevilla.

²Departamento Bioquímica y Biología Molecular Edificio Severo Ochoa, Campus Universitario de Rabanales, Universidad de Córdoba.

³Centro de Recursos Naturales, Salud y Medio Ambiente (RENSMA). Departamento de Química. Facultad de Ciencias Experimentales, Universidad de Huelva.

rutf@us.es

Keywords: benzodiazepinas, ácidos biliares, hormonas sexuales, contaminantes emergentes

Abstract:

Se ha demostrado que muchos fármacos psicoactivos, como las benzodiazepinas, interactúan con la microbiota intestinal y esta última modula su absorción y biodisponibilidad. La presencia de estos compuestos y sus metabolitos causan neurotoxicidad cuando se acumulan en el organismo, afectando al funcionamiento normal del cerebro, e indirectamente a otros órganos. Asimismo, se ha descrito cómo el consumo de antipsicóticos puede alterar, a veces sustancialmente, los niveles de ciertas hormonas sexuales, y, por tanto, la salud reproductiva. En este trabajo, el principal objetivo fue evaluar la alteración de los perfiles de hormonas sexuales y ácidos biliares sobre un modelo animal in vivo (*mus musculus*) tras la exposición a benzodiazepinas, con el fin de analizar el potencial impacto de su presencia sobre la respuesta biológica de los organismos vivos en estudio, sobre la premisa de que los contaminantes (fármacos como contaminantes emergentes) pueden causar alteraciones en las respuestas biológicas de los organismos que habitan los ecosistemas. Asimismo, se ha evaluado el potencial efecto protector del selenio. Para ello, se realizó un experimento de exposición controlada a benzodiazepinas. Se extrajeron las muestras de los individuos expuestos y se analizaron los perfiles de hormonas sexuales, ácidos biliares, benzodiazepinas y sus principales metabolitos mediante cromatografía líquida acoplada a espectrometría de masas de tiempo de vuelo.

Agradecimientos: Financiación recibida: proyecto PID2021-123073NB-C22 y PID2021-123073NB-C21 del Ministerio de Ciencia e Innovación-Agencia Estatal de Investigación.

P_33-IDENTIFYING PESTICIDE EXPOSURE BIOMARKERS IN OLIVE GROVE WORKERS USING ANALYTICAL TOOLS

D. Moreno-González¹, G.C. Martos de la Fuente^{1,2}, A. M. Fernández-Ocaña², J.F. García-Reyes¹

¹Universidad de Jaén (Campus Las Lagunillas s/n, 23071 - Jaén). Departamento de Química Física y Analítica, Grupo de Investigación FQM 323. Edificio B3 Ciencias Experimentales y de la Salud.

²Universidad de Jaén (Campus Las Lagunillas s/n, 23071 - Jaén). Departamento de Biología Animal, Biología Vegetal y Ecología. Grupo de Investigación Gen4Olive. Edificio B3, Ciencias Experimentales y de la Salud.

dmgonzal@ujaen.es

Keywords: biomonitoring, exposome, chemical exposure, silicone wristband, passive sampling, pesticides

Abstract:

Misuse of pesticides can pose significant risks to human health. The project is centered on the "exposome" concept, which investigates the cumulative effects of environmental exposures and their biological responses, emphasizing the need for exposure biomarkers to evaluate associated risks. In this context, the study employs silicone wristbands (WBs) as personal passive samplers to monitor pesticide exposure among agricultural workers in olive groves, a group known for high pesticide exposure. The study aims to develop and validate a multi-residue method for analyzing over 150 multi-class organic contaminants, including organochlorines, organophosphates, carbamates, pyrethroids, herbicides, and fungicides, in silicone wristband samples. Sample extraction was performed using ethyl acetate, followed by nitrogen evaporation, with reconstitution in acetonitrile. Dispersive solid-phase extraction was applied to clean the samples utilizing C18 and PSA sorbents. GC analysis was conducted on a Thermo Scientific™ TRACE™ 1610 GC with a TraceGOLD™ TG-5SilMS column, and mass spectrometry (MS) was executed with an Orbitrap™ Exploris™ GC 240, achieving a resolution of 60,000 FWHM at m/z 200. The limits of quantification for the compounds were in the low nanogram-per-liter range (below 0.1 ng/L for all cases). Although the study is in its pilot phase with a small participant group, it demonstrates the potential of employing WBs for assessing body burdens of organic pollutants. This approach is expected to gain broader adoption in exposure assessment. Future research should concentrate on methodological improvements, additional validation, and long-term studies to explore exposure patterns, levels, and the effects of organic pollutants in other population groups.

P_34-ADVERSE NEONATAL OUTCOMES PREDISPOSE TO EXACERBATED METABOLIC DISTURBANCES IN CHILDHOOD OBESITY

L. Jurado-Sumariva¹, Á. González-Domínguez¹, O. Savolainen², R. Landberg²,
R. González-Domínguez¹

¹ Instituto de Investigación e Innovación Biomédica de Cádiz (INiBICA), Hospital Universitario Puerta del Mar, Universidad de Cádiz. 11009 Cádiz, Spain.

² Division of Food and Nutrition Science, Department of Life Sciences, Chalmers University of Technology. SE-412 96 Gothenburg, Sweden.

lucia.jurado@inibica.es

Keywords: childhood obesity, insulin resistance, metabolomics, neonatal outcomes

Abstract:

The perinatal period is highly sensitive to obesogenic determinants, being consistently reported that adverse birth outcomes are among the most important early risk factors for childhood obesity. Nevertheless, the molecular mechanisms underpinning this greater predisposition remain to be elucidated. To get deeper insights into the influence of neonatal conditions in obesity-related metabolic disturbances occurring later during childhood, we applied high-throughput metabolomics (UHPLC-HRMS) to plasma and erythrocyte samples from a cohort of children diagnosed with obesity, from whom birth metrics (i.e., gestational age, weight, and length at birth) were available from their medical records. The findings of this study evidenced that adverse neonatal outcomes (i.e., low gestational age, weight, and length at birth) may predispose to an unhealthier metabolic status, as reflected in negative associations with anthropometric parameters (e.g., waist circumference) and biochemical markers of insulin resistance (e.g., HOMA-IR) and inflammation (e.g., CRP, inflammatory indices). This was accompanied by exacerbations in a multitude of central metabolic pathways which play a crucial role in obesity pathophysiology, such as energy metabolism, homeostasis of branched chain and aromatic amino acids, regulation of oxidative stress, and biosynthesis of steroid hormones and bile acids. Accordingly, we hypothesize that even minor variations in neonatal conditions may provoke deleterious molecular programming mechanisms with strong impact on later metabolic risk.

**P_35-OPTIMIZATION OF AN ULTRASONIC-ASSISTED
EXTRACTION METHOD FOR THE ELABORATION OF
BIOACTIVE-ENRICHED EXTRACTS THROUGH THE
VALORIZATION OF BEACH-CAST SEAWEEDS**

**D. Gebremedhin Gebrehiwot¹, I. Hernández², E. Durán-Guerrero³,
R. González-Domínguez¹**

¹Instituto de Investigación e Innovación Biomédica de Cádiz (INiBICA), Hospital
Universitario Puerta del Mar, Universidad de Cádiz, 11009 Cádiz, Spain.

²Department of Biology, University of Cadiz, Puerto Real, Spain.

³Analytical Chemistry Department, Faculty of Sciences-IVAGRO, University of Cadiz,
Agrifood Campus of International Excellence (CeIA3), Polígono Río San Pedro, s/n,
Puerto Real 11510, Cadiz, Spain

desta.gebremedhin@inibica.es

Keywords: bioactive compounds, seaweed, ultrasound-assisted extraction, antioxidant activity, anti-inflammatory activity.

Abstract:

Seaweeds are a rich source of bioactive compounds with reported health benefits. In particular, beach-cast seaweeds represent an interesting biomass for preparing nutraceuticals through the valorization of waste materials. In this work, we describe the optimization of an ultrasonic-assisted extraction method for the preparation of bioactive-enriched extracts from the invasive species *Rugulopteryx okamurae*. To this end, we applied a three-level, four-factor Box-Behnken design combined with response surface methodology to systematically evaluate the effect of temperature, time, solvent-to-sample ratio, and solvent composition (in terms of ethanol content) on extraction efficiency. As response variables, we used the following spectrophotometric determinations: i) total polyphenol content (Folin-Ciocalteu assay), ii) antioxidant activity (DPPH assay), and iii) anti-inflammatory activity (lipoxxygenase inhibition assay). All experimental factors under study had a crucial impact on recovery of polyphenol compounds. However, antioxidant activity was only found to be affected by temperature and solvent composition (and marginally by solvent-to-sample ratio), whereas a strict control of temperature and solvent-to-sample ratio (and to a lesser extent solvent composition) was required to maximize anti-inflammatory activity. On this basis, the optimal extraction conditions were achieved by sonicating for 45 min in a water bath thermostated at 60 °C, using 55% ethanol as the extractant at a solvent-to-sample ratio of 25 (v/w). Altogether, this method stands out as an environmentally-friendly, cost-effective, and sustainable alternative for the extraction of seaweed bioactive compounds for nutraceutical applications, emphasizing the importance of precise parameter optimization to preserve compound integrity and maximize bioactivity.

P_36-IDENTIFYING METABOTYPES OF INSULIN RESISTANCE SEVERITY IN CHILDREN WITH METABOLIC SYNDROME

**Á. González-Domínguez¹, O. Savolainen², J. Domínguez-Riscart¹,
A. Lechuga-Sancho¹, R. Landberg², R. González-Domínguez¹**

¹ Instituto de Investigación e Innovación Biomédica de Cádiz (INiBICA), Hospital Universitario Puerta del Mar, Universidad de Cádiz. 11009 Cádiz, Spain.

² Division of Food and Nutrition Science, Department of Life Sciences, Chalmers University of Technology. SE-412 96 Gothenburg, Sweden.

raul.gonzalez@inibica.es

Keywords: insulin resistance, childhood obesity, metabolomics, metabolic flexibility

Abstract:

Insulin resistance is a frequent precursor of typical complications associated with obesity and metabolic syndrome. However, accurate diagnosis remains elusive because of its pathophysiological complexity and heterogeneity. Herein, we explored the utility of insulin secretion dynamics in response to an oral glucose tolerance test as a surrogate marker to identify distinct metabolotypes of disease severity. The study population consisted of children with obesity and insulin resistance, stratified according to the post-challenge insulin peak timing (i.e., early, middle, and late peak), from whom fasting and postprandial plasma and erythrocytes were collected for metabolomics analysis. Children with late insulin peak manifested worse cardiometabolic health (i.e., higher blood pressure, glycemia, and HOMA-IR scores) than early responders. These subjects also showed more pronounced changes in metabolites mirroring failures in energy homeostasis, oxidative stress, metabolism of cholesterol and phospholipids, and adherence to unhealthy dietary habits. Furthermore, delayed insulin peak was associated with impaired metabolic flexibility, as reflected in compromised capacity to regulate mitochondrial energy pathways and the antioxidant defense in response to glucose overload. Altogether, these findings suggest that insulin resistance could encompass several phenotypic subtypes characterized by graded disturbances in distinctive metabolic derangements occurring in childhood obesity, which serve as severity predictive markers.

P_37-METABOLOMICS APPROACH TO THE POTENTIAL OF ERYTHROCYTES AS SENSITIVE AND RELIABLE SENSORS OF METABOLIC DISTURBANCES IN THE CROSSTALK BETWEEN CHILDHOOD OBESITY AND INSULIN RESISTANCE

**Á. González-Domínguez¹, O. Savolainen², J. Domínguez-Riscart¹,
A. Lechuga-Sancho¹, R. Landberg², R. González-Domínguez¹**

¹ Instituto de Investigación e Innovación Biomédica de Cádiz (INiBICA), Hospital Universitario Puerta del Mar, Universidad de Cádiz. 11009 Cádiz, Spain.

² Division of Food and Nutrition Science, Department of Life Sciences, Chalmers University of Technology. SE-412 96 Gothenburg, Sweden.

raul.gonzalez@inibica.es

Keywords: childhood obesity, erythrocytes, insulin resistance, metabolomics

Abstract:

Although insulin resistance (IR) is among the most frequent and pathogenically relevant complications accompanying childhood obesity, its role in modulating and exacerbating obesity pathophysiology has not yet been completely clarified. To get deeper insights into the interplay between childhood obesity and IR, we leveraged a comprehensive experimental design based on a combination of observational data, in vivo challenge tests (i.e., oral glucose tolerance test), and ex vivo assays (i.e., incubation of erythrocytes with insulin) using a population comprising children with obesity and IR, children with obesity without IR, and healthy controls, from whom plasma and erythrocyte samples were collected for subsequent metabolomics analysis. Children with concomitant IR showed exacerbated metabolic disturbances in the crosstalk between endogenous, microbial, and environmental determinants, including failures in energy homeostasis, amino acid metabolism, oxidative stress, synthesis of steroid hormones and bile acids, membrane lipid composition, as well as differences in exposome-related metabolites associated with diet, exposure to endocrine disruptors, and gut microbiota. Furthermore, challenge tests and ex vivo assays revealed a deleterious impact of IR on individuals' metabolic flexibility, as reflected in blunted capacity to regulate homeostasis in response to hyperinsulinemia, at both systemic and erythroid levels. Thus, we have demonstrated for the first time that metabolite alterations in erythrocytes represent reliable and sensitive biomarkers to disentangle the metabolic complexity of IR and childhood obesity. This study emphasizes the crucial need of addressing inter-individual variability factors, such as the presence of comorbidities, to obtain a more accurate understanding of obesity-related molecular mechanisms.

P_38-METODOLOGÍAS (META-)ÓMICAS PARA EL ESTUDIO DE LA INFLUENCIA DEL MANGANESO EN EL EJE MICROBIOTA INTESTINAL-CEREBRO

R.F. Vélez-Pérez¹, A. Arias-Borrego², N. Abril³, M.J. Prieto-Álamo³, J. Jurado³, T. García-Barrera¹

¹Centro de Investigación en Recursos Naturales, Salud y Medio Ambiente (RENSMA), Departamento de Química, Facultad de Ciencias Experimentales, Universidad de Huelva, Campus El Carmen, Av. Fuerzas Armadas, 21007, Huelva, España.

²Departamento de Química Analítica, Facultad de Química, Universidad de Sevilla, 41012, España.

³Departamento de Bioquímica y Biología Molecular, Campus Universitario Rabanales, Edificio Severo Ochoa, 14071 Córdoba.

rafael.velez@dqcm.uhu.es

Keywords: antibiótico, manganeso, metabolómica, metataxonómica, microbiota, selenio

Abstract:

El manganeso (Mn) es un elemento esencial, cofactor en múltiples procesos bioquímicos. Está asociado a producción de energía, defensa antioxidante, salud ósea, reproducción, coagulación de la sangre y respuesta inmunitaria. Su sobreexposición puede causar neurotoxicidad progresiva con síntomas similares al Parkinson. El selenio (Se), antioxidante esencial, mitiga la toxicidad de metales como mercurio, cadmio o arsénico. Aunque ambos comparten función antioxidante, la interacción entre ambos aún es poco conocida. Este estudio metabolómico y metataxonómico analizó la interacción Mn-Se en la microbiota intestinal de ratones BALB/c (*Mus musculus*), a partir de 249 muestras fecales (125 de colon y 124 de ciego), distribuidas en nueve grupos experimentales según el tipo de dieta (con o sin Mn y/o Se) y el tratamiento previo con antibióticos. Los metabolitos se extrajeron con metanol de muestras liofilizadas y se analizaron mediante UHPLC-QTOF con columnas de fase reversa (ZORBAX Eclipse Plus C18) e HILIC (ACQUITY UPLC BEH Amide, 1.7 µm) en modos positivo y negativo. Paralelamente, se extrajo ADN de 100 mg de contenido intestinal para caracterizar la microbiota mediante la región V3-V4 del gen 16S rRNA (Illumina), usando la base de datos Silva v132. Los datos se procesaron en Calypso, aplicando PERMANOVA y RDA. Se utilizó la prueba de Wilcoxon con corrección FDR para comparar abundancias relativas y se correlacionaron metabolitos con las familias bacterianas más abundantes. Los resultados sugieren que el Se modula parcialmente los efectos de la sobreexposición de Mn en la microbiota intestinal, lo que podría influir en su toxicidad sistémica.

P_39-DETERMINACIÓN DE METALES EN MUESTRAS DE SUERO DE PACIENTES CON CÁNCER COLORRECTAL MEDIANTE ESPECTROMETRÍA DE MASAS DE PLASMA DE ACOPLAMIENTO INDUCTIVO (ICP_MS)

S. Sánchez-Espirilla^{1,2}, B. Callejón-Leblic², R. Del Campo³, T. García Barrera²

¹Public Foundation for Health and Biomedicine Research in Málaga (FIMABIS), Severo Ochoa Ave., 35, 29590, Málaga.

²University of Huelva, Department of Chemistry, Research Center for Natural Resources, Health and the Environment (RENSMA), Faculty of Experimental Sciences, University of Huelva, Campus El Carmen, Fuerzas Armadas Ave., 21007 Huelva, Spain.

³Hospital Ramón y Cajal and IRYCIS Ctra. Colmenar Viejo, Fuencarral-El Pardo, 28034 Madrid.

saida.sanchez@alu.uhu.es

Keywords: cáncer colorrectal, metales, plasma acoplado inductivamente, espectrometría de masas

Abstract:

El cáncer colorrectal (CRC) representa el 9.6 % de todos los cánceres en el mundo, siendo el tercer cáncer diagnosticado con mayor frecuencia en 2022 (después del cáncer de pulmón y cáncer de mama) y, es también, la segunda causa de muerte por cáncer. Los oligoelementos son esenciales en el metabolismo humano, ya que están involucrados en numerosas funciones biológicas incluyendo su participación en aproximadamente en un tercio de las proteínas. En este sentido, la dishomeostasis de metales se ha registrado en diversas enfermedades, incluido el cáncer. En este estudio se analizaron los perfiles elementales séricos de 31 pacientes con diagnóstico de CRC y de 50 personas sanas. Concretamente, se analizaron 17 elementos (V, As, Mn, Co, Cu, Zn, Fe, Cd, Se, W, Mo, Pb, Ti, Cr, Mg, Ni y U) mediante espectrometría de masas de plasma de acoplamiento inductivo (ICP_MS). Se realizó el análisis multivariante de mínimos cuadrados parciales (PLS-DA) para comprobar la clasificación de los grupos en función del perfil metalómico. Los resultados mostraron la disminución de los niveles de As y Pb en CRC, mientras que Co, Cu, Mg, Mn y Ni aumentaron con respecto al control. Para la validación del método se utilizó el material de referencia Seronorm Trace Elements Serum L-2. Finalmente, el análisis de curvas ROC mostraron a 6 elementos con valores de área debajo de la curva (AUC) mayores a 0.75 (As, Co, Cu, Mg, Mn, Ni), pudiendo sugerir utilidad clínica en el diagnóstico de CRC. Sin embargo, es necesario realizar estudios con mayor población para establecer una asociación más concluyente del papel de estos elementos en el CRC.

