

MEMÒRIA

de les
activitats exercides durant l'any

2005

per

L'INSTITUT UNIVERSITARI DE PLAGUICIDES I AIGÜES (IUPA)

Universitat Jaume I

Castelló de la Plana, abril de 2006

ÍNDEX

1.	INTRODUCCIÓ	2
2.	ESTRUCTURA DE L'INSTITUT	5
2.1.	PERSONAL DEL IUPA	5
2.2.	SECCIONS	6
2.3.	ÒRGAN DE REPRESENTACIÓ I GOVERN	8
2.4.	ÒRGAN DE GESTIÓ ORDINÀRIA	9
2.5.	DISTRIBUCIÓ DEL PERSONAL	10
3.	ACTIVITAT CIENTÍFICA	11
3.1.	ANTECEDENTS	11
3.1.1.	Projectes d'investigació	11
3.1.2.	Convenis/contractes de col·laboració	15
3.1.3.	Publicacions	20
3.1.4.	Tesis doctorals	24
3.1.5.	Línies d'investigació	26
3.2.	PROJECTES D'INVESTIGACIÓ EN 2005	41
3.3.	CONVENIS/CONTRACTES DE COL·LABORACIÓ EN 2005	55
3.4.	PUBLICACIONS EN 2005	57
3.5.	PARTICIPACIÓ EN CONGRESSOS EN 2005	59
4.	DOCÈNCIA	61
4.1.	DOCÈNCIA REGLADA	61
4.2.	DOCÈNCIA NO REGLADA	64
4.3.	PONÈNCIES/CONFERÈNCIES	65
5.	PREMIS I DISTINCIONS	66
6.	PRESSUPOST DEL IUPA EN 2005	67

1. Introducció

Les activitats investigadores en l'àmbit dels plaguicides en la Universitat Jaume I es remunten als començaments dels anys 80, en el si de l'antic Col·legi Universitari de Castelló (CUC) quan, en la secció de Químiques, el professor adjunt de Química Analítica, doctor Julio Medina, va posar en marxa el **Laboratori de Medi Ambient** i es van iniciar els primers treballs sobre aquest tema. Aquestes primeres activitats es van emmarcar en el Programa de Vigilància i Investigació de la Contaminació al mar Mediterrani (MEDPOL), dins del Programa de Nacions Unides per al Medi Ambient (PNUMA), en el qual havien de realitzar-se nombroses determinacions de residus de plaguicides organoclorats i bifenils policlorats (PCB) en mostres d'origen marí. El treball experimental va anar a càrrec del llavors professor ajudant Félix Hernández.

Paral·lelament, es van iniciar les primeres investigacions en matèria de recursos hídrics per part del professor Ignacio Morell, que també estava adscrit a la secció de Químiques del CUC. Des de llavors, es va desenvolupar una notable activitat al Laboratori de Medi Ambient i en la Unitat d'Hidrogeologia que, amb la creació de la Universitat Jaume I, l'any 1991, van passar a fusionar-se sota la denominació de **Grup d'Investigació del Medi Ambient i Recursos Naturals (GIMARN)**, adscrit al Departament de Ciències Experimentals.

En la dècada dels anys 90 el GIMARN va ser codirigit pels doctors Félix Hernández i Ignacio Morell, els quals van desenvolupar una intensa activitat investigadora en les àrees de Química Analítica i d'Hidrogeologia, amb especial èmfasi en l'àmbit dels plaguicides. Durant aquesta dècada s'hi va incorporar un bon nombre de joves investigadors que, actualment, constitueix el nucli central del grup investigador que suporta el IUPA.

L'any 2000, els investigadors de l'àrea de Química Analítica es plantegen obtenir la certificació de Bones Pràctiques de Laboratori (BPL), més conegudes internacionalment per la nomenclatura anglosaxona de *Good Laboratory Practices* (GLP). Les BPL són un conjunt de regles, procediments i pràctiques establides i promulgades per la OCDE, que es consideren de compliment obligatori per assegurar la qualitat i integritat de les dades produïdes com a base de la mútua acceptació de resultats entre diferents països. D'aquesta manera es pretén evitar la duplicitat d'estudis, obstacles en el comerç internacional, i millorar, al capdavall, la protecció de la salut humana i del medi ambient. Les BPL són de compliment obligatori en estudis no clínics sobre seguretat ambiental i sanitària, la finalitat dels quals siga autoritzar productes farmacèutics, plaguicides, additius alimentaris, o medicaments veterinaris, entre altres. La normativa desenvolupada per la OCDE ha estat assumida per la UE en les directives 87/18/CEE i 99/11/CE i recollida, en la legislació espanyola, pel Reial Decret 822/1993, modificat pel RD 1369/2000.

Amb aquest fi es crea el Laboratori d'Anàlisi de Residus de Plaguicides (LARP). Després d'un llarg i complex procés d'implantació d'aquest sistema d'assegurar la qualitat. Al novembre de 2001, el LARP va obtenir, finalment, el *Certificat de compliment de Bones Pràctiques de Laboratori per a l'Anàlisi de Residus de Productes Fitosanitaris (Certificat 17BPL/22)*, i es va convertir en el primer laboratori espanyol en aconseguir aquesta prestigiosa certificació en l'àmbit dels productes fitosanitaris.

A l'octubre de 2002, atesa la sol·licitud d'autorització presentada pel LARP, el certificat número 17/BPL 22 emès per ENAC i l'informe de la Comissió d'Avaluació de Productes Fitosanitaris, en la reunió d'aquesta, de 21 de maig de 2002, el Ministeri d'Agricultura, Pesca i Alimentació va autoritzar el LARP per realitzar assajos de residus de productes

fitosanitaris sota els requisits de les Bones Pràctiques de Laboratori, mitjançant una resolució del director general d'Agricultura.

Amb la implantació de les BPL en l'àmbit de l'anàlisi de plaguicides, el LARP s'ha convertit en un laboratori de referència tant nacional com internacional. Són nombrosos els estudis que ha realitzat per a empreses del sector de fabricants de productes fitosanitaris, tant de tipus multinacional com nacional. Els estudis realitzats pel LARP tenen com a objectiu l'obtenció de dades per a l'autorització de matèries actives en l'àmbit de la UE (inclusió en l'annex I de la Directiva 91/414), o per al registre de formulats en qualsevol dels estats membres. Sobre la base de les dades obtingudes pel LARP s'estableixen els Límits Màxims de Residus de Plaguicides (LMR) en aliments, límits legals l'àmbit dels quals és el de tota la UE.

Un fita important en el procés de consolidació del LARP és la designació d'aquest com a laboratori de referència del Ministeri d'Agricultura, Pesca i Alimentació en matèria d'anàlisi de productes fitosanitaris i dels residus d'aquests, per realitzar estudis sota BPL, quant a l'establiment de límits màxims de residus (Ordre APA/1964/2005, de 6 de juny;BOE 150, de 24 de juny de 2005).

Paral·lelament als estudis BPL realitzats pel LARP, el grup de treball de Química Analítica ha efectuat un bon nombre d'investigacions centrades, principalment, en l'ús de tècniques híbrides de cromatografia (tant de gasos com de líquids) / espectrometria de masses, incloent-hi un ampli ventall de tècniques MS, amb analitzadors de quadrupol, trampa d'ions, triple quadrupol, temps de vol (TOF) i quadrupol-temps de vol (QTOF). Les investigacions dutes a terme en els últims anys han tingut una important component aplicada, i s'han abordat àmbits com el dels contaminants orgànics en el medi ambient i en aliments, l'anàlisi de fluids i de teixits biològics humans, l'ecotoxicologia marina, etc. En els estudis realitzats s'ha prestat especial atenció a la correcta quantificació dels baixos nivells de concentració, normalment presents en aquest tipus de mostres, així com als criteris d'identificació de l'anàlit detectat, i a la possible elucidació de compostos no diana (*non-target analytes*) en les mostres investigades. Els criteris de confirmació, basats en l'ús de tècniques híbrides de cromatografia/MS, han estat rigorosament estudiats i discutits en els nostres treballs, a fi d'evitar falsos positius i, fins i tot, falsos negatius en l'anàlisi.

L'any 2004, els grups de treball de Química Analítica i d'Hidrogeologia presenten a la Universitat Jaume I la proposta de creació de l'Institut Universitari de Plaguicides i Aigües (IUPA), sobre la base dels antecedents previs que existien de col·laboració entre ambdós grups. Van justificar, així mateix, la necessitat d'aquest per l'interès dels treballs realitzats per ambdós grups investigadors. El IUPA es crea finalment per Decret 260/2004, de 19 de novembre, del Consell de la Generalitat Valenciana.

La present Memòria recull les activitats del IUPA al llarg de 2005 i és, per tant, la primera que hem elaborat, atesa la recent creació de l'Institut. Hem afegit una secció d'antecedents perquè el lector dispose de més informació, que li permeti conèixer millor la nostra breu història.

Esperem que aquesta Memòria siga la primera d'una sèrie de monografies sobre el IUPA, en les quals es pugui observar progressivament l'evolució de l'Institut, que esperem siga satisfactòria i d'acord amb les expectatives que hem generat. Il·lusió i ganes de treball no ens faltaran. Segur.

Una cordial salutació,

Félix Hernández
Director

2. Estructura de l'Institut

1.1. Personal del IUPA

Director: doctor Félix Hernández Hernández, catedràtic de Química Analítica.

Subdirector: doctor Ignacio Morell Evangelista, catedràtic de Geodinàmica Externa.

Secretari: doctor Francisco López Benet, professor titular de Química Analítica.

Professorat:

Doctor Juan Vicente Sancho Llopis, professor titular de Química Analítica.

Doctor Joaquim Beltran Arandes, professor titular de Química Analítica.

Doctor Roque Serrano Gallego, professor titular de Química Analítica.

Doctor Antoni Francesc Roig i Navarro, professor titular de Química Analítica.

Doctora Elena Pitarch Arquimbau, professora contractada doctora.

José Ramón Jiménez Salas, professor associat de Geodinàmica Externa.

Personal investigador propi:

Doctor Óscar Juan Pozo Mendoza.

Mercedes Barreda Portalés.

Susana Grimalt Brea.

Arantzazu Peruga Mínguez.

María Ibáñez Martínez.

Alejandra Renau Llorens.

José Manuel Marín Ramos.

Carlos Guerrero Ramos.

Personal investigador en formació:

Miguel Ángel Blanes Fernández.

Tania Portolés Nicolau.

Arianna Renau Pruñonosa.

Liliana Bandenay Egoávil.

Personal d'administració i serveis:

Cruchenka Morales Castillo.

Doctora Carmen Hidalgo Ortiz.

Sergio Gil Capdevila.

1.2. Seccions

El IUPA es divideix en tres seccions especialitzades de treball:

- 1. Investigacions analítiques.**
- 2. Laboratori d'Anàlisi de Residus de Plaguicides (LARP).**
- 3. Recursos hídrics.**

El personal adscrit a cada una de les seccions anteriors és el següent:

1. Investigacions analítiques

Responsable de secció: doctor Francisco López Benet.

Personal adscrit:

Doctor Félix Hernández Hernández.
Doctor Juan Vicente Sancho Llopis.
Doctor Joaquim Beltran Arandes.
Doctor Roque Serrano Gallego.
Doctor Antoni Francesc Roig i Navarro.
Doctora Elena Pitarch Arquimbau.
Doctor Óscar Juan Pozo Mendoza.
Mercedes Barreda Portalés.
Susana Grimalt Brea.
Arantzazu Peruga Mínguez.
María Ibáñez Martínez.
José Manuel Marín Ramos.
Carlos Guerrero Ramos.
Miguel Ángel Blanes Fernández.
Tania Portolés Nicolau.
Ángel Castillo Tirado.
Elena Serrano Ibáñez.
Cecilia Medina Vélez.

2. Laboratori de Residus de Plaguicides (LARP)

Director del Laboratori: doctor Félix Hernández Hernández.

Directors d'estudi:

Doctor Francisco López Benet.
Doctor Juan Vicente Sancho Llopis.
Doctor Joaquim Beltran Arandes.
Doctor Roque Serrano Gallego.
Doctor Antoni Francesc Roig i Navarro.
Doctora Elena Pitarch Arquimbau.

Unitat de Garantia de Qualitat: doctora Carmen Hidalgo Ortiz.

Personal tècnic:

Mercedes Barreda Portalés.
Susana Grimalt Brea.
Arantzazu Peruga Mínguez.
María Ibáñez Martínez.
José Manuel Marín Ramos.
Cruchenka Morales Castillo.

Responsable d'arxiu: Sergio Gil Capdevila.

3. Recursos hídrics

Responsable de secció: doctor Ignacio Morell Evangelista.

Personal adscrit:

José Ramón Jiménez Salas.

Alejandra Renau Llorens.

Arianna Renau Pruñonosa.

Liliana Bandenay Egoávil.

3. Òrgan de representació i de govern

L'òrgan de representació i de govern està format pel **Consell** de l'Institut, els membres del qual són:

Director: doctor Félix Hernández Hernández.

Subdirector: doctor Ignacio Morell Evangelista.

Secretari: doctor Francisco López Benet.

Professorat:

Doctor Juan Vicente Sancho Llopis.
Doctor Joaquim Beltran Arandes.
Doctor Roque Serrano Gallego.
Doctor Antoni Francesc Roig i Navarro.
Doctora Elena Pitarch Arquimbau.
José Ramón Jiménez Salas.

Personal investigador propi:

Doctor Óscar Juan Pozo Mendoza.
Mercedes Barreda Portalés.
Susana Grimalt Brea.
Arantzazu Peruga Mínguez.
María Ibáñez Martínez.
Alejandra Renau Llorens.
José Manuel Marín Ramos.
Carlos Guerrero Ramos

Representants del personal investigador en formació:

Miguel Ángel Blanes Fernández.
Tania Portolés Nicolau.

Representants del PAS: Cruchenka Morales Castillo.
Doctora Carmen Hidalgo Ortiz.

1.3. Òrgan de gestió ordinària

L'òrgan de gestió és la **Junta Permanent** de l'Institut, els membres de la qual són:

Director: doctor Félix Hernández Hernández.

Subdirector: doctor Ignacio Morell Evangelista.

Secretari: doctor Francisco López Benet.

Representants del Consell: doctora Elena Pitarch Arquimbau.
Mercedes Barreda Portalés.

1.4. Distribució del personal

Cognoms, nom	Adreça de correu electrònic	Secció			Situació laboral		
		IA	LARP	RH	F	C	B
Bandenay Egoávil, Liliana	lilianabandenay@hotmail.com						
Barreda Portalés, Mercedes	mbarreda@sg.uji.es						
Beltran Arandes, Joaquim	joaquim.beltran@exp.uji.es						
Blanes Fernández, Miguel Ángel	blanes@exp.uji.es						
Castillo Tirado, Ángel	acastill@guest.uji.es						
Gil Capdevila, Sergio	sgil@uji.es						
Grimalt Brea, Susana	grimalt@sg.uji.es						
Guerrero Ramos, Carlos	cguerrer@guest.uji.es						
Hernández Hernández, Félix	felix.hernandez@exp.uji.es						
Hidalgo Ortiz, Carmen	hidalgo@sg.uji.es						
Ibáñez Martínez, María	ibanezm@exp.uji.es						
Jiménez Salas, José Ramón	jjimenez@exp.uji.es						
López Benet, Francisco	francisco.lopez@exp.uji.es						
Marín Ramos, José Manuel	jmarin@sg.uji.es						
Medina Vélez, Cecilia	medina@guest.uji.es						
Morales Castillo, Cruchenka	cmorales@sg.uji.es						
Morell Evangelista, Ignacio	morell@exp.uji.es						
Peruga Mínguez, Arantzazu	peruga@sg.uji.es						
Pitarch Arquimbau, Elena	epitarch@exp.uji.es						
Portolés Nicolau, Tania	tportole@exp.uji.es						
Pozo Mendoza, Óscar Juan	mendoza@exp.uji.es						
Renau Pruñonosa, Arianna	arenau@guest.uji.es						
Renau Llorens, Alejandra	erenau@guest.uji.es						
Roig i Navarro, Antoni Francesc	roig@exp.uji.es						
Sancho Llopis, Juan Vicente	juanvi.sancho@exp.uji.es						
Serrano Gallego, Roque	serrano@exp.uji.es						
Serrano Ibáñez, Elena	eibanez@exp.uji.es						
Total		19	15	5	9	9	9

IA = Investigacions Analítiques; LARP = Laboratori d'Anàlisi de Residus de Plaguicides; RH = Recursos Hídrics
 F = funcionari; C = contractat; B = becari

4. Activitat científica

1.5. Antecedents

En aquest apartat es resumeixen les principals activitats del grup investigador que constitueix el IUPA. No es pretén donar una informació exhaustiva ni remuntar-se als inicis dels nostres treballs (any 1980) en l'antic Col·legi Universitari de Castelló. Per això, únicament s'hi inclouen els indicadors clàssics utilitzats en investigació; és a dir, els projectes aconseguits en convocatòries públiques competitives, els contractes/convenis més rellevants amb empreses i amb l'administració central o autonòmica, i els articles científics publicats en revistes internacionals referenciades en l'ISI *Web of Knowledge*, i únicament els relatius als últims cinc anys.

En la Introducció d'aquesta Memòria ja s'han comentat algunes línies generals, relatives al nostre historial investigador. A més del que s'ha indicat en aqueix apartat, cal assenyalar que investigadors del IUPA han promogut la creació de la Unitat Associada d'Ecotoxicologia Marina junt amb l'Institut d'Aqüicultura Marina de Torre La Sal (IATS) del Consell Superior d'Investigacions Científiques (CSIC). Per part del IUPA, els membres que formen part de la Unitat Associada són el doctor Francisco López (director) i els doctors Roque Serrano i Félix Hernández.

1. Projectes d'investigació

Codi del projecte: ---

Títol: *Estudio hidrogeológico de la cuenca del Mijares. Relación río-acuíferos, contaminación y uso conjunto.*

Font de finançament: Fundació Caixa Castelló-Bancaixa.

Import: 8.035 euros.

Data de començament: 06/11/1996. **Data de finalització:** 07/11/1999.

Investigador principal: Ignacio Morell Evangelista.

Altres investigadors: Juan Tuñón Colom i Policarpo Garay Martín.

Codi del projecte: ---

Títol: *Origen geoquímico y procesos contaminantes del boro en las aguas subterráneas del acuífero de la Plana de Castellón.*

Font de finançament: CICYT.

Import: 3.456 euros.

Data de començament: 01/09/1998. **Data de finalització:** 01/09/1999.

Investigador principal: Ignacio Morell Evangelista.

Altres investigadors: Antoni Roig Navarro i Antonio Pulido Bosch.

Codi del projecte: ---

Títol: *Estudio de las impurezas en el proceso de fabricación de la ϵ -caprolactama. Mejora de la calidad.*

Font de finançament: Ministeri d'Educació i Ciència (Projecte R+D. Programa FEDER).

Import: 76.388 euros.

Data de començament: 01/11/1998. **Data de finalització:** 31/10/2000.

