

## DETERMINACIÓN DE PRODUCTOS DE TRANSFORMACIÓN DE CLORANTRANILIPROL EN TOMATE MEDIANTE LC-Q-ORBITRAP-MS Y UNA ESTRATEGIA DE ANÁLISIS NO DIRIGIDO: ESTUDIOS DE CAMPO Y LABORATORIO

**A. J. Maldonado-Reina**

R. López-Ruiz, R. Romero-González, J. L. Martínez-Vidal y A. Garrido-Frenich

*Universidad de Almería, Facultad de Ciencias Experimentales, Departamento de Química y Física, Ctra. Sacramento s/n, CITE I, Laboratorio 1.15, 04120 La Cañada de San Urbano, Almería, [amr238@ual.es](mailto:amr238@ual.es)*

El clorantraniliprol, un insecticida sintético de tipo diamida antranílica desarrollado por DuPont, y se encuentra aprobado para su uso como sustancia activa en España por lo que se controla de forma rutinaria en los productos agrícolas comercializados. A pesar de ello, la monitorización de sus productos de transformación (TPs) sigue sin abordarse en la actualidad, incluso aún existiendo una elevada probabilidad de que estos se encuentren presentes en alimentos tratados con productos fitosanitarios (PPPs) de clorantraniliprol. Por lo tanto, es una tarea fundamental esclarecer los posibles TPs derivados de su degradación y monitorizarlos, ya sean aquellos descritos previamente en bibliografía, o los actualmente no elucidados, empleando para ello una estrategia de análisis no dirigido (detección de sospechosos y análisis de desconocidos).

Para ello, en este trabajo se han realizado estudios de campo (invernadero) y de laboratorio en muestras de tomate con el propósito de monitorizar la degradación del clorantraniliprol en TPs. El PPP Altacor® se diluyó y se aplicó a muestras de tomate a diferentes concentraciones. Los estudios de campo se llevaron a cabo a la dosis recomendada (7,53 g clorantraniliprol/L) durante 53 días. Por otra parte, se realizaron estudios de laboratorio a dosis recomendada y doble (15,05 g clorantraniliprol/L), durante 30 días a temperatura ambiente. Se aplicó un método de extracción sólido-líquido (SLE), con acetonitrilo (MeCN) como solvente de extracción (5 g de tomate por 5 mL de MeCN). La adquisición de datos se realizó mediante cromatografía de líquidos de ultra alto rendimiento acoplada a espectrometría de masas de alta resolución Q-Orbitrap (LC-Q-Orbitrap-MS), en los modos barrido completo (Full Scan MS) y adquisición independiente de datos (DIA). El procesado de datos se llevó a cabo mediante una estrategia de análisis no dirigido que combina la detección de sospechosos, empleando una base de datos elaborada a partir de una revisión bibliográfica, y análisis de desconocidos, mediante el software MassChemSite, que predice posibles TPs generados a partir de un compuesto padre.

En total se identificaron tentativamente 2 TPs de clorantraniliprol, y se llevó a cabo un procedimiento de semi-cuantificación mediante un patrón analítico de clorantraniliprol, debido a su similitud estructural. El TP IN-F6L99 estuvo presente en ambos estudios, y se detectó desde el día 0 (laboratorio) y el día 2 (invernadero), con una concentración máxima de 20,3 µg/kg, en estudios de laboratorio en el día 5. El TP C20 solo se detectó en estudios de laboratorio en el día 21, a una concentración de 0,22 µg/kg (probable TP intermediario). La toxicidad de los TPs identificados fue determinada mediante ToxTree, de acuerdo con las reglas de Cramer, que mostraron que IN-F6L99 podría clasificarse como un compuesto altamente tóxico (Clase III), del mismo modo que el clorantraniliprol. Esto nos permitió deducir que la toxicidad de los TPs puede ser similar a la del principio activo del que provienen y, por ende, no se debe subestimar su monitorización.

*Agradecimientos.* Los autores agradecen al Ministerio de Economía y Competitividad y a FEDER-EU (ref. PID2019-106201RB-I00) por el apoyo financiero. AJMR agradece al Ministerio de Universidades por el apoyo financiero (FPU, ref. FPU19/04260). RLR agradece a la Consejería de Transformación Económica, Industria, Conocimiento y Universidades por el apoyo financiero (Ayudas para Captación, Incorporación y Movilidad de Capital Humano de I+D+I, PAIDI 2020).