

MEMORIA JUSTIFICATIVA PARA LA ADQUISICIÓN DE UN EQUIPO DE CROMATOGRAFIA LIQUIDA (HPLC) ACOPLADO A UN ESPECTROMETRO DE MASAS DE ALTA RESOLUCIÓN (HRMS) CON ANALIZADOR HÍBRIDO CUADRUPOLO-TIEMPO DE VUELO (QTOF) PARA EL LABORATORIO DE ANÁLISIS Y ENSAYOS DE LA FUNDACIÓN IMDEA AGUA

El laboratorio de IMDEA Agua pertenece a la Red de Laboratorios de la Comunidad de Madrid, registrado como Laboratorio de Análisis y Ensayos (número de registro RLAB-002) y constituye una parte fundamental del servicio común de investigación, dando soporte analítico a usuarios internos y externos. El ámbito de trabajo del laboratorio se centra en actividades de I+D, llevando a cabo desarrollos de nuevos métodos de análisis en función de los proyectos vigentes.

El servicio de análisis químicos del laboratorio, en concreto la Unidad de Espectrometría de Masas (MS), se encuentra en continuo proceso de adaptación a las necesidades internas y externas para ofrecer soporte analítico y de calidad. La oferta científica de esta Unidad está enfocada principalmente al análisis de microcontaminantes (pesticidas, fármacos, hormonas, estimulantes y productos de transformación, cianotoxinas). Algunas de sus aplicaciones son:

- (i) Análisis de sustancias prioritarias en el ámbito de políticas de aguas basadas en la directiva 2013/39/ UE.
- (ii) Identificación y cuantificación de contaminantes de preocupación emergente (CPE) y otros compuestos orgánicos (aditivos, surfactantes etc.)
- (iii) Cuantificación de cianotoxinas.

La Unidad de MS cuenta con instrumentación especializada de última generación: cromatógrafo de líquidos acoplado a espectrometría de masas de alta resolución con analizador de tiempo de vuelo (LC-QTOF₅₆₀₀); cromatógrafos de líquidos y cromatógrafo de gases acoplados a espectrómetro de masas triple cuadrupolo (LC-QqQ_{6495A}, LC-QqQ_{6495C} y GC-QqQ_{7890A}). En el año 2016, la empresa SCIEX, S.L, emitió un certificado informando de la obsolescencia del equipo QTOF₅₆₀₀, y como consecuencia, de la limitación de piezas de sustitución en los mantenimientos correctivos y preventivos. Además, el sistema de cromatografía LC 1200 series (Agilent Technologies) presenta limitaciones respecto a otros modelos más actuales, como el límite de presión (400 bar), la refrigeración de muestras (T^a ambiente) para asegurar condiciones de estabilidad, y la imposibilidad de control a través del software de adquisición.

La adquisición de un nuevo **cromatógrafo de líquidos de alta presión (LC)** acoplado a un **espectrómetro de masas de alta resolución (HRMS) con analizador híbrido cuadrupolo-tiempo de vuelo (QTOF)** es fundamental para que la Unidad de MS continúe trabajando y especializándose en investigaciones relevantes en todos los aspectos relacionados con el agua (presencia de contaminantes, tecnologías de tratamiento y gestión). El nuevo equipo LC-HRMS(QTOF) reemplazará al sistema LC 1200 series (Agilent Technologies)-QTOF₅₆₀₀ (SCIEX). Las prestaciones que ofrecerá la nueva instrumentación (mayor sensibilidad e identificación más precisa de moléculas

complejas) **permitirán reforzar y ampliar la oferta científica**, trabajando en nuevas metodologías enfocadas a la identificación de contaminantes desconocidos, productos de transformación (PT) y metabolitos mediante PCA, y cuantificación de CPE (aplicación para PFAS). Fomentará el desarrollo de nuevas metodologías, y contribuirá a **potenciar la investigación y las interacciones sinérgicas** entre IMDEA Agua y otros centros de investigación, Universidades y empresas.

En Alcalá de Henares a 17 de marzo de 2025



Fdo.: M. Isabel López Heras
Responsable Servicios de Análisis Químicos