P_40-CHARACTERIZATION OF THE BIOACTIVE PROFILE OF BEACH-CAST SEAWEEDS USING A QUANTITATIVE AND LARGE-SCALE METABOLOMICS APPROACH

D. Gebremedhin Gebrehiwot¹, I. Hernández², R. Landberg³, E. Durán-Guerrero⁴, R. González-Domínguez¹

¹Instituto de Investigación e Innovación Biomédica de Cádiz (INiBICA), Hospital Universitario Puerta del Mar, Universidad de Cádiz, Cádiz, 11009, Spain.

²Instituto Universitario de Investigación Marina (INMAR), Campus de Excelencia Internacional del Mar (CEI·MAR), Departamento de Biología, Facultad de Ciencias del Mar y Ambientales Universidad de Cádiz, Campus Universitario de Puerto Real, Puerto Real, Cádiz, Spain.

³Division of Food and Nutrition Science, Department of Life Sciences, Chalmers University of Technology, Gothenburg, SE-412 96, Sweden.

⁴Analytical Chemistry Department, Faculty of Sciences-IVAGRO, University of Cadiz, Agrifood Campus of International Excellence (CeIA3), Polígono Río San Pedro, s/n, Puerto Real 11510, Cadiz, Spain.

desta.gebremedhin@inibica.es

Keywords: seaweed, bioactive compounds, metabolomics, valorization

Abstract:

The proliferation and coastal accumulation of marine macroalgae (i.e., beach-cast seaweed) is a major environmental and socioeconomic issue, which requires new management and valorization strategies. In this vein, because of their rich content of compounds with health benefits, this natural resource could be exploited for elaborating nutraceuticals and food supplements. Herein, we aimed to compare the bioactive profile of various native brown (*Gongolaria barbata*, *Sargassum vulgare*), green (*Codium taylorii*, *Ulva linza*), and red (*Rhododymenia pseudopalmata*, *Laurencia hybrida*) species, as well as the invasive algae *Rugulopteryx okamuræ*. To this end, samples were subjected to ultrasonic-assisted extraction and subsequent metabolomics analysis by liquid chromatography–mass spectrometry. Overall, higher levels of most phytochemicals under study were observed in brown algae, especially in *Rugulopteryx okamuræ*, including polyphenols, carotenoids, and phytosterols. On the other hand, many essential amino acids and polyunsaturated fatty acids were found to be particularly abundant in the green algae *Codium taylorii*. Finally, although showing a poorer bioactive profile in general terms, red seaweeds stand out as an ideal source for specific compounds normally present at lower concentrations in the other aforementioned species, such as docosaheptaenoic acid or vitamin B5. In summary, our findings demonstrate that the valorization of beach-cast seaweeds could be of great interest for the pharmaceutical and food industries, not only because of their high content of bioactive compounds with anti-inflammatory and antioxidant activity, but also in order to minimize and provide an added-value to these wastes within the framework of the circular economy and green chemistry.

**P_41-BIODISOLVENTES SUPRAMOLECULARES DE TWEEN 20:
SÍNTESIS, CARACTERIZACIÓN Y APLICACIÓN A LA
EXTRACCIÓN DE BIOACTIVOS DE PIEL DE NARANJA**

A. Aparicio-Ibáñez, A. Ballesteros-Gómez, S. Rubio

Departamento de Química Analítica. Instituto Químico para la Energía y el
Medioambiente. Universidad de Córdoba.

antonioaparicio@hotmail.com

Keywords: química verde, disolventes supramoleculares, valorización de biomasa.

Abstract:

La recuperación sostenible de compuestos bioactivos a partir de residuos agroalimentarios es prioritaria ante los riesgos ambientales y sanitarios asociados al uso de disolventes tradicionales. Estas técnicas convencionales suelen emplear grandes volúmenes de disolventes petroquímicos tóxicos, lo que limita su sostenibilidad. En este contexto, los biodisolventes supramoleculares (bioSUPRAS) surgen como una alternativa innovadora y ecológica. Se forman espontáneamente mediante el autoensamblaje de moléculas anfifílicas, en nuestro estudio de Tween 20 en medio acuoso, inducida por agentes como sulfato o citrato. Los bioSUPRAS presentan ventajas notables: estructuras nanométricas ajustables, síntesis eficiente en energía, y uso de compuestos renovables y biodegradables. En este estudio, se construyeron diagramas de fases para determinar las condiciones óptimas de formación del bioSUPRAS de Tween 20 logrando una incorporación casi total del anfifílico. Esta elevada economía atómica permite controlar con precisión la composición del disolvente. Las nanoestructuras obtenidas fueron analizadas mediante crio-microscopía electrónica de barrido (Cryo-SEM), revelando su organización interna. Posteriormente, se aplicaron estos disolventes a la extracción de polifenoles y carotenoides de residuos de cáscara de naranja. El proceso se optimizó considerando la composición del bioSUPRAS, el tiempo de extracción y la proporción disolvente/muestra. Los compuestos extraídos fueron identificados por LC-MS/MS. En comparación con los disolventes convencionales, los bioSUPRAS basados en Tween 20 mostraron mayor eficacia, permitiendo extraer una gama más amplia de bioactivos con menos disolvente y bajo condiciones suaves. Este enfoque representa una solución sostenible para la valorización de residuos agroindustriales.

Agradecimientos: Los autores agradecen la financiación recibida de MCIU/AEI/10.13039/501100011033/ FEDER, UE (proyecto PRE2023/PID2023-149488OB-I00).

**P_42-DESARROLLO E IMPLEMENTACIÓN DE UN NUEVO
BIOSENSOR AMPEROMÉTRICO PARA LA DETECCIÓN DIRECTA
DE GLUCOSA EN SUERO SANGUÍNEO**

J.J. García Guzmán, M. Jiménez Rodríguez, A. Jesús Sainz Calvo, J.M.

Palacios Santander, L. Cubillana Aguilera, D. Bellido Milla

Departamento de Química Analítica, Instituto de Investigación en Microscopía Electrónica y Materiales (IMEYMAT), Facultad de Ciencias, Campus de Excelencia Internacional del Mar (CEIMAR) Universidad de Cádiz, Campus de Puerto Real, 11510 Puerto Real.

juanjo.garciaguzman@uca.es

Keywords: biosensor electroquímico, monitoreo en continuo, fabricación aditiva, polímeros conductores, Sonogel-Carbon

Abstract:

En las últimas décadas, la diabetes mellitus se ha consolidado como una de las enfermedades crónicas de mayor impacto en la salud pública a nivel mundial. Su creciente prevalencia, unida a las complicaciones que conlleva y el significativo coste que supone para los sistemas de salud, la sitúan en el centro de atención de la investigación biomédica y clínica. Actualmente, la concentración de glucosa en sangre actúa como un biomarcador esencial para el diagnóstico de esta enfermedad. Los sensores electroquímicos destacan debido a su alta sensibilidad, facilidad de uso, rapidez en los resultados, simplicidad y bajo coste de producción. Estas características han favorecido su integración en el desarrollo de biosensores de glucosa, particularmente en dispositivos portátiles y de monitoreo continuo. En el presente trabajo se desarrollará, por primera vez, un biosensor amperométrico basado en un electrodo de Sonogel-Carbono como transductor, una enzima glucosa oxidasa como elemento biológico de reconocimiento, azul de Prusia como mediador redox y una membrana difusora multipolimérica biocompatible para su empleo en continuo en una celda de microflujo, la cual será diseñada y fabricada por impresión 3D, lo que permitirá una configuración adaptable, precisa y de bajo coste. El biosensor propuesto es capaz de detectar un amplio rango de concentraciones de glucosa, abarcando tanto los niveles fisiológicos normales como aquellos elevados asociados con estados diabéticos. Además, el uso de materiales como el Sonogel-Carbono ofrece una alternativa eficiente y respetuosa con el medio ambiente frente a las técnicas tradicionales.

P_43-FITORREMEDIACIÓN DE COMPUESTOS ORGÁNICOS VOLÁTILES (VOCs) MEDIANTE JARDINES VERTICALES ACTIVOS (ALW). DETERMINACIÓN POR CROMATOGRAFÍA DE GASES Y ESPACIO DE CABEZA (HS-GC-FID). OPTIMIZACIÓN Y EVALUACIÓN

**L. Cabello-Calado¹, L. Pérez-Urrestarazu², S. Rossini-Oliva³,
A.J. Fernández-Espinosa¹**

¹Departamento de Química Analítica. Facultad de Química. Universidad de Sevilla.

²Departamento Agronomía. Escuela Técnica Superior de Ingeniería Agronómica.
Universidad de Sevilla.

³Departamento Biología Vegetal y Ecología. Facultad de Biología. Universidad de Sevilla.
anjose@us.es

Keywords: volatile organic compounds (VOCs), active living wall (ALW), indoor air quality (IAQ), GC-FID, gas-tight, headspace (HS) sampling

Abstract:

Los compuestos orgánicos volátiles (volatile organic compounds, VOCs) tienen un impacto tanto en la contaminación ambiental, son precursores del ozono, como en la calidad de aire interior (IAQ). En el presente trabajo se optimizaron las condiciones cromatográficas para la separación y determinación cuantitativa por GC-FID e inyección gaseosa, de los VOCs contenidos en hojas de 6 especies de plantas ornamentales. Cada especie forma un jardín vertical activo (active living wall, ALW), situado dentro de una cámara cerrada (closed-top chambers, CTCs) de 2 m³ y contaminadas durante un periodo de tres semanas (n1 = 3) para cada especie vegetal. Estos experimentos constituyeron ensayos de contaminación controlados en ambientes interiores (indoor). Dentro de cada semana se añadieron las mismas cantidades de mezcla de VOCs inicial (formaldehído, acetona, n-hexano y heptano), replicándose la adición cada 24 h (n2 = 3) y recogiendo una muestra de 15-20 hojas el tercer día dentro de un vial de 120 mL, sellado herméticamente y congelado hasta su posterior análisis. La optimización del método incluyó: optimización de la técnica de extracción por espacio de cabeza y la optimización de las condiciones cromatográficas (tiempo y temperatura de calentamiento del vial, patrón interno, rampa de temperatura y modo y volumen de inyección). Como aplicación, se estudiaron las especies vegetales que captan más volátiles del aire interior, y se comparó el grado de absorción de VOCs con la reducción de la contaminación del aire interior dentro de la CTC estudiada en el Proyecto de investigación (P18-TP_1657, 2020-2023).

P_44-ESTUDIO DE LA EFICACIA DE SISTEMAS DOMÉSTICOS DE FILTRACIÓN DE AGUA PARA LA ELIMINACIÓN DE CONTAMINANTES EMERGENTES EN AGUAS DE ANDALUCÍA

P. Laborde, M.A. Bello-López, R.M. Fernández-Torres, J.A. Ocaña-González,
M. Ramos-Payán, N. Aranda-Merino

Departamento de Química Analítica. Facultad de Química. Universidad de Sevilla.

naranda@us.es

Keywords: contaminantes emergentes, parabenos, muestras medioambientales, filtros domésticos, agua potable

Abstract:

Los parabenos (PHBs) son compuestos derivados del ácido P-hidroxibenzoico que, debido a su bajo coste y excelentes propiedades fisicoquímicas, se emplean habitualmente como conservantes en las industrias alimentaria, cosmética y farmacéutica [1]. Este uso generalizado ha dado lugar a su incursión en el ciclo del agua, lo que supone un potencial riesgo para la salud de la población. Si bien las concentraciones detectadas se encuentran dentro de los límites legales, los efectos de una exposición continuada son casi desconocidos. En las últimas décadas, diversos estudios científicos han concluido que los PHBs pueden provocar alteraciones endocrinas, infertilidad o el desarrollo de ciertos tipos de cáncer [2]. Por este motivo, la evaluación de la toxicidad, así como los posibles riesgos de una exposición prolongada es un tema de gran interés entre la comunidad científica. En este trabajo se propone evaluar la eficacia de un dispositivo doméstico de filtración de agua en la eliminación de siete PHBs. Para ello se seleccionaron muestras de agua potable de diferentes provincias de Andalucía y se emplearon diferentes filtros comerciales con objeto de comparar su rendimiento, durabilidad y capacidad de retención. Los filtros evaluados están compuestos por carbón activo y resinas de intercambio iónico, combinando así mecanismos de adsorción físicos y químicos. Una vez filtradas las muestras de agua se analizaron mediante cromatografía líquida de alta resolución (HPLC) empleando una columna KromaPhase RP_18e (150 mm x 3.0 mm i.d., 3.5 µm tamaño de partícula) y una fase móvil compuesta por ácido fórmico (0.1% v/v; pH 2.6) y metanol. La elución se realizó a un flujo de 0.4 mL min⁻¹ con detección a 255 nm (DAD) aplicando el siguiente programa de elución: 0 min 100% A, 2.5 min 100% A, 4 min 30% A, 14 min 30% A, 15 min 100% A. Los resultados obtenidos muestran eficacias de eliminación de más del 70% de los PHBs tras un único filtrado, observándose diferencias significativas en la capacidad de retención entre las diferentes marcas comerciales empleadas.

[1] A. Tartaglia, A. Kabir, S. Ulusoy, E. Sperandio, S. Piccolantonio, H.I. Ulusoy, M. Locatelli, *J. Chromatogr. B* 1125, 2019, 121707.

[2] R. Golden, J. Gandy, G. Vollmer, *Crit. Rev. Toxicol.* 35, 2005, 435-458.

Agradecimientos: Proyectos PID2021-123073NB-C21/C22 (MICIN-AEI, España), Red Nacional RED 2022-134079-T (MICIN, España).

P_45-METABOLIC PROFILING AND FUNCTIONAL PATHWAY ANALYSIS IN THE DIGESTIVE GLAND OF FRESHWATER MUSSELS (*UNIO RAVOISIERI*): IMPACT OF NANOPARTICLE EXPOSURE, AND THE PROTECTIVE ROLE OF SELENIUM

O. Abidi^{1,2}, E. Mahmoudi¹, T. García Barrera²

¹Environmental Biomonitoring Laboratory (LBE), Faculty of Sciences of Bizerte, University of Carthage, Bizerte, Tunisia.

²Research Centre of Natural Resources, Health and the Environment (RENSMA), Department of Chemistry, Faculty of Experimental Sciences, University of Huelva, Campus El Carmen, Fuerzas Armadas Ave., 21007, Huelva, Spain.

abidimouamya27@gmail.com

Keywords: *Unio Ravoisieri*, ZnTi nanoparticles, selenium, environmental metabonomics

Abstract:

Nanoparticles (NPs) are widely used in cosmetics, pharmaceuticals, and water treatment due to their biocompatibility and antimicrobial properties [1,2]. However, their increasing presence in aquatic ecosystems raises concerns regarding potential ecotoxicological effects on aquatic organisms [3,4]. This study aimed to evaluate the metabolic disturbances and functional pathway alterations in the digestive gland of the freshwater mussel *Unio ravoisieri* after exposure to Zinc-Titanium nanoparticles (ZnTiNPs). Additionally, it assesses selenium's (Se) protective role in restoring metabolic homeostasis against nanoparticle-induced toxicity. Mussels were exposed to two concentrations of ZnTiNPs (10 and 100 µg/L), either alone or in combination with 100 µg/L of Se, over 14 days. Metabolomic analysis of digestive glands was performed using complementary analytical platforms: GC-MS and UHPLC-QTOF-MS in both electrospray ionization positive (ESI+) and negative (ESI-) modes offering extensive metabolic coverage. ZnTiNPs exposure significantly altered the mussels' metabolome, impacting fatty acid biosynthesis, amino acid pathways, and key metabolic routes, including glutathione, glyoxylate, and dicarboxylate metabolism. Selenium supplementation counteracted several of these metabolic disruptions, suggesting its potential protective role against nanoparticle-induced toxicity. The combination of GC-MS and UHPLC-QTOF-MS provided comprehensive insights into the metabolic and functional pathway alterations caused by ZnTiNP exposure. Selenium supplementation effectively modulated these disruptions, demonstrating its potential as a key mitigator of nanoparticle-induced toxicity. These findings highlight selenium's role in restoring metabolic homeostasis, underscoring its significant protective effect against environmental nanotoxicity in aquatic organisms.

[1] M.J. Araújo, M. Vazquez, L. Rodríguez-Lorenzo, A. Moreda-Piñero, E. Fonseca, N. Mallo, I. Pinheiro, M. Quarato, E. Bigorra-Ferré, A. Matos, A. Barreiro-Felpeto, M.V. Turkina, C. Suárez-Oubiña, P. Bermejo-Barrera, S. Cabaleiro, V. Vasconcelos, B. Espiña, A. Campos, *Environ. Pollut.* 360, 2024, 124665.

[2] I. Bouzidi, A. Khazri, K. Mougin, W. Bendhafer, A.M. Abu-Elsaoud, O.A. Plavan, M.A.M Ali, G. Plavan, s. Özdemir, H. Beyrem, F. Boufahja, B. Sellami, *J. Trace Elem. Med. Biol.* 83, 2024, 127401.

[3] F. Li, Y. Lin, C. Yang, Y. Yan, R. Hao, R. Mkuye, Y. Deng, *Comp. Biochem. Physiol.* 280, 2024, 109906.

[4] A. D'Agata, S. Fasulo, L.J. Dallas, A.S. Fisher, M. Masiano, J.W. Readman, A.N. Jha, *Nanotoxicology*. 8 (5), 2013, 1–10.

Acknowledgements: The authors acknowledge the support of the Department of Chemistry at the University of Huelva and the University of Carthage for providing research facilities and technical assistance.