Investigador principal: Félix Hernández Hernández.

Altres investigadors: Francisco López Benet, Joaquim Beltran Arandes, Antoni Roig Navarro, Miguel Carda Usó, Abel Herreros Bastero, José Luis Pujol Sánchez, María Teresa Castillo de Casas, Nobuyuki Taenaka.

Codi del projecte: P1 A98-08.

Títol: *Mejora de la sensibilidad y capacidad identificativa en la determinación de contaminantes orgánicos mediante GC/MS/MS.*

Font de finançament: Fundació Caixa Castelló-Bancaixa.

Import: 15.926 euros.

Data de començament: 06/11/1998. **Data de finalització:** 6/11/2000.

Investigador principal: Francisco López Benet.

Altres investigadors: Joaquim Beltran Arandes i Antoni Francesc Roig Navarro.

Codi del projecte: ---

Títol: *Nuevas estrategias en la determinación de residuos de plaguicidas y de metabolitos en fluidos biológicos. Simplificación de la etapa de preparación de muestra.*

Font de finançament: Fundació Caixa Castelló-Bancaixa.

Import: 32.815 euros.

Data de començament: 06/11/1998. **Data de finalització:** 06/11/2001.

Investigador principal: Félix Hernández Hernández.

Altres investigadors: Juan Vicente Sancho Llopis, Roque Serrano Gallego i Ángel Durán Martínez.

Codi del projecte: GV98-2-130.

Títol: *Estudio de la contaminación por metales en aguas y sedimentos de zonas húmedas de la Comunitat Valenciana. Análisis de especies organometálicas. Evaluación del riesgo potencial para los organismos vivos.*

Font de finançament: Generalitat Valenciana.

Import: 22.357 euros.

Data de començament: 01/01/1999. **Data de finalització:** 31/12/2000.

Investigador principal: Juan Vicente Sancho Llopis.

Altres investigadors: Joaquim Beltran Arandes, Roque Serrano Gallego, Antoni Francesc Roig Navarro i Elena Pitarch Arquimbau.

Codi del projecte: PB98-1043.

Títol: *Estudio del potencial de LC-MS/MS al análisis de plaguicidas en sangre y orina, con especial énfasis en la identificación y elucidación de metabolitos.*

Font de finançament: Ministeri d'Educació i Ciència.

Import: 21.035 euros.

Data de començament: 30/12/1999. **Data de finalització:** 30/12/2002.

Investigador principal: Félix Hernández Hernández.

Altres investigadors: Francisco López Benet, Juan Vicente Sancho Llopis, Roque Serrano Gallego i Joaquim Beltran Arandes.

Codi del projecte: HID99-0597-C02-01.

Títol: *El boro como indicador de procesos hidrogeoquímicos.*

Font de finançament: Ministeri d'Educació i Ciència.

Import: 47.388 euros.

Data de començament: 01/01/2000. **Data de finalització:** 01/01/2003.

Investigador principal: Ignacio Morell Evangelista.

Altres investigadors: Antoni Roig Navarro i Antonio Pulido Bosch.

Codi del projecte: GR00-73.

Títol: *Estudio de los niveles de concentración de contaminantes organoclorados ambientales en tejidos humanos.*

Font de finançament: Generalitat Valenciana (ajudes a grups d'investigació).

Import: 11.419 euros.

Data de començament: 01/01/2000. **Data de finalització:** 01/01/2001.

Investigador principal: Félix Hernández Hernández.

Altres investigadors: Francisco López Benet, Juan Vicente Sancho Llopis, Joaquim Beltran Arandes, Roque Serrano Gallego, Antoni Francesc Roig Navarro i Elena Pitarch Arquimbau.

Codi del projecte: AE01-10.

Títol: *Implantación del sistema de aseguramiento de calidad de Buenas Prácticas de Laboratorio (BPL, GLP) en un laboratorio de investigación.*

Font de finançament: Generalitat Valenciana (acció especial).

Import: 4.808 euros.

Data de començament: 01/01/2001. **Data de finalització:** 31/10/2001.

Investigador principal: Félix Hernández Hernández.

Altres investigadors: Francisco López Benet, Juan Vicente Sancho Llopis, Joaquim Beltran Arandes, Roque Serrano Gallego, Antoni Francesc Roig Navarro i Elena Pitarch Arquimbau.

Codi del projecte: GR01-6.

Títol: *Determinación de residuos de plaguicidas en productos vegetales.*

Font de finançament: Generalitat Valenciana (ajudes per a grups d'investigació).

Import: 3.305 euros.

Data de començament: 01/01/2001. **Data de finalització:** 30/11/2001.

Investigador principal: Félix Hernández Hernández.

Altres investigadors: Francisco López Benet, Juan Vicente Sancho Llopis, Joaquim Beltran Arandes, Roque Serrano Gallego, Antoni Francesc Roig Navarro i Elena Pitarch Arquimbau.

Codi del projecte: GV00-019-2.

Títol: *Problemática de los contaminantes organoclorados en piscicultura. Bioacumulación de los plaguicidas i PCB a través de los alimentos de origen marino y su posible incidencia en el hombre.*

Font de finançament: Generalitat Valenciana.

Import: 13.582 euros.

Data de començament: 01/01/2001. **Data de finalització:** 01/01/2003.

Investigador principal: Roque Serrano Gallego.

Altres investigadors: Joaquim Beltran Arandes i Antoni Francesc Roig Navarro.

Codi del projecte: ---

Títol: *Simplificación de la etapa de preparación de muestra en la determinación de residuos de pesticidas mediante microextracción en fase sólida.*

Font de finançament: Fundació Caixa Castelló-Bancaixa.

Import: 23.041 euros.

Data de començament: 01/01/2001. **Data de finalització:** 01/01/2003.

Investigador principal: Joaquim Beltran Arandes.

Altres investigadors: Antoni Francesc Roig Navarro i Elena Pitarch Arquimbau.

Codi del projecte: P1-1B2001-11.

Títol: *Establecimiento de un programa de vigilancia e investigación de residuos de plaguicidas en aguas subterráneas de la Comunidad Valenciana.*

Font de finançament: Fundació Caixa Castelló-Bancaixa.

Import: 24.809 euros.

Data de començament: 01/11/2001. **Data de finalització:** 01/11/2003.

Investigador principal: Félix Hernández Hernández.

Altres investigadors: Ignacio Morell Evangelista, Francisco López Benet i Juan Vicente Sancho Llopis.

Codi del projecte: AGL2002-10127-E.

Títol: *Aseguramiento de la calidad en el laboratorio de análisis de residuos de plaguicidas. Certificado en Buenas Prácticas de Laboratorio.*

Font de finançament: acció especial, Ministeri de Ciència i Tecnologia.

Import: 33.000 euros.

Data de començament: 01/10/2003. **Data de finalització:** 31/12/2004.

Investigador principal: Félix Hernández Hernández.

Altres investigadors: ---

2. Convenis/contractes de col·laboració

Títol: *Residuos de plaguicidas en aguas naturales.*

Empresa: Conselleria d'Agricultura i Pesca (Generalitat Valenciana).

Import: 15.543 euros.

Data de començament: 07/09/1998. **Data de finalització:** 31/12/1999.

Investigador principal: Félix Hernández Hernández.

Altres investigadors: Ignacio Morell Evangelista, Francisco López Benet, Juan V. Sancho Llopis i Roque Serrano Gallego.

Títol: *Estudio de las impurezas en el proceso de fabricación de la ε-caprolactama. Mejora de la calidad.*

Empresa: Proquimed, SA.

Import: 18.030 euros.

Data de començament: 01/11/1998. **Data de finalització:** 30/10/2000.

Investigador principal: Félix Hernández Hernández.

Altres investigadors: Francisco López Benet, Joaquim Beltran Arandes, Carmen Hidalgo Ortiz i Miguel Carda Usó.

Títol: *Análisis de trazas de compuestos de azufre en productos derivados del petróleo mediante GC-MS.*

Empresa: BP Oil.

Import: 3.005 euros.

Data de començament: 25/05/2000. **Data de finalització:** 25/08/2000.

Investigador principal: Félix Hernández Hernández.

Altres investigadors: Francisco López Benet, Joaquim Beltran Arandes i Mercedes Barreda Portalés.

Títol: *Examen y evaluación en el área de residuos de productos fitosanitarios, para su inclusión en la lista comunitaria del anexo I de la Directiva 91/414/CEE, relativa a la comercialización de los mismos.*

Empresa: INIA.

Import: 60.100 euros.

Data de començament: 1996. **Data de finalització:** 2000.

Investigador principal: Félix Hernández Hernández.

Altres investigadors: ---

Títol: *Investigación de plaguicidas en las aguas subterráneas de la Vega media-baja del Segura.*

Empresa: Institut Geològic i Miner d'Espanya.

Import: 10.362 euros.

Data de començament: 29/06/2000. **Data de finalització:** 28/02/2001.

Investigadors principals: Félix Hernández Hernández i Ignacio Morell Evangelista.

Altres investigadors: Juan Vicente Sancho Llopis i Juan Tuñón Colom.

Títol: *Monitoring chlorpyrifos (and chlorpyrifos-methyl) surface water concentrations following use in citrus orchards, Spain-2000-2001.*

Empresa: Dow AgroSciences, SA.

Import: 55.058 euros.

Data de començament: 01/08/2000. **Data de finalització:** 15/05/2002.

Investigador principal: Félix Hernández Hernández.

Altres investigadors: Francisco López Benet, Juan Vicente Sancho Llopis, Antoni Francesc Roig Navarro, Elena Pitarch Arquimbau, Ignacio Morell Evangelista i Juan Tuñón Colom.

Títol: *Planificación de un modelo de gestión de aguas subterráneas en los sectores septentrional de la Plana de Castellón y meridional del subsistema de Javalambre.*

Empresa: FACSA.

Import: 18.030 euros.

Data de començament: 26/09/2000. **Data de finalització:** 26/09/2001.

Investigador principal: Ignacio Morell Evangelista.

Altres investigadors: ---

Títol: *Actualización del inventario de puntos de agua del área provincial de Castellón perteneciente a la cuenca hidrográfica del río Ebro.*

Empresa: Confederació Hidrogràfica de l'Ebre.

Import: 6.000 euros.

Data de començament: 01/01/2001. **Data de finalització:** 21/12/2001.

Investigador principal: Ignacio Morell Evangelista.

Altres investigadors: ---

Títol: *Diagnóstico de los recursos hídricos subterráneos en la provincia de Castellón. Recopilación y evaluación de la información.*

Empresa: Diputació Provincial de Castelló.

Import: 11.800 euros.

Data de començament: 01/01/2001. **Data de finalització:** 15/09/2001.

Investigador principal: Ignacio Morell Evangelista.

Altres investigadors: ---

Títol: *Evaluación de los recursos hídricos en el entorno Patecas.*

Empresa: Conselleria d'Obres Públiques, Generalitat Valenciana.

Import: 11.800 euros.

Data de començament: 01/02/2001. **Data de finalització:** 01/07/2001.

Investigador principal: Ignacio Morell Evangelista.

Altres investigadors: ---

Títol: *Caracterización físico-química de los residuos sólidos y líquidos del proceso de gasificación.*

Empresa: Environmental International Engineering, SL.

Import: 5.986 euros.

Data de començament: 16/11/2001. **Data de finalització:** 16/11/2002.

Investigador principal: Félix Hernández Hernández.

Altres investigadors: Joaquim Beltran Arandes, Antoni Francesc Roig Navarro, Laura Orero Iserte i Macarena Rivera Tena.

Títol: *Estudio de recarga artificial de acuíferos de la provincia de Castellón.*

Empresa: Diputació Provincial de Castelló.

Import: 11.731 euros.

Data de començament: 01/12/2001. **Data de finalització:** 30/10/2002.

Investigador principal: Ignacio Morell Evangelista.

Altres investigadors: ---

Títol: *Análisis de residuos de flazasulfurón en muestras de tomate.*

Empresa: Centre Tecnològic Agrari d'Extremadura.

Import: 11.500 euros.

Data de començament: 18/06/2002. **Data de finalització:** 18/10/2002.

Investigador principal: Félix Hernández Hernández.

Altres investigadors: Joaquim Beltran Arandes i Francisco López Benet

Títol: *Investigación de contaminantes orgánicos en las aguas de lixiviado de residuos urbanos de la planta de compostaje de Onda.*

Empresa: RECIPLASA.

Import: 33.000 euros.

Data de començament: 03/10/2002. **Data de finalització:** 03/10/2004.

Investigadors principals: Félix Hernández Hernández i Francisco López Benet

Altres investigadors: Joaquim Beltran Arandes, Juan Vicente Sancho Llopis i Elena Pitarch Arquimbau.

Títol: *Desarrollo y transferencia de metodología analítica para el control reglamentario de sustancias prioritarias en aguas de acuerdo con la Directiva marco 2000/60/CE.*

Empresa: IPROMA, SL.

Import: 30.000 euros.

Data de començament: 01/3/2003. **Data de finalització:** 01/03/2004.

Investigadors principals: Félix Hernández Hernández i Francisco López Benet.

Altres investigadors: Joaquim Beltran Arandes, Juan Vicente Sancho Llopis i Elena Pitarch Arquimbau.

Títol: *Determinación analítica de residuos de productos fitosanitarios en cultivos menores de conformidad con los principios de las Buenas Prácticas de Laboratorio.*

Empresa: INIA.

Import: 160.000 euros.

Data de començament: 31/01/2003. **Data de finalització:** 31/12/2003.

Investigador principal: Félix Hernández Hernández.

Altres investigadors: Joaquim Beltran Arandes, Francisco López Benet, Juan Vicente Sancho Llopis i Elena Pitarch Arquimbau.

Títol: *Estudio en cumplimiento con los principios de las BPL sobre residuos de herbicidas en olivas y en aceite. Cálculo del factor de transferencia.*

Empresa: TRAGSATEC, SA.

Import: 38.657 euros.

Data de començament: 31/10/2003. **Data de finalització:** 31/10/2004.

Investigador principal: Félix Hernández Hernández.

Altres investigadors: Joaquim Beltran Arandes, Francisco López Benet i Juan Vicente Sancho Llopis.

Títol: *Desarrollo de la estrategia sobre la calidad del aire.*

Empresa: Conselleria de Medi Ambient, Generalitat Valenciana.

Import: 11.960 euros.

Data de començament: 20/01/2003. **Data de finalització:** 31/12/2003.

Investigador principal: Antoni Roig Navarro.

Altres investigadors: Eliseo Monfort Gimeno.

Títol: *Estudio piezométrico de la Plana de Castellón.*

Empresa: Diputació Provincial de Castelló.

Import: 10.363 euros.

Data de començament: 06/02/2003. **Data de finalització:** 06/12/2003.

Investigador principal: Ignacio Morell Evangelista.

Altres investigadors: ---

Títol: *Los estudios del modelo matemático del flujo del acuífero de la Plana de Castellón.*

Empresa: Diputació Provincial de Castelló.

Import: 10.363 euros.

Data de començament: 06/2/2003. **Data de finalització:** 06/02/2004.

Investigador principal: Ignacio Morell Evangelista.

Altres investigadors: ---

Títol: *Elaboración de un protocolo de ensayo para determinar LMR y factores de transformación aceituna/aceite.*

Empresa: Ministeri d'Agricultura, Pesca i Alimentació.

Import: 12.000 euros.

Data de començament: 2004. **Data de finalització:** 2004.

Investigador principal: Félix Hernández Hernández.

Altres investigadors: : Joaquim Beltran Arandes, Francisco López Benet, Juan Vicente Sancho Llopis i Elena Pitarch Arquimbau.

Anàlisi de residus de plaguicides en mostres vegetals realitzats sota els principis de les Bones Pràctiques de Laboratori (BPL) per a diverses empreses del sector dels fitosanitaris: Zeneca Agro, Recerca Agrícola; Probelte, Agrodan, Syngenta Agro, Centre Tecnològic Agrari d'Extremadura, Sipcam Inagra, INIA, Fertilitzants Naturals, Dow AgroSciences.

Import global: 270.000 euros.

3. Publicacions

Es relacionen les publicacions rellevants des de l'any 2000. S'indica si és un article (A), capítol d'un llibre (CL) o revisió (R) al final del títol de cada entrada.

Persistent organochlorines, organophosphorus compounds and heavy elements in common whale (*Balaenoptera physalus*) from the western Mediterranean Sea. A.

F. Hernández, R. Serrano, A. F. Roig-Navarro, Y. Martínez-Bravo, F. J. López.
Marine Pollution Bulletin, 40, 426-433 (2000).

Determination of glyphosate residues in plants by precolumn derivatisation and coupled-column liquid chromatography with fluorescence detection. A.

F. Hernández, C. Hidalgo, J. V. Sancho.
Journal AOAC International, 83, 728-734 (2000).

Use of solid phase microextraction for the quantitative determination of herbicides in soil and water samples. A.

F. Hernández, J. Beltran, F. J. López, J. V. Gaspar.
Analytical Chemistry, 72, 2313-2322 (2000).

Multiresidue procedures for determination of triazine and organophosphorus pesticides in water by use of large-volume PTV injection in gas chromatography. A.

M. Forcada, J. Beltran, F. J. López, F. Hernández.
Chromatographia, 51, 362-368 (2000).

Solid phase microextraction in pesticide residue analysis. A review. R.

J. Beltran, F. J. López, F. Hernández.
Journal of Chromatography A, Thematic Issue on SPE (Editors Poole and Wilson), 885, 389-404 (2000).

Treball inclòs entre *entre l'1% dels treballs de major influència en el seu àmbit*, d'acord amb els Essential Science Indicators, Thomson.

Direct Determination of Chlorpyrifos and Its Main Metabolite 3,5,6-Trichloro-2-Pyridinol in Human Serum and Urine by Coupled-Column Liquid Chromatography-Electrospray-Tandem Mass Spectrometry. A.

J. V. Sancho, O. J. Pozo, F. Hernández.
Rapid Communications in Mass Spectrometry, 14, 1485-1490 (2000).

Estrategies for the sample treatment simplification and sensitivity improvement in pesticide residue analysis: application to the analysis of polar pesticides and selected metabolites in water. CL.

F. Hernández.
IRSA, Quad. Ist. Ric. Acque, 112, 301-338, ISSN: 0390-6329 (2000).

El agua en Castellón: un reto para el siglo XXI. L.

I. Morell, F. Hernández.
Publicacions de la Universitat Jaume I, Athenea, 538 pàgines, ISBN: 84-8021-333-7 (2000).

Evaluation of porous cup soil-samplers under laboratory conditions. Comparison of ceramic and PTFE cups. A.

Morell, I., Sanchez-Perez, J. M.

Toxicological and Environmental Chemistry, 74:231-244 (2000).

Toxicity and bioconcentration of chlorpyrifos in aquatic organisms: Artemia parthenogenetica (Crustacea), Gambusia affinis and Aphanis iberus (Pisces). A.

I. Varó, R. Serrano, E. Pitarch, F. Amat, F. J. López, J. C. Navarro.
Bulletin of Environmental Contamination and Toxicology, 65, 623-630 (2000).

