



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 Roberto Romero González

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:

DETERMINACIÓN DE NUEVOS COFORMULANTES EN PRODUCTOS FITOSANITARIOS MEDIANTE EL USO DE LC-Q-ORBITRAP-MS SIGUIENDO UNA ESTRATEGIA DE DETECCIÓN DE SOSPECHOSOS Y DE DESCONOCIDOS

Beatriz Martín García, Antonio Jesús Maldonado-Reina, José Luis Martínez Vidal, Antonia Garrido Frenich, Roberto Romero González.

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-059

DETERMINACIÓN DE NUEVOS COFORMULANTES EN PRODUCTOS FITOSANITARIOS MEDIANTE EL USO DE LC-Q-ORBITRAP-MS SIGUIENDO UNA ESTRATEGIA DE DETECCIÓN DE SOSPECHOSOS Y DE DESCONOCIDOS

Beatriz Martín García, Antonio Jesús Maldonado-Reina, José Luis Martínez Vidal, Antonia Garrido Frenich, Roberto Romero González

Grupo de investigación “Química Analítica de Contaminantes”, Departamento de Química y Física, Centro de Investigación en Agrosistemas Intensivos Mediterráneos y Biotecnología Agroalimentaria (CIAMBITAL), Universidad de Almería, Campus de Excelencia Internacional Agroalimentario, ceiA3, 04120, Almería, España.

El objetivo de este estudio fue la determinación de coformulantes en 21 productos fitosanitarios (PPP). Quince de ellos tenían como principio activo clorantraniliprol, difenoconazol, fluxapiroxad y azoxistrobin, mientras que los otros 6 estaban compuestos por tebuconazol, miclobutanilo, flutriafol, penconazol y fenbuconazol [1,2]. Estos fitosanitarios pertenecen a diferentes formulaciones como concentrados dispersables (DC), emulsionables en agua (EW), concentrados emulsionables (EC), concentrados en suspensión (SC) y gránulos dispersables en agua (WG). Las muestras se analizaron mediante cromatografía de líquidos acoplada a espectrometría de masas de alta resolución Q-Orbitrap (LC-Q-Orbitrap-MS), operando en modo Full Scan MS y con un sistema de adquisición dependiente de datos (ddMS²). Para ello, se ha desarrollado un método usando una fase estacionaria basada en un polímero de partícula macro porosa (polihidroximetacrilato) Shodex ODP2 HP-2D (150 mm x 2.0 mm x 5µm), comparando los resultados con los obtenidos por una fase estacionaria basada en sílice AcclaimTM surfactant plus (2.1 x 100 mm x 3 µm). Shodex ODP2 HP-2D proporcionó una identificación de un mayor número de coformulantes. A continuación, se llevó a cabo una comparación con un método previamente establecido para la determinación de coformulantes en dichos fitosanitarios objeto de estudio [1,2], el cuál utilizaba una columna Hypersil GOLDTM aQ C18 column (100 mm x 2.1 mm x 1.9 µm). Se han identificado tentativamente 72 coformulantes con la columna Shodex mediante el uso de una estrategia de tratamiento de datos que combina la detección de sospechosos y de desconocidos. Además, se utilizaron patrones que permitieron la confirmación de los más abundantes y se llevó a cabo la validación del método analítico, así como la cuantificación de dichos coformulantes. En la mayoría de los fitosanitarios los coformulantes más abundantes fueron los surfactantes aniónicos, como sulfonatos de alquilbenzeno de sodio y surfactantes de alquilamina y alquilamida.

Agradecimientos: Proyecto PID2019-106201RB-I00 financiado por MCIN/AEI/10.13039/501100011033/

Referencias:

- [1] M.E. Hergueta-Castillo, R. López-Ruiz, A.G. Frenich, R. Romero-González. *J. Sci. Food Agric.* (2022). doi: 10.1002/jsfa.11952
[2] A.J. Maldonado-Reina, R. López-Ruiz, R. Romero-González, J.L. Martínez Vidal, A. Garrido-Frenich. *J. Agric. Food Chem.* 70 (2022) 7302–7313. doi:10.1021/acs.jafc.2c01152.