P_46-VALORIZACIÓN DE RESIDUOS DE BRÓCOLI COMO BIOSORBENTE EFICAZ DE IONES DE Pb(II)

**M.D. Galindo-Riaño, M.J. Casanueva-Marenco, M. Díaz-de-Alba,
M.D. Granado-Castro, J.A. Gestoso-Rojas, L. Sánchez-Ponce**

Dpto. Química Analítica, Instituto de Biomoléculas (INBIO), Facultad de Ciencias,
Campus de Excelencia Internacional del Mar (CEI-MAR), Universidad de Cádiz. Puerto
Real, Cádiz

dolores.galindo@gm.uca.es

Keywords: plomo, biosorción, valorización, residuos agroalimentarios, biomasa, brócoli

Abstract:

El uso de biomateriales ecológicos en procesos de sorción, aplicados a la remediación de aguas contaminadas por metales pesados, despierta gran interés por su carácter verde, bajo coste y eficaz sostenibilidad. En este trabajo se preparó biomasa a partir de tallos de brócoli *Calabrese*, desechados durante su uso como alimento, evaluándose su capacidad para la biosorción de iones Pb(II) de disoluciones acuosas. La biomasa se caracterizó estructural y morfológicamente mediante TGA/DGT, FTIR y SEM/EDX. Los componentes principales identificados en el biosorbente fueron hemicelulosa, almidón, pectina, celulosa, lignina y fitoquímicos, con grupos donadores de electrones implicados en la sorción del ion metálico. También se determinaron la densidad volumétrica y aparente, siendo 0,52 y 0,65 g mL⁻¹, respectivamente, la porosidad con un valor de 20,6% y el área superficial específica de 15,3 m² g⁻¹. El valor del pH_{pzc} fue de 6,25, la capacidad de adsorción de yodo de 619 mg g⁻¹ y la capacidad de intercambio catiónico de 30,7 cmol kg⁻¹. El proceso fue optimizado y se lograron valores de sorción de iones Pb(II) muy satisfactorios (88,3 ± 0,8%) a pH 4,8 con una dosis de biomasa de 10 g L⁻¹. Las isothermas de Freundlich, Dubinin–Radushkevich y el modelo cinético de pseudo-segundo orden explicaron la biosorción de Pb(II) en la superficie heterogénea de la biomasa, con una capacidad máxima de adsorción de 586,7 mg g⁻¹. Igualmente se determinó la naturaleza endotérmica y espontánea de la biosorción, donde los mecanismos de complejación, intercambio de ligando e interacción catión- π fueron significativos.

Agradecimientos: Los autores agradecen al Servicio Central de Investigación para la Ciencia y la Tecnología de la Universidad de Cádiz (España) por la cesión de sus equipos, al Grupo de Investigación “FQM 249-Instrumentación y Ciencias Ambientales” de la Universidad de Cádiz por su ayuda y el suministro del analizador Microtrac NANOTRAC Wave DLS y a A. Gil Montero por el análisis FTIR. Este trabajo fue financiado por los siguientes programas del Plan Propio de estímulo y apoyo a la Investigación y Transferencia: a) UCA PR2022-017; b) INBIO 2023 y 2024; c) SC2022-002 y SC2024-001.

P_47-CONTAMINANTES METÁLICOS EN MUESTRAS DE POLVO DE LA BAHÍA DE CÁDIZ

L. Gallardo-Guerrero¹, B. García-Catalán¹, L. Morano², M.D. Galindo-Riaño¹, E. Dinelli², M.J. Casanueva-Marengo¹, M. Díaz-de-Alba¹, M.D. Granado-Castro¹

¹Dpto. Química Analítica, Instituto de Biomoléculas (INBIO), Facultad de Ciencias, Campus de Excelencia Internacional del Mar (CEI-MAR), Universidad de Cádiz. Puerto Real, Cádiz.

²Dipartimento di Scienze Biologiche, Geologiche e Ambientali, Università Di Bologna, Piazza di Porta S. Donato 1, Bologna.

lucia.gallardoquerrero@alum.uca.es

Keywords: polvo, contaminación metálica, calidad ambiental, índices de contaminación, índices de riesgo ecológico

Abstract:

El polvo es una matriz ambiental compleja, que puede estar enriquecida en metales pesados procedentes tanto de fuentes naturales (erosión eólica, aerosoles marinos, calima...) como antropogénicas (tráfico rodado, emisiones industriales, procesos de combustión...), siendo muy significativas estas últimas en zonas urbanas, industriales y portuarias. Las partículas de polvo pueden transportarse por la atmósfera, depositarse, resuspenderse e interactuar con otros componentes de los compartimentos ambientales (agua de lluvia, de riego, gases, masas de aguas, suelos...), así como con seres vivos, siendo de interés en estudios de calidad y contaminación ambiental. Por ello, en este trabajo se analizaron muestras de polvo de la bahía de Cádiz, caracterizando su contenido en metales pesados, sus niveles de contaminación y de riesgo ecológico. Las muestras se tomaron en diversos entornos: vías urbanas, zonas industriales y portuarias. Se analizaron elementos como Cd, Cr, Pb, V, Al, Fe, Cu, As, Ag, Ni y Zn en las fracciones más finas por su facilidad de transporte, lixiviación e impacto por exposición. Se emplearon diversos índices geoquímicos y de riesgo ecológico, además de algunas técnicas quimiométricas para identificar patrones y posibles fuentes de contaminación. En las muestras de la ciudad de Cádiz se hallaron niveles significativos de Cu, Pb, Ag y Zn, atribuibles al tráfico rodado. En Puerto Real, los índices de riesgo ecológico fueron generalmente menores que en Cádiz, excepto para el As. Este elemento podría estar relacionado con las actividades de construcción naval (pintado y chorreado de buques) de sus astilleros donde se realizaron los muestreos.

Agradecimientos: Este trabajo ha sido cofinanciado por el Programa Operativo FEDER Andalucía 2021-2027 (FEDER-UCA-2024-A1-04), por la Consejería de Universidad, Investigación e Innovación de la Junta de Andalucía y por los siguientes programas del Plan Propio de estímulo y apoyo a la Investigación y Transferencia: a) UCA PR2022-017; b) INBIO 2023 y 2024; c) SC2022-002 y SC2024-001.

P_48-DETERMINACIÓN SIMULTÁNEA DE IONES Cu(II), Ni(II) Y Cd(II) EN AGUAS NATURALES MEDIANTE UNA MEMBRANA DE INCLUSIÓN POLIMÉRICA

**M.D. Granado-Castro¹, M.M. López-Guerrero², J. Lande-Durán¹,
M. Díaz-de-Alba¹, M.J. Casanueva-Marengo¹**

¹Departamento de Química Analítica, Instituto de Biomoléculas (INBIO), Facultad de Ciencias, Campus de Excelencia Internacional del Mar (CEI-MAR), Universidad de Cádiz. Puerto Real, Cádiz.

²Departamento de Química Analítica, Universidad de Málaga.

dolores.granado@gm.uca.es

Keywords: membrana de inclusión polimérica (PIM), determinación de iones metálicos, extracción, preconcentración, aguas naturales, metales pesados

Abstract:

La detección de metales pesados en aguas naturales es crucial debido a su toxicidad y persistencia. Métodos como la espectroscopia de absorción atómica (FAAS) suelen necesitar pasos previos de separación y preconcentración, especialmente en matrices complejas como el agua de mar. En este trabajo, se ha desarrollado un método usando una membrana de inclusión polimérica (PIM) para extraer y preconcentrar simultáneamente Cu(II), Ni(II) y Cd(II) de aguas con distintas salinidades. La PIM se sintetiza con poli(cloruro de vinilo) y fosfato de tributilo, utilizando piridina-2-acetaldehído benzoilhidrazona (2-APBH) como extractante. Este ligando forma quelatos neutros a pH 8, facilitando la extracción de los iones metálicos del agua. Posteriormente, los metales se reextraen con ácido nítrico y se cuantifican por FAAS. Tras optimizar las variables analíticas, se lograron límites de detección de 0,33; 0,75 y 0,48 µg/L para Cu(II), Ni(II) y Cd(II) respectivamente, demostrando alta sensibilidad. La precisión del método fue excelente (1,39% para Cu(II), 2,62% para Ni(II) y 0,84% para Cd(II)), y la exactitud se confirmó con una muestra de referencia certificada. El método se aplicó con éxito a muestras de estuario y agua de mar, sin que la salinidad o las interferencias de otros iones afectaran significativamente los resultados. El método propuesto es simple, reproducible, económico y ofrece una alternativa "verde" al reducir el consumo de reactivos y la generación de residuos, promoviendo así prácticas analíticas más sostenibles.

Agradecimientos: Esta investigación fue financiada por la Consejería de Economía, Conocimiento, Empresas y Universidad de la Junta de Andalucía (España) (ayuda RNM-236), por el Programa Fomento e Impulso de la Investigación y de la Transferencia de la Universidad de Cádiz (España) (PR2018-070) y por los siguientes programas del Plan Propio de estímulo y apoyo a la Investigación y Transferencia: a) UCA PR2022-017; b) INBIO 2023 y 2024; c) SC2022-002 y SC2024-001.

**P_49-MÉTODO AUTOMATIZADO BASADO EN SPE
ONLINE-LC-MS/MS PARA LA DETERMINACIÓN
ENANTIOSELECTIVA DE FÁRMACOS QUIRALES EN AGUAS
RESIDUALES**

M. Arenas, J. Martín, J.L. Santos, I. Aparicio, E. Alonso

Departamento de Química Analítica, Escuela Politécnica Superior, Universidad de Sevilla
iaparicio@us.es

Keywords: SPE Online, LC-MS/MS, cromatografía quiral, fármacos, metabolitos, agua residual

Abstract:

Entre los distintos grupos de contaminantes emergentes, los fármacos suscitan una especial preocupación debido a su liberación continua en medios acuáticos y sus posibles efectos en organismos no diana. Sin embargo, a pesar de que muchos de ellos son compuestos quirales cuyos enantiómeros pueden presentar diferente comportamiento y efectos, la mayoría de las metodologías existentes para su determinación no consideran su quiralidad. En este trabajo, se ha optimizado y validado un método automatizado basado en extracción en fase sólida (SPE) integrada online con cromatografía de líquidos acoplada espectrometría de masas en tándem (LC-MS/MS) para la determinación enantiomérica de fármacos quirales de interés medioambiental en aguas residuales influentes y efluentes. Los fármacos seleccionados pertenecen a los grupos terapéuticos de β -bloqueantes, antidepresivos y dos de sus metabolitos. Los límites de cuantificación se encontraron en el rango de 0,1 a 50 ng L⁻¹ para la mayoría de los compuestos. La exactitud osciló entre 60,8 % y 114 %, y la precisión, expresada como desviación estándar relativa, fue inferior al 12,5 % para todos los compuestos. El método desarrollado permite la determinación enantioselectiva simple y automatizada de los compuestos en 40 minutos, incluyendo el tratamiento de la muestra, con valores de enantioresolución situados entre 0,51 a 1,24. Adicionalmente, la aplicación del método a muestras reales de aguas residuales reveló una degradación preferencial de los enantiómeros S-(-)-atenolol, metoprolol-E1, venlafaxina-E1 y O-desmetilvenlafaxina-E1.

Agradecimientos: Junta de Andalucía, Consejería de Economía y Conocimiento (US-1254283) y Ministerio de Universidades (contrato predoctoral de Marina Arenas FPU20/00540).

**P_50-MONITOREO DE PESTICIDAS EN SUELOS DE OLIVAR
INTENSIVO Y ECOLÓGICO EN LA CUENCA MEDITERRÁNEA
MEDIANTE LC-MS/MS**

A.J. Rascón^{1,2}, D. Moreno-González^{1,2}, B. Gilbert-López^{1,2}, J.F. García-Reyes^{1,2}

¹ Analytical Chemistry Research Group, Department of Physical and Analytical Chemistry, University of Jaén, Campus Las Lagunillas s/n, 23071 Jaén, Spain.

² University Research Institute for Olives Grove and Olive Oil (INUO), University of Jaén, Jaén, Campus Las Lagunillas s/n, 23071 Jaén, Spain.

arascon@ujaen.es

Keywords: olivar, ecológico, pesticidas, monitoreo, espectrometría de masas

Abstract:

El cultivo del olivo tiene un impacto agrícola significativo en Europa, situándose entre los sectores más importantes de la industria agroalimentaria. En regiones como el sur de España, Portugal, Italia y Grecia, la producción de aceite de oliva es vital para sus economías. Este estudio, que forma parte de la fase preoperativa del proyecto SOIL O-LIVE, analizó 49 muestras de suelo de 49 olivares en España, Portugal, Italia, Grecia y Marruecos para investigar la presencia de pesticidas y las variaciones en diferentes tipos de manejo del suelo: tradicional (TD), alta densidad (HD) y orgánico (ORG). Los resultados mostraron patrones de contaminación distintos relacionados con las prácticas de manejo del suelo. En todos los países, los fungicidas y herbicidas fueron los más comúnmente detectados, mientras que los insecticidas fueron los menos prevalentes. Los suelos gestionados de forma tradicional mostraron una amplia gama de concentraciones de fungicidas (de 8,2 a 51 µg/kg) y herbicidas (de 3,0 a 48 µg/kg). Los suelos de alta densidad presentaron niveles más bajos de fungicidas, pero concentraciones medianas más altas de herbicidas. Se detectaron pesticidas en 44 de los 49 olivares seleccionados. Los hallazgos ilustran la distribución de pesticidas en los suelos de olivares, destacando la influencia del manejo del suelo en la persistencia de los pesticidas.

Agradecimientos: 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 acknowledges funding support from the MCIN/AEI/10.13039/501100011033 through the Ramón y Cajal program (RYC2022-035915-I).

P_51-TÉCNICAS ANALÍTICAS EN LA EVALUACIÓN DE LA EFICIENCIA DE LA STEVENSITA PURIFICADA EN LA ELIMINACIÓN DE TETRACICLINAS Y SUS METABOLITOS EN AGUAS RESIDUALES

N. García-Criado, L. Martín-Pozo, J. Martín, J.L. Santos, I. Aparicio, E. Alonso
Departamento Química Analítica, Escuela Politécnica Superior, Universidad de Sevilla.

iaparicio@us.es

Keywords: tetraciclinas, metabolitos, arcilla, eliminación, aguas residuales

Abstract:

Este estudio evalúa el uso de stevensita purificada, una arcilla natural, como adsorbente eficiente y de bajo coste para la eliminación de antibióticos tetraciclínicos en aguas contaminadas. Se realizaron experimentos en modo discontinuo para estudiar la cinética de adsorción, las isothermas y la influencia de distintos factores ambientales. El material y las soluciones se analizaron antes y después de los ensayos de adsorción mediante MEB/EDS, DRX, BET, potencial zeta, FTIR y LC-MS/MS. La stevensita purificada mostró una eficiencia óptima en condiciones ácidas, logrando una eliminación de más del 99% de tetraciclinas y sus metabolitos a una dosis de adsorbente de 2 g L^{-1} y una concentración de antibiótico de 5 mg L^{-1} . El equilibrio se alcanzó en 30 minutos. Los ensayos de regeneración confirmaron que la stevensita mantiene más del 90 % de su capacidad adsorbente tras cinco ciclos de adsorción-desorción. Los análisis de caracterización superficial revelaron que su elevada área específica, alta capacidad de intercambio catiónico y la posibilidad de establecer enlaces de hidrógeno explican su elevada eficacia. El material se evaluó en agua de grifo, agua superficial y aguas residuales, logrando eficiencias superiores al 99 %. Por su elevada eficiencia, bajo coste y buena capacidad de reutilización, la stevensita purificada se presenta como una alternativa prometedora para el tratamiento de aguas residuales a gran escala.

Agradecimientos: Ministerio de Ciencia, Innovación y Universidades (PID2023-148571OB-I00), Universidad de Sevilla (SOL2024-29271), Ministerio de Ciencia e Innovación (contrato predoctoral de Noelia García (PRE2021-100799) y contrato postdoctoral Juan de la Cierva de Laura Martín (FJC2021-047238-I).

P_52-DESARROLLO Y VALIDACIÓN DE UN MÉTODO MULTIRRESIDUO PARA LA DETERMINACIÓN DE ANTIBIÓTICOS Y SUS METABOLITOS EN LODOS DE DEPURADORA Y SUELOS

C. Mejías, J.L. Santos, J. Martín, I. Aparicio, E. Alonso

Departamento de Química Analítica, Escuela Politécnica Superior, Universidad de Sevilla

cmpadilla@us.es

Keywords: antibióticos, metabolitos, suelos, lodos de depuradora, compost, LC-MS/MS

Abstract:

Los antibióticos son un grupo de fármacos ampliamente utilizados para prevenir y tratar infecciones bacterianas. Tras su administración, se excretan a través de la orina y/o las heces como compuestos originales y/o metabolitos. Debido al uso extendido, excesivo y abusivo de los antibióticos, los compuestos originales y sus metabolitos se vierten continuamente al medioambiente, principalmente a través de los efluentes de las estaciones depuradoras de aguas residuales. También pueden acumularse en los lodos de depuradora generados durante el tratamiento de las aguas residuales. Este hecho es especialmente preocupante cuando los lodos de depuradora se aplican en suelos agrícolas como fertilizantes. En este trabajo se ha desarrollado y validado un método para la determinación de doce antibióticos y ocho de sus metabolitos en lodos y suelos. El método incluye extracción asistida por ultrasonidos, limpieza mediante extracción en fase sólida dispersiva y determinación mediante cromatografía de líquidos acoplada a espectrometría de masas en tándem. Se optimizaron las variables que afectan a cada etapa del método analítico. Los límites de cuantificación del método oscilaron entre 0,03 y 7,5 ng/g peso seco. La precisión, expresada como desviación estándar relativa, fue inferior al 17%. La exactitud media, expresada como recuperación relativa, osciló entre el 87,8 y el 106%. Una aplicación preliminar del método reveló que los macrólidos y las fluoroquinolonas eran los antibióticos con las concentraciones más elevadas en ambos tipos de muestras.

Agradecimientos: Al Ministerio de Ciencia e Innovación-Agencia Estatal de Investigación (PID2020-117641RBI00 de MCIN/AEI/10.13039/501100011033) y a la Universidad de Sevilla (VIPPIT-US2021II.2A).

P_53-HOLOTHURIA TUBULOSA COMO BIOINDICADOR EN EL ESTUDIO DE LA CONTAMINACIÓN MARINA. ANÁLISIS DE ALTERADORES ENDOCRINOS QUÍMICOS MEDIANTE CROMATOGRAFÍA CG-MS/MS

A. Zafra-Gómez¹, U. Gallardo-Gómez¹, L. Martín-Pozo¹, F. Hidalgo²

¹Departamento de Química Analítica, Universidad de Granada, E-18071 Granada, España.

²Departamento de Zoología, Universidad de Granada, E-18071 Granada, España.

azafra@ugr.es

Keywords: alteradores endocrinos químicos, biomonitorización, *Holothuria tubulosa*; pared corporal; CG-MS/MS

Abstract:

La actividad humana provoca la liberación de numerosos contaminantes al medio ambiente [1]. Algunos de estos, los llamados alteradores endocrinos químicos (EDCs), interfieren en el sistema endocrino de animales y humanos. Se trata de un grupo heterogéneo de más de 800 compuestos xenobióticos diferentes [2]. En este grupo, bisfenoles, parabenos y triclosán destacan por su impacto tóxico y duradero. En esta investigación se evalúa la presencia y bioacumulación de 20 EDCs en la pared corporal de *Holothuria tubulosa* Gmelin 1791 mediante CG-MS/MS. Se ha optimizado la extracción de los analitos mediante ultrasonidos y el proceso cromatográfico. Se ha validado el método en términos de linealidad (%R² > 99%; Plof > 5%), sensibilidad (LODs, 0.1-0.7 ng g⁻¹ / LOQs 0.5-2.0 ng g⁻¹), y exactitud (veracidad, %Rec 85.6-112.3%; precisión, %DER < 15%). Se han analizado especímenes recogidos en 7 zonas de muestreo distintas a lo largo de la costa andaluza. Los resultados han revelado la presencia de varios compuestos en las muestras, siendo bisfenol A y metilparabeno los más habituales (100% de las muestras). Las concentraciones más elevadas se encontraron en las zonas con mayor actividad antropogénica, lo que indica una tendencia situacional. El estudio subraya el valor de *Holothuria tubulosa* como bioindicador de contaminación marina, concienciando sobre la presencia y efectos nocivos de los EDCs en la vida marina y enfatizando la necesidad de estrategias de conservación y protección de los ecosistemas acuáticos.