Influence of wastewater versus groundwater on young citrus trees. A.

V. Reboll, M. Cerezo, A. F. Roig, V. Flors, L. Lapeña, P. García.
Journal of the Science of Food and Agriculture, 80, 1441-1446 (2000).

Procesos electroquímicos del nitrógeno y del azufre de prusia/nitrógeno sobre electrodo transparente de óxido de indio-estaño: un modelo de electrodo multicapa. L.

F. Vicente, A. F. Roig, J. J. García, A. Sanmatías.
Ed. Moliner-40, 147 páginas, ISBN: 84-931188-6-9 (2000).

Strategy for water analysis using ICP-MS. A.

J. L. Fernández Turiel, J. F. Llorens, F. López Vera, C. Gómez Artola, I. Morell, D. Gimeno.
Fresenius J. Anal. Chem. 368 (6): 601-606.

Simultaneous speciation of arsenic species and chromium (VI) by high performance liquid chromatography - inductively coupled plasma mass spectrometry. A.

A. F. Roig Navarro, I. Martínez Brau, F. J. López, F. Hernández.
Journal of Chromatography A, 912, 319-327 (2001).

Gas chromatographic determination of organochlorine and organophosphorus pesticides in human fluids using solid phase microextraction (SPME). A.

F. J. López, E. Pitarch, S. Egea, J. Beltran, F. Hernández.
Analytica Chimica Acta, 433, 217-22 (2001).

Multiresidue determination of organophosphorus and organochlorine pesticides in human biological fluids by capillary gas chromatography. A.

E. Pitarch, F. J. López, R. Serrano, F. Hernández.
Fresenius Journal of Analytical Chemistry, 369, 502-509 (2001).

Application of column-switching liquid chromatography to the determination of polar herbicides in different environmental matrices. MCPA as a case study. A.

F. Hernández, C. Hidalgo, S. Grimalt, J. V. Sancho.
Química Analítica, 20, 81-91 (2001).

Study of matrix effects on the direct trace analysis of acidic pesticides in water using various liquid chromatographic modes coupled to tandem mass spectrometric detection. A.

E. Dijkman, D. Mooibroek, R. Hoogerbrugge, E. Hogendoorn, J. V. Sancho, Ó. Pozo, F. Hernández.
Journal of Chromatography A, 926, 113-125 (2001).

Determination of the herbicide 4-chloro-2-methylphenoxyacetic acid and its main metabolite 4-chloro-2-methylphenol in water and soil by liquid chromatography-electrospray tandem mass spectrometry. A.

Ó. Pozo, E. Pitarch, J. V. Sancho, F. Hernández.
Journal of Chromatography A, 923, 75-85 (2001).

Gas chromatographic determination of selected pesticides in human serum by head-space solid phase microextraction. A.

J. Beltran, E. Pitarch, S. Egea, F. J. López, F. Hernández.
Chromatographia, 54, 757-763 (2001).

Multielemental determination of arsenic, selenium and chromium (VI) species in water by high-performance liquid chromatography-inductively coupled plasma-mass spectrometry. A.

Y. Martínez Bravo, A. F. Roig Navarro, F. J. López, F. Hernández.
Journal of Chromatography A, 926, 265-274 (2001).

Rapid direct determination of pesticides and metabolites in environmental water samples at sub-ppb level by on line solid phase extraction-liquid chromatography-electrospray tandem mass spectrometry. A.

F. Hernández, J. V Sancho, Ó. Pozo, A. Lara, E. Pitarch.
Journal of Chromatography A, 939, 1-11 (2001).

Physico-chemical processes in a vadose zone during the infiltration of treated wastewater used for irrigation: application of the NETPATH model. A.

M. V. Esteller, I. Morell, C. Almeida.
Environmental Geology, 40(7): 923-930 (2001).

Head-space solid phase microextraction in combination with gas chromatography and tandem mass spectrometry for the determination of organochlorine and organophosphorus pesticides in whole human blood. A.

F. Hernandez, E. Pitarch, J. Beltran, F. J. López.
Journal of Chromatography B, 769, 65-77 (2002).

Multiresidue determination of endosulfan and metabolic derivatives in human adipose tissue using automated liquid chromatographic clean-up and gas chromatographic analysis. A.

F. Hernández, E. Pitarch, R. Serrano, J. V. Gaspar, N. Olea.
Journal of Analytical Toxicology, 26, 94-103 (2002).

Different quantitation approaches for xenobiotics in human urine samples by liquid chromatography/electrospray tandem mass spectrometry. A.

J. V. Sancho, Ó. Pozo, F. J. López, F. Hernández.
Rapid Communications in Mass Spectrometry, 16, 639-645(2002).

Treball inclòs entre **entre l'1% dels treballs de major influència en el seu àmbit**, d'acord amb els Essential Science Indicators, Thomson.

Determination of organochlorine compounds in human adipose tissue using automated liquid chromatographic clean-up and gas chromatography-tandem mass spectrometry. A.

F. Hernández, E. Pitarch, R. Serrano, C. Guerrero.
Chromatographia, 55, 715-721 (2002).

Direct determination of alkyl phosphates in human urine by liquid chromatography/electrospray tandem mass spectrometry. A.

F. Hernández, J. V. Sancho, Ó. Pozo.
Rapid Communications in Mass Spectrometry, 16, 1766-1773 (2002).

Bioaccumulation of chlorpyrifos through an experimental food chain: study of protein HSP70 as biomarker of sublethal stress in fish. A.

I. Varó, R. Serrano, E. Pitarch, F. Amat, F. J. López, J. C. Navarro.
Archives Environmental Contamination Toxicology, 45, 229-235 (2002).

Direct Analysis of Abscisic Acid in Crude Plant Extracts by Liquid Chromatography-Electrospray/Tandem Mass Spectrometry. A.

A. Gómez-Cadenas, Ó. J. Pozo, P. García-Agustí, J. V. Sancho.
Phytochem. Anal., 13, 228-23 (2002).

Determination of low concentrations of organochlorine pesticides and PCBs in fish feed and fish tissues from aquaculture activities by gas chromatography with tandem mass spectrometry. A.

R. Serrano, M. Barreda, E. Pitarch, F. Hernández.
Journal of Separation Science, 23, 75-86 (2003).

Determination of abamectin and azadirachtin residues in orange samples by liquid chromatography-electrospray tandem mass spectrometry. A.

Ó. Pozo, J. M. Marin, J. V., Sancho, F. Hernández.
Journal of Chromatography A, 992, 133-140 (2003).

Direct determination of paclobutrazol residues in pear samples by liquid chromatography-electrospray tandem mass spectrometry. A.

J. V. Sancho, Ó. Pozo, T. Zamora, S. Grimalt, F. Hernández.
Journal of Agricultural and Food Chemistry, 51, 4202-4206 (2003).

Rapid determination of fosetyl-aluminium residues in lettuce by liquid chromatography –electrospray tandem mass spectrometry. A.

F. Hernández, J. V. Sancho, Ó. Pozo, C. Villaplana, M. Ibáñez, S. Grimalt.
Journal of AOAC International, 86, 832-838 (2003)

Biomagnification study on organochlorine compounds in marine aquaculture: the sea bass (*Dicentrarchus labrax*) as a model. A.

R. Serrano, A. Simal-Julián, E. Pitarch, I. Varó, J. C. Navarro, F. Hernández.
Environmental Science & Technology, 37, 3375-3381 (2003).

Rapid multiresidue determination of organochlorine and organophosphorus compounds in human serum by solid phase extraction and gas chromatography coupled to tandem mass spectrometry. A.

E. Pitarch, R. Serrano, F. J. López, F. Hernández.
Analytical and Bioanalytical Chemistry, 376, 189-197 (2003).

Application of solid phase microextraction to the determination of pyrethroid residues in vegetable samples by GC-MS. A.

J. Beltrán, A. Peruga, E. Pitarch, F. J. López, F. Hernández.
Analytical and Bioanalytical Chemistry, 376, 502-511 (2003).

Direct determination of 1-naphtol in human urine by coupled-column liquid chromatography with flurorescent detection. A.

J. V. Sancho, R. A. Cabanes, F. J. López, F. Hernández.
Chromatographia, 58, 565-569 (2003).

The versatility of coupled-column LC. A.

E. A. Hogendoorn, P. Van Zoonen, F. Hernández.
LC-GC Europe, 16, 44-51 (2003).

Geoestadística y modelos matemáticos en Hidrogeología. L.

J. Mateu, I. Morell

Col·lecció Medi Ambient, 1, Publicacions de la Universitat Jaume I, ISBN 84-8021-417-1, 312 pàgines (2003).

Contribución de las actividades agrícolas a la presencia de sulfatos en los acuíferos costeros. El caso de la Plana de Castellón. CL.

I. Morell, J. Tuñón.

«Los acuíferos costeros y las desaladoras», Eds. Pulido-Bosch, Vallejos y Pulido-Leboeuf, Universitat d'Almeria, ISBN 84-607-3936-8 (2003).

La gestión de los acuíferos costeros: entre la intrusión marina y las desaladoras. CL.

I. Morell.

«Gestión y contaminación de recursos hídricos», Eds. Pulido-Bosch y Vallejos, Universitat d'Almeria, ISBN 84-8240-662-0 (2003).

El marjal de Almenara. CL.

I. Morell.

«Conflictos entre el desarrollo de las aguas subterráneas y la conservación de los humedales: litoral mediterráneo», Eds. Fornés y Llamas, Fundación Marcelino Botín, páginas 65-75 (2003).

Liquid Chromatography and Tandem Mass Spectrometry: a Powerful Approach for the Sensitive and Rapid Multiclass Determination of Pesticides and Transformation Products in Water. A.

J. V. Sancho, Ó. Pozo, F. Hernández.

The Analyst, 129, 38-44 (2004).

Potential of capillary column switching liquid chromatography-tandem mass spectrometry for the quantitative trace analysis of small molecules. Application to the on-line screening of drugs in water. A.

E. Pitarch, F. Hernández, J. Ten Hove, H. Meiring, W. Niesing, E. Dijkman, L. Stolker. E. A. Hogendoorn.

Journal of Chromatography A, 1031, 1-9 (2004).

Use of quadrupole-time of flight mass spectrometry in environmental analysis: elucidation of transformation products of triazine herbicides in water after UV exposure. A.

M. Ibáñez, J. V. Sancho, Ó. J. Pozo, F. Hernández.

Analytical Chemistry, 76, 1328-1335 (2004).

4. Tesis doctorals

Títol: *Determinación experimental del balance hídrico del suelo y evaluación de la contaminación asociada a las prácticas agrícolas.*

Doctorand: Juan Tuñón Colom.

Universitat/centre: Universitat Jaume I, Escola Superior de Tecnologia i Ciències Experimentals.

Any: 2000. **Qualificació:** apte cum laude.

Director: Ignacio Morell Evangelista.

Títol: *Hidrogeología de los acuíferos triásicos de las sierras del Espadán i la Calderona.*

Doctorand: Policarpo Garay Martín.

Universitat/centre: Universitat de València.

Any: 2000. **Qualificació:** apte cum laude.

Director: Ignacio Morell Evangelista.

Títol: *Estudio de la inyección de grandes volúmenes en cromatografía de gases capilar. Aplicación al análisis de residuos de plaguicidas.*

Doctoranda María Forcada Ortells.

Universitat/centre: Universitat Jaume I, Escola Superior de Tecnologia i Ciències Experimentals.

Any: 2001. **Qualificació:** apta cum laude.

Directors: Félix Hernández Hernández i Joaquim Beltran Arandes.

Títol: *Desarrollo de metodología analítica para la determinación de plaguicidas organofosforados y organoclorados en muestras biológicas humanas.*

Doctoranda: Elena Pitarch Arquimbau.

Universitat/centre: Universitat Jaume I, Escola Superior de Tecnologia i Ciències Experimentals.

Any: 2001. **Qualificació:** apta cum laude. (Doctorat europeu).

Directors: Félix Hernández Hernández i Roque Serrano Gallego.

Títol: *Determinación de residuos de fungicidas en productos vegetales mediante técnicas cromatográficas avanzadas.*

Doctoranda: Tatiana Zamora Zamora.

Universitat/centre: Universitat Jaume I, Escola Superior de Tecnologia i Ciències Experimentals.

Any: 2004. **Qualificació:** apta cum laude.

Directors: Félix Hernández Hernández i Francisco López Benet.

Títol: *Potencial del acoplamiento instrumental cromatografía líquida-espectrometría de masas en tándem (LC/(LC)-MS/MS) para la determinación de residuos de plaguicidas y metabolitos en muestras ambientales y biológicas.*

Doctorand: Óscar Pozo Mendoza.

Universitat/centre: Universitat Jaume I, Escola Superior de Tecnologia i Ciències Experimentals.

Any: 2004. **Qualificació:** apte cum laude. (Doctorat europeu).

Directors: Félix Hernández Hernández i Juan Vicente Sancho Llopis.

5. Línies d'investigació

Al llarg dels quasi 20 anys de treball del grup d'investigació que constitueix el IUPA, s'han desenvolupat diversos projectes d'investigació en temes relacionats principalment amb la problemàtica analítica, ambiental i toxicològica dels plaguicides. No es pretén en aquesta Memòria presentar una recopilació detallada de totes aquestes activitats, sinó únicament resumir les que es consideren més rellevants, relacionades amb l'àmbit d'actuació de l'Institut. En diferenciar entre les diferents seccions que conformen el IUPA, aquestes es poden agrupar de la manera següent:

Secció d'Investigacions Analítiques

Impacte dels plaguicides sobre la qualitat de les aigües

Es tracta d'una de les principals activitats exercides per l'antic GIMARN. Aquesta línia de treball va donar lloc a diversos convenis de col·laboració i projectes d'investigació. Entre aquests, cal destacar els successius convenis amb la Conselleria d'Agricultura i Pesca de la Generalitat Valenciana sobre *Residuos de plaguicidas en aguas naturales* que, al llarg de la dècada dels anys 90, va permetre un millor coneixement de l'estat de contaminació de les aigües de la Comunitat Valenciana, tant superficials com subterrànies. També rellevants van ser els estudis realitzats per encàrrec de l'Institut Geològic i Miner d'Espanya (IGME). El primer d'aquests, *Estudios de contaminación de aguas subterráneas por plaguicidas. Determinación de residuos, evolución y procesos fisico-químicos en las zonas saturada y no saturada*, va permetre obtenir un millor coneixement de la mobilitat dels plaguicides seleccionats al sòl i a la ZNS, així com de les possibilitats de contaminació de les aigües subterrànies de l'àrea citrícola de la Comunitat Valenciana. A través d'un segon estudi, *Investigación de plaguicidas en las aguas subterráneas de la vega media-baja del río Segura*, es van poder establir les zones més vulnerables davant de la contaminació per plaguicides en aquesta àrea de Múrcia, d'àmplia tradició agrícola.

La problemàtica de la contaminació d'aigües per plaguicides també s'ha abordat en diversos projectes. En un primer projecte de la CICYT, l'any 1991, es va abordar l'estudi de la *Contaminación de origen agrícola en el subsistema acuífero de la Plana de Castellón*, amb el qual es van obtenir dades d'interès sobre la presència de plaguicides i de nitrats en aqueixes aigües. Posteriorment, el projecte de la UE *Development of Analytical and Sampling Methods for Priority Pesticides and Relevant Transformation Products in Acuífers*, Environment 1991-94, mitjançant sengles convenis amb la Universitat Politècnica de Catalunya i amb la Conselleria d'Obres Públiques, Habitatge i Aigües (Direcció General d'Aigües) del Govern de Canàries va permetre realitzar nombroses experiències de camp i de laboratori, a fi d'investigar la presència de plaguicides prioritaris i dels principals productes de transformació d'aquests en aquífers de Canàries i de Catalunya.

En dates més recents, s'ha aprofundit en aquest tema a través de projectes com: *Aprovechamiento de nuevos avances en instrumentación analítica para la realización de estudios sobre el impacto de residuos de plaguicidas en la calidad de las aguas subterráneas*, del Programa Nacional de Recursos Naturals, del Ministeri de Ciència i Tecnologia, 2003-2005 i *Establecimiento de un programa de vigilancia e investigación de residuos de plaguicidas en aguas subterráneas de la Comunidad Valenciana*, projecte d'investigació Universitat Jaume I-Fundació Caixa Castelló, 2002-2003. Aquests projectes presenten gran interès en àrees d'intensa activitat agrícola, amb gran ús de plaguicides que, a més, tinguen aquífers vulnerables que puguen estar sotmesos a contaminació per plaguicides. El desenvolupament de metodologia analítica moderna,

sensible i fiable, per a compostos que, per les característiques fisicoquímiques que tenen (elevada polaritat i solubilitat en aigua, principalment), presenten major mobilitat al sòl i a la zona no saturada (principalment herbicides de diverses famílies químiques) és una de les tasques més complicades d'aquesta línia d'investigació. L'aspecte més rellevant és, sense dubte, el disseny d'un programa de vigilància de plaguicides i productes de transformació en aigües subterrànies, en el qual queden clarament indicats els compostos objecte de control i els mètodes analítics que han d'aplicar-se per a la detecció d'aquests en nivells inferiors a 0,1 µg/L (límit màxim permès per a aigües d'abastiment públic). L'adequada selecció dels compostos a controlar ha de basar-se en factors com: el grau d'utilització dels plaguicides a les zones investigades, la persistència dels plaguicides davant de la hidròlisi, la mobilitat al sòl a la zona no saturada, la toxicitat, les dades prèvies sobre la detecció dels compostos a les àrees controlades, etc. En última instància, es pretén proposar les línies mestres que permeten dissenyar un programa de control i de vigilància en investigació de plaguicides en l'àmbit nacional, i aplicar la metodologia de treball, desenvolupada a la Comunitat Valenciana, a fi de conèixer l'estat actual de les aigües subterrànies pel que fa a una problemàtica poc coneguda, com és la contaminació per plaguicides.

A finals de 2003, es va iniciar una línia de treball relacionada amb la problemàtica ambiental dels plaguicides, sobre la base del projecte *Aplicación del acoplamiento cromatografía líquida-espectrometría de masas (LC-MS/MS y LC-QTOF-MS) a la identificación de metabolitos de plaguicidas en muestras de interés ambiental y toxicológico*, del Ministeri de Ciència i Tecnologia. Es tracta d'explorar les possibilitats de les poderoses tècniques analítiques de MS (de triple quadrupol, temps de vol, i analitzador híbrid quadrupol-temps de vol) adaptades a LC, a fi d'investigar la presència de plaguicides, productes de transformació i, especialment, compostos desconeguts en aigües, amb especial èmfasi en la identificació y confirmació de la identitat d'aquests, i seguir les pautes recents de la UE.

Des de fa més d'una dècada, es manté una línia d'investigació conjunta amb el Laboratory of Organic Analytical Chemistry, Institute of Public Health and Environment (RIVM), Bilthoven, Holanda, sobre nous avanços analítics per avaluar la contaminació per compostos orgànics en el medi ambient. En aquest context, s'han realitzat al voltant de deu estades d'investigació al RIVM i a l'UJI per dur a terme treballs conjunts.

