



GRASEQA 2022

LIBRO DE RESÚMENES



Grupo Regional Andaluz
Sociedad Española de Química Analítica



XVII Reunión del Grupo Regional Andaluz de la Sociedad Española de Química Analítica



Libro de resúmenes



Sevilla, 6 y 7 de octubre de 2022



El Comité Organizador de la XVII Reunión del Grupo Regional Andaluz de la Sociedad Española de Química Analítica (GRASEQA 2022) CERTIFICA que:

D/D^a Antonia Garrido Frenich

Ha asistido a esta reunión, celebrada los días 6 y 7 de octubre de 2022 en Sevilla (España).

En Sevilla a 7 de octubre de 2022

Profesor Dr. Fernando de Pablos Pons
Coordinador del GRASEQA 2022



El Comité Organizador de la XVII Reunión del Grupo Regional Andaluz de la Sociedad Española de Química Analítica (GRASEQA 2022) CERTIFICA que el trabajo:

SEGUIMIENTO DE LA FORMACIÓN DE METABOLITOS DE DIFENOCONAZOL TRAS LA APLICACIÓN DE UN PRODUCTO FITOSANITARIO EN SUELO MEDIANTE UHPLC-Q-EXACTIVE-ORBITRAP MS

M. Granados-Povedano, F.J. Arrebola, I. Domínguez, F.J. Egea González, A. Garrido Frenich.

Ha sido presentado a esta reunión en modalidad de **PÓSTER**.

En Sevilla a 7 de octubre de 2022

Profesor Dr. Fernando de Pablos Pons
Coordinador del GRASEQA 2022

P-072

**SEGUIMIENTO DE LA FORMACIÓN DE METABOLITOS DE
DIFENOCONAZOL TRAS LA APLICACIÓN DE UN PRODUCTO
FITOSANITARIO EN SUELO MEDIANTE UHPLC-Q-EXACTIVE-ORBITRAP
MS**

M. Granados-Povedano, F.J. Arrebola, I. Domínguez F.J. Egea González, A. Garrido Frenich

Departamento de Química y Física, Centro de Investigación en Agrosistemas Intensivos Mediterráneos y Biotecnología Agroalimentaria (CIAIMBITAL), Universidad de Almería, Campus de Excelencia Internacional Agroalimentario, ceiA3, Ctra. Sacramento s/n E-04120 Almería, España.

Difenoconazol es un fungicida sistémico de amplio espectro perteneciente a la familia de los triazoles y muy utilizado en diversos cultivos a pesar de tener una elevada persistencia. Existe la necesidad de identificar metabolitos y/o productos de transformación ya que estos son también tóxicos, en algunos casos, llegando a serlo incluso más que sus precursores [1].

Por ello, en este trabajo se estudió la formación de metabolitos en suelo de difenoconazol tras la aplicación de un producto fitosanitario (Lexor 25% difenoconazol, 0.5 L ha⁻¹). El seguimiento se llevó a cabo en condiciones de laboratorio durante siete meses debido a la alta persistencia de la sustancia activa. Aspectos como la concentración inicial en suelo fue también evaluada. Los suelos seleccionados para el estudio fueron de tipo arenoso y arcilloso, los más empleados en invernaderos en el sureste de España. El extracto final del suelo se obtuvo mediante una extracción asistida por ultrasonidos. Dichos extractos fueron analizados mediante cromatografía de líquidos de ultra alta eficacia (*Ultra-High Performance Liquid Chromatography, UHPLC*) acoplada a espectrometría de masas de alta resolución utilizando un analizador Q-Exactive-Orbitrap (*High Resolution Mass Spectrometry, HRMS*). Gracias al empleo de la HRMS se pudieron llevar a cabo análisis no dirigidos. Mediante el programa Xcalibur se realizó una búsqueda exhaustiva de compuestos previamente descritos en bibliografía, detectando en las muestras 5 metabolitos diferentes. Difenoconazol alcohol, uno de los metabolitos más característicos de difenoconazol, fue identificado en los suelos durante más de cien días demostrando la gran persistencia que comparte con su precursor. Este metabolito, confirmado con un patrón analítico comercial, presentó una variación en su concentración de entre 20 y 200 µg kg⁻¹. Los otros cuatro metabolitos se estima que variaron sus concentraciones entre 1 y 10 µg kg⁻¹. Por otra parte, mediante el programa MassChemSite se detectó la presencia de un metabolito desconocido (C₂₂H₂₂ClN₃O₅) no descrito previamente en bibliografía.

Agradecimientos: Los autores quieren mostrar su agradecimiento al Ministerio de Ciencia e Innovación de España y FEDER-EU (proyecto ref. PID2019-106201RB-I00) por el apoyo financiero.

Referencias:

[1] Pietrzak, D.; Kania, J.; Kmiecik, E.; Malina, G.; Wątor, K. *Chemosphere* 255 (2020) 255, 126981.