[1] C. Pironti, M. Ricciardi, A. Proto, P.M. Bianco, L. Montano, O. Motta, *Water*. 13 (10), 2021, 1347.

[2] Y. Combarous, T.M.D. Nguyen, *Toxics*. 7(1), 2019, 5.

**P_54-MONITORIZACIÓN AMBIENTAL MEDIANTE
METODOLOGÍAS ÓMICAS EN ESPACIOS NATURALES
UTILIZANDO AVES COMO BIOINDICADORES DE CALIDAD
AMBIENTAL**

**C. Navarro Fernández¹, C. De Le Court², J.L. Gómez-Ariza¹, M.C. Collado³,
F. Hortas⁴, T. García-Barrera¹**

¹Centro de Investigación en Recursos Naturales, Salud y Medio Ambiente (RENSMA).
Departamento de Química, Facultad de Ciencias Experimentales, Universidad de Huelva,
Campus El Carmen, Avda. Fuerzas Armadas, 21007, Huelva, España.

²Agencia de Medio Ambiente y Agua, Sevilla, España.

³Instituto de Agroquímica y Tecnología de los Alimentos (IATA-CSIC), Agustín Escardino
7., Valencia. 46980 Paterna, Valencia, España.

⁴Departamento de Biología, Instituto de Investigaciones Marinas (INMAR). Universidad
de Cádiz. 11510 Puerto Real, España.

cristina.navarro@dqcm.uhu.es

Keywords: bioindicadores, espátula, contaminantes, metabolómica, microbiota

Abstract:

La existencia en Andalucía de núcleos industriales y urbanos que constituyen fuentes potenciales importantes de contaminantes con incidencia medioambiental, hace aconsejable el estudio y evaluación de la presencia, movilización y acumulación de diversos xenobióticos en los tejidos de los organismos vivos presentes en ecosistemas especialmente sensibles. Las consecuencias de la contaminación debida a metales pesados son ampliamente reconocidas a escala global, regional y local [2] y su influencia sobre los ecosistemas [3], especialmente en las zonas con abundante presencia de agua, la cual actúa como elemento transportador de estos contaminantes. La espátula común (*Platalea leucordia*) es un ave zancuda que habita en los humedales y presenta una gran sensibilidad a la contaminación. Es importante conocer la presencia de determinados contaminantes en este bioindicador único en la zona, ya que ello nos proporcionará información sobre la situación ambiental de estos entornos ecológicos y el grado de amenaza que esta y otras aves y animales de vida libre, que habitan en estas zonas puede sufrir. Para ello, Se realizó un estudio metabolómico no dirigido en heces para determinar metabolitos producidos microbianamente que potencialmente pudieran estar relacionados con la presencia de contaminantes ambientales. El análisis metabolómico se llevó a cabo combinando espectrometría de masas y cromatografía líquida de ultra alto rendimiento acoplada a tiempo de vuelo cuadrupolar (UHPLC-QTOF). Se compararon los perfiles de metabolitos fecales entre espátulas comunes en la Reserva de la Biosfera de las Marismas del Odiel y en Salinas de La Cetina en el Parque Natural Bahía de Cádiz. Se compararon los perfiles metabolómicos de dos aves distintas en la misma zona, por un lado gaviota reidora y espátula en las Marismas del Odiel y por otro lado se compararon los perfiles de la cigüeña y gaviota patiamarilla en Salinas de La Tapa. Y por último se compararon los perfiles metabolómicos entre dos zonas próximas como son Salinas de la Cetina de la gaviota reidora y Salinas de la Tapa de la gaviota patiamarilla, las dos zonas en Cádiz. Se observó principalmente la alteración de esteroides, acilos

grasos, glicerofosfolípidos y esfingolípidos en el metaboloma fecal de las diferentes aves acuáticas, sugiriendo alteraciones metabólicas posiblemente debidas a factores ambientales, de alimentación y migración.

[1] J. Burger, B. Eichhorst, *Arch. Environ. Contam. Toxicol.* 53(3), 2007, 442-449.

[2] J. Burger, M. Gochfeld, C. Jeitner, D. Snigaroff, T. Stamm, C. Volz, *Environ. Monit. Assess.* 143(1-3), 2007, 247-256.

[3] J.A. Kushlan, *Colonial Waterbirds.* 16(2), 1993, 223-251.

**P_55-DETERMINATION OF OCTOCRYLENE, BENZOPHENONE-3
AND ITS DERIVATES IN SWIMMING POOL WATERS BY GAS
CHROMATOGRAPHY-MASS SPECTROMETRY**

**E. Ballesteros¹, B. Puebla-Domínguez¹, L. Ávalos-Monroy ¹,
L. Palacios Colón¹, A.J. Rascón^{1,2}**

¹Department of Physical and Analytical Chemistry, E.P.S of Linares, University of Jaén,
Spain.

²Analytical Chemistry Research Group, Department of Physical and Analytical Chemistry,
University of Jaén, Campus Las Lagunillas s/n, 23071 Jaén, Spain.

eballes@ujaen.es

Keywords: ultraviolet (UV) filters, swimming pool waters, gas chromatography–mass spectrometry

Abstract:

The rising use of sunscreen products to prevent sunburn, photoaging, and skin cancer has significantly increased the environmental release of ultraviolet (UV) filters. Among these, benzophenones—particularly benzophenone-3—and octocrylene are commonly used due to their efficient UV-absorbing properties. Although regulations restrict the use of certain compounds, a wide range of benzophenone derivatives are detected in cosmetics and aquatic environments. These substances are persistent and potentially harmful, with documented endocrine-disrupting effects in aquatic organisms and adverse impacts on plant and algal growth. As a result, their presence in water sources raises environmental and public health concerns. This research aims to assess the influence of sunscreen and cosmetic use on water quality through the detection and quantification of benzophenones. Advanced analytical techniques, such as gas chromatography–mass spectrometry (GC-MS) and high-performance liquid chromatography–mass spectrometry (HPLC-MS), are employed for accurate analysis. Sensitivity is enhanced by applying solid-phase extraction (SPE), which reduces matrix interferences and improves analyte concentration. A continuous SPE method using Oasis HLB sorbent coupled with GC-MS was developed to determine octocrylene and ten benzophenone derivatives. The method was validated, showing high recovery (83–112%), strong linearity, low matrix effects (<20%), high precision (RSD <10%), and low detection limits (20–40 ng/L). It was applied to 20 swimming pool waters. Two of the benzophenones (BP_2 and BP_8) were not found at quantifiable levels in any sample. By contrast, the other benzophenones were detected in all samples at levels from 67 to 3100 ng/L.

**P_56-ANALYTICAL METHOD FOR THE DETERMINATION OF
GLYCOLS AND BISPHENOLS IN SURFACE WATERS USING
SOLID-PHASE EXTRACTION AND GAS
CHROMATOGRAPHY–MASS SPECTROMETRY**

**E. Ballesteros¹, L. Ávalos-Monroy¹, B. Puebla-Domínguez¹,
L. Palacios Colón¹, A.J. Rascón^{1,2}**

¹Department of Physical and Analytical Chemistry, E.P.S of Linares, University of Jaén,
Spain.

²Analytical Chemistry Research Group, Department of Physical and Analytical Chemistry,
University of Jaén, Campus Las Lagunillas s/n, 23071 Jaén, Spain.

eballes@ujaen.es

Keywords: glycols, bisphenols, waters, solid-phase extraction, gas chromatography–mass spectrometry.

Abstract:

The release of synthetic substances into the environment, once assumed to pose minimal risk, has resulted in considerable ecological and public health concerns, leading to increased regulatory scrutiny. Bisphenols (BPs)—notably BPA, BPS, and BPF—are extensively utilized in the production of polycarbonate plastics and epoxy resins and have been identified as persistent contaminants, especially in aquatic environments. Similarly, ethylene glycol and other glycols such as propylene glycol, widely used in antifreeze products, are recognized as potential sources of groundwater contamination and are associated with severe toxicological outcomes, including cardiopulmonary and renal dysfunction. The monitoring of this class of compounds in surface waters is essential for evaluating both their environmental occurrence and temporal degradation patterns. In this context, glycols and bisphenols can be reliably identified and quantified using advanced analytical methodologies, as gas chromatography and high-performance liquid chromatography coupled with mass spectrometry. The analytical sensitivity of these techniques is significantly improved through the application of solid-phase extraction (SPE), which facilitates the elimination of matrix interferences and enhances the pre-concentration efficiency. The developed method has been applied for the determination of five bisphenol compounds and six glycols in various water matrices, employing SPE in combination with gas chromatography–mass spectrometry. Method optimization was carried out by systematically evaluating the influence of pH and ionic strength. Validation of the procedure demonstrated robust analytical performance, yielding satisfactory recoveries and precision, with relative standard deviations below 10%. The method proved effective for the quantification of target analytes in superficial water samples.

P_57-COMPARACIÓN DE MÉTODOS DE MUESTREO EN ESPACIO DE CABEZA PARA EL ANÁLISIS DE COMPUESTOS VOLÁTILES DE PASTAS DE CACAO DE COSTA RICA: UNA HERRAMIENTA PARA EXPLORAR SU ORIGEN

A.L. Mayorga-Gross^{1,2}, M.P. Segura-Borrego¹, M.L. Morales¹, A. Arciniegas³, R.M. Callejón¹, R. Ríos-Reina¹

¹Departamento de Nutrición y Bromatología, Facultad de Farmacia, Universidad de Sevilla, Sevilla, España.

²Centro Nacional de Ciencia y Tecnología de Alimentos, Universidad de Costa Rica, San José, Costa Rica.

³Centro Agronómico Tropical de Investigación y Enseñanza (CATIE), Turrialba, Costa Rica.

rrios5@us.es

Keywords: VOCs, cacao, técnicas de muestreo, origen, Costa Rica, quimiometría

Abstract:

El perfil de compuestos orgánicos volátiles (VOCs) en productos derivados de cacao está determinado por el origen del cacao, los procesos postcosecha y la industrialización. Este está estrechamente relacionado con su calidad sensorial y la eficacia de los procesos. Los objetivos de este estudio fueron comparar el desempeño de tres técnicas de muestreo en espacio de cabeza –microextracción en fase sólida (HS-SPME), extracción sorptiva (HSSE) y muestreo dinámico (DHS)– junto con la cromatografía de gases acoplada a espectrometría de masas para el análisis de pastas de cacao derivadas de ocho variedades (CATIE-R1, CATIE-R4, CATIE-R6, CC-137, CCN-51, IC-95, PMCT-58 y TSH-565) cultivadas en dos fincas de Costa Rica (en Sarapiquí y Turrialba) y evaluar la capacidad de cada técnica para la diferenciación de las pastas según su procedencia con el empleo de análisis quimiométrico exploratorio. Se detectaron 111 VOCs en total, siendo HS-SPME la técnica que extrajo el mayor número (69) y DHS la que proporcionó señales de mayor intensidad. Aunque cada método mostró selectividades diferentes, todos extrajeron compuestos como alcoholes, ésteres, pirazinas, monoterpenoides y ácidos grasos, varios de ellos clave para el aroma. Todas las técnicas permitieron diferenciar las pastas según procedencia, sugiriendo un efecto geográfico. Compuestos como el ácido isovalérico, ácido isobutírico, 1-hidroxi-2-propanona y alcohol fenetílico fueron dominantes en esta diferenciación. Estos resultados refuerzan la importancia de seleccionar la técnica de muestreo más adecuada según el objetivo del estudio y resaltan la utilidad del análisis de VOCs como potencial herramienta de trazabilidad y autenticación en pastas de cacao.

**P_58-APPLICATION OF A GRAPHENE OXIDE SORBENT
MODIFIED WITH MAGNETIC NANOPARTICLES FOR THE
EXTRACTION OF PHARMACEUTICALS FROM WASTEWATER**

B. Martínez-Piernas^{1,2}, I.S. Trujillo^{1,2}, M.d.M López-Guerrero^{1,2}, E.I. Vereda-Alonso^{1,2}

¹Department of Analytical Chemistry, Faculty of Sciences, University of Málaga,
29071, Málaga, Spain.

²University Institute of Materials and Nanotechnology, IMANA, University of Málaga,
Teatinos Campus, 29071, Málaga, Spain.

ampiernas@uma.es

Keywords: magnetic solid-phase extraction, graphene oxide, pharmaceuticals, wastewater, LC-MS

Abstract:

Conventional wastewater treatment processes are often ineffective in removing various organic contaminants (OCs), including pharmaceuticals. Their presence in aquatic environments poses significant ecological and human health risks. To address this, nanoscale sorbents have emerged as promising alternatives for wastewater decontamination. Among them, graphene oxide (GO)-based sorbents have attracted attention due to their large surface area, strong π - π interactions, and high adsorption capacity for hydrophobic and carbon-based compounds. Functionalization of GO with magnetic nanoparticles (MNPs) enhances sorbent stability, durability, and reusability, enabling easy separation from solutions using magnetic fields and reducing environmental and economic costs. This study investigates the adsorption performance of a novel GO-MNP sorbent, patented as M@GO, for the enrichment of 20 OCs from wastewater. Sample analysis was conducted using liquid chromatography coupled with high-resolution mass spectrometry (LC-Orbitrap_{MS}). Key parameters such as solution pH, contact time, and adsorption method were optimized. Under typical wastewater pH (7.5–8) and using ultrasound-assisted extraction (UAE) for 5 minutes, 77% of the OCs showed adsorption efficiencies between 70–100%, with relative standard deviations (RSDs) below 20%. To explore sorbent enrichment, a magnetic solid-phase extraction (MSPE) method was proposed. Extraction time, elution solvent, and solvent pH modifiers were evaluated. Optimal recoveries (70–120%, RSD<20%) were obtained using 1mL of methanol with 5% acetic acid and UAE for 2 minutes. These findings support the applicability of M@GO as MSPE sorbent.

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.

P_59-AVANCES EN BIOANÁLISIS MEDIANTE ESTRATEGIAS DE MINIATURIZACIÓN Y CONTROL DINÁMICO CON TECNOLOGÍA RASPBERRY PI

**A. Écija-Arenas, M. Durán-Salinas, V. Román-Pizarro, M.A. García-Granados,
J.M. Fernández-Romero**

Departamento de Química Analítica, Instituto Químico para la Energía y el
Medioambiente (IQUEMA), Universidad de Córdoba, Campus de Rabanales, Edificio
Anexo "Marie Curie", E-14071 Córdoba, España.

q92ecara@uco.es

Keywords: microfluídica basada en gotas (droplet-based microfluidic), nanoclusters de oro, procesamiento de imágenes, Raspberry Pi, derivados tiólicos, detección automatizada

Abstract:

Los avances recientes en bioanálisis han sido impulsados por la miniaturización, la automatización y la integración de plataformas embebidas de bajo coste. Este trabajo presenta el desarrollo de un sistema portátil y miniaturizado que combina microfluídica basada en gotas, nanosondas luminiscentes, control dinámico mediante Raspberry Pi y tratamiento de la señal mediante una aplicación de Python. El sistema está diseñado para monitorizar interacciones entre derivados tiólicos y nanoclústeres de oro estabilizados con albúmina sérica bovina (BSA-AuNCs), cuya luminiscencia se modula selectivamente al interactuar. La detección de estos compuestos, usando el glutatión como modelo, en muestras ambientales y agroalimentarias sigue siendo un reto debido a sus bajas concentraciones y a la complejidad de las matrices. La microfluídica basada en gotas (droplet-based microfluidic) permite manipular volúmenes de picolitros a microlitros, generando microreactores discretos que mejoran la reproducibilidad de los ensayos y reducen el consumo de reactivos. Cada gota actúa como una cámara de reacción independiente, favoreciendo la eficiencia de mezcla y el rendimiento analítico. Los módulos de cámara RGB integrados en la Raspberry Pi permiten la adquisición de imágenes y el procesamiento de señales a bordo, lo que posibilita la monitorización de la luminiscencia en las gotas. Se emplean algoritmos y herramientas quimiométricas basadas en una aplicación Python para optimizar la señal y mejorar la precisión del análisis. Este enfoque interdisciplinar combina innovación bioanalítica, hardware accesible y procesamiento avanzado de datos, ofreciendo una herramienta potente para la detección automatizada de xenobióticos usando sistemas portátiles para el análisis in situ.

Agradecimientos: Financiación: Este trabajo ha sido financiado por la submodalidad 2.6 "UCOProyecta", del Plan Propio de Investigación "Enrique Aguilar Benítez de Lugo" 2024 y el proyecto "Plan Complementario de I+D+i en el área de Ciencias Marinas" (PCM_00121, ThinkInazul), cofinanciado por la Consejería de Universidades, Investigación e Innovación de la Junta de Andalucía y por la Unión Europea a través de los fondos Next Generation EU del Plan de Recuperación, Transformación y Resiliencia. Las opiniones y puntos de vista expresados son exclusivamente de los autores y no reflejan necesariamente los de la Unión Europea ni de la Comisión Europea.

P_60-EXTRACCIÓN MEDIANTE MICRO-ELECTROMEMBRANA (M-EME) EMPLEANDO MEMBRANAS LÍQUIDAS LIBRES PARA LA DETERMINACIÓN DE PARABENOS EN MUESTRAS BIOLÓGICAS Y MEDIOAMBIENTALES

T. Cronly², A. Reguli³, M.A. Bello-López¹, R. María Fernández-Torres¹, J.L. Pérez-Bernal¹, M. Ramos-Payán¹, N. Aranda-Merino¹

¹Departamento de Química Analítica. Facultad Química, Universidad de Sevilla, España,

²Department of Chemistry, University of York, Reino Unido.