Investigació sobre nous contaminants en aigües: fàrmacs i hormones

Fins dates molt recents, la rellevància mediambiental dels fàrmacs i de les hormones, tant naturals com sintètics, no havia estat tinguda en compte, ja que aquests compostos només s'estudiaven en termes de salut humana i veterinària, i no es prestava atenció a l'entrada i potencial impacte que poden tindre sobre el medi ambient.

La majoria d'aquests compostos s'excreten pels sers humans i entren al medi ambient després d'alguna forma de tractament, generalment en una estació depuradora d'aigües residuals (EDAR). Les EDAR modernes s'han dissenyat com a ferramentes molt eficaces per tractar els problemes d'excés de nutrients i contaminació microbiològica. No obstant, un gran nombre de compostos naturals i sintètics encara es troben presents en els efluent, ja que no han pogut ser eliminats eficaçment per aquests sistemes i, finalment, arriben al medi ambient a través de les aigües depurades.

Entre aquests compostos es poden trobar els fàrmacs i les hormones, que a pesar d'haver estat àmpliament estudiats en humans i en uns altres mamífers durant les fases de desenvolupament i posterior registre, requerides per la majoria de les agències governamentals, hi ha falta d'informació ecotoxicològica sobre aquests compostos, així com la rellevància que presenten en el medi ambient.

Aquests compostos han estat dissenyats per ser altament actius i específics en receptors humans, per la qual cosa, una vegada han estat introduïts en el medi ambient, poden interactuar amb els sistemes biològics de multitud d'organismes.

La perillositat de les hormones queda patent per la inherent capacitat disruptora endocrina que tenen, per la qual cosa, l'emissió d'hormones, tant naturals com sintètiques, en els efluent de les EDAR pot produir impactes negatius sobre els éssers vius exposats als compartiments mediambientals receptors.

Quant als fàrmacs, en aquesta nova línia d'investigació, els nostres estudis s'han centrat inicialment en els antibiòtics, a causa de la rellevància i els potencials efectes que tenen, com el possible augment de l'aparició de resistències en bacteris i microorganismes exposats a aquests compostos a través de les aigües.

Els estudis d'avaluació del risc mediambiental combinen la perillositat amb la possibilitat d'exposició, basant-se en les concentracions mediambientals que es poden predir (PEC) i dades de laboratori. No obstant, els nivells de concentració mesurats (MEC) són indispensables per obtenir dades reals, així com detalls de l'evolució dels fàrmacs en diferents compartiments mediambientals.

Conseqüentment, el desenvolupament de mètodes analítics sensibles i selectius en matrius mediambientals, com les aigües, és de gran importància per avaluar correctament el possible risc dels fàrmacs.

Per aconseguir els límits de detecció necessaris, en l'ordre dels ng/L, es requereixen elevats factors de preconcentració i/o mètodes de detecció extremadament sensibles, quasi sempre basats en acoblaments cromatografia-espectrometria de masses. Per tant, una simple modificació dels mètodes analítics desenvolupats durant els estudis clínics del fàrmac no és suficient per ser aplicats a mostres mediambientals. L'anàlisi de fàrmacs i hormones en aigües residuals, superficials i subterrànies requereix del desenvolupament de nous mètodes analítics que permeten aconseguir límits de detecció en el rang d'uns pocs ng/L.

El primer informe sobre l'aparició de residus de fàrmacs en el medi ambient va ser publicat per Garrison, en 1976, de l'Agència de Protecció Mediambiental dels Estats Units d'Amèrica (US EPA), van trobar àcid clofíbric i àcid salicílic en les aigües depurades d'una EDAR a nivells de 1-2 µg/L. Van emprar l'extracció líquid-líquid amb diclorometà, metilació amb diazometà i posterior detecció per cromatografia de gasos adaptada a espectrometria de masses (GC-MS). No obstant, aquesta publicació no va iniciar noves investigacions sobre l'aparició i rellevància dels fàrmacs en el medi ambient fins a la dècada següent, quan apareixen a Europa els primers estudis en profunditat sobre

l'impacte dels fàrmacs en el medi ambient. Aquests treballs van demostrar que, al Regne Unit, existien nivells de fàrmacs de l'ordre del $\mu\text{g/L}$ en les aigües; no obstant, els mètodes emprats continuaven estant basats en GC-MS amb les consegüents etapes de tractament de mostra (extracció, derivatització i purificació) prèvies a la injecció en el sistema GC-MS.

No obstant, molts fàrmacs i hormones per l'elevada polaritat que tenen, no són analits adequats per determinar-los amb GC-MS. Amb la generalització de les interfases a pressió atmosfèrica (API), s'ha popularitzat l'ús de la cromatografia líquida adaptada a espectrometria de masses (LC-MS) i s'han començat a desenvolupar mètodes per a fàrmacs i hormones en aigües, basats en LC-MS. A més, a causa dels baixos nivells de concentració esperats d'aquests contaminants, se solen preconcentrar volums d'aigua de l'ordre d'un litre fins a extractes finals de l'ordre d'un mil·lilitre, i s'aconsegueixen factors de preconcentració de tres ordres de magnitud.

A pesar que encara es poden trobar certes aplicacions amb la utilització d'un sistema LC-MS, basat en un únic analitzador de filtre quadrupolar, la complexitat de les mostres i els baixos límits de detecció necessaris fan que quasi totes les aplicacions desenvolupades es basen en l'ocupació d'un sistema LC-MS/MS, principalment amb un analitzador de triple quadrupol, encara que també es poden trobar aplicacions recents amb sistemes de trampa d'ions.

No obstant, en quasi tots els casos, es continua realitzant una etapa de preconcentració manual d'entre 250-1000 ml de mostra d'aigua mitjançant extracció en fase sòlida en mode fora de línia. Durant aquesta fase del procediment es poden produir errors, pèrdues d'analit per aconseguir el volum de ruptura d'aquest o rebliment del cartutx per coextracció d'interferents presents en la mostra d'aigua.

L'ús d'un sistema d'extracció en fase sòlida, adaptat en línia al de cromatografia líquida-espectrometria de masses en tàndem (SPE-LC-MS/MS), s'ha aplicat satisfactòriament per investigadors del IUPA en uns altres àmbits de l'anàlisi de microcontaminants orgànics en aigües, i ha permès de reduir el volum de mostra a preconcentrar a uns pocs mil·lilitres (1-4 ml), es minimitzen així les pèrdues per ruptura, es redueix la coextracció d'interferents i permet aconseguir, fàcilment, límits de detecció de l'ordre dels pocs ng/L , i fins i tot, per a analits favorables, de sub ng/L . Aquests avantatges es poden aplicar també en el desenvolupament de metodologia per a altres contaminants orgànics, com els fàrmacs i les hormones. Per a aquesta última família de compostos hi ha algunes aplicacions, en aquest sentit, però amb la utilització de la detecció ultraviolada, amb la consegüent pèrdua de selectivitat i sensibilitat davant d'un espectròmetre de masses en tàndem de triple quadrupol, i requereix la preconcentració de majors volums de mostra (200 ml).

Un altre aspecte molt important a tindre en compte quan es desenvolupa metodologia analítica per a la determinació de contaminants orgànics en aigües és la capacitat de confirmació del mètode davant una mostra positiva. De fet, hi ha hagut fortes polèmiques davant dades sobre la presència de fàrmacs i hormones a les aigües dels Estats Units, difícils de rebatre per la falta de mètodes de confirmació per a moltes mostres positives. La majoria dels mètodes desenvolupats emfasitzen la sensibilitat aconseguida, però molt pocs aprofundeixen en la necessitat confirmar correctament la identitat del compost detectat. En la present línia de treball, la confirmació adequada de la presència de residus de fàrmacs i hormones en les mostres d'aigua és un aspecte crucial per evitar falsos positius. Per això, i sobre la base d'una recent decisió de la Unió Europea (2002/657/CE) sobre la identificació i quantificació de residus en productes d'origen animal, s'estudien les possibilitats confirmatòries que ofereixen les tècniques d'espectrometria de masses en tàndem, tant de triple quadrupol com de quadrupol-temps de vol, per confirmar la presència de residus d'antibiòtics i hormones en aigües. En relació amb aquest aspecte, l'ús de la tecnologia de temps de vol (TOF) o millor encara, l'híbrid quadrupol-temps de vol (QTOF) ja s'ha començat a utilitzar al camp mediambiental per identificar i confirmar residus de contaminants o dels productes de transformació d'aquests.

Aplicacions de tècniques híbrides cromatografia/espectrometria de masses en la quantificació, confirmació i elucidació de contaminants orgànics en mostres d'interès ambiental, alimentari i toxicològic.

Es tracta d'una línia d'investigació amb una forta component analítica en la qual s'explora el potencial de les més modernes tècniques analítiques adaptades a espectrometria de masses. Aquesta línia té interconnexions amb els altres camps d'investigació, també descrits en aquesta Memòria d'activitats, en els quals es fa ús de mètodes avançats amb fins aplicats. Cal distingir, en aquest, camp dos grans grups de tècniques híbrides: cromatografia de gasos/espectrometria de masses (GC-MS) i cromatografia líquida/espectrometria de masses (LC-MS). En ambdós casos es fa ús d'equips instrumentals dotats amb diversos analitzadors de MS. Quant a GC-MS es treballa amb equips de quadrupol únic (Q), trampa d'ions (IT), triple quadrupol (QqQ) i temps de vol (TOF). Quant a LC-MS es disposa d'analitzadors tipus QqQ i de l'analitzador híbrid quadrupol-temps de vol (Q-TOF). La instrumentació disponible permet d'investigar el potencial i aplicacions de tècniques MS en tàndem, tant en gasos (GC-MS/MS) com en líquids (LC-MS/MS), i es poden utilitzar equips que permeten la mesura de massa nominal, o bé de massa exacta, en el cas dels equips d'alta resolució TOF-MS.

Les nostres principals aportacions, en aquest àmbit, s'han centrat en la simplificació en el tractament de mostra i en la millora de les característiques analítiques de relleu, com la sensibilitat i la selectivitat, que són fonamentals en la determinació de microcontaminants orgànics. S'ha posat especial èmfasi en la determinació de compostos de coneguda dificultat analítica, com ara herbicides fosfònics (glifosat, glufosinat), compostos en forma iònica, com el fosetil, i especialment en els metabòlits i productes de transformació (TP) de plaguicides, com alquilfosfats, diversos metabòlits conjugats (glucurònids), AMPA, etc. Les principals aproximacions analítiques emprades per a aquest fi han estat l'ús de la cromatografia líquida amb columnes adaptades (LC-LC, SPE-LC), la injecció de grans volums, tant en GC com en LC, i la microextracció en fase sòlida (SPME), en tots els casos en combinació amb tècniques híbrides cromatografia/MS(MS) amb l'àmplia varietat d'analitzadors esmentats anteriorment.

Les mostres objecte d'estudi són molt diverses i comprenen el camp ambiental (aigües, sòls i sediments), alimentari (principalment productes vegetals) i toxicològic (fluids biològics, teixit adipós humà, tumors, etc.). Quant als analits, ateses les característiques del nostre grup, el treball se centra principalment en l'àmbit dels plaguicides i els metabòlits d'aquests, encara que també s'estudien altres problemàtiques com la dels compostos clorats persistents (OC i PCB), difenilèter bromats (PDEB), hidrocarburs policíclics aromàtics (PAH), i més recentment, fàrmacs de diversos tipus i toxines marines, entre d'altres.

El nostre treball ha rebut el suport de diversos projectes i contractes nacionals i internacionals d'investigació, amb els quals ha existit una intensa col·laboració amb grups estrangers, es pot destacar el National Institute of Public Health and Environment (RIVM), Bilthoven, Holanda. Tot això ha donat com a resultat la publicació d'uns 100 articles científics en revistes ISI i a la defensa de deu tesis doctorals, les tres últimes amb menció de Doctorat europeu.

En els últims anys, s'ha prestat especial atenció a la problemàtica de la identificació/confirmació dels compostos detectats en mostres reals, especialment quan s'utilitzen tècniques basades en LC-MS i LC-MS/MS. Així mateix, s'han investigat detalladament els efectes que la matriu exerceix sobre la ionització en LC-MS ja que, en certs casos, poden arribar a causar greus problemes en la quantificació, bé per supressió de la ionització de l'analit o bé per exaltació. Un altre aspecte que s'aborda en l'actualitat és la identificació/elucidació de compostos desconeguts (*non-target analytes*) en mostres ambientals, així com la possibilitat de desenvolupar mètodes amplis de cribratge

(*screening*) on els analits poden ser seleccionats prèviament (*pre-target analysis*) o posteriorment, una vegada adquirides totes les dades (*post-target analysis*). En aquest àmbit, és on els analitzadors TOF i Q-TOF mostren un excel·lent potencial.

Tots aquests temes s'han abordat amb un cert detall en algunes de les nostres publicacions més recents, en articles sobre tendències (publicats en la revista Trends Anal. Chem.) o en revisions crítiques sobre l'estat de l'art (dues avaluacions d'experts publicades en Anal. BioAnal. Chem.).

En el nostre treball s'ha posat de manifest el potencial de la tècnica LC-MS/MS QqQ en anàlisi de residus de plaguicides (PRA). Es tracta d'una tècnica excel·lent per a la correcta quantificació i confirmació de plaguicides polars i TP en l'anàlisi de compostos diana (*target analysis*).

D'altra banda, la confirmació de la identitat dels compostos detectats en mostres reals pot ser complicada i poc fiable quan s'usa la tècnica LC-MS, per la qual cosa és de vital importància l'aplicació de criteris rigorosos de confirmació per evitar-ne falsos positius i/o falsos negatius en l'anàlisi. El criteri basat en l'ús de punts d'identificació (IP) (Decisió europea 2002/657/EC) és un dels més útils i àmpliament acceptats en l'actualitat. En un estudi comparat sobre el potencial i aplicabilitat de distints analitzadors MS adaptats a LC amb fins de confirmació, hem posat de manifest la importància que té no només aconseguir un nombre determinat de IP en l'anàlisi, sinó també l'especificitat de les transicions MS/MS seleccionades en mètodes basats en LC tàndem MS.

Són de gran interès els estudis d'elucidació de metabòlits i TP, formats en mostres d'aigua sota condicions de laboratori, ja que permeten conèixer els compostos més rellevants i incloure'ls, posteriorment, en els mètodes analítics desenvolupats, basats, per exemple, en l'ús de LC-MS/MS QqQ. L'aplicació d'aquests mètodes a mostres reals d'aigua ha permès, en el nostre cas, detectar nombrosos TP en les mostres analitzades, de vegades en concentracions superiors a les dels plaguicides inalterats (*parent compound*). La tècnica LC-QTOF és molt poderosa per elucidar metabòlits i TP en els experiments realitzats en laboratori. Aquest fet s'ha comprovat per a herbicides triazínics (estudis de fotodegradació) i per a l'insecticida diazinó (estudis de fotodegradació i de metabolisme, *in vivo* i *in vitro*). Les dades de massa exacta aportades per TOF MS permeten diferenciar entre compostos isobàrics i assignar una única fórmula empírica en la majoria dels casos, amb excel·lent sensibilitat. La possibilitat de treballar en tàndem MS amb els equips de QTOF és de gran ajuda per diferenciar entre isòmers de TP.

L'elucidació de compostos no diana (*non target*) en mostres ambientals és un repte complicat per als químics analítics. En el cas de compostos polars, difícilment analitzables per GC, la tècnica LC-TOF MS apareix com una de les més poderoses per aconseguir aquest objectiu. La informació complementària que aporten els equips de LC TOF i LC-QTOF és de gran ajuda en el procés d'elucidació de desconeguts, i de fet, ens ha permès detectar i confirmar diversos compostos *non target* en diferents tipus d'aigües. A pesar de l'èxit en l'elucidació d'uns quants compostos, un bon nombre d'intents resulta infructuós a causa de les extremes dificultats d'aquest treball. Sens dubte, es requereixen moltes més investigacions en aquest apassionant camp, en el que l'aplicació complementària de GC-TOF i LC-TOF apareix com una de les millores alternatives

Estudis d'exposició de la població a plaguicides: metabolisme en éssers humans

La preocupació pels efectes nocius derivats de la utilització de plaguicides ha anat en augment en els últims anys, com a conseqüència del major nivell de conscienciació sobre els riscos associats a l'ús d'aquest tipus de compostos. Aquesta problemàtica és especialment important a les zones agrícoles de cultiu intensiu, així com en el sector serveis de tractaments DDD (desinsectació, desinfecció, desratització).

Les matrius biològiques són fonamentals en l'aspecte preventiu, ja que l'anàlisi d'aquestes permet arribar a detectar precoçment una exposició excessiva dels treballadors abans que es produïsquen alteracions biològiques importants o que apareguen símptomes clínics; permeten alhora realitzar confirmacions de diagnòstic i són una excel·lent alternativa per avaluar l'exposició real a plaguicides.

Per poder utilitzar indicadors biològics de dosi interna, és necessari disposar de mètodes d'anàlisi de plaguicides i dels metabòlits d'aquests en matrius biològiques, principalment en sang i orina. No obstant, la dificultat de les anàlisis és una de les grans limitacions dels estudis relacionats amb el control biològic de l'exposició a plaguicides. A pesar de l'evolució de les tècniques analítiques, les anàlisis continuen sent complicades i molt cares i es requereixen tècniques analítiques adaptades amb espectrometria de masses, en especial LC-MS/MS, a més d'àmplia experiència i personal prou qualificat.

És, precisament, aquesta problemàtica analítica la que aborda, en els últims anys, el nostre grup de treball, a través de diversos projectes d'investigació. En el projecte titulat *Estudio del potencial de LC-MS/MS para el análisis de plaguicidas en sangre y orina, con especial énfasis en la identificación y elucidación de metabolitos*, del Programa sectorial de promoció general del coneixement, Ministeri Educació i Cultura, s'han desenvolupat nous mètodes analítics, basats en LC/MS/MS, per a la determinació sensible i ràpida de diversos plaguicides i metabòlits en sang, sèrum i orina.

Actualment, es fa ús del potent acoblament instrumental cromatografia líquida-espectrometria de masses amb analitzador híbrid quadrupol-temps de vol, amb l'objectiu d'investigar la formació de metabòlits de plaguicides en distints tipus de mostres d'interès ambiental (sòls, aigües) i toxicològic (orina, sèrum). A pesar que la tècnica LC-QTOFMS resulta actualment imprescindible en els àmbits farmacèutic i bioquímic, a penes s'ha aplicat en el mediambiental i en el toxicològic, per la qual cosa pretenem endinsar-nos en àrees en les quals hi ha escassa o nul·la tradició en quant a l'ús d'aquesta. El projecte se centra en dos grans temes: 1) l'exposició de les persones a plaguicides, 2) la problemàtica ambiental que suposa la presència de plaguicides en les aigües. En ambdós casos, les mostres procedents dels estudis s'investigaran exhaustivament amb un equip de LC-QTOFMS, a fi d'identificar els compostos que s'hagen format, fruit del metabolisme, transformació i/o degradació.