³Department of Pharmaceutical Chemistry and Pharmaceutical Analysis, Faculty of Pharmacy, Charles University, Akademika, República Checa.

naranda@us.es

Keywords: extracción mediante micro-electromembrana (μ -EME), membranas líquidas libres (FLM), parabenos, muestras medioambientales, muestras biológicas, espectrometría de masas

Abstract:

La extracción por electromembrana (EME) es una técnica de preparación de muestras que emplea un campo eléctrico para favorecer la migración de analitos iónicos desde una muestra acuosa hacia una fase aceptora a través de una membrana líquida orgánica conocida como membrana líquida soportada (SLM) [1]. Se caracteriza por su alta selectividad, bajo consumo de disolventes y tiempos de análisis reducidos. En 2014, Kubáň et al. [2] desarrollaron la microextracción por electromembrana (μ -EME), una variante miniaturizada que reemplaza la SLM por una membrana líquida libre (FLM) estabilizada geométricamente dentro de un tubo capilar entre dos fases acuosas. Este nuevo diseño es más simple, elimina la necesidad de soportes y mejora la transferencia de masa y la selectividad, alineándose con los principios de la Química Analítica Verde (GAC). En este trabajo se optimizó un método de μ -EME para el análisis de parabenos (PHBs), conservantes de uso habitual en la industria y que han generado preocupación social por su actividad estrogénica y persistencia medioambiental [3]. Se empleó una configuración en tres fases, aplicando las siguientes condiciones óptimas: 100 μ L fase donadora (NaOH, pH 11), 20 μ L fase aceptora (NaOH 10 mM, pH 12), 1-octanol como FLM (20 μ L), 200 V y 15 minutos. Comparada con la EME con fibras huecas (HF-EME), la μ -EME mejoró el rendimiento de extracción para la mayoría de los PHBs analizados y redujo el tiempo de operación en más del 60%. El método se aplicó satisfactoriamente a muestras biológicas y medioambientales que fueron analizadas mediante cromatografía líquida acoplada a espectrometría de masas (UPLC-ESI-QTOF).

[1] S. Pedersen, K.E. Rasmussen, *J. Chromatogr. A* 1109(2), 2006, 183-190.

[2] P. Kubáň, P. Boček, *J. Chromatogr. A* 1337, 2014, 32-39.

[3] F. Wei, M. Mortimer, H. Cheng, N. Sang, L.H. Guo, *Science of The Total Environment*. 778, 2021, 146150.

Agradecimientos: Proyectos PID2021-123073NB-C21/C22 (MICIN-AEI, España), Red Nacional RED 2022-134079-T (MICIN, España).

P_61-DESARROLLO DE UN MÉTODO BASADO EN LA TÉCNICA HS-GC-IMS EN COMBINACIÓN CON ALGORITMOS DE APRENDIZAJE AUTOMÁTICO PARA LA DISCRIMINACIÓN DEL OLOR HUMANO

A. Reynals Marcangeli, E. Durán- Guerrero, M.J. Aliaño-González, J.L. Pérez Calle, M. Palma, M. Ferreiro- González

Departamento de Química Analítica, Facultad de Ciencias, Instituto de Investigación Vitivinícola y Agroalimentaria (IVAGRO), Universidad de Cádiz, Campus Agroalimentario de Excelencia Internacional (ceiA3), 11510 Puerto Real, España.

marta.ferreiro@uca.es

Keywords: aprendizaje automático, compuestos orgánicos volátiles (COVs), diseño experimental, HS-GC-IMS, IMSS, volatiloma

Abstract:

Los seres humanos emitimos una amplia variedad de compuestos orgánicos de distintos grados de volatilidad y orígenes metabólicos, que en conjunto conforman el volatiloma humano. Este perfil químico está influenciado por factores genéticos, fisiológicos y ambientales, y puede proporcionar información relevante sobre el sexo, la edad, el estilo de vida, el estado de salud e incluso la presencia de enfermedades. Por ello, el análisis del volatiloma ha cobrado interés en ámbitos como la ciencia forense, el diagnóstico clínico, la medicina personalizada y la bioseguridad. La técnica de espacio de cabeza acoplada a cromatografía de gases y espectrometría de movilidad iónica (HS-GC-IMS) se presenta como una alternativa rápida, limpia y económica para el análisis de compuestos volátiles. No obstante, su aplicación al estudio del olor humano ha sido escasamente explorada. En este trabajo se optimizó un método basado en HS-GC-IMS mediante un diseño Box-Behnken y metodología de superficie de respuesta, utilizando como variable de respuesta la distancia euclídea entre los espectros suma de movilidad iónica (IMSS) de distintos individuos. Las condiciones óptimas para la generación del HS fueron 80 °C, 30 min y 750 rpm. Los espectros obtenidos fueron pretratados aplicando la primera derivada y el filtro de Savitzky-Golay. El modelo mostró un error absoluto de predicción del 5.03%, con una precisión instrumental intra-día de 6.03%, e inter-día de 6.18%. El método optimizado se aplicó posteriormente a un conjunto de muestras humanas, empleando algoritmos de aprendizaje automático para su clasificación en función de variables como el sexo, la edad y el estilo de vida.

P_62-CONDICIONES EXPERIMENTALES PARA LA APLICACIÓN EN ARQUEOMETRÍA DE LA ESPECTROSCOPIA DE FLUORESCENCIA DE RAYOS X

E. Fernández¹, M. Bethencourt², C. Moreno³

¹Centro de Arqueología Subacuática, Instituto Andaluz del Patrimonio Histórico, Junta de Andalucía, España.

²Departamento de Ciencias de los Materiales, Ingeniería Metalúrgica y Química Inorgánica, Universidad de Cádiz, España.

³Departamento de Química Analítica, Universidad de Cádiz, España.

carlos.moreno@uca.es

Keywords: fluorescencia de Rayos X, arqueometría, calibración

Abstract:

La química analítica se ha convertido en una ciencia relevante en estudios de arqueología. Numerosas técnicas instrumentales encuentran su campo de aplicación en el estudio y caracterización de objetos recuperados en yacimientos arqueológicos, pudiendo utilizarse para ello tanto técnicas espectroscópicas, como espectrometría de masas, activación neutrónica, diversas técnicas cromatográficas, etc. Dado el valor histórico e insustituible de muchas de las muestras a analizar, con frecuencia resulta indispensable disponer de técnicas no destructivas. Igualmente, resulta frecuente la necesidad de analizar objetos de gran tamaño o que por diferentes motivos no puedan ser desplazados al laboratorio. Estas razones han estimulado el uso de instrumentos portátiles de espectroscopía de fluorescencia de rayos X (pXRF) en arqueometría. Los pXRF disponibles en el mercado son suministrados con calibraciones previamente cargadas, siendo estas las únicas utilizables en análisis cuantitativos sencillos. Estas calibraciones son realizadas en fábrica utilizando patrones con una matriz concreta y en determinadas condiciones, por lo que no son aplicables con carácter general, pudiendo proporcionar resultados erróneos si se usan indebidamente. En este trabajo se han utilizado dos pXRF con hasta cuatro calibraciones diferentes preinstaladas. Se realizó un análisis comparativo usando muestras certificadas de referencia, así como diversos objetos procedentes de yacimientos arqueológicos, tanto metálicos como cerámicos. Se ha estudiado el efecto de diferentes variables instrumentales generalmente disponibles para los arqueólogos, como el tiempo de exposición y la colimación del haz de radiación. Con los resultados obtenidos se han optimizado las condiciones de medida para cada tipo de muestra, y se han propuesto estrategias de calibración para cada tipo de pXRF, en función de las calibraciones disponibles.

P_63-SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE BIODISOLVENTES SUPRAMOLECULARES OBTENIDOS A PARTIR DE LAURATO DE GLICERILO Y BENZOATO DE SODIO EN MEDIO ACUOSO

M.L. Lunar, S. Rubio

Departamento de Química Analítica. Instituto Químico para la Energía y el Medio Ambiente. Universidad de Córdoba.

qa1lurem@uco.es

Keywords: biodisolventes supramoleculares, laurato de glicerilo, benzoato de sodio.

Abstract:

El desarrollo de biodisolventes alternativos a los disolventes de origen petroquímico que sean más seguros y respetuosos con el medio ambiente se considera clave para el fomento de procesos químicos sostenibles. En este trabajo se describe la síntesis y caracterización de biodisolventes supramoleculares (bioSUPRAS) utilizando como compuesto anfifílico laurato de glicerilo, ampliamente empleado como ingrediente en formulaciones cosméticas. La síntesis se llevó a cabo en medio acuoso mediante la coacervación de laurato de glicerilo, inducida por de benzoato sódico, a temperaturas comprendidas entre 30 y 80 °C. Como fuente del anfifilo se utilizó el producto comercial Monomuls 90-L12. Se han construido los diagramas de fases para determinar la región en la que forman los bio-SUPRASs en función de la temperatura y se ha estudiado la estabilidad de este a temperatura ambiente. La proporción relativa de anfifilo, benzoato sódico y agua en el bioSUPRAS, y por tanto su capacidad de extracción, puede modelarse en función de la composición química de la disolución utilizada para el proceso de coacervación. Se han desarrollado ecuaciones que permiten predecir el volumen de bioSUPRAS obtenido en función de la concentración de anfifilo para cada una de las temperaturas estudiadas. Los bioSUPRASs desarrollados tienen una elevada capacidad para extraer compuestos en un amplio intervalo de polaridad, lo que, unido a su inocuidad, los convierten en excelentes candidatos para llevar a cabo extracciones ecológicas y sostenibles.

Agradecimientos: Los autores agradecen la ayuda PID2023-149488OB-I00 financiada por MCIN/AEI/10.13039/501100011033.

P_64-DETERMINACIÓN DE COMPUESTOS DE PREOCUPACIÓN EMERGENTE ASOCIADOS AL USO DE DISPOSITIVOS ELECTRÓNICOS MEDIANTE EL USO DE DISOLVENTES SUPRAMOLECULARES Y ESPECTROMETRÍA DE MASAS

A. Pulido-Zurera, N. Caballero-Casero, S. Rubio

Departamento de Química Analítica. Instituto Químico para la Energía y el Medioambiente, Universidad de Córdoba. 14014 Córdoba, España.

q92puzua@uco.es

Keywords: contaminantes de preocupación emergente, disolventes supramoleculares, exposición dérmica, dispositivos electrónicos, tratamiento de muestra.

Abstract:

Se ha demostrado que los compuestos de preocupación emergente (CECs), como retardantes de llama, ftalatos y bisfenoles, pueden migrar desde los dispositivos electrónicos y acumularse en el polvo doméstico, siendo la ingesta una vía de exposición relevante. Sin embargo, no se han considerado otras vías de exposición como la absorción dérmica por contacto directo con estos dispositivos. En este trabajo se ha desarrollado y validado un método analítico para la determinación de los CECs presentes en las palmas de las manos de trabajadores con uso continuado de dispositivos electrónicos. El objetivo es disponer de una herramienta que permita evaluar la absorción dérmica de CECs procedentes de esta fuente potencial de exposición. El procedimiento desarrollado utiliza gasas estériles impregnadas con 2-propanol para muestrear las palmas de las manos. Las gasas se dejan secar al aire y se pulverizan a partir de un molino de bolas. Posteriormente, 200 mg de las mismas se extraen con 300 µL de SUPRAS y el extracto se analiza directamente mediante LC-MS/MS. El SUPRAS empleado se sintetizó a partir de 1-decanol en mezclas de tetrahidrofurano y agua. Se obtuvieron recuperaciones cuantitativas (70–135 %) y una precisión intra-día del 10–19 % para los 21 CECs investigados. La validez del método se demostró mediante el análisis de las palmas de las manos de 45 voluntarios que utilizan dispositivos electrónicos durante su jornada de trabajo.

Agradecimientos: Los autores agradecen la financiación a MCIU/AEI/10.13039/501100011033/FEDER, UE (PID2023-149488OB-I00). NCC agradece el contrato RYC2023-045005-I, financiado por MICIU/AEI/10.13039/501100011033 y por el Fondo Social Europeo Plus (ESF+).

**P_65-EXTRACCIÓN ALL-IN-ONE CON DISOLVENTES
SUPRAMOLECULARES PARA LA DETERMINACIÓN SIMULTÁNEA
DE DOCE MICOTOXINAS REGULADAS EN CINCO CATEGORÍAS
DE ALIMENTOS SÓLIDOS Y LÍQUIDOS**

L. Muñiz-Bustamante, N. Caballero-Casero, S. Rubio

Departamento de Química Analítica, Instituto de Química para la Energía y el
Medioambiente, Universidad de Córdoba.

a42caasn@uco.es

Keywords: disolventes supramoleculares, micotoxinas, extracción all-in-one, seguridad alimentaria, LC-MS/MS

Abstract:

Las metodologías convencionales para la determinación de micotoxinas en alimentos suelen ser específicas para cada matriz y requieren múltiples etapas de extracción o limpieza, lo que incrementa el consumo de disolventes, el tiempo de análisis y los costes. En este contexto, se desarrolló un método de tratamiento de muestra basado en disolventes supramoleculares (SUPRAS) que permite una extracción all-in-one, integrando en una sola etapa la extracción y limpieza de las muestras. El método fue aplicado a la determinación simultánea de 12 micotoxinas reguladas en alimentos sólidos y líquidos pertenecientes a cinco categorías alimentarias distintas. La formación espontánea del SUPRAS a partir de 1-hexanol en una mezcla agua-tetrahidrofurano permitió un procedimiento rápido, sencillo y con un consumo mínimo de disolvente (<1 mL/muestra). La estrategia SUPRAS-LC-MS/MS permitió alcanzar recuperaciones del 69–115% y valores de precisión entre 3–20% para todas las matrices, cumpliendo los requisitos del Reglamento (UE) 2023/2782. La metodología all-in-one-SUPRAS-LC-MS/MS es una herramienta robusta, versátil y sostenible para el análisis rutinario de micotoxinas en una amplia variedad de alimentos, tanto sólidos como líquidos. Asimismo, simplifica el control de micotoxinas en alimentos en análisis de rutina, de los laboratorios de control de calidad y seguridad alimentaria.

Agradecimientos: Los autores agradecen la financiación a MCIU/AEI/10.13039/501100011033/FEDER, UE (PID2023-149488OB-I00).

NCC agradece el contrato RYC2023-045005-I, financiado por MICIU/AEI/10.13039/501100011033 y por el Fondo Social Europeo Plus (ESF+).

LMB agradece la ayuda PRE2021-096892, financiada por MICIU/AEI/10.13039/501100011033 y por el Fondo Social Europeo (FSE) "Invierte en tu futuro".

P_66-DESARROLLO Y CARACTERIZACIÓN DEL NUEVO MATERIAL SONOGEL-CARBONO CON MEDIADOR REDOX INTEGRADO Y REUTILIZABLE: SONOGEL-CARBONO/CARBON BLACK-AZUL DE PRUSIA

L. Cubillana-Aguilera, I. Castro-Betanzos, A. Sierra-Padilla, A.J. Sainz-Calvo, J.J. García-Guzmán, J.M. Palacios-Santander

Departamento de Química Analítica, Instituto de Investigación en Microscopía Electrónica y Materiales (IMEYMAT), Facultad de Ciencias, Campus de Excelencia Internacional del Mar (CEIMAR) Universidad de Cádiz, Campus de Puerto Real, 11510 Puerto Real.

laura.cubillana@uca.es

Keywords: Sonogel-Carbono, azul de Prusia, mediador redox, electroquímica, leche, electroanálisis

Abstract:

La llamada cuarta revolución industrial que estamos viviendo necesita avances significativos en el diseño de materiales para dar solución a los desafíos cada vez más complejos a los que la sociedad se enfrenta. En este sentido, los nanomateriales son un pilar fundamental para fabricar materiales más eficientes y personalizados. En este trabajo se desarrolló y caracterizó un nuevo material basado en Sonogel-Carbono/Carbon Black-Azul de Prusia con el fin de fabricar sensores basados en la aplicabilidad del Azul de Prusia como mediador redox, aprovechando al mismo tiempo la elevada área superficial del Carbon Black para incrementar el área catalítica activa. Mediante la determinación de H_2O_2 se estimó el rendimiento electroanalítico de los nuevos sensores. Del mismo modo, la calibración mediante técnicas cronoamperométricas de H_2O_2 se empleó para estudiar el rango lineal de respuesta a la concentración, sensibilidad, límite de detección (LOD), repetibilidad y reproducibilidad. Finalmente, se obtuvo una sensibilidad de $0,974 \pm 0,045 \text{ mA mM}^{-1} \text{ cm}^{-2}$ y un LOD de $43 \text{ }\mu\text{M}$, además de una excelente repetibilidad y reproducibilidad, demostrando la estabilidad del complejo metálico en la superficie y la fiabilidad del proceso de fabricación. Por otro lado, con el objetivo de estudiar la aplicabilidad analítica del sensor, se determinó el H_2O_2 en una muestra real de leche fortalecida, consiguiendo muy buenos valores de concentración próximos al valor teórico, lo que indica la posible aplicabilidad del sensor en campos como el control de calidad agroalimentario.

P_67-SÍNTESIS EN FASE SÓLIDA DE NANOESTRUCTURAS MAGNÉTICAS GRAFITIZADAS ASISTIDA POR LÁSER UV EN UN SOLO PASO COMO NUEVOS CATALIZADORES DE NANOENZIMAS

J.M. Palacios-Santander¹, A. Berni^{1,2}, J.J. García-Guzmán¹, A. Amine², L. Cubillana-Aguilera¹

¹Departamento de Química Analítica, Instituto de Investigación en Microscopía Electrónica y Materiales (IMEYMAT), Facultad de Ciencias, Campus de Excelencia Internacional del Mar (CEIMAR) Universidad de Cádiz, Campus de Puerto Real, 11510 Puerto Real.

²Laboratorio de Ingeniería de Procesos y Medioambiente. Facultad de Ciencias y Tecnologías. Universidad Hassan de Casablanca (Marruecos).

josem.palacios@uca.es

Keywords: nanoenzimas, síntesis asistida por láser, nanopartículas magnéticas, peroxidasa, compuestos fenólicos

Abstract:

El grafeno inducido por láser (LIG) es un nanomaterial revolucionario, tridimensional y altamente conductor, una plataforma ideal para albergar nanoestructuras funcionales y mejorar su actividad catalítica. En este trabajo, se ha realizado la grafitización en un solo paso de nanomateriales magnéticos (Fe_3O_4 -LIG, $\text{Ag-Fe}_3\text{O}_4$ -LIG y $\text{Cu-Fe}_3\text{O}_4$ -LIG). Este proceso genera una plataforma catalítica universal de nanoenzimas cuatro-en-uno con actividades de peroxidasa (POD), oxidasa (OXD), catalasa (CAT) y lacasa (LAC). El proceso impulsado por láser UV permite la grafitización, la oxidación de metales y la nanoestructuración simultáneas, ofreciéndose como una opción más económica, ecológica y escalable que otros protocolos de síntesis más complejos. Las nanoenzimas obtenidas se caracterizaron mediante microscopía electrónica de barrido/transmisión (STEM), difracción de rayos X (DRX) y espectroscopía Raman. Para evaluar y monitorear las actividades catalíticas del material de las nanoenzimas se emplearon métodos ópticos y electroquímicos. El material $\text{Ag-Fe}_3\text{O}_4$ -LIG mostró la mayor actividad oxidasa y peroxidasa, mientras que $\text{Cu-Fe}_3\text{O}_4$ -LIG exhibió una actividad catalasa mejorada y similar a lacasa. Para investigar más a fondo la actividad de lacasa, se emplearon compuestos fenólicos como dopamina, adrenalina y L-dopa. Como prueba de concepto, se detectó adrenalina utilizando un sensor LIG poroso 3D. El sensor mostró gran sensibilidad en la región catódica, con un rango lineal de 0,5 a 10 μM y un límite de detección de 0,23 μM . Dicha innovadora plataforma de nanoenzimas presenta amplias implicaciones en la biodetección, demostrando la solidez de la síntesis asistida por láser UV para futuras generaciones de materiales que imitan enzimas.

P_68-SENSOR ÓPTICO BASADO EN PUNTOS DE CARBONO PARA LA DETERMINACIÓN SIMULTÁNEA DE METALES MEDIANTE USO DE INTELIGENCIA ARTIFICIAL

S. San Martín Soto¹, M.G. López Aveiga¹, A. González Casado¹,
A.L. Medina Castillo^{1,2}, [A. Arroyo Cerezo](mailto:arroyoc@ugr.es)¹, M.D. Fernández Ramos¹

¹Departamento de Química Analítica, Universidad de Granada, Avda. Fuentenueva s/n,
18071 Granada.

²Instituto de Investigación Biosanitaria Ibs.GRANADA, 18014 Granada.

arroyoc@ugr.es

Keywords: carbon dots, matriz de excitación-emisión, quimiometría, sensor óptico, fluorescencia, iones metálicos

Abstract:

Los metales pesados son compuestos tóxicos que contaminan aire, agua y suelo a bajos niveles de concentración. Generalmente, estos metales no están presentes de forma individual, por lo que su determinación requiere de complejos y costosos métodos analíticos. Actualmente hay limitados trabajos de investigación con sensores capaces de identificar múltiples metales simultáneamente, por lo que desarrollar herramientas que lo permitan resulta de gran interés en el ámbito ambiental. Los carbon dots (CDs) son un tipo de nanopuntos de carbono fluorescentes de baja toxicidad con propiedades ópticas ajustables, lo que los hace aptos para la detección basada en fluorescencia. Los CDs pueden interactuar con metales pesados a través de diferentes mecanismos, siendo uno de ellos la atenuación de la fluorescencia, que permitiría detectar y cuantificar dichos metales. El objetivo de este trabajo es desarrollar un sensor óptico capaz de detectar simultáneamente diversos metales pesados. Para ello, se sintetizaron y caracterizaron CDs que presentaban diferente longitud de onda de emisión y fueron inmovilizados sobre un soporte de papel utilizando una matriz sol-gel como medio de fijación, permitiendo obtener de una forma sencilla fases sensoras fluorescentes de bajo coste. Se estudió la respuesta fluorescente de los CDs a diferentes metales pesados, y los resultados se evaluaron mediante análisis de datos multivariable utilizando herramientas de inteligencia artificial (quimiometría). Los resultados preliminares muestran diferencias entre la respuesta óptica de cada fase sensora según el tipo de CD y el metal presente, lo que sugiere su potencial aplicabilidad para la detección de metales de manera simultánea.

P_69-DESARROLLO DE UN MÉTODO PARA LA SEPARACIÓN Y DETERMINACIÓN DE COBRE EN MUESTRAS SALINAS MEDIANTE MEMBRANAS DE INCLUSIÓN POLIMÉRICAS

A. Perales-Pérez, J.J. Pinto, C. Moreno

Departamento de Química Analítica. Facultad de Ciencias del Mar y Ambientales.
Universidad de Cádiz.

juanjose.pinto@uca.es

Keywords: membrana de inclusión polimérica, FIA, cobre, separación

Abstract:

En este trabajo se presenta el desarrollo de un sistema que permite la separación y determinación on-line de cobre empleando una membrana de inclusión polimérica. En primer lugar, se ha estudiado y optimizado la influencia de la composición y espesor de ésta, variando la concentración de polímero base, agente extractante y plastificante, así como el volumen total empleado para su preparación. Las mejores condiciones para el transporte del ión metálico se obtuvieron empleando las membranas más delgadas, con una composición de 30% (p/p) de triacetato de celulosa (CTA) como polímero base, 60% (p/p) de ácido di-2-etilhexil fosfórico (DEHPA) como extractante y 10% (p/p) de tris(2-etilhexil fosfato) (TEHP) como plastificante. Posteriormente se estudiaron las variables fisicoquímicas que afectan al transporte de cobre a través de la membrana, obteniéndose los mejores resultados cuando la muestra se encuentra a pH 5 y se utiliza una disolución de HNO_3 0,1M como fase receptora. Para la determinación on-line de cobre se utilizó un sistema de análisis por inyección en flujo (FIA) en el que se empleó una disolución $6,67 \cdot 10^{-5}$ M de 4-(2-piridilazo) resorcinol (PAR) como reactivo colorimétrico. La disolución receptora se inyectaba directamente a intervalos regulares de tiempo. El efecto del tiempo de extracción sobre el porcentaje de separación de cobre se ajustó a una ecuación matemática de segundo orden, lo que permite la aplicación del método a muestras con diferentes concentraciones de cobre, así como a diferentes tiempos de extracción.

P_70-POTENCIAL BIOACTIVO DE EXTRACTOS DE HOJAS DE OLIVO OBTENIDOS CON NADES: UN ENFOQUE HACIA LA ECONOMÍA CIRCULAR.

C. Betanzos, M.A. Fernández-Recamales, R. González-Domínguez, A. Sayago

Laboratorio Agroalimentario. Facultad de Ciencias Experimentales, Universidad de Huelva.

ana.sayago@dqcm.uhu.es

Keywords: disolventes eutécticos profundos naturales (NADES), extractos, compuestos bioactivos, polifenoles, flavonoides, capacidad antioxidante, ensayo antimicrobiano

Abstract:

Los residuos de la industria olivarera, como las hojas de olivo, constituyen una fuente rica en compuestos bioactivos con un alto potencial de revalorización. Este trabajo se centra en el desarrollo de un método de extracción sostenible, basado en el uso de disolventes eutécticos profundos naturales (NADES), para obtener extractos de hojas de olivo enriquecidos en compuestos con actividad antioxidante y antimicrobiana. Se sintetizaron y evaluaron diferentes NADES para optimizar el proceso de extracción. Los extractos obtenidos fueron caracterizados mediante la determinación del contenido en polifenoles totales y flavonoides, así como su capacidad antioxidante. La identificación de los fenoles extraídos se realizó por HPLC-DAD. La actividad antimicrobiana se evaluó frente a un panel de bacterias Gram-positivas (*Staphylococcus aureus*, *Staphylococcus saprophyticus*, *Enterococcus faecalis*) y Gram-negativas (*Escherichia coli*, *Klebsiella pneumoniae*, *Proteus mirabilis*, *Klebsiella aerogenes*). Los resultados indicaron que el NADES compuesto por ácido málico, prolina y agua (MA:Pro:W; 1:1:9) fue el más eficiente para la extracción de compuestos fenólicos, presentando la mayor actividad antioxidante. Sin embargo, el sistema formado por cloruro de colina y ácido oxálico (ChCl:OA; 1:1) exhibió una actividad antimicrobiana notablemente superior, demostrada por mayores halos de inhibición. Estos hallazgos subrayan la importancia de la selección del NADES en función de la aplicación final deseada y evidencian el potencial de los NADES como extractantes verdes para la valorización de subproductos agroindustriales, con aplicaciones prometedoras en los sectores farmacéutico, alimentario y cosmético.

P_71-ANÁLISIS DE Cd(II) MEDIANTE UN SENSOR ÓPTICO BASADO EN UNA BASE DE SCHIFF INMOVILIZADA EN UNA MEMBRANA DE INCLUSIÓN POLIMÉRICA: APLICACIONES EN MUESTRAS DE AGUA Y PINTURAS ARTÍSTICAS

M. Díaz-de-Alba, M.D. Granado-Castro, L. Sánchez-Ponce, M.J.

Casanueva-Marengo, M.D. Galindo-Riaño

Departamento Química Analítica, Instituto de Biomoléculas (INBIO), Facultad de Ciencias, CEI-MAR, Campus Río San Pedro, Universidad de Cádiz, ES-11510, Puerto Real, España.

margarita.diaz@uca.es

Keywords: membrana de inclusión polimérica, sensor óptico, análisis de Cd, 2-acetilpiridina benzoilhidrazona, base de Schiff, diseño factorial

Abstract:

La inmovilización de reactivos complejantes de metales en membranas de inclusión polimérica (PIMs), cuyas propiedades físico-químicas permitan la determinación mediante medidas espectroscópicas de los complejos coloreados formados, ha demostrado ser eficiente en el desarrollo de sensores ópticos. Así, se ha diseñado un sensor óptico desechable basado en una membrana de inclusión polimérica (PIM) para determinar iones de Cd(II) en disoluciones acuosas. El reactivo complejante seleccionado es la base de Schiff 2-acetilpiridina benzoilhidrazona (2-APBH), que, inmovilizada en la membrana polimérica, se comporta como molécula sensora. Las cantidades de los componentes de la PIM se optimizaron mediante un diseño factorial fraccional 3^2 con dos puntos centrales y dos bloques, resultando en 11,1% de poli(cloruro de vinilo) (PVC) como polímero base, 13,1% de tributil fosfato (TBP) como plastificante, 0,09% de 2-APBH como reactivo y 75,7% de tetrahidrofurano (THF). El sensor mostró una buena respuesta lineal en el rango de $0,02 \text{ mg L}^{-1}$ (límite de detección) a 1 mg L^{-1} de Cd(II) bajo las siguientes condiciones experimentales: pH 9,5, 60 minutos de tiempo de exposición más 2 minutos de sonicación, y 10 minutos de estabilidad a corto plazo. La desviación estándar relativa del método se determinó en 4,04% para $0,4 \text{ mg L}^{-1}$ de Cd(II). Además, se estudió la selectividad del sensor, y se encontró que iones significativos como Al(III), Fe(II), Fe(III) o Pb(II) no interferían en su respuesta. El sensor óptico se aplicó con éxito para la determinación de Cd(II) en muestras de agua natural y pinturas artísticas.

Agradecimientos: Esta investigación fue financiada por la Consejería de Economía, Conocimiento, Empresas y Universidad de la Junta de Andalucía (España) (ayuda RNM-236) y por el Programa Fomento e Impulso de la Investigación y de la Transferencia de la Universidad de Cádiz (España) (PR2020-013) y por los siguientes programas del Plan Propio de estímulo y apoyo a la Investigación y Transferencia: a) UCA PR2022-017; b) INBIO 2023 y 2024; c) SC2022-002 y SC2024-0.

P_72-USO DE PRETRATAMIENTOS DE MUESTRA NO TÉRMICOS COMO ESTRATEGIA DE EXTRACCIÓN DE LOS COMPUESTOS FENÓLICOS DE LA HOJA DE MANGO

M.C. Razola-Díaz^{1,2}, M. Jiménez-Valera³, A. Ruiz-Bravo³, V. Verardo^{1,2},
A.M. Gómez Caravaca^{2,4}

¹Campus de Cartuja, Departamento de Nutrición y Bromatología, Universidad de Granada, 18071 Granada.

²Centro de Investigación Biomédica, Instituto de Nutrición y Tecnología de los Alimentos 'José Mataix', Universidad de Granada, Avda del Conocimiento 19, 18016 Granada.

³Campus de Cartuja, Departamento de Microbiología, Universidad de Granada, 18071 Granada.

⁴Departamento de Química Analítica, Facultad de Ciencias, Universidad de Granada, Avda. Fuentenueva s/n, 18071 Granada.

anagomez@ugr.es

Keywords: mango, compuestos fenólicos, PEF, fermentación

Abstract:

La hoja de mango (*Mangifera indica*) es una fuente rica en compuestos fenólicos con reconocidas propiedades bioactivas. Este estudio comparó la eficacia de tres estrategias de pretratamiento aplicadas antes de la extracción asistida por sonotrodo: campos eléctricos pulsados (PEF), fermentación ácido-láctica (con *Levilactobacillus plantarum* o *Lactiplantibacillus brevis*), y la combinación de PEF seguido de fermentación (PEF + fermentación). Tanto el PEF como la fermentación se realizaron bajo condiciones previamente optimizadas, y las cepas bacterianas fueron seleccionadas mediante un cribado inicial. Los compuestos fenólicos fueron identificados y cuantificados mediante HPLC-ESI-TOF-MS. Además, se evaluaron las actividades antioxidantes (ABTS, DPPH) y antidiabética (inhibición de α -amilasa). El tratamiento exclusivo con PEF resultó ser el más eficaz, con un incremento de hasta un 38 % en la extracción de compuestos fenólicos totales en comparación con fermentación sola o PEF + fermentación. Asimismo, este tratamiento mostró los mejores resultados en actividad antioxidante (ABTS: $222,16 \pm 11,09$; DPPH: $135,28 \pm 5,43$ mg TE/g d.w.) y en la inhibición de α -amilasa ($44,51 \pm 1,15$ %), en comparación con el resto de pre-tratamientos. En contraste, la fermentación redujo la concentración de compuestos fenólicos y la combinación PEF + fermentación no presentó ventajas adicionales frente a PEF solo. En conclusión, la aplicación de PEF como pretratamiento único es la estrategia más eficaz para maximizar la recuperación de compuestos fenólicos y potenciar las bioactividades en hoja de mango.

Agradecimientos: Proyecto PID2022-141237OB-I00 financiado por MICIU/AEI/10.13039/501100011033 y por FEDER, UE.

**P_73-EMPLEO DE UN DISEÑO DE EXPERIMENTOS
BOX-BEHNKEN PARA LA OPTIMIZACIÓN DE LA EXTRACCIÓN
DE LOS COMPUESTOS FENÓLICOS DE LA HOJA DE AGUACATE
MEDIANTE SONÓTRODO**

B. Martín-García¹, M.C. Razola-Díaz^{2,3}, M.J. Aznar-Ramos^{2,3}, V. Verardo^{2,3}, A.M. Gómez-Carvaca^{1,3}

¹Departamento de Química Analítica, Facultad de Ciencias, Universidad de Granada,
Avda. Fuentenueva s/n, 18071 Granada.

²Departamento de Nutrición y Bromatología, Campus de Cartuja, Universidad de
Granada, 18071 Granada.

³Centro de Investigación Biomédica, Instituto de Nutrición y Tecnología de los Alimentos
'José Mataix', Universidad de Granada, Avda del Conocimiento 19, 18016 Granada.
anagomez@ugr.es

Keywords: Hoja de aguacate, compuestos fenólicos, sonótrodo

Abstract:

La creciente producción mundial de aguacate genera residuos como las hojas, ricas en compuestos fenólicos con actividad antioxidante. Este estudio tuvo como objetivo la optimización de la extracción asistida por ultrasonidos de dichos compuestos a partir de hojas de aguacate utilizando un sonótrodo. Se utilizó un diseño Box-Behnken para optimizar la amplitud, el tiempo y la composición del disolvente, buscando maximizar el contenido fenólico y la actividad antioxidante in vitro en hojas de aguacate 'Hass'. Las condiciones óptimas (60 % de amplitud, 10 min, etanol/agua al 50 % (v/v)) incrementaron un 47–52 % el contenido fenólico y la actividad antioxidante (DPPH y FRAP) respecto al baño ultrasónico. Estas condiciones se aplicaron a las variedades 'Hass' y 'Fuerte', detectándose un total de 37 compuestos fenólicos y 14 proantocianidinas mediante HPLC-ESI-TOF-MS y HPLC-FLD. Se identificaron por primera vez en hojas de aguacate compuestos como ácido P_cumárico glucósido, octilgalato, ácido 3-feruloilquínico y kaempferol 3-O-(2"-O-hexosil)hexósido-7-O-ramnósido mediante HPLC-MS. 'Fuerte' mostró 1,7 veces más concentración de compuestos fenólicos, el doble de proantocianidinas y hasta 1,6 veces mayor actividad antioxidante que 'Hass'. Además, se observaron correlaciones muy fuertes y positivas entre las actividades antioxidantes y los flavonoides ($r > 0,971$) y las proantocianidinas ($r > 0,924$). Estos hallazgos destacan el papel fundamental de los flavonoides especialmente los derivados de quercetina así como los dímeros y trímeros de proantocianidinas, que se encuentran en mayor concentración en las hojas de aguacate y, probablemente, son responsables de sus fuertes propiedades antioxidantes, lo que indica su potencial para uso nutracéutico.

P_74-OPTIMIZACIÓN DE CAMPOS ELÉCTRICOS PULSADOS COMO PRETRATAMIENTO DE EXTRACCIÓN DE COMPUESTOS FENÓLICOS EN HOJA DE GUAYABA

M.J. Aznar-Ramos^{1,2}, M.C.Razola-Díaz^{1,2}, V. Verardo^{1,2},
A.M. Gómez-Caravaca^{2,3}

¹Departamento de Nutrición y Bromatología. Facultad de Farmacia. Universidad de Granada.

²Centro de Investigación Biomédica, Instituto de Nutrición y Tecnología de los Alimentos 'José Mataix', Universidad de Granada, Avda del Conocimiento 19, 18016 Granada.

³Departamento de Química Analítica. Facultad de Ciencias. Universidad de Granada.

mariajoseaznar@ugr.es

Keywords: actividad antioxidante, actividad antidiabética, subproducto, compuestos fenólicos, HPLC-ESI-qTOF-MS

Abstract:

El cultivo de guayaba genera subproductos como hojas, ricas en compuestos fenólicos con propiedades funcionales. El objetivo de este estudio fue optimizar un pretratamiento con campos eléctricos pulsados (PEF) en hoja de guayaba para mejorar, mediante ultrasonidos, la extracción de compuestos fenólicos y potenciar su actividad antioxidante y antidiabética. Se utilizó un diseño Box-Behnken con 27 experimentos, considerando como variables independientes el voltaje (1200–10000 V), la frecuencia (1–175 Hz), el ancho de pulso (5–175 μ s) y el número de pulsos (20–220). Las respuestas se midieron por el método de Folin-Ciocalteu, DPPH, ABTS e inhibición de la enzima α -amilasa. Las variables dependientes se ajustaron a un modelo polinómico de segundo orden, y se aplicó la metodología de superficie de respuesta para determinar las condiciones óptimas del pretratamiento. Estas fueron: 7800 V, 40 Hz, 150 μ s y 20 pulsos. Los extractos se analizaron por HPLC-ESI-qTOF-MS, identificando más de 50 compuestos fenólicos. En comparación con la muestra sin tratamiento, el extracto optimizado mostró incrementos del 12% al 42% en todas las variables. El modelo presentó un buen ajuste ($R^2 > 0,98$) y no tuvo falta significativa de ajuste ($p > 0,05$). Se observaron correlaciones significativas entre el contenido fenólico, la capacidad antioxidante y la actividad antidiabética. En conclusión, el pretratamiento a las condiciones óptimas de PEF consiguió una mejora del contenido fenólico, antioxidante y antidiabético. Estos extractos podrían tener una aplicación potencial en la industria alimentaria, farmacéutica y cosmética.