Es pretén iniciar una línia d'investigació sobre l'aplicació d'aquesta tècnica en un camp de gran interès i actualitat, com és el dels plaguicides. S'aportarà informació sobre els metabòlits i productes de transformació més rellevants, la qual cosa ha de permetre dur a terme programes de control d'aquests compostos en les aigües, així com l'avaluació del grau d'exposició dels éssers vius a través d'un adequat control biològic. La metodologia de treball desenvolupada podrà aplicar-se en el futur a uns altres tipus de contaminants i drogues sobre els quals a penes hi ha informació en l'àmbit científic pel que fa al metabolisme/transformació d'aquestes substàncies en éssers humans i en el medi ambient.

Aquestes actuacions s'emmarquen dins del projecte d'investigació *Aplicación del acoplamiento cromatografía líquida-espectrometría de masas (LC-MS/MS y LC-QTOF-MS) a la identificación de metabolitos de plaguicidas en muestras de interés ambiental y toxicológico*, finançat pel MEC

Una línia de treball relacionada amb aquests temes se centra en l'avaluació de l'exposició a compostos clorats i fosfòrics, mitjançant la determinació d'aquests en mostres de teixit adipós humà, així com en la sang i en el sèrum. Per dur a terme aquests estudis, s'ha col·laborat amb el Laboratori de Radiologia de la Universitat de Granada, amb el Gabinet de Seguretat i Higiene en el Treball de Castelló i amb l'Hospital General de Castelló.

Recentment s'ha iniciat un interessant estudi a llarg termini sobre la presència de xenoestrògens en mostres de teixit gras humà i la seua possible relació amb certs processos cancerígens hormonodependents, com el càncer de mama. Aquest treball es desenvolupa en col·laboració amb l'Institut Valencià d'Oncologia (IVO) de València.

Estudis sobre aqüicultura, amb especial èmfasi en la toxicitat, la bioacumulació i la biomagnificació de plaguicides i de compostos clorats en organismes marins.

Els primers treballs al camp de compostos organoclorats (OC) en organismes marins es remunten a la dècada dels anys 80 al Col·legi Universitari de Castelló, quan es van dur a terme les primeres determinacions d'OC en diversos tipus d'organismes (crustacis, mol·luscos i peixos) en el marc del *Programa de vigilància de la contaminació del Mediterráneo (MEDPOL)*. Des de llavors, s'ha mantingut una línia continuada d'investigació en aquest camp, que, lògicament, ha evolucionat i que, cada vegada més, s'ha basat en treballs de col·laboració amb l'Institut d'Aqüicultura de Torre La Sal, del CSIC.

Les activitats exercides en el programa MEDPOL, en el qual aquest grup d'investigació va participar durant una dècada, es van complementar amb projectes d'investigació, com *Nuevas aportaciones a la metodología analítica en la determinación de metales pesados y pesticidas en organismos marinos, sedimentos y aguas residuales*, CAICYT, Ministeri d'Educació i Ciència, desenvolupat entre 1985 i 1987. Cal destacar també el projecte *Study of the Toxicity, Bioaccumulation and Persistence of Some Heavy Metals and Pesticides in the Crayfish Procambarus clarkii (Girard) on the Albufera Lake of Valencia, Spain*, finançat per la FAO, *Mediterranean Action Plan*, i dut a terme entre 1985 i 1988.

El desenvolupament de metodologia analítica avançada ha estat fonamental per millorar els mètodes d'anàlisi de contaminants orgànics en aquest tipus de mostres complexes. Aquest tema ha estat objecte de diverses col·laboracions amb grups nacionals i estrangers, entre els quals cal destacar el *National Institute of Public Health and Environment*, d'Holanda, amb el qual es va desenvolupar, a mitjan dels anys 90, una línia de treball sobre nous mètodes automatitzats d'anàlisi per a compostos OC i OP en organismes marins (peixos, crustacis, mol·luscos, mamífers). La metodologia analítica desenvolupada va permetre obtindre dades d'interès sobre nivells de plaguicides i els metabòlits d'aquests en projectes com ara *Toxicidad, bioconcentración y biodepuración de pesticidas organofosforados en dos especies autóctonas de la Comunidad Valenciana (Aphanius iberus i Artemia sp.)*. *Estudio de la bioacumulación en cadenas tróficas artificiales*, finançat per la Generalitat Valenciana, en el qual es va afrontar la problemàtica de la bioacumulació de plaguicides OP en espècies aquàtiques autòctones de la Comunitat Valenciana.

Recentment, s'ha realitzat un projecte sobre *Problemática de los contaminantes organoclorados en piscicultura. Bioacumulación de los plaguicides y bifenilos policlorados a través de los alimentos de origen marino y su posible incidencia en el hombre*, finançat per la Generalitat Valenciana. Es tracta d'una línia d'investigació que es desenvolupa des de fa diversos anys en col·laboració amb l'Institut d'Aqüicultura de Torre La Sal (IATS), del CSIC. L'objectiu principal és caracteritzar els pinsos, farines i olis de peix usats per a l'alimentació de peixos en aqüicultura pel que fa a continguts de contaminants persistents organoclorats. A partir d'aquesta informació, es pretén estudiar el grau d'acumulació d'aquests contaminants en animals que hagen estat alimentats amb aquests pinsos i avaluar-ne la possible incidència i els riscos per a la salut de la persones, com a última baula de la cadena tròfica.

Aquesta línia de treball forma part de les investigacions sobre bioacumulació de contaminants en organismes marins que es realitzen pel nostre grup des de fa quasi deu anys. En aquest context, es va presentar, en 2002, una expressió d'interès (EOI) per part de l'Institut d'Investigacions Marines (CSIC) sobre un projecte integrat en el qual figura el nostre grup d'investigació *Genomics and proteomics to improve the safety and quality of aquaculture products*. En l'àmbit de la contaminació marina, el nostre grup d'investigació està involucrat igualment en una altra EOI sobre el projecte integrat *Knowledge based policy building strategies for marine contaminant reduction (Mediterranean)*, coordinat pel centre francès IFREMER, amb el qual es mantenen contactes regularment a través del seu coordinador científic, Axel Romana.

Amb la concessió, a finals de 2003, del projecte *Depuración del ácido domoico en dos bivalvos de interés comercial de la Comunidad Valenciana: chirla (Chamelea gallina) y tellina (Donax trunculus)*. *Estudios de la efectividad de la N-acetil-cisteína como agente detoxificador*, s'obri una nova línia d'investigació orientada a l'estudi de toxines naturals en el medi marí, i a l'assaig d'agents detoxificadors que han de permetre una ràpida depuració de les toxines per part dels organismes marins d'interès comercial.

Amb aquest primer estudi, realitzat en col·laboració amb investigadors de l'IAST, es pretén conèixer millor i aportar solucions al problema de la contaminació per àcid domoic (*Amnesic Shellfish Poisoning, ASP*), una neurotoxina que, periòdicament, afecta les poblacions de mol·luscos, com a conseqüència de la multiplicació massiva esporàdica d'algunes espècies de microalgues diatomees, capaces de sintetitzar aquesta neurotoxina natural.

Laboratori d'Anàlisi de Residus de Plaguicides

Estudis en compliment amb els principis de les Bones Pràctiques de Laboratori

El LARP ha realitzat, fins a l'actualitat, un important nombre d'estudis BPL amb finalitats de registre per encàrrec de companyies multinacionals del sector fitosanitari, així com una àmplia investigació sobre control de l'insecticida clorpirifos en aigües, a fi de defensar la inclusió d'aquesta matèria activa en l'annex I de la Directiva 91/414.

Entre els diversos estudis, cal destacar el dut a terme mitjançant conveni de col·laboració amb l'Institut Nacional d'Investigació i Tecnologia Agrària i Alimentària (INIA) per a la realització de l'estudi pilot *Determinación de residuos de productos fitosanitarios en cultivos menores seleccionados, de conformidad con los principios de las Buenas Prácticas de Laboratorio*, per encàrrec del Ministeri d'Agricultura, Pesca i Alimentació (MAPA). Es tracta d'un treball de dos anys de durada (campanyes de 2002 i de 2003) l'objectiu del qual és poder defensar i registrar l'ús de certs plaguicides per a conreus menors, que resulten d'interès per a Espanya. Aquesta defensa dels denominats «conreus menors» ha de realitzar-se per a prou combinacions plaguicida/cultiu; per la qual cosa, cal suposar que aquest tipus de treballs serà una de les principals activitats del LARP en els pròxims anys.

Així mateix, a finals de 2003 es va iniciar una important col·laboració amb el MAPA amb l'objecte de realitzar estudis BPL d'interès per a l'estat espanyol, normalment relacionats amb la presència de plaguicides en productes vegetals processats (oli d'oliva, pebre roig, suc de taronja), o bé amb conreus, d'interès per a Espanya, que poden quedar desprotegits davant els importants canvis que s'esdevenen en la UE en matèria de plaguicides (els plàtans per exemple). Aquests treballs s'emmarquen dins de les activitats del LARP com a Laboratori de Referència Nacional del MAPA en matèria

d'estudis BPL per al registre de plaguicides (BOE número 150, de 24 de juny de 2005), basant-se en allò que disposa la Llei 43/2002, de 20 de novembre, de sanitat vegetal.

La realització d'estudis en compliment amb els principis de les BPL és, sense dubte, l'activitat més destacable del LARP. Fins ara s'han realitzat 90 estudis BPL, sobre diversos temes:

- Estudis de residus de plaguicides en vegetals i en productes transformats.
- Estudis d'estabilitat de residus.
- Estudis de bioacumulació en organismes aquàtics.
- Estudis sobre comportament mediambiental de productes fitosanitaris, en especial pel que fa a la presència d'aquests en aigua i en sediments.

Secció de Recursos Hídrics

El Grup d'investigació de Recursos Hídrics ha desenvolupat la seua activitat des dels inicis dels anys 80, primer al Col·legi Universitari de Castelló, dependent de la Universitat de València i, posteriorment, en el Departament de Ciències Experimentals de la Universitat Jaume I.

En els anys 80 i part dels 90, la principal preocupació era la degradació de la qualitat dels recursos hídrics, primer per la intrusió marina i els nitrats i, posteriorment, pels metalls pesants i els plaguicides. En els últims anys, els problemes de qualitat semblen haver passat a un segon pla, en benefici dels problemes de gestió dels recursos hídrics, encara que incloent-ne la qualitat, naturalment. Així, apareixen problemes lligats a la reutilització d'aigües residuals, a la sobreexplotació i, més recentment, a altres qüestions emergents com el dessalatge. Els problemes de quantitat, a pesar de l'expectativa creada pel transvasament d'aigües des del riu Ebre, o precisament per això, comencen a ser de la màxima preocupació.

En síntesi, les principals línies d'investigació fins ara desenvolupades han estat les següents:

Processos de salinització

L'objectiu inicial era caracteritzar els processos d'intrusió marina que havien aparegut als aqüífers costaners de Castelló, a finals de la dècada dels seixanta, i que havien estat estudiats per mètodes tradicionals, basats essencialment en l'anàlisi de clorurs i de conductivitat.

Prenent com a referència l'aqüífer d'Orpesa-Torreblanca es va aprofundir en l'estudi dels processos modificadors associats a la mescla d'aigua dolça i aigua salada i es van posar de manifest l'existència de reaccions d'interacció de l'aigua de mescla amb la matriu sòlida de l'aqüífer. Probablement, el més nou d'aquella investigació va ser la utilització d'ions minoritaris (bromur i estronci) que van permetre identificar l'existència d'aigües, la salinitat de les quals no semblava tindre relació directa amb un simple procés de mescla d'aigua de mescla i aigua salada. També els registres de conductivitat i temperatura efectuats periòdicament en alguns sondejos van permetre conèixer millor la dinàmica de la zona de mescla.

Posteriorment, la tesi doctoral de Giménez (1994) va aprofundir molt més en aquestes qüestions, especialment en l'interès dels ions minoritaris com a indicadors de salinitat i en els processos de canvi iònic, basats en la tècnica, pionera a Espanya, en aqueix moment, d'anàlisi de fàcies hidroquímiques (AFQ) i l'estudi dels deltes iònics. L'aproximació multiparamètrica al procés de salinització va permetre de discriminar diversos orígens (intrusió marina i fluxos salins regionals) als aqüífers costaners de Castelló, així com de millorar sensiblement el grau sobre la hidrogeoquímica d'aquests processos. Probablement, el més significatiu d'aquesta investigació fóra la posada a punt d'una metodologia que ha estat, posteriorment, utilitzada amb èxit per uns altres grups d'investigació.

Recentment, s'ha finalitzat un estudi detallat de l'avanç de la intrusió en el sector meridional de la Plana de Castelló, en una àrea de captacions d'aigua per a abastiment urbà.

Altres treballs relacionats amb aquesta mateixa problemàtica han estat realitzats a l'aqüífer del pantà de Zapata (Cuba), en el marc de dos projectes de l'AECI, i en col·laboració amb investigadors cubans i de les universitats de Granada i del País Basc. En aquest cas, i atesa la naturalesa kàrstica de l'aqüífer, l'estudi hidroquímic va posar èmfasi en els processos de dissolució i de precipitació de carbonats.

També en l'àmbit internacional, el doctor Ignacio Morell ha participat activament en les accions COST 65 i 621, les quals van tractar sobre protecció d'aqüífers kàrstics i gestió d'aigües subterrànies en regions kàrstiques costaneres, respectivament.

Contaminació d'aqüífers per activitats agrícoles

Des de 1987, i de manera ininterrompuda fins a l'actualitat, s'ha participat activament en la línia d'investigació sobre plaguicides desenvolupada pel Grup de Medi Ambient i Recursos Naturals. Inicialment, l'objectiu era controlar la presència de plaguicides en aigües d'abastiment urbà; però, posteriorment, es va ampliar l'àmbit d'actuació al control de la presència de residus de plaguicides en aigües superficials i subterrànies.

En aquesta mateixa línia, el Grup d'investigació de Recursos Hídrics va promoure i va coordinar l'estudi sobre plaguicides a l'aqüífer de la Vega mitja i baixa del Segura, dut a terme mitjançant conveni subscrit amb l'Institut Geològic i Miner d'Espanya (IGME), que va arribar a determinar fins a cinquanta-cinc compostos en cada una de les mostres analitzades.

Paral·lelament, s'han realitzat investigacions sobre la mobilitat de plaguicides en sòls i en la zona no saturada. La primera experiència es va realitzar en col·laboració amb l'Institut Geològic i Miner a una parcel·la experimental d'Almassora (Castelló) on es va estudiar el comportament dels compostos dicofol, dimetoat, tetradifó i fenitrotió.

Aquests estudis en parcel·la experimental s'han complementat amb experiències d'adsorció en *batch* i en columnes en què s'han reproduït les característiques del sòl, s'han controlat diverses variables i s'han determinat experimentalment les constants d'adsorció de cada un dels compostos.

Estudis semblants s'han dut a terme a una parcel·la que el Departament de Geologia de la Universitat Nacional del Sud té a Badia Blanca (Argentina), i on s'ha desenvolupat la tesi doctoral de C. Lexow, s'han realitzat les experiències d'absorció de l'herbicida glifosat a l'UJI.

Una altra sublínia d'investigació relacionada amb la contaminació agrícola ha consistit en l'estudi de la presència i evolució dels nitrats als aquífers castellanencs i en altres llocs, com l'aqüífer quaternari de Vitoria-Gasteiz o el poliè de Zafarraya (Granada).

Aquesta línia es va iniciar en 1992 amb la posada en marxa del projecte *Estudio de la contaminación de origen agrícola en el subsistema acuífero de la Plana de Castellón*, del Programa Nacional d'Investigació Agrícola, Ministeri d'Educació i Ciència.

En l'àmbit internacional, es va estudiar i modelizó mitjançant el programa MELEF el transport de nitrats a la zona no saturada, aplicat a una parcel·la experimental a Saint Agoustin (Québec, Canadà) i també a la parcel·la experimental d'Almassora (Castelló).

Com a consultor de l'Organització d'Estats Americans (OEA), el doctor Morell ha participat en un projecte sobre *l'Impacto da agricultura nos recursos hídricos subterrâneos da bacia do rio Verde/Jacaré (Bahía, Brasil)*, l'investigador principal del qual era el doctor Herald Peixoto, de la Universitat de Salvador de Bahía. L'objectiu d'aquest projecte era planificar una estratègia metodològica que permetera avaluar la contaminació de l'aqüífer kàrstic de la regió d'Irecé, on s'ha desenvolupat en les dues últimes dècades una intensa activitat agrícola.

Així mateix, el doctor Morell és consultor en el projecte titulat *Poluição difusa da hidrosfera devido a práticas agrícolas: origem e mobilidade de poluentes na zona*

vadosa. Illes Açores (Portugal), l'investigador principal del qual és el doctor José Virgilio Cruz, de la Universitat de les Illes Açores. L'objectiu del projecte és caracteritzar i avaluar la contaminació del Llac Verd, a l'Illa de Sant Miquel, causada per les activitats agrícoles, ramaderes i urbanes que es desenvolupen als voltants d'aquest.

Contaminació per metalls pesants

La determinació de metalls pesants ha generat dues línies d'investigació en el grup. La inicialment desenvolupada, determinació del contingut total de metall, i una de més recent implantació, determinació d'espècies metàl·liques.

La primera línia de treball, la determinació del metall total, pot considerar-se eventual, i es limita a tres etapes concretes: entre 1992 i 1995 en el marc d'un conveni d'investigació subscrit amb l'empresa IPROMA sobre contaminació per metalls pesants en l'aqüífer de la Plana de Castelló, durant els anys 1994 i 1995 dins d'un contracte d'investigació amb Unió de Mútues sobre Estudi d'Elements Tòxics Metàl·lics en Atmosferes Laborals del Sector Ceràmic, i en 1998 en el marc d'un altre conveni subscrit amb l'empresa FACSA sobre presència de metalls en el sector meridional de l'aqüífer de la Plana de Castelló.

En el primer cas es tractava d'un estudi l'objectiu del qual era el reconeixement de la presència de metalls pesants (Cr, Cd, Pb, Zn, Cu) en l'aqüífer de la Plana. En el segon cas es tractava d'obtenir informació sobre l'estat de l'ambient laboral en el sector ceràmic quant a la presència i nivells de B, Ba, Cd, Co, Cr, Cu, Ni i Zn, i la possible relació d'aquests amb el procés de producció. En el tercer cas, l'objectiu era indagar sobre l'origen del mercuri trobat en la meitat meridional de la Plana de Castelló i que afectava pous d'abastiment urbà. Es va concloure que l'origen del mercuri semblaven ser els abocaments d'aigües residuals de la indústria del calcer a la Vall d'Uixó i que la mobilització augmentava per la formació de complexos clorurats, afavorida en aigües de major salinitat.

La segona línia d'investigació, determinació d'espècies metàl·liques, es va iniciar en 1998 i continua en l'actualitat. Té com a propòsit director el desenvolupament de metodologia analítica per a la determinació de les diferents espècies químiques les quals metalls i metal·loides poden trobar-se en diferents tipus de matrius. Les anàlisis d'especiació es porten a terme mitjançant tècniques adaptades (majoritàriament HPLC o GC-ICPMS) per aprofitar el potencial d'ambdues: gran capacitat de separació i molt bona sensibilitat i caràcter multielemental. Una aclaparadora majoria d'estudis utilitzen la cromatografia líquida convencional, mentre que són realment escassos els duts a terme adaptant cromatografia líquida capil·lar (columnes «microbore») amb ICPMS. Els avantatges que pot aportar aquest adaptament són: millor sensibilitat, a causa de la menor dispersió de l'anàlit dins de la microcolumna i a la millor eficàcia de transport de massa dels micronebulitzadors necessaris, menor consum de reactiu i mostra i major poder de resolució.

Els treballs en curs aborden l'estudi de la separació d'espècies de As, Se, Cr, Pb, Sn i Hg mitjançant columnes «microbore» (amb la fase estacionària més adequada) i l'òptim adaptament al detector ICPMS mitjançant diferents sistemes micronebulitzador —cambra de nebulització. L'objectiu final és estudiar el potencial de la cromatografia capil·lar adaptada a ICPMS per a la determinació d'espècies organometàl·liques seleccionades. La millora de la sensibilitat és el principal èxit que s'espera obtenir en relació amb la LC convencional, la qual cosa facilitaria la determinació d'ultratraces d'espècies metàl·liques en mostres d'interès ambiental. L'ús de la metodologia desenvolupada per a la determinació d'espècies metàl·liques en diferents tipus d'aigües de la Plana de Castelló es considera una aplicació, a mitjà termini, d'interès evident.

Recàrrega natural

Aquesta línia d'investigació s'ha desenvolupat entre els anys 1998 i 2002 i ha consistit bàsicament en la determinació experimental de la taxa de recàrrega en una parcel·la lisimètrica dissenyada a l'efecte.

Encara que la finalitat específica de la parcel·la era l'estudi de la infiltració d'aigües residuals, la instrumentació utilitzada i la metodologia necessària per a això van permetre també realitzar càlculs precisos d'infiltració en els lisímetres en diferents condicions operacionals.

Infiltració d'aigües residuals

En el marc d'un projecte finançat per la Fundació Bancaixa, titulat *Reutilización y eliminación de aguas residuales urbanas depuradas*, es va encetar una línia d'investigació, l'objectiu de la qual era estudiar els efectes que sobre el sòl i les aigües subterrànies podia originar la reutilització d'aigües residuals urbanes depurades per al reg.

Les principals conclusions obtingudes van ser que, amb la notable excepció del bor, la zona no saturada es comportava com un reactor químic molt actiu que impedia l'arribada fins a l'aqüífer de matèria orgànica i fosfats; també, es va constatar que les aigües de retorn de reg presentaven una salinitat general notablement més elevada que la de les aigües de reg.

La continuació d'aquesta línia de treball ha consistit en l'ampliació de la parcel·la experimental amb la instal·lació de 17 lisímetres, la qual cosa permet, d'una banda, experimentar en diferents condicions d'entrades d'aigua i fertilitzants i, d'una altra, quantificar les masses de soluts posats en joc. Les principals conclusions són que la utilització d'aigües residuals per al reg provoca salinització i sodificació dels sòls, i que el drenatge profund és altament salí.

Hidrogeoquímica

Encara que es pot considerar que la Hidrogeoquímica és el fil conductor de les diferents línies d'investigació desenvolupades, cal destacar també una línia estrictament hidrogeoquímica, iniciada en 1998, mitjançant un projecte-pont finançat per la CICYT i completada en el marc del projecte, també de la CICYT, denominat *El boro como indicador de procesos geoquímicos* (HID99-0597-C02-01), coordinat amb la Universitat d'Almeria i desenvolupat entre els anys 2000 i 2003.

L'objectiu fonamental d'aquest projecte ha estat determinar la utilitat de la relació isotòpica del bor (11B/10B) com a indicador de processos de salinització i d'altres mecanismes contaminants.

Gestió de recursos hídrics

En els últims anys, una part de la labor investigadora del grup de treball s'ha dedicat a la gestió dels recursos hídrics, especialment en l'àmbit castellanenc.

Aquesta labor està relacionada amb les activitats de la Taula de l'Aigua, la Comissió Tècnica de la qual coordina el doctor Ignacio Morell, i els objectius bàsics del qual són millorar el grau de coneixement dels recursos hídrics disponibles, optimitzar l'ús d'aquests i plantejar noves actuacions tendents a l'obtenció de nous recursos o la preservació dels que ja existeixen. En aquest context, s'han realitzat diversos treballs encarregats per la Taula de l'Aigua, entre els quals destaquen el *Diagnóstico de los recursos hídricos en la provincia de Castellón: recopilación y evaluación de la información* (2001) i *Estudio de viabilidad de recarga artificial de acuíferos de la provincia de Castellón* (2002). En l'actualitat, i en aquest mateix marc, s'estan desenvolupant els projectes *Estudio piezométrico de la Plana de Castellón* i *Modelo matemático del acuífero de la Plana de Castellón*, els quals són realment estudis previs d'un ambiciós projecte de recàrrega artificial amb aigües residuals urbanes depurades.

1.6. Projectes d'investigació en 2005

Codi del projecte: AGL2002-04224-C02-01.

Títol: *Mejora de la calidad organoléptica y nutritiva del tomate.*

Font de finançament: Ministeri de Ciència i Tecnologia.

Import: 69.000 euros.

Data de començament: 01/12/2002. **Data de finalització:** 01/12/2005.

Investigador principal: Joaquim Beltran Arandes.

Altres investigadors: Francisco López Benet i Mónica Asunción Hurtado Ruiz.

Objectiu: la utilització de mètodes de quantificació de compostos volàtils implicats en l'aroma y sabor de la tomata (espectrometria de masses amb adaptament MS/MS, GC/MS i GC/MS/MS), així com distints modes d'extracció, fonamentalment mitjançant volatilització i microextracció en fase sòlida (SPME), per establir perfils característics en diferents tipus de tomata (varietats tradicionals de consum en fresc, d'ús industrial, híbrids comercials i espècies silvestres relacionades). L'objectiu final és orientar la selecció dels materials en els programes de millora.

Labor desenvolupada: el desenvolupament del projecte durant els tres anys de durada ha seguit fidelment els objectius previstos, així com el pla de treball que es dissenyà en un primer moment. En aquest sentit, s'ha treballat intensament en el desenvolupament d'un procediment analític robust, senzill i fiable que permeti la determinació d'aromes en les mostres vegetals seleccionades. En una primera etapa de la investigació, s'han realitzat anàlisis amb especial èmfasi en la detecció i identificació de les aromes presents en les mostres de tomata. L'ús de l'espectrometria de masses en tàndem (basada en trampa d'ions amb possibilitat de realitzar MS/MS) es va considerar, però va haver de ser descartada a causa de les característiques dels compostos estudiats. El següent pas en el desenvolupament del projecte va ser l'estudi dels procediments d'extracció d'aromes a partir de les mostres de tomata. El major esforç en el desenvolupament de metodologia es va dirigir a l'optimització d'un mètode de purga i trampa (fora de línia) i un altre basat en l'ús de microextracció en fase sòlida (SPME). En ambdós casos es va dur a terme l'optimització de les diferents variables involucrades (massa de mostra, temperatures, temps d'extracció, desorció, etc). Una vegada determinades les condicions d'extracció més adequades en cada cas, es va procedir a estudiar en profunditat els aspectes quantitatius d'ambdós procediments. S'han comparat diversos modes de quantificació fins i tot l'ús de calibrat extern en dissolvent, calibrat per addicions estàndard, calibrat en matriu i l'ús de patró intern marcat isotòpicament. La validació dels mètodes proposats, realitzada seguint les guies SANCO que apliquen a la determinació de contaminants en matrius d'aliments, ha revelat que l'ús de patró intern marcat isotòpicament en combinació amb un calibrat extern en dissolvent pur, proporciona resultats satisfactoris i amb un grau de precisió adequat a les mostres en estudi.

Codi del projecte: REN2002-01818.

Títol: *Aprovechamiento de nuevos avances en instrumentación analítica para la realización de estudios sobre el impacto de residuos de plaguicidas en la calidad de las aguas subterráneas.*

Font de finançament: Ministeri de Ciència i Tecnologia.

Import: 80.500 euros.

Data de començament: 03/03/2003. **Data de finalització:** 03/03/2006.

Investigador principal: Francisco López Benet.

Altres investigadors: Félix Hernández Hernández, Ignacio Morell Evangelista, Joaquim Beltran Arandes i Juan Vicente Sancho Llopis.

Objectiu: desenvolupar i optimitzar nous mètodes d'anàlisi per a residus de plaguicides en aigües mitjançant l'aplicació dels últims avanços en instrumentació analítica i de preparació de mostra. Amb aquest objectiu, es dissenyaran mètodes basats en l'ús de l'espectrometria de masses adaptada a cromatografia (cromatografia de líquids i gasos), en emprar les possibilitats de millora de sensibilitat i especificitat que l'espectrometria de masses tàndem (MS/MS) ofereix. A més, es farà ús de l'augment de sensibilitat, més precisió i elevada selectivitat (gràcies a la capacitat de mesura de masses exactes) que els espectròmetres de masses basats en analitzadors de temps de vol (TOF) proporcionen. Establiment dels criteris científics per al disseny d'un programa de vigilància i investigació de residus de plaguicides en aigües subterrànies. Per a això, es consideren tant els aspectes hidrogeològics (tipus d'aqüífers, vulnerabilitat) com els agronòmics (plaguicides més usats, mètodes d'aplicació, tipus de sòls), així com les propietats fisicoquímiques dels plaguicides a investigar (solubilitat en aigua, persistència, degradació i mobilitat). El programa s'aplicarà a la Comunitat Valenciana, i en aquest s'indicaran els plaguicides a controlar, els principals productes de transformació dels plaguicides, els punts de presa de mostres i la freqüència dels mostratges, així com els mètodes d'anàlisi que permeten la determinació de la totalitat dels anàlits seleccionats. Aquests mètodes han de complir els requisits exigits per la Directiva europea sobre aigües potables 98/83/EG i han de ser desenvolupats i validats convenientment als nostres laboratoris. Finalment, s'han de proposar línies d'actuació a fi de reduir la contaminació per plaguicides a la zona estudiada, amb especial atenció als compostos que més sovint s'hagen detectat, i s'establirà la metodologia de treball aplicable a futurs programes de control de residus de plaguicides, tant en l'àmbit autonòmic com nacional. Es pretén resoldre l'actual situació existent, caracteritzada per la falta de dades contrastades sobre residus de plaguicides en aigües, la qual cosa resulta preocupant atès l'elevat ús d'aquests compostos en l'agricultura mediterrània.

Labor desenvolupada: s'han estudiat les possibilitats que ofereixen els analitzadors de triple quadrupol (QqQ), així com els de temps de vol (TOF) i els híbrids Q-TOF per a l'anàlisi de residus de plaguicides en aigües utilitzant tècniques cromatogràfiques. Així, s'han desenvolupat diferents mètodes basats en l'acoblament d'aquestes tècniques amb espectrometria de masses en tàndem, prestant especial atenció a la confirmació dels compostos que es du a terme mitjançant la selecció de dues transicions per a cada un dels plaguicides estudiats.

S'han desenvolupat mètodes basats en l'acoblament en línia d'una etapa de preconcentració mitjançant extracció en fase sòlida (SPE) a un sistema LC-MS/MS, incloent-hi dos mètodes multiresiduals (per a la determinació de 18 plaguicides polars i nou productes de transformació), així com dos mètodes específics per a la determinació de compostos polars d'elevada dificultat analítica (glifosat, glufosinat i AMPA, en un mètode, i acrilàmida en un altre). També s'ha desenvolupat un mètode GC-MS/MS amb analitzador de triple quadrupol per determinar residus de 50 compostos que pertanyen a diferents famílies químiques (pentaclorobenzè, 19 plaguicides organoclorats i organofosforats, sis herbicides, set PCB, 16 PAH, dos difenil èters bromats i tres

octil/nonil fenols), la majoria d'aquests inclosos en la llista de contaminants prioritari en la legislació europea. Tots els mètodes desenvolupats permeten la determinació sensible (subppb) i selectiva dels compostos estudiats, i han estat completament validats i aplicats a l'anàlisi de mostres reals.

En aquest sentit, s'ha dissenyat i executat un programa de vigilància de residus de plaguicides a la Comunitat Valenciana amb un total de 21 punts de mostreig (aigües subterrànies i superficials) i 21 plaguicides, incloent-hi productes de transformació. Els resultats obtinguts indiquen que són els herbicides i els productes de transformació els compostos que es detecten amb major freqüència, tal com era previsible atès el caràcter polar d'aquests.

Codi del projecte: BQU2003-02685.

Títol: *Aplicación del acoplamiento cromatografía líquida-espectrometría de masas (LC-MS/MS y LC-QTOFMS) a la determinación de metabolitos de plaguicidas en muestras de interés ambiental y toxicológico.*

Font de finançament: Ministeri de Ciència i Tecnologia.

Import: 86.250 euros.

Data de començament: 01/12/2003. **Data de finalització:** 01/12/2006.

Investigador principal: Félix Hernández Hernández.

Altres investigadors: Juan Vicente Sancho Llopis, Roque Serrano Gallego, Antoni Francesc Roig i Navarro, Elena Pitarch Arquimbau, Carmen Hidalgo Ortiz i María Ibáñez Martínez

Objectiu: investigar les aplicacions analítiques de l'adaptament instrumental LC-MS amb analitzador híbrid quadrupol-temps de vol (QTOF) quant a la identificació i elucidació estructural de metabòlits de plaguicides en dues àrees de treball d'interès ambiental i toxicològic: la transformació d'aquests compostos en el medi ambient sòl/aigua i el metabolisme en éssers humans que hagen estat exposats a plaguicides. Per a això, es realitzen diferents experiències de camp i de laboratori: 1) assajos in vitro amb microsomes hepàtics i hepatòcits humans, a fi de simular els processos metabòlics que tenen lloc en persones exposades a plaguicides; 2) experiències de fotodegradació en laboratori sobre mostres d'aigua fortificades amb plaguicides seleccionats, a fi de conèixer els productes de transformació resultants de la fotodegradació que podrien formar-se en el medi ambient; 3) assajos de camp sobre parcel·les experimentals, que permeten reproduir els processos reals que experimenten els plaguicides en ser aplicats al camp. La informació obtinguda mitjançant la combinació d'estudis de laboratori i de camp, amb la investigació analítica posterior de les mostres/extractes mitjançant LC-QTOF MS, permet establir els compostos (metabòlits i productes de transformació) que han d'investigar-se per procedir a un control més realista del grau d'exposició de les persones a plaguicides o del nivell de contaminació de les aigües. Es desenvolupa, així mateix, metodologia analítica avançada basada en l'ús de tècniques de LC adaptades a espectrometria de masses en tàndem per a l'avaluació (quantificació i correcta identificació) del nivell d'exposició/contaminació en el tipus de mostres investigades (fluids biològics humans i aigües). La metodologia analítica desenvolupada s'aplica a mostres reals seleccionades a fi de comprovar l'existència dels productes investigats en aquestes. L'objectiu últim és establir una metodologia analítica de treball poderosa i moderna, que pugui aplicar-se també a altres camps d'interès relacionats amb l'impacte de contaminants orgànics i fàrmacs en el medi ambient i en la salut de les persones.

Labor desenvolupada: per a l'elucidació de metabòlits en mostres ambientals, s'han estudiat, mitjançant LC-QTOF, mostres fortificades amb distints plaguicides i sotmeses a fotodegradació. Per al desenvolupament de la metodologia general s'ha seleccionat un grup de plaguicides àmpliament detectat en mostres ambientals com són els herbicides triazínics. Amb l'ús de la metodologia desenvolupada s'han elucidat diferents metabòlits d'aquesta família; molts d'aquests han estat inequívocament identificats gràcies a les excel·lents prestacions del QTOF. Posteriorment, aquesta estratègia general ha estat ampliada a l'elucidació de metabòlits procedents d'altres plaguicides àmpliament detectats en les aigües de la Comunitat Valenciana (bromacil, diuró, carbendazima, glifosat, etc).

Els metabòlits elucidats mitjançant l'ús de LC-QTOF han estat inclosos, posteriorment, en els mètodes d'anàlisi d'aigües subterrànies i superficials realitzats amb instruments de triple quadrupol. Aquests mètodes s'han validat a nivell de residu i s'han aplicat a mostres d'aigua procedents de parcel·les controlades a les quals s'hi havia aplicat els plaguicides estudiats. D'altra banda, també s'han aplicat aquests mètodes al control d'aigües superficials i subterrànies de la Comunitat Valenciana. En ambdós casos, la concentració obtinguda de metabòlits va ser normalment significativa, i va ser, en

algunes ocasions, clarament superior al plaguicida inalterat. Aquest fet demostra la importància de la inclusió dels metabòlits per obtenir una imatge més realista de la contaminació per plaguicides.

S'ha estudiat l'aplicabilitat de l'acoblament LC-QTOF en l'elucidació de metabòlits de plaguicides en mostres d'interès toxicològic. Amb aquest fi, s'ha seleccionat l'insecticida diazinó com a anàlit objecte d'estudi. S'han realitzat assajos in vitro amb microsomes hepàtics i assajos in vivo després de subministrar aquest insecticida a rates de laboratori. Distints metabòlits d'aquest insecticida han estat elucidats inequívocament i es poden seleccionar com a marcadors de l'exposició al diazinó.

Amb les experiències realitzades en aquest projecte ha escrit la seua tesi doctoral María Ibáñez Martínez, la qual serà defensada al llarg del segon semestre de 2006.

Codi del projecte: P1 1B2003-08.

Títol: *Depuración del ácido domoico en dos bivalvos de interés comercial de la Comunidad Valenciana, la chirla (Chamelea gallina) y la tellina (Donax trunculus). Estudio de la efectividad de la n-acetil-cisteína como agente detoxificador*

Font de finançament: Universitat Jaume I-Fundació Caixa Castelló.

Import: 12.100 euros.

Data de començament: 01/12/2003. **Data de finalització:** 31/12/2005.

Investigador principal: Roque Serrano Gallego.

Altres investigadors: Joaquim Beltran Arandes i Elena Pitarch Arquimbau.

Objectiu: el projecte presentat pretén conèixer millor i aportar solucions al problema de la contaminació per àcid domoic, una neurotoxina natural que periòdicament afecta les poblacions de mol·luscos, com a conseqüència de la multiplicació massiva d'algunes espècies de microalgues diatomees capaces de sintetitzar aquest pseudoaminoàcid.