Agradecimientos: Proyecto PID2022-141237OB-I00 financiado por MICIU/AEI/10.13039/501100011033 y por FEDER, UE.

P_75-APLICACIÓN DE PRETRATAMIENTOS CON TECNOLOGÍAS EMERGENTES PARA MEJORAR LA EXTRACCIÓN DE COMPUESTOS FENÓLICOS CON ACTIVIDAD ANTIOXIDANTE Y ANTIDIABÉTICA EN HOJA DE GUAYABA

M.J. Aznar-Ramos^{1,2}, M.C. Razola-Díaz^{1,2}, M. Jiménez-Valera³, A. Ruiz-Bravo³, V. Verardo^{1,2}, A.M. Gómez-Caravaca^{2,4}

¹Departamento de Nutrición y Bromatología. Facultad de Farmacia. Universidad de Granada.

²Centro de Investigación Biomédica, Instituto de Nutrición y Tecnología de los Alimentos 'José Mataix', Universidad de Granada, Avda del Conocimiento 19, 18016 Granada.

³Departamento de Microbiología. Facultad de Farmacia. Universidad de Granada.

⁴Departamento de Química Analítica. Facultad de Ciencias. Universidad de Granada.

mariajoseaznar@ugr.es

Keywords: fermentación, bacterias ácido lácticas, campos eléctricos pulsados, compuestos fenólicos

Abstract:

La hoja de guayaba es un subproducto con alto potencial bioactivo por su contenido en compuestos fenólicos, responsables de su actividad antioxidante y antidiabética. Por ello, se evaluaron diferentes pretratamientos tecnológicos para mejorar la extracción de estos compuestos: campos eléctricos pulsados (PEF), fermentación con bacterias ácido lácticas, así como su combinación. El objetivo fue comparar la eficacia de los pretratamientos para obtener extractos ricos en compuestos fenólicos con gran capacidad antioxidante y antidiabética. El tratamiento con PEF se realizó a 7800 V, 40 Hz, 20 pulsos y 150 µs de ancho de pulso. La fermentación sumergida se llevó a cabo con *Pediococcus acidilactici* CECT 5765T durante 48 horas a 26 °C. La extracción se realizó con ultrasonidos y se compararon los extractos con un control sin pretratamiento. Las muestras se analizaron mediante HPLC-ESI-qTOF-MS, así como por métodos antioxidantes y antidiabéticos in vitro. El tratamiento con PEF aumentó la respuesta en todas las variables analizadas, con mejoras superiores al 12% en comparación con el control, siendo significativa la inhibición de α -amilasa. Sin embargo, los resultados mostraron que la fermentación redujo significativamente el contenido de compuestos fenólicos, mostrando una reducción de actividad antioxidante y antidiabética. Por otro lado, la combinación de ambas técnicas resultó efectiva para incrementar la actividad α -amilasa en un 5% en comparación con el control. Así, PEF podría ser un pretratamiento efectivo para potenciar la liberación de compuestos fenólicos, en la hoja de guayaba, contribuyendo a incrementar su funcionalidad antioxidante y antidiabética.

Agradecimientos: Proyecto PID2022-141237OB-I00 financiado por MICIU/AEI/10.13039/501100011033 y por FEDER, UE.

**P_76-ESTUDIO COMPARATIVO DEL PERFIL VOLÁTIL DE
MACROALGAS PROCEDENTES DEL MAR MEDITERRÁNEO Y EL
OCÉANO ATLÁNTICO: EFECTOS DEL FILO Y LA ESTACIÓN**

**H. Achahbar^{1,2}, R. Castro-Mejías¹, I. Hernández³, N. El Mtili⁴, A. Debdoubi²,
E. Durán-Guerrero¹**

¹Departamento de Química Analítica, Universidad de Cádiz (Cádiz, España).

²Departamento de Química, Universidad Abdelmalek Essaadi (Tetuán, Marruecos).

³Departamento de Biología, Universidad de Cádiz (Cádiz, España).

⁴Departamento de Biología, Universidad Abdelmalek Essaadi (Tetuán, Marruecos).

enrique.duranguerro@uca.es

Keywords: macroalgas, MHSSE, compuestos volátiles, caracterización, GC-MS

Abstract:

Las algas son cada vez más reconocidas como fuentes valiosas de compuestos orgánicos volátiles (COV) con aplicaciones prometedoras en las industrias farmacéutica, alimentaria y de fragancias. En este estudio se investigan los perfiles de COV de macroalgas recolectadas en el Mar Mediterráneo y el Océano Atlántico, enfatizando la variación taxonómica y estacional. Se recolectaron muestras de tres filos de algas (algas verdes, pardas y rojas) durante dos temporadas (temporada cálida y temporada fría) de dos ubicaciones marinas diferentes (Cádiz y Tetuán). Dichas muestras se analizaron mediante la técnica Multiple Head Space Sorptive Extraction (MHSSE) acoplada a cromatografía de gases con detección mediante espectrometría de masas (GC-MS). Este enfoque permitió la extracción e identificación eficiente de una amplia gama de compuestos volátiles, incluyendo diferentes alcoholes, aldehídos, cetonas y terpenos, entre otros. El análisis reveló diferencias en la composición de COV entre los filos de algas, los lugares de muestreo y los períodos de recolección, destacando la naturaleza dinámica de la expresión de metabolitos en las algas. Además, el análisis multivariante demostró que la variable más influyente en la diferenciación de las muestras fue el lugar de procedencia de las mismas. Varios compuestos identificados son conocidos por sus propiedades antioxidantes, antimicrobianas o aromáticas, lo que refuerza el potencial de las algas como fuentes de volátiles bioactivos. Este estudio demuestra la aplicabilidad de MHSSE-GC-MS como una herramienta poderosa para la caracterización detallada del perfil volátil en algas marinas. Los resultados mejoran la comprensión de la diversidad química de las algas y proporcionan una base para futuras investigaciones en la química de productos naturales marinos y para estudios metabolómicos.

P_77-DISEÑO Y OPTIMIZACIÓN DE UN SENSOR ÓPTICO DESECHABLE PARA LA DETERMINACIÓN DE ZINC

**M.J. Casanueva-Marengo, M. Díaz-de-Alba, A. Herrera-Armario,
M.D. Galindo-Riaño, M.D. Granado-Castro**

Departamento de Química Analítica, Instituto de Biomoléculas (INBIO), Facultad de Ciencias, CEI-MAR, Universidad de Cádiz, Campus Río San Pedro, ES-11510, Puerto Real, Cádiz, España.

mariajose.casanueva@uca.es

Keywords: sensor óptico, membrana de inclusión polimérica, determinación de Zn(II), matriz de PVC, optimización, 2-acetilpiridina benzoilhidrazona

Abstract:

Los sensores químicos ópticos (optodos) han demostrado ser muy efectivos en el análisis de diversas especies químicas. En este trabajo, se presenta el diseño y la aplicación de un sensor óptico desechable para la determinación de Zn(II). Este elemento es de gran interés dado su importante papel en procesos biológicos y fisiológicos, pudiendo llegar a ser perjudicial en dosis elevadas. Para ello, se inmovilizó el reactivo colorimétrico 2-acetilpiridina benzoilhidrazona (2-APBH) en una membrana de inclusión polimérica (PIM). Se evaluaron distintos componentes para la preparación de la membrana, seleccionando aquellos que ofrecían unas propiedades mecánicas, físicas y ópticas adecuadas. Para optimizar la composición de la membrana, se aplicó un diseño factorial 2^3 con tres réplicas del punto central. La composición óptima resultó ser 2,5 g de poli(cloruro de vinilo) (PVC), 4 mL de fosfato de tributilo (TBP) y 0,04 g de 2-APBH. El optodo desarrollado mostró un rango dinámico lineal desde 0,03 (límite de detección) a 1 mg L⁻¹ de Zn(II), con un tiempo de respuesta de 30 minutos en disolución acuosa a pH 6 y una desviación estándar relativa del 3,90% para 0,4 mg L⁻¹ de Zn(II). Además, el sensor demostró una buena selectividad para el Zn(II) frente a otros iones comunes, y fue validado con éxito usando un material de referencia certificado. Finalmente, se aplicó a una muestra de agua del grifo enriquecida, una bebida vitamínico-mineral, un suplemento alimenticio y productos para el cuidado de los pies.

Agradecimientos: Esta investigación fue financiada por la Consejería de Economía, Conocimiento, Empresas y Universidad de la Junta de Andalucía (España) (ayuda RNM-236), por el Programa Fomento e Impulso de la Investigación y de la Transferencia de la Universidad de Cádiz (España) (PR2018-070) y por los siguientes programas del Plan Propio de estímulo y apoyo a la Investigación y Transferencia: a) UCA PR2022-017; b) INBIO 2023 y 2024; c) SC2022-002 y SC2024-0.

P_78-USO Y OPTIMIZACIÓN DE DTD-GC-MS PARA EL ESTUDIO DE LOS COMPUESTOS VOLÁTILES APORTADOS POR LA MADERA Y SU TRATAMIENTO DE LAS BARRICAS SHERRY CASKS

M. Guerrero^{1,2}, M.J. Valcarcel³, M.V. García-Moreno¹, D.A. Guillén-Sánchez¹

¹Departamento de Química Analítica, Facultad de Ciencias, Instituto Investigación Vitivinícola y Agroalimentaria (IVAGRO), Universidad de Cádiz, Campus Universitario de Puerto Real, 11510 Puerto Real, Cádiz, Spain.

²Bodegas Fundador S.L.U., C/San Ildefonso, nº 3, 11403 Jerez de la Frontera, Cádiz, Spain.

³Oeno R&D FL, 11402 Jerez de la Frontera, Cádiz, Spain.

dominico.guillen@gm.uca.es

Keywords: volátiles, madera, Sherry cask, DTD-GC-MS

Abstract:

En el presente trabajo se muestra la optimización y puesta a punto de un método mediante Desorción Térmica Directa-Cromatografía de Gases-Espectrometría de Masas para la caracterización directa de compuestos volátiles en madera de barricas envinadas. El desarrollo de este método permite el análisis directo de la madera para caracterizar su perfil químico y aromático, lo cual es fundamental para entender qué compuestos se transfieren a las bebidas durante el envejecimiento. La optimización del método se realizó mediante diseños experimentales factoriales. Las condiciones óptimas que se establecieron consisten en calentar 10 mg de la muestra de madera, a 250 °C durante 7 minutos, desorber la muestra a la misma temperatura durante 6 minutos y transferir los compuestos a la columna cromatográfica. La principal ventaja de este método es que permite el análisis directo de la madera en estado sólido (polvo), sin necesidad de ningún tratamiento previo más allá de la molienda. Esto evita cualquier pérdida de información sobre los compuestos aromáticos que podría ocurrir con otras técnicas. Además, ha demostrado ser una herramienta efectiva para diferenciar entre distintos tipos de madera, como el roble (americano, francés, español), el cerezo y el castaño, y es aplicable tanto a chips de madera como a las duelas de las barricas. Se ha aplicado esta metodología al estudio de la composición volátil de la madera de barricas envinadas con distintos vinos de Jerez, revelando cómo el tipo y la duración del envinado afectan el perfil de compuestos volátiles en la madera.

P_79-INFLUENCIA DE LA SALINIDAD EN LA DETECCIÓN LUMINISCENTE DE ANTIBIÓTICOS DE USO EN ACUICULTURA

M.V. Zurita-Lozano, M.A. García-Granados, M.P. Aguilar-Caballos

Departamento de Química Analítica. Instituto Químico para la Energía y el Medio Ambiente (IQUEMA). Facultad de Ciencias. Universidad de Córdoba. 14014-Córdoba.

España.

qa1agcam@uco.es

Keywords: antibióticos, acuicultura, luminiscencia, tiempo resuelto, dry-reagent chemistry, sensores IoT

Abstract:

Las directrices estratégicas de la Unión Europea (UE) para lograr una acuicultura más sostenible y competitiva entre 2021 y 2030 [1] parten de las premisas del Pacto Verde Europeo y la estrategia «De la Granja a la Mesa». Los productos acuícolas de la UE solo representan el 10 % del consumo de la UE, por lo que existe un enorme potencial para un sector que contribuye a mitigar el cambio climático gracias a la descarbonización de la economía y la reducción de la contaminación. El uso de metodologías analíticas basadas en Internet de las cosas “IoT” minimiza el impacto ambiental derivado del control analítico del proceso productivo en granjas acuícolas, ya que los muestreos periódicos y el transporte de las muestras hasta el laboratorio se minimizan por la transferencia de datos mediante protocolos de Internet. Los desarrollos recientes para el seguimiento de los parámetros fisicoquímicos en aguas de granjas acuícolas implican el uso de sensores electroquímicos, tales como electrodos medidores de pH o de oxígeno disuelto. También se utilizan dispositivos para la medida de turbidez y sólidos disueltos o nitratos y nitritos, aunque el desarrollo de sensores ópticos se encuentra aún en sus inicios. El presente estudio incide en el estudio de la influencia del contenido salino en la señal luminiscente obtenida con fases sensoras en estado sólido en su reacción con antibióticos fluoroquinolona y tetraciclina, que originan señales luminiscentes. Los resultados obtenidos demuestran que es posible obtener señales medibles en presencia de concentraciones salinas similares a las propias de mares y océanos.

[1] Comunicación de la Comisión del Parlamento Europeo, el Consejo, El Comité Europeo Económico y Social de las Regiones. Recomendaciones estratégicas para una acuicultura más sostenible y competitiva en EU para el periodo 2021 a 2030, 12.05.2021.

Agradecimientos: "Proyecto (PCM_00121) financiado con recursos procedentes del Fondo de Recuperación «Next Generation EU» a través del Plan de Recuperación, Transformación y Resiliencia y cofinanciado por la Consejería de Universidad, Investigación e Innovación de la Administración de la Junta de Andalucía. Los puntos de vista y las opiniones expresadas son únicamente del autor o autores y no reflejan necesariamente los de la Unión Europea o la Comisión Europea. Ni la Unión Europea ni la Comisión Europea son responsables de ellas."

**P_80-DISEÑO Y DESARROLLO DE UN SENSOR
ELECTROQUÍMICO PARA LA MONITORIZACIÓN DE LITIO EN
MUESTRAS REALES**

**M.M. Lopez-Guerrero, L. Vazquez-Palomo, J. Gonzalez-Rodriguez,
E.I. Vereda-Alonso, R. Jiménez-Pérez**

Departamento de Química Analítica. Universidad de Málaga/Instituto Universitario de
Materiales y Nanotecnología (IMANA).

ebeca.jimenez@uma.es

Keywords: litio, sensor, muestras biológicas, espinelas, electroquímica, óxido de grafeno

Abstract:

El litio se considera uno de los tratamientos principales para pacientes con trastorno bipolar. A pesar de su eficacia, el uso de litio requiere una monitorización continuada debido a su estrecho margen terapéutico, ya que tanto una deficiencia como una sobredosis del mismo pueden causar efectos adversos graves. En este contexto, existe una necesidad urgente de desarrollar métodos de detección rápidos, simples y no invasivos que faciliten el monitoreo en tiempo real de los niveles de litio. En este trabajo, se desarrolló un sensor de litio basado en la espinela LiMn_2O_4 , óxido de grafeno y pirrol, depositados electroquímicamente sobre electrodos desechables (SPCEs) para el análisis de litio en fluidos biológicos. El sensor propuesto presentó una excelente actividad electrocatalítica hacia el primer proceso de litiación, lo que permitió su detección amperométrica a -0,25 V. La capacidad electrocatalítica del sensor se evaluó inicialmente en una disolución acuosa tamponada, obteniendo un límite de detección de 76,2 nM. Posteriormente, el sensor fue aplicado en muestras biológicas, incluyendo orina, saliva y sangre, obteniéndose resultados muy similares a los obtenidos en tampón fosfato. Los límites de detección de Li^+ en estas matrices biológicas oscilaron entre 141,1 nM y 162,2 nM, valores significativamente inferiores al rango terapéutico del litio, por lo que estos electrodos representan una plataforma prometedora para el desarrollo de sensores electroquímicos de Li^+ sensibles, rápidos, robustos y económicos, minimizando las molestias de los procedimientos invasivos.

Agradecimientos: Ministerio PID2021-126794OB; Junta de Andalucía FQM-117-G-FEDER; Plan Propio UMA

P_81-INFLUENCIA DEL MÉTODO DE EXTRACCIÓN EN LA COMPOSICIÓN FENÓLICA Y EL PERFIL ELECTROQUÍMICO DE ORUJOS DE VINIFICACIÓN

**M. Valencia Pérez¹, B. Baca-Bocanegra¹, D. Hernanz¹, F.J. Heredia²,
M.J. Jara-Palacios¹**

¹Departamento de Química Analítica. Universidad de Sevilla.

²Área de Nutrición y Bromatología. Universidad de Sevilla.

mjara@us.es

Keywords: subproductos de vinificación, orujos, voltamperometría cíclica, extracción

Abstract:

El orujo de uva destaca entre los subproductos de vinificación por su volumen y su riqueza en compuestos bioactivos. En este trabajo se han obtenido extractos fenólicos a partir de dos tipos de orujo de uva, blanco y tinto, mediante tres métodos de extracción: agitación mecánica, ultrasonidos y microondas. Se ha evaluado el rendimiento de extracción mediante el contenido en fenoles totales determinado por el método de Folin-Ciocalteu y el contenido en compuestos fenólicos individuales por UHPLC-DAD. Además, se ha aplicado la voltamperometría cíclica para evaluar el perfil electroquímico. Teniendo en cuenta el contenido en fenoles totales, los resultados obtenidos con la extracción convencional y ultrasonidos fueron diferentes estadísticamente ($p < 0,05$) con respecto a microondas. En cuanto a los compuestos fenólicos individuales, el rendimiento de extracción fue muy diferente para orujos blancos y orujos tintos. En la extracción de orujos blancos, el método con ultrasonidos presentó mejores resultados para la extracción de flavanoles, y el convencional y con microondas para la extracción de flavonoles. En la extracción de orujos tintos, el método con microondas mostró los valores más elevados para casi la totalidad de compuestos fenólicos. En un análisis discriminante realizado con los datos químicos y electroquímicos se obtuvieron dos funciones discriminantes con un nivel de clasificación del 100 %, permitiendo clasificar las muestras según el método de extracción aplicado.