Labor desenvolupada: s'ha desenvolupat un mètode avançat per detectar l'àcid domoic que millora els existents per la major rapidesa i sensibilitat que ofereix, basat en cromatografia líquida d'alta resolució adaptada a espectrometria de masses en tàndem (triple quadrupol). El mètode és aplicable directament a l'anàlisi de mostres reals compostes per mol·luscos bivalves de totes o de la majoria d'espècies d'interès. S'ha estudiat la cinètica d'acumulació i depuració d'un compost de polaritat intermèdia (fenitrotió) en mol·luscos bivalves model (*Mytilus galloprovincialis*), que permet la modelització del comportament d'aquest tipus de substàncies presents a les zones costaneres on estan situades les granges productores de bivalves. Durant els anys 2004 i 2005 s'ha seguit un programa de vigilància de detecció d'àcid domoic en mol·luscos bivalves d'interès comercial (*Chamelea gallina* i *Donax trunculus*) de la Comunitat Valenciana. Finalment, Samuel Peña-Llopis i Juan B. Peña, per part del CSIC, i per Roque Serrano Gallego, per part de la Universitat Jaume I, han presentat una patent sobre la utilització de n-acetil-cisteína com a agent que millora la depuració de xenobiòtics acumulats en bivalves. Número de sol·licitud: P200600493, davant l'OEPM (Oficina Espanyola de Patents i Marques) amb data 01/03/2006.

Codi del projecte: P1 1B2005-08.

Títol: *Investigación sobre la presencia de xenoestrógenos en tejido adiposo humano mediante técnicas avanzadas GC-MS (triple cuadrupolo y tiempo de vuelo).*

Font de finançament: Universitat Jaume I-Fundació Caixa Castelló.

Import: 34.200 euros.

Data de començament: 01/12/2005. **Data de finalització:** 30/11/2007.

Investigador principal: Francisco López Benet.

Altres investigadors: Félix Hernández Hernández, Roque Serrano Gallego y Elena Pitarch Arquimbau.

Objectiu: explorar el potencial de les tècniques analítiques avançades, basades en cromatografia de gasos adaptada a espectrometria de masses per a la correcta identificació i confirmació, així com quantificació, de xenoestrògens en mostres de teixit adipós humà amb els següents objectius específics:

Desenvolupament de procediments de purificació automatitzats basats en cromatografia líquida en fase normal per a l'anàlisi de xenoestrògens en extractes de teixit adipós humà. També per a aquests teixits, s'ha desenvolupat metodologia analítica basada en GC-MS/MS amb triple quadrupol (QqQ) per determinar i confirmar xenoestrògens seleccionats (*target analysis*). Comparació de les tècniques GC-MS/MS amb triple quadrupol i amb trampa d'ions que s'ha de dur a terme mitjançant la injecció d'extractes seleccionats en ambdós equips, i avaluar, d'aquesta manera, les possibilitats d'ambdues tècniques. Explorar les possibilitats de la tècnica GC-TOF-MS per a la confirmació de xenoestrògens i la identificació de desconeguts (*unknown*) en mostres reals, així com prestar especial atenció als metabòlits i productes de transformació. Aplicació de la metodologia desenvolupada a mostres seleccionades de teixit adipós humà (incloent-hi teixit mamari i tumors cancerosos) a fi d'avaluar la presència de xenoestrògens en aquest tipus de mostres. Generar bases de dades sobre nivells de xenoestrògens en persones de l'àmbit de la Comunitat Valenciana, avaluar la situació actual i establir els nivells basals d'aquests compostos.

Labor desenvolupada: s'ha estudiat el potencial de la cromatografia de gasos adaptada a l'espectrometria de masses amb QqQ per confirmar i quantificar compostos estrògens organohalogenats en teixit mamari humà i en fragments tumorals. En concret, s'ha desenvolupat metodologia analítica per a la determinació d'aproximadament 30 compostos organoclorats (PCB i pesticides) i organobromats (difeníl èters policromats). El procediment optimitzat es basa en l'extracció amb hexà dels anàlits i la purificació automatitzada dels extractes mitjançant cromatografia líquida en fase normal. S'ha avaluat la precisió i exactitud del mètode desenvolupat mitjançant experiències de recuperació a tres nivells de concentració. La selectivitat i sensibilitat dels analitzadors QqQ ha permès la quantificació i confirmació de concentracions tan baixes com 5-25 ng/g. Per a cada un dels anàlits s'han seleccionat dues transicions MS/MS, utilitzant la relació entre les intensitats d'aquestes com a criteri de confirmació. Aquest mètode s'ha aplicat a l'anàlisi de més de 50 mostres reals. També s'ha estudiat les possibilitats de la cromatografia de masses adaptada a espectrometria de masses amb analitzador de temps de vol (TOF) per a la inequívoca confirmació dels compostos detectats.

Codis del projecte: GV04A710 i P1 1B2004-31.

Títol: *Identificación, cuantificación y confirmación de nuevos contaminantes (fármacos y hormonas) en muestras de aguas mediante cromatografía líquida acoplada a espectrometría de masas en tàndem.*

Fonts de finançament: Generalitat Valenciana i Universitat Jaume I-Fundació Caixa Castelló.

Import: 32.300 euros.

Data de començament: 01/01/2004. **Data de finalització:** 30/11/2007.

Investigadors principals: Elena Pitarch Arquimbau i Juan Vicente Sancho Llopis.

Altres investigadors: Juan Vicente Sancho Llopis, Óscar Pozo Mendoza, María Ibáñez Martínez i Carlos Guerrero Ramos.

Objectiu: es pretén fer ús del potent acoblament instrumental cromatografia líquida-espectrometria de masses en tàndem amb analitzador de triple quadrupol com amb analitzador híbrid quadrupol-temps de vol (QTOF) amb l'objectiu d'investigar la presència de residus de fàrmacs, principalment antibiòtics, i hormones en distints tipus de mostres d'aigües, tant d'interès mediambiental (superficials i subterrànies) com residuals (urbanes, industrials, etc.). Amb això, es pretén obtindre informació que resulta necessària per poder avaluar la presència i impacte d'aquests nous contaminants sobre les aigües, així com la potencial exposició de les persones a aquests productes que poden provocar resistències microbianes o alterar el nostre sistema endocrí. A pesar que l'adaptament LC-QTOFMS resulta actualment imprescindible en els àmbits farmacèutic i bioquímic, a penes s'ha aplicat al camp mediambiental, per la qual cosa aquest projecte pretén endinsar-se en camps d'escassa o nul·la tradició pel que fa a l'ús d'aquest tipus de tècniques analítiques. El projecte se centra en tres grans àmbits: 1) la determinació ràpida i sensible de residus d'aquests compostos en les aigües, 2) la problemàtica ambiental i social que suposa la presència o no d'antibiòtics i hormones a les aigües, i 3) la realització d'un xicotet programa de control per avaluar quins són els nivells reals d'aquests nous contaminants en les aigües de la província de Castelló. Es pretén encetar una línia d'investigació sobre l'aplicació d'aquesta tècnica en àmbits com el dels nous contaminants (*emerging contaminants*) i aportar informació necessària sobre els nivells d'aquests perquè es puga realitzar una correcta avaluació del grau d'exposició dels éssers vius a aquests compostos (antibiòtics i hormones).

Labor desenvolupada: inicialment, s'ha començat amb el desenvolupament de mètodes multiresiduals per a antibiòtics en aigües naturals i residuals. Les famílies de compostos seleccionades van ser, en primer lloc, penicil·lines i quinolones, amb un total de 18 anàlits per, posteriorment, ampliar el nombre de compostos fins a aproximadament 50, amb l'objectiu de cobrir pràcticament tots els antibiòtics, tant humans com veterinaris, més àmpliament usats a la zona. A causa de les distintes característiques fisicoquímiques dels compostos seleccionats, així com els baixos nivells que s'esperen en les aigües ambientals, s'ha desenvolupat un mètode basat en l'extracció en fase sòlida adaptada en línia a cromatografia líquida-espectrometria de masses en tàndem (SPE-LC-MS/MS). S'han desenvolupat i validat dos mètodes multiresiduals per a antibiòtics amb límits de detecció d'uns pocs ng/L, que permeten el cribratge ràpid i sensible per detectar la possible presència de residus d'aquests compostos en aigües mediambientals. La metodologia desenvolupada s'ha aplicat a l'anàlisi de 43 mostres d'aigües (38 aigües superficials i cinc subterrànies) procedents dels Països Baixos i de l'àrea mediterrània espanyola. Les penicil·lines estudiades no van ser detectades en cap mostra, mentre que vuit de les quinolones seleccionades (*pipemidic acid, norfloxacin, ciprofloxacin, ofloxacin, marbofloxacin, nalidixic acid, flumequin i oxolonic acid*) van ser detectades, almenys, una vegada i sempre en aigües superficials. *Pipemidic acid, ofloxacin, flumequin i oxolonic acid* van ser les trobades de manera més comuna. A més, per evitar l'aparició de falsos positius, s'ha

estudiat la capacitat confirmatòria de l'espectrometria de masses amb analitzadors de triple quadrupol, i s'ha demostrat la necessitat de l'etapa de confirmació, que ens ha permès, en alguns casos, descartar una mostra presumptament positiva.

En l'actualitat, es treballa per ampliar els mètodes desenvolupats a mostres residuals urbanes i hospitalàries, així com a influents i efluent de depuradores (EDAR) per avaluar els nivells d'antibiòtics que eliminem, així com l'eficàcia dels sistemes actuals de depuració sobre aquests nous contaminants.

Codi del projecte: GV05/120.

Títol: *Estudio del potencial de la cromatografía líquida capilar en la determinación de especies organometálicas mediante sistemas acoplados microHPLC-ICPMS.*

Font de finançament: Generalitat Valenciana.

Import: 29.000 euros.

Data de començament: 01/01/2005.

Data de finalització: 31/12/2006.

Investigador principal: Antoni F. Roig i Navarro

Altres investigadors: Óscar J. Pozo Mendoza, Ángel Castillo Tirado, Laura Orero Iserte, Yolanda Martínez Bravo.

Objectiu: el propòsit d'aquest projecte és abordar l'estudi de la determinació d'espècies de As, Se, Cr, Hg i Sn mitjançant acoblament mHPLC-ICPMS. Per a això, s'han de dur a terme assajos amb columnes «microbore» amb fase estacionària d'intercanvi iònic i fase reversa. Es pretén optimitzar les etapes de separació i l'adaptament a l'ICPMS i comparar diferents tipus de micronebulitzadors i de cambres de nebulització.

L'objectiu final és estudiar el potencial de la cromatografia capil·lar adaptada a ICPMS per determinar espècies organometàliques seleccionades. La millora de sensibilitat és el principal èxit que s'espera obtenir en relació amb la LC convencional, la qual cosa facilitaria la determinació d'ultratraces d'espècies metàl·liques en mostres d'interès ambiental.

Labor desenvolupada: els resultats obtinguts s'han dividit en dos apartats, tenint en compte els dos grups d'anàlits abans esmentats.

Especiació de As, Se i Cr:

El primer pas ha consistit a adaptar un mètode convencional a les condicions de treball de HPLC «microbore» (1x150 mm, 3 microns). Els capil·lars (sílice fosa) del sistema de bombament han generat un problema d'interaccions addicionals. Tenint en compte les característiques de la fase mòbil emprada (basada en nitrat amònic, pH 8,7) i l'estructura molecular dels diferents anàlits, aquestes devien a la formació de ponts d'hidrogen entre grups siloxà i els anàlits presents. Atenent als pKa i al del pH del medi es va proposar una classificació en funció de la força de les interaccions addicionals que cada espècie podia patir: As(III) » As(V) > MMA » Se(IV) > Cr(VI) » DMA > Se(VI). Aquest ordre concordava amb el grau de distorsió observat en els pics cromatogràfics. Aquesta hipòtesi es va veure reforçada mitjançant variacions de pH de la fase mòbil i el canvi dels capil·lars de sílice fosa per altres de PEEK. En ambdós casos es van minimitzar o van semblar les interaccions extracolumna. Aquest treball va ser presentat com a comunicació oral en les «11 Jornades d'Anàlisi Instrumental», Barcelona, novembre de 2005.

Especiació de Hg:

En aquest treball s'ha estudiat el potencial del sistema microHPLC-ICPMS per a l'especiació de Hg. S'ha determinat Hg(II), MeHg(I), EtHg(I) i PhHg(I) en dissolucions patró aquoses. S'han estudiat paràmetres relacionats amb la separació cromatogràfica i amb la detecció mitjançant ICPMS.

L'ús de metanol per a la separació cromatogràfica repercuteix negativament en el sistema de detecció, l'ICP. Una adequada elecció del sistema nebulitzador/cambra de nebulització comporta un augment de transferència de massa i redueix la càrrega orgànica que arriba al plasma. Els paràmetres clau per obtenir una elevada relació S/N, així com un senyal estable en el temps han consistit en l'ús d'un micronebulitzador, l'optimització dels cabals de gasos de nebulització i també l'ús de reactius amb el mínim contingut possible de Hg. En optimitzar el gradient de metanol

emprat, el pH de treball i la longitud de la columna s'ha aconseguit eluir el PhHg(I) en un temps de 12 minuts sense que coeluisquen Hg(II) i MeHg(I). Els LOD que s'han aconseguit són inferiors a 100 ng/L. Aquest treball va ser presentat com a pòster en les «11 Jornades d'Anàlisi Instrumental». Amb els resultats s'ha elaborat un article científic que s'ha enviat a publicar en «Analytica Chimica Acta».

Codi del projecte: CGL2005-02306/BOS.

Títol: *Biodiversidad de Artemia (Branchiopoda, Anostraca) en el Mediterráneo occidental. Presencia de A. franciscana como especie invasora. Implicaciones ecológicas y de interés en acuicultura.*

Font de finançament: Ministeri d'Educació i Ciència.

Import: 160.888 euros.

Data de començament: 31/12/2005. **Data de finalització:** 31/12/2008.

Investigador principal: Francisco Amat Doménech (IATS, CSIC).

Altres investigadors: Roque Serrano Gallego (IUPA, UJI), Francisco Hontoria Danés i Juan Carlos Navarro.

Objectiu: el desenvolupament de projectes d'investigació previs (Pla nacional) dirigits a la identificació de formes autòctones del crustaci *Artemia (Branchiopoda, Anostraca)*, al coneixement de diversos aspectes de la biologia, ecologia i ús en aqüicultura d'aquest, ha proporcionat àmplia informació sobre la presència de distintes soques i espècies del gènere a Espanya, a la Península Ibèrica i a uns altres països veïns, en els quals es troba una representació àmplia d'algunes formes originals del vell món; concretament, la forma bisexual *Artemia salina*, i dues varietats de la forma partenogenètica (diploide i tetraploide). Aquesta biodiversitat del gènere *Artemia* a les nostres latituds sembla haver-se mantingut fins a finals dels anys 80. A partir de llavors, i a causa de la desaparició i abandonament de salines i ambients hipersalins, i a inoculacions incontrolades i mal informades, dutes a terme en explotacions salineres, o com a conseqüència d'activitats aqüícoles o aquariòfiles, s'ha fet patent la desaparició de poblacions autòctones i la presència de la forma al·lòctona (exòtica) *Artemia franciscana*, procedent del continent americà, que sembla comportar-se com a espècie invasora, i competeix amb avantatge sobre les formes autòctones, a les quals desplaça dels seus ecosistemes originals.

Davant d'aquesta situació, el projecte es planteja, com a objectius, actualitzar la informació referida a l'existència i a la distribució d'ecosistemes hipersalins, identificar els que encara presenten les formes autòctones d'*Artemia* en l'àrea del Mediterrani occidental, al mateix temps que constatar, el més àmpliament possible, la presència de la forma exòtica.

L'estudi de taules de vida d'individus d'aquestes poblacions sota condicions de cultiu al laboratori, i de concurrència en un sistema obert, així com el dels factors que afecten l'eclosió i qualitat dels seus quistos, han de mostrar en quins termes s'estableix la competència i les conseqüències d'aquesta. Es procedirà a un ampli inventari i a una caracterització del valor nutritiu d'aquests quistos, basats en nivells lipídics i perfils d'àcids grassos poliinsaturats, d'acord amb la seua adscripció geogràfica (ecològica) i específica, com a informació d'alt valor i interès en aqüicultura.

S'estudiarà la influència de factors naturals com el parasitisme, i d'impacte ambiental, com la presència de xenobiòtics (plaguicides), així com les conseqüències espècie-específiques, com a condicionants de la persistència de les poblacions estudiades i de la biodiversitat d'aquestes.

Els resultats obtinguts permetran actualitzar i millorar la informació continguda en la base de dades i la diversitat de mostres en el banc de quistos, mantinguts ambdós per l'equip.

Labor desenvolupada: el projecte està en fase inicial. S'ha començat la recollida de dades de la distribució d'*A. franciscana* a la Península. No ha arribat a Santa Pola, però sí al Delta de l'Ebre. A Portugal està plenament estesa, i a tot el sud d'Espanya, sola o en coexistència amb formes autòctones, en funció dels ecosistemes. Hem analitzat els àcids grassos d'*A. franciscana*, invasora de diferents parts del món.

Codi del projecte: ---.

Títol: *Implementación de estructuras de datos medioambientales (IDM). Prototipo de sistemas de información geográfica en la gestión de recursos hídricos.*

Font de finançament: Fundació Caixa Castelló-Bancaixa.

Import: 16.900 euros.

Data de començament: 15/11/2002. **Data de finalització:** 15/11/2005.

Investigador principal: Michael Gould.

Altres investigadors: Ignacio Morell Evangelista.

Objectiu: ---

Labor desenvolupada: ---

Codi del projecte: ---

Títol: *Nuevo modelo de gestión de recursos hídricos en la plana de Oropesa-Torreblanca (Castellón). Diseño y aplicación de herramientas informáticas (GIS y MODFLOW) para soporte a la decisión.*

Fonts de finançament: Fundació Caixa Castelló-Bancaixa, Construccions Castelló 2000, UE programa GMES.

Import: 23.040 euros.

Data de començament: novembre de 2004. **Data de finalització:** novembre de 2007.

Investigador principal: Ignacio Morell Evangelista.

Altres investigadors: ---

Objectiu: dissenyar un nou model de gestió dels recursos hídrics que tinga com a objectiu la regeneració de l'aqüífer basada en la reducció dels bombaments i la recàrrega artificial, així com posar a punt ferramentes de suport a la presa de decisions i avaluar les conseqüències de les distintes possibilitats d'actuació.

Es realitzarà un model matemàtic de l'aqüífer (MODFLOW) que servisca per preveure les modificacions que poden originar les noves línies d'actuació i proporcionar una ferramenta potent (GIS) que permeta avaluar les afeccions ambientals generades.

Labor desenvolupada: instal·lació dels programes a ser utilitzats. Capacitació dels futurs usuaris. Inici de la recopilació de dades històriques hidrogeològiques que s'han d'incorporar als programes.

1.7. Convenis/contractes de col·laboració en 2005

Títol: ***Estudios de residuos de herbicidas en aceituna y aceite de oliva virgen y realización de ensayos para la determinación del factor de transferencia de residuos de productos fitosanitarios en el proces de transformación de aceituna a aceite.***

Empresa: TRAGSATEC.