P_82-ALGAS DE ARRIBAZÓN: DE PROBLEMA A OPORTUNIDAD

B. Cárdenas, R. González-Domínguez, A. Sayago, A. Fernández-Recamales

Laboratorio Agroalimentario. Facultad de Ciencias Experimentales. Universidad de Huelva.

recamale@uhu.es

Keywords: NADES, *Rugulopteryx okamurae*, valorización, compuestos bioactivos, Química Verde, macroalgas.

Abstract:

Las arribazones masivas de macroalgas en la costa de Huelva, en particular de la especie invasora *Rugulopteryx okamurae*, constituyen un problema ambiental y una oportunidad para su valorización como fuente de compuestos bioactivos. En este trabajo se evaluó la aplicación de disolventes eutécticos naturales profundos (NADES) como alternativa verde para la extracción de polifenoles, clorofilas y carotenoides.

Tras un cribado de setenta y tres combinaciones, se seleccionaron tres de las dieciocho que resultaron estables, basadas en cloruro de colina (con ácido láctico y urea) para la extracción asistida por ultrasonidos (UAE) a partir de *R. okamurae* y de la especie autóctona *Ulva intestinalis*. La eficiencia de los NADES se comparó con disolventes convencionales (metanol y acetona).

Los resultados mostraron que la combinación cloruro de colina:ácido láctico (1:1) iguala o supera al metanol en la recuperación de polifenoles y en la actividad antioxidante, especialmente en *Ulva*. Para los carotenoides, los NADES también ofrecieron buenos rendimientos, mientras que la extracción de clorofilas fue más eficiente con disolventes orgánicos convencionales. Los resultados para polifenoles totales sugieren la necesidad de explorar nuevos NADES o modificar las condiciones. La optimización del proceso mediante un diseño superficie de respuesta (Box-Behnken), permitió definir condiciones que maximizan la eficiencia con menor impacto ambiental. Este estudio demuestra el potencial de los NADES como extractantes sostenibles para la valorización de biomasa de macroalgas.

**P_83-NUEVO MÉTODO DE EXTRACCIÓN DE COMPUESTOS
VOLÁTILES EN MUESTRAS DE MADERA DE USO ENOLÓGICO,
BASADO EN EL USO DE COLUMNAS VIGREAU**

D. Cantillo, D.A. Guillén-Sánchez, M.V. García-Moreno

Departamento de Química Analítica, Facultad de Ciencias,
Instituto de Investigación Vitivinícola y Agroalimentaria (IVAGRO),
Universidad de Cádiz, Campus Universitario de Puerto Real, 11510 Puerto Real, Cádiz.
valme.garcia@uca.es

Keywords: composición volátil, madera, diseño de experimento, SBSE-GC-MS, columna vigreux

Abstract:

Se ha puesto a punto un nuevo método de extracción de compuestos volátiles en muestras de madera de uso enológico basado en una extracción sólido-líquido con agitación, utilizando disolvente hidroalcohólico mediante el uso de una columna vigreux para impedir la pérdida de componentes volátiles durante el proceso de extracción (método con columna). Las muestras utilizadas han sido virutas comerciales de madera de roble americano de tostado medio. La composición volátil de los extractos se analizó mediante cromatografía de gases con extracción previa por adsorción con barra de agitación (SBSE-GC-MS). La optimización de las variables del nuevo método se llevó a cabo mediante un primer estudio de cribado de variables utilizando el método de Youden-Steiner, y posteriormente un método de optimización mediante un diseño factorial fraccionado 2³-1. Como variable respuesta se ha considerado el número de compuestos volátiles obtenidos en el análisis por SBSE-GC-MS. Con las variables optimizadas se ha procedido a la determinación de la precisión mediante el estudio de la repetibilidad y reproducibilidad, y a la comparación con los resultados obtenidos por otros métodos de extracción sólido-líquido con disolventes hidroalcohólicos utilizados en la bibliografía (método estático, Velickovic, Velickovic modificado). Por último, se procedió a la caracterización de la componente volátil de otras virutas de maderas de uso enológico, concretamente de roble francés (*Quercus petraea*) y de roble español (*Quercus pyrenaica*), ambas de tostado medio.

P_84-APLICACIÓN DE TÉCNICAS EXTRACTIVAS PARA LA OBTENCIÓN DE COMPUESTOS BIOACTIVOS A PARTIR DE HONGOS

G. Fernández Barbero, E. Espada Bellido, M. Ferreiro González,

M. Palma Lovillo, E. Ortega Caneda, A. Ruiz López, C. Carrera Fernández

Departamento de Química Analítica, Facultad de Ciencias, Instituto de Investigación Vitivinícola y Agroalimentaria (IVAGRO), Universidad de Cádiz, Campus de Excelencia Internacional Agroalimentario (ceiA3), 11510 Puerto Real, Cádiz.

gerardo.fernandez@uca.es

Keywords: compuestos bioactivos, setas, ultrasonidos, microondas, técnicas de extracción

Abstract:

Los compuestos bioactivos presentes en los hongos han despertado un creciente interés debido a sus propiedades beneficiosas para la salud, como efectos antioxidantes, antiinflamatorios y neuroprotectores. Este estudio se centró en optimizar técnicas de extracción sostenibles, como la extracción asistida por ultrasonido (UAE) y por microondas (MAE), con el objetivo de obtener compuestos como triptófano, compuestos fenólicos y alcaloides en diversas especies fúngicas. La UAE fue optimizada mediante un diseño Box-Behnken, evaluando variables como la proporción de metanol, temperatura, amplitud ultrasónica y relación muestra-disolvente. Se cuantificaron los compuestos fenólicos totales (método Folin-Ciocalteu) y se evaluó la capacidad antioxidante (ensayos DPPH y ABTS). Las condiciones óptimas permitieron una extracción eficaz de compuestos antioxidantes y fenólicos, con diferencias menores al 5% respecto a extracciones individuales. Además, se determinó el contenido de triptófano en 26 muestras silvestres de los géneros *Lactarius* y *Boletus* mediante UHPLC-DAD-FLR, con concentraciones de 0.042 a 0.742 mg/g. El análisis de conglomerados reveló asociaciones entre los niveles de triptófano, la especie y sus propiedades bioactivas. Por otro lado, se aplicaron UAE y MAE para extraer psilocibina y psilocina de *Psilocybe cubensis*, logrando condiciones óptimas (50 °C, 60% de metanol, 0.6 g:10 mL) en solo 5 minutos. Aunque UAE mostró mayores rendimientos, también favoreció una mayor conversión de psilocibina a psilocina. Estos resultados subrayan el potencial de los hongos como fuente sostenible de compuestos naturales de alto valor, con aplicaciones prometedoras en los sectores alimentario, farmacéutico y cosmético.

P_85-COMPARACIÓN DE MÉTODOS BASADOS EN SBSE-GC-MS Y HS-SPME-GC-MS PARA LA DETERMINACIÓN DE ALCOHOLES SUPERIORES EN VINOS Y DERIVADOS

I. Punta¹, J.A. Rubio¹, A. Ruiz-Rodríguez^{1,2}, E. Durán², M. Palma-Lovillo^{1,2}

¹Instituto de Investigación Vitivinícola y Agroalimentaria, Universidad a Cádiz

²Departamento Química Analítica. Universidad de Cádiz.

ana.ruiz@uca.es

Keywords: SBSE-GC-MS, HS-SPME-GC-MS, alcoholes superiores, vinos blancos, vinos tintos, vinos Sherry

Abstract:

En este estudio se comparan dos métodos analíticos desarrollados para la determinación de alcoholes superiores en vinos y productos derivados, ambos basados en cromatografía de gases acoplada a espectrometría de masas (GC-MS), pero utilizando procedimientos distintos de preparación de muestra: Stir Bar Sorptive Extraction (SBSE) y Headspace Solid Phase Microextraction (HS-SPME). La evaluación comparativa incluyó el análisis de los parámetros como repetibilidad, rangos lineales, niveles de recuperación y sensibilidad.

Los resultados mostraron diferencias significativas en la sensibilidad, siendo el método basado en SBSE-GC-MS generalmente más sensible para la mayoría de los alcoholes evaluados, mientras que el método HS-SPME-GC-MS ofreció mayor simplicidad operativa y tiempos de extracción más cortos. Ambos métodos se aplicaron a una amplia variedad de matrices vínicas, incluyendo vinos blancos, tintos, finos, amontillados, olorosos y Pedro Ximénez. Esta diversidad permitió evaluar el comportamiento de cada método frente a diferentes niveles de complejidad de matriz. La comparación crítica de los resultados permite establecer recomendaciones prácticas sobre la elección del método más adecuado según el tipo de vino y los requerimientos analíticos específicos.

**P_86-DESARROLLO Y VALIDACIÓN DE UN MÉTODO
HILIC-MS/MS PARA LA DETERMINACIÓN DE PESTICIDAS
POLARES Y SUS PRODUCTOS DE TRANSFORMACIÓN EN
SUELOS DE OLIVAR**

**A. Fernández-García^{1,2}, A.J. Rascón^{1,2}, A. B. Martínez-Piernas^{1,2},
D. Moreno-González^{1,2}, B. Gilbert-López^{1,2}, J.F. García-Reyes^{1,2}**

¹Grupo de Investigación Química Analítica. Departamento de Química Física y Analítica.
Universidad de Jaén.

²Instituto Universitario de Investigación en Olivar y Aceites de Oliva. Universidad de Jaén.

fernandez@ujaen.es

Keywords: glifosato, pesticidas polares, suelo, HILIC-MS/MS.

Abstract:

El glifosato es el herbicida más utilizado a nivel mundial. Desde su comercialización en los años setenta, su uso ha crecido de forma exponencial hasta nuestros días. En la actualidad ha generado bastante controversia debido a que diferentes estudios lo han relacionado con efectos toxicológicos sobre la salud humana y sobre especies no-objetivo. Aunque este herbicida es aplicado directamente sobre las malas hierbas, una parte considerable termina introduciéndose en el suelo donde puede degradarse en productos de transformación como el AMPA, que es mucho más persistente que el glifosato. Esta problemática hace necesario el desarrollo de métodos analíticos para su monitoreo. Sin embargo, a pesar de su uso generalizado, es uno de los plaguicidas más difíciles de detectar debido a su alta polaridad y carácter iónico, su baja volatilidad y peso molecular, así como sus propiedades quelantes. Todas estas características hacen que sea difícil de extraer y analizar mediante métodos convencionales multi-residuo. En los últimos años, la cromatografía líquida de interacción hidrofílica acoplada a la espectrometría de masas en tándem (HILIC-MS/MS) ha resultado ser una técnica adecuada para la determinación de analitos polares. En este trabajo se ha desarrollado y validado un método analítico para la determinación de siete compuestos polares en suelos de olivares sometidos a diferentes manejos del suelo, incluyendo manejo tradicional, alta densidad y orgánico, en diferentes países de la cuenca mediterránea. El método propuesto permitió determinar la presencia de glifosato y los productos de transformación AMPA y N-acetyl-AMPA en los diferentes suelos estudiados.

P_87-APLICACIÓN DE LA FUENTE DE PLASMA POR MICROTUBO FLEXIBLE (F μ TP) PARA LA IONIZACIÓN EFICIENTE DE CONTAMINANTES ORGÁNICOS MEDIANTE LC-MS

I. Caño-Carrillo¹, D. Moreno-González¹, B. Gilbert-López¹, J. Franzke²,
J.F. García-Reyes¹

¹Grupo de Investigación de Química Analítica (FQM-323), Departamento de Química Física y Analítica, Universidad de Jaén, Campus Las Lagunillas, 23071, Jaén, España.

²Instituto Leibniz de Ciencias Analíticas (ISAS e.V), 44123, Dortmund, Alemania.

jfgreyes@ujaen.es

Keywords: ionización por descarga de barrera dieléctrica, F μ TP, contaminantes orgánicos, cromatografía líquida, espectrometría de masas.

Abstract:

La ionización por descarga de barrera dieléctrica ha ganado especial interés debido a su versatilidad y amplia cobertura química. Aunque la ionización por electrospray (ESI) es la fuente comúnmente utilizada para el análisis de contaminantes orgánicos mediante cromatografía líquida acoplada a espectrometría de masas (LC-MS), ésta presenta varias limitaciones, como una eficiencia de ionización reducida para compuestos no polares o la aparición de efectos matriz. El presente estudio investiga el potencial del plasma de microtubo flexible (F μ TP) como una fuente de ionización alternativa para la determinación por LC-MS de plaguicidas multiclase, incluyendo tanto contaminantes compatibles con ESI como organoclorados. La eficacia de F μ TP se evaluó en términos de límites de cuantificación, reproducibilidad, linealidad y efecto matriz. Posteriormente, los resultados se compararon con los obtenidos utilizando tanto la ionización ESI como la ionización química a presión atmosférica (APCI). Además de demostrar una mayor sensibilidad para un número significativo de plaguicidas, F μ TP presentó varias ventajas sobre las fuentes de ionización convencionales, como la ausencia de aductos de sodio (típicos en ESI) o la reducción de los efectos matriz. Asimismo, se investigó la viabilidad de usar argón y una mezcla de argón-propano como gases de descarga alternativos al helio en el F μ TP, obteniendo resultados de sensibilidad comparables. Por lo tanto, esta fuente de ionización miniaturizada demuestra ser una herramienta poderosa para lograr una ionización eficiente de contaminantes orgánicos, ofreciendo la ventaja adicional de extender el espacio químico cubierto, lo que la hace útil tanto para aplicaciones de análisis dirigido como no dirigido.

P_88-MODELIZACIÓN DE LA ADSORCIÓN DE METALES SOBRE POLIPROPILENO RECICLADO EN COLUMNAS DE LECHO FIJO

R. Lombana^{1,2}, M. Peña-Icart², C. Moreno¹, C. Mendiguchía¹

¹Departamento de Química Analítica. Facultad de Ciencias del Mar y Ambientales.
Universidad de Cádiz, España.

²Instituto de Ciencias y Tecnología de los Materiales (IMRE), Universidad de La Habana,
Cuba.

carolina.mendiguchia@uca.es

Keywords: extracción en fase sólida, curva de ruptura, adsorción, metales, polipropileno

Abstract:

La extracción en fase sólida es una de las técnicas más utilizadas para eliminar metales en aguas contaminadas, siendo la búsqueda de adsorbentes de bajo coste y medioambientalmente sostenibles un objetivo prioritario. En este sentido, los plásticos reciclados han demostrado una buena capacidad para la adsorción de metales. Sin embargo, para aplicarlos a nivel industrial, es imprescindible el estudio de sistemas en continuo como las columnas de lecho fijo, donde el agua pasa continuamente a través de una columna rellena con el adsorbente. En este trabajo se estudió la adsorción de Pb^{2+} , Cu^{2+} y Co^{2+} en condiciones dinámicas de lecho fijo, utilizando columnas empaquetadas con partículas de polipropileno reciclado. Para ello, se evaluó el efecto de distintos parámetros sobre el volumen de ruptura y la capacidad de adsorción del material. En concreto, se estudió el efecto del caudal ($0,33\text{-}2\text{ mL}\cdot\text{min}^{-1}$), la altura del lecho adsorbente ($1\text{-}3\text{ cm}$) y la concentración inicial de metal ($1\text{-}3\text{ mg}\cdot\text{L}^{-1}$). Los resultados mostraron que el rendimiento de la columna mejora cuando disminuyen el caudal y la concentración inicial de metal, mientras que aumenta al aumentar la altura del lecho adsorbente. Además, se estudió el ajuste de los datos experimentales a diferentes modelos de adsorción, siendo el modelo de Thomas el que proporciona el mejor ajuste independientemente del metal. Esto indica que la adsorción es principalmente superficial y sigue una cinética de pseudo-segundo orden, presentando el adsorbente una distribución de sitios relativamente homogénea y sin presentar grandes gradientes de concentración ni zonas amplias de saturación progresiva.

P_89-INFOGEST 2.0 EN LA CÚRCUMA: BIODISPONIBILIDAD DE CURCUMINOIDES Y SESQUITERPENOS

M.J. Aliaño-González¹, J. Alcalá-Zamora¹, N. Chinchilla², M. Palma¹, C. Carrera¹

mariajose.aliano@uca.es

¹Departamento de Química Analítica, Facultad de Ciencias, Instituto de Investigación Vitivinícola y Agroalimentaria (IVAGRO), Universidad de Cádiz, Campus Agroalimentario de Excelencia Internacional (ceiA3), 11510 Puerto Real, España.

²Departamento de Química Orgánica, Facultad de Ciencias, Instituto de Biomoléculas (INBIO), Universidad de Cádiz, 11510 Puerto Real, España.

Keywords: cúrcuma, Infogest 2.0, curcuminoides, sesquiterpenos, biodisponibilidad

Abstract:

La cúrcuma (*Curcuma longa* L.) constituye una fuente destacada de compuestos bioactivos, principalmente curcuminoides y sesquiterpenos, cuyas propiedades antioxidantes, antiinflamatorias y neuroprotectoras han despertado gran interés en los ámbitos nutracéutico y farmacéutico. No obstante, la eficacia biológica de estos metabolitos depende en gran medida de su estabilidad y liberación durante la digestión gastrointestinal. El objetivo de este trabajo fue evaluar la bioaccesibilidad de curcuminoides y sesquiterpenos de cúrcuma mediante digestión *in vitro* estática según el protocolo INFOGEST 2.0, considerando además la influencia del pretratamiento (cúrcuma fresca vs liofilizada). Previamente, se optimizó un método de extracción asistida por ultrasonidos (UAE) empleando un diseño Box–Behnken y metodología de superficie de respuesta (BBD–RSM), que permitió maximizar el rendimiento de curcuminoides y sesquiterpenos bajo condiciones de 80% etanol, 55°C, 50% de amplitud y 0.6 s⁻¹ de ciclo durante 5 min. Los extractos fueron caracterizados por UHPLC-PDA-MS, identificándose tres curcuminoides (curcumina, demetoxicurcumina y bisdemetoxicurcumina) y dos sesquiterpenos (aryl-turmerona y β-turmerona). Tras la digestión *in vitro*, los sesquiterpenos presentaron una biodisponibilidad muy elevada (≈ 99%), mientras que los curcuminoides mostraron una liberación notablemente menor, especialmente en las muestras frescas. La capacidad antioxidante (ensayo DPPH) se mantuvo más estable en las fracciones derivadas de la cúrcuma liofilizada, en concordancia con los resultados de bioaccesibilidad. Estos hallazgos confirman el impacto de la matriz y el procesado previo sobre la liberación de metabolitos bioactivos, y aportan evidencias relevantes para el diseño de alimentos funcionales y suplementos que potencien la eficacia terapéutica de la cúrcuma.