Import: 97.440 euros.

Data de començament: 12/01/2005. Data de finalització: 12/01/2006.

Investigador principal: Félix Hernández Hernández.

Títol: ***Determination of pesticide residues in fruit and vegetables.***

Empresa: Waters Cromatografia, SA.

Import: 5.800 euros.

Data de començament: 22/09/2004. Data de finalització: 22/09/2005.

Investigador principal: Félix Hernández Hernández.

Títol: ***Desarrollo y aplicación de metodología analítica para la identificación y confirmación de contaminantes ambientales persistentes en muestras de tejido adiposo humano per GC-MS/MS y GC-TOF-MS.***

Empresa: Institut Valencià d'Oncologia (IVO).

Import: 12.528 euros.

Data de començament: 01/01/2005.

Data de finalització: 31/12/2005.

Investigador principal: Félix Hernández Hernández.

Títol: ***Investigación de contaminantes orgánicos en las aguas de lixiviado de residuos urbanos de la planta de compostaje de Onda.***

Empresa: RECIPLASA.

Import: 15.000 euros.

Data de començament: 03/10/2004.

Data de finalització: 03/10/2005.

Investigadors principals: Félix Hernández Hernández i Francisco López Benet.

Títol: ***Convenio específico de colaboración entre el Consejo Superior de Investigaciones Científicas y la Universitat Jaume I, relativo a la participación de personal investigador de dicha universidad en el proyecto de investigación administrado por el CSIC sobre partículas atmosféricas en suspensión en la Comunidad Valenciana.***

Empresa: CSIC.

Import: 12.000 euros.

Data de començament: 30/09/2004.

Data de finalització: 30/09/2005.

Investigador principal: Antoni F. Roig i Navarro.

Títol: ***Estudio hidrogeoquímico sobre la presencia de arsénico en pozos del sector meridional de la Plana de Castellón.***

Empresa: Ajuntament de Nules.

Import: 6.000 euros.

Data de començament: octubre de 2005. Data de finalització: febrer de 2006.

Investigador principal: Ignacio Morell Evangelista.

Títol: ***Delimitación de perímetros de protección de los pozos de La Mallà.***

Empresa: Ajuntament de Nules.

Import: 6.000 euros.

Data de començament: octubre de 2005. Data de finalització: gener de 2006.

Investigador principal: Ignacio Morell Evangelista.

Títol: *Gestión del ciclo integral del agua en el sector meridional de la plana de Oropesa-Torreblanca (Castellón).*

Empresa: Construccions Castelló 2000.

Import: 97.264 euros.

Data de començament: desembre de 2004. Data de finalització: desembre de 2006.

Investigador principal: Ignacio Morell Evangelista.

Títol: *Caracterización geológica e hidrogeológica de un sector de la partida «Baladral», en relación con la implantación del polígono medioambiental de levante en el término municipal de Fanzara (Castellón).*

Empresa: F. F. Entropics.

Import: 60.000 euros.

Data de començament: novembre de 2004. Data de finalització: juliol de 2005.

Investigadors principals: Ignacio Morell Evangelista i José Ramón Jiménez.

Estudis de residus de plaguicides en mostres vegetals realitzats sota els principis de les Bones Pràctiques de Laboratori (BPL) per a diverses empreses del sector dels fitosanitaris

Import global: 182.076 euros.

1.8. Publicacions 2005

Les publicacions que es relacionen a continuació estan ordenades per ordre alfabètic segons el cognom del primer autor. S'indica si és un article (A), un capítol d'un llibre (CL) o una revisió (R), al final del títol de cada entrada.

Simultaneous Determination of Multiple Phytohormones in Plant Extracts by Liquid Chromatography-Electrospray-Tandem Mass Spectrometry. A.

Durgbanshi, V. Arbona, Ó. Pozo, O. Miersch, J. V. Sancho, A. Gómez-Cadenas.
Journal of Agricultural and Food Chemistry, 53 (2005) 8437.

Application of solid phase microextraction for the determination of soil fumigants in water and soil samples. A.

S. Fuster, J. Beltran, F. J. López, F. Hernández.
Journal Separation Science, 28, 98-103 (2005).

Evaluation of different quantitative approaches for the determination of non easily ionisable molecules by different atmospheric pressure interfaces used in LC-MS/MS. Abamectin as case of study. A.

S. Grimalt, Ó. J. Pozo, J. M. Marín, J. V. Sancho, F. Hernández.
Journal of the American Society for Mass Spectrometry, 16, 1619-1630 (2005).

Liquid Chromatography: Multidimensional. CL.

F. Hernández, J. V. Sancho.
«*Encyclopedia of Analytical Science. 2nd Edition*», Paul J. Worsfold, Alan Townshend and Colin F. Poole eds., Elsevier, Oxford. Vol. 5, pàgines 197-204 (2005). *Escrit per invitació.*

Potential of gas chromatography coupled to triple quadrupole mass spectrometry for quantification and confirmation of organohalogen xenoestrogen compounds in human breast tissues. A.

F. Hernández, T. Portoles, E. Pitarch, F. J. López, J. Beltrán, C. Vázquez.
Analytical Chemistry, 77, 7662-7672 (2005).

Strategies for Quantification and Confirmation of Multi-class Polar Pesticides and Transformation Products in Water by LC-MS/MS Using Triple Quadrupole and Hybrid Quadrupole-Time of Flight Analysers. A.

F. Hernández, Ó. J. Pozo, J. V. Sancho, F. J. López, J. M. Marín, M. Ibáñez.
TRAC, Trends in Analytical Chemistry, 24, 596-612 (2005). *Escrit per invitació.*

Critical review of the application of liquid chromatography/mass spectrometry to the determination of pesticide residues in biological samples. R.

F. Hernández, J. V. Sancho, Ó. J. Pozo.
Analytical and Bioanalytical Chemistry, 382, 934-946 (2005). *Escrit per invitació.*

Residue determination of glyphosate, glufosinate and aminomethyl phosphonic acid in water and soil samples by liquid chromatography coupled to electrospray tandem mass spectrometry. A.

M. Ibáñez, Ó. J. Pozo, J. V. Sancho, F. J. López, F. Hernández.
Journal of Chromatography A, 1081, 145-155 (2005).

Use of quadrupole time-of-flight mass spectrometry in the elucidation of unknown compounds present in environmental water. A.

M. Ibáñez, Ó. J. Pozo, J. V. Sancho, W. Niessen, F. Hernández.
Rapid Communications in Mass Spectrometry, 19, 169-178 (2005).

Treball inclòs entre l'1% dels treballs de major influència en el seu àmbit, d'acord amb Essential Science Indicators, Thomson.

Determinación y confirmación de xenoestrógenos por GC-MS/MS en muestras de tejido mamario. A.

T. Portolés, E. Pitarch, F. J. López, J. Beltran, F. Hernández, C. Vázquez.
Clinical and Translational Oncology, 2, 57 (2005).

Residue determination of cyromazine and its metabolite melamine in chard samples by ion-pair liquid chromatography coupled to electrospray tandem mass spectrometry. A.

J. V. Sancho, M. Ibáñez, S. Grimalt, Ó. J. Pozo, F. Hernández.
Analytica Chimica Acta, 530, 237-243 (2005).

Geoquímica isotópica del boro en áreas termales asociadas al vulcanismo activo. Casos de la isla de Ischia (Italia) y San Miguel (Azores, Portugal). CL.

I. Morell, A. Pulido-Bosch, J. Virgilio, L. Daniele.
Agua, minería y medio ambiente. Libro homenaje al profesor Rafael Fernández Rubio.
IGME (2005).

1.9. Participació en congressos en 2005

1st International Workshop on Liquid Chromatography-tandem mass spectrometry for screening and trace level quantitation in environmental and food analysis, Barcelona, juny de 2005.

Confirmation of positive samples by liquid chromatography tandem mass spectrometry: achievements and pitfalls.

J. V. Sancho, Ó. J. Pozo, F. Hernández, M. Ibáñez.

Comunicació oral.

Residue determination of glyphosate, gluphosinate and aminomethylphosphonic acid in water and soil samples by liquid chromatography coupled to electrospray tandem mass spectrometry.

M. Ibáñez, Ó. J. Pozo, J. V. Sancho, F. López, F. Hernández.

Comunicació pòster.

LC-MS/MS trace-level determination of benfuracarb and its metabolites carbofuran and 3-OH-carbofuran in oranges.

S. Grimalt, J. V. Sancho, Ó. J. Pozo, F. Hernández.

Comunicació pòster.

The Use of ACQUITY UPLC Coupled to Fast Mass Spectral Data Acquisition for Environmental Analyses.

G. Kearney, M. Ibáñez, P. Revilla, H. Mol, D. McMillan, P. Hancock, C. Ryan.

Comunicació oral.

X Congrés de l'Associació Espanyola d'Investigació sobre el Càncer (ASEICA), Pamplona, octubre de 2005.

Determinación y confirmación de xenoestrógenos per GC-MS/MS en muestras de tejido mamario.

T. Portolés, E. Pitarch, F. J. López, J. Beltran, F. Hernández, C. Vázquez.

Comunicació pòster.

11 Jornades d'Anàlisi Instrumental, Barcelona, novembre de 2005.

Simple procedure for the characterization of tomato aroma pattern.

E. Serrano, J. Beltran, F. J. López, M. Hurtado, S. Roselló.

Comunicació pòster.

Development of a multiresidue method for the determination and confirmation of 54 organic pollutants in water by GC-MS/MS.

T. Portolés, C. Medina, E. Pitarch, F. J. López, F. Hernández.

Comunicació pòster.

Effect of fused silica capillaries on the chromatographic behavior of As, Se, Cr(VI) speciation by μ HPLC-ICPMS.

A. F. Roig-Navarrès, A. Castillo Tirado.

Comunicació oral.

Speciation of mercury by capillary HPLC-ICP-MS.

A. Castillo Tirado, A. F. Roig-Navarro.

Comunicació pòster.

*Organochlorine pollutants in wild gilthead seabream (*Sparus aurata*). Seasonal trends and tissue distribution.*

M. A. Blanes, R. Serrano, F. Hernández.
Comunicació pòster.

II International Symposium on recent advances in food analysis. International Association of Environmental Analytical Chemistry. Praga (República Txeca), novembre de 2005.

Potential of LC-MS/MS for the determination of anionic, cationic and neutral pesticides and metabolites in food matrices.

F. Hernández, J. V. Sancho, Ó. J. Pozo, M. Barreda, L. Bisjlsma, E. Pitarch, S. Grimalt.
Comunicació pòster.

Rapid screening of drinking water for multiple pesticide residues by UPLC-TOF MS.

D. McMillan, M. Ibáñez.

Comunicació pòster.

Florida Pesticide Workshop, Florida (EUA), juliol de 2005.

Rapid screening of drinking water for multiple pesticide residues by UPLC-TOF MS.

D. McMillan, M. Ibáñez.

Comunicació pòster.

Waters User Meeting at the American Society of Mass Spectrometry, San Antonio (EUA), juny de 2005.

Multiresidue Determination of Pesticides in Food by GC-MS and LC-MS.

G. Kearney, M. Ibáñez, D. McMillan.

Comunicació oral.

1. Docència

1.10. Docència reglada

Els professors membres del IUPA imparteixen docència en diferents titulacions de l'UJI. A continuació es relacionen les assignatures impartides pels professors en les distintes titulacions i els crèdits per assignatura per a cada professor per als cursos 2004/05 i 2005/06.

Període docent 2004/05

- **Llicenciatura en Químiques:**

Tècniques Analítiques de Separació.

Francisco López Benet. 6 crèdits.

Tècniques Analítiques Avançades.

Antoni Francesc Roig i Navarro. 4,5 crèdits.

Química Analítica I.

Juan Vicente Sancho Llopis. 9 crèdits.

Félix Hernández Hernández. 9 crèdits.

Química Analítica II.

Joaquim Beltran Arandes. 4,5 crèdits.

Química Analítica del Medi Ambient.

Félix Hernández Hernández. 4,5 crèdits.

Química Analítica Avançada.

Antoni Francesc Roig i Navarro. 4,5 crèdits.

Laboratori Avançat en Química II.

Antoni Francesc Roig i Navarro. 4 crèdits.

Elena Pitarch Arquimbau. 8 crèdits.

Laboratori Avançat en Química III.

Joaquim Beltran Arandes. 6 crèdits.

Antoni Francesc Roig i Navarro. 3 crèdits.

Juan Vicente Sancho Llopis. 6 crèdits.

Ampliació de Química.

Joaquim Beltran Arandes. 6 crèdits.

Anàlisi d'Aliments.

Juan Vicente Sancho Llopis. 4,5 crèdits.

Informàtica Aplicada a la Química.

Roque Serrano Gallego. 9 crèdits.

Control de Qualitat i Gestió del Laboratori d'Anàlisi.

Roque Serrano Gallego. 4,5 crèdits.

Laboratori Químic IV.

Roque Serrano Gallego. 4,5 crèdits.

María Ibáñez Martínez. 4,5 crèdits.

Prospecció, Gestió i Explotació de Recursos Hídrics.

José Ramón Jiménez Salas. 4,5 crèdits.

Hidrogeoquímica

Ignacio Morell Evangelista. 4,5 crèdits.

Recursos Hídrics

Ignacio Morell Evangelista. 7,5 crèdits.

- **Enginyeria Tècnica Agrícola:**

Fonaments Químics de l'Enginyeria.

Roque Serrano Gallego. 2 crèdits.

Elena Pitarch Arquimbau. 4,5 crèdits.

- **Programa de doctorat «Química, Física i Ciències Aplicades»:**

Tècniques Cromatogràfiques Avançades. 3 crèdits.

Francisco López Benet.

Juan Vicente Sancho Llopis.

Joaquim Beltran Arandes.

L'Espectrometria de Masses en l'Anàlisi Cromatogràfica. 3 crèdits.

Francisco López Benet.

Juan Vicente Sancho Llopis.

Joaquim Beltran Arandes.

Anàlisi de Traces de Metalls en Mostres Mediambientals. 3 crèdits.

Antoni Francesc Roig i Navarro.

Processos Físicoquímics en Mitjans Porosos Naturals.

Ignacio Morell Evangelista.

Període docent 2005/06

- **Llicenciatura en Químiques:**

Introducció al Laboratori Químic.

Joaquim Beltran Arandes. 6 crèdits.

Tècniques Analítiques de Separació.

Francisco López Benet. 6 crèdits.

Tècniques Analítiques Avançades.

Antoni Francesc Roig i Navarro. 4,5 crèdits.

Química Analítica I.

Juan Vicente Sancho Llopis. 9 crèdits.

Félix Hernández Hernández. 6,5 crèdits.

Óscar Pozo Mendoza. 2,5 crèdits.

Química Analítica II.

Joaquim Beltran Arandes. 4,5 crèdits.

Química Analítica del Medi Ambient.

Elena Pitarch Arquimbau. 4,5 crèdits.

Química Analítica Avançada.

Antoni Francesc Roig i Navarro. 4,5 crèdits.

Laboratori Avançat en Química II.

Antoni Francesc Roig i Navarro. 4 crèdits.

María Ibáñez Martínez. 6 crèdits.

Óscar Pozo Mendoza. 4 crèdits.

Laboratori Avançat en Química III.

Elena Pitarch Arquimbau. 3 crèdits.

Antoni Francesc Roig i Navarro. 3 crèdits.

Ampliació de Química.

Joaquim Beltran Arandes. 6 crèdits.

Anàlisi d'Aliments.

Juan Vicente Sancho Llopis. 4,5 crèdits.

Informàtica Aplicada a la Química.

Roque Serrano Gallego. 4,5 crèdits.

Control de Qualitat i Gestió del Laboratori d'Anàlisi.

Roque Serrano Gallego. 4,5 crèdits.

Laboratori Químic IV.

Roque Serrano Gallego. 4,5 crèdits.

Prospecció, Gestió i Explotació de Recursos Hídrics.

José Ramón Jiménez Salas. 3,5 crèdits.

Ignacio Morell Evangelista. 1 crèdit.

Hidrogeoquímica

M. Vicenta Esteller Alberich. 4,5 crèdits.

Recursos Hídrics

M. Vicenta Esteller Alberich. 6,5 crèdits.

- **Enginyeria Tècnica Agrícola:**

Fonaments Químics de l'Enginyeria.

Elena Pitarch Arquimbau. 4,5 crèdits.

- **Programa de doctorat «Química, Física i Ciències Aplicades»:**

Anàlisi de Dades en Química Analítica Ambiental. 3 crèdits.

Roque Serrano Gallego.

Anàlisi de Contaminants Orgànics en el Medi Ambient. 3 crèdits.
Félix Hernández Hernández.

1.11. Docència no reglada

«Contaminació d'origen agrícola»

L'aigua en l'agricultura. Alternatives de sostenibilitat, Universitat Internacional Menorca Illa del Rei (UIMIR), Menorca, setembre de 2005.
F. Hernández Hernández

«Registre Europeu de Plaguicides»

L'aigua en l'agricultura. Alternatives de sostenibilitat, Universitat Internacional Menorca Illa del Rei (UIMIR), Menorca, setembre de 2005.
F. Hernández Hernández.

III Màster en Medi Ambient i Empreses: Gestió dels Processos Productius.

Organitzat per la Fundació Universitat-Empresa, UJI, Castelló de la Plana, novembre de 2004-juny de 2005.
Director: Ignacio Morell Evangelista.

III Màster en Medi Ambient i Empreses: Gestió dels Processos Productius.

Organitzat per la Fundació Universitat-Empresa, UJI, Castelló de la Plana, novembre de 2004-juny de 2005.
Mòdul d'Anàlisi d'Aigües.
Francisco López Benet.

Curs sobre contaminació i sobreexplotació de les aigües subterrànies en el llevant espanyol. Universitat Politècnica de Cartagena, Cartagena, 11 de juliol de 2005.
Ignacio Morell Evangelista.

Curs el debat dels transgènics. Escola de tardor 2005. Universitat Jaume I, Castelló, 17-21 octubre de 2005.
Director: Ignacio Morell Evangelista.

Curs avançat d'hidrogeologia, hidrogeoquímica i termalisme. Universitat de Pinar del Río, Cuba, 12 de desembre de 2005.
Ignacio Morell Evangelista.

Curs avançat d'hidrogeologia, hidrogeoquímica i termalisme. Universitat de L'Havana, Cuba, 20 de desembre de 2005.
Ignacio Morell Evangelista.

1.12. Ponències/conferències

Multi-residue LC-MS/MS determination of fifty non GC-amenable pesticides in different food commodities.

F. Hernández, Ó. J. Pozo, J. V. Sancho, L. Bijlsma, M. Barreda, E. Pitarch.

1st International Workshop on Liquid Chromatography-tandem mass spectrometry for screening and trace level quantitation in environmental and food analysis, Barcelona, juny de 2005. Ponència invitada.

Pesticidas: problemas ambientales, analíticos y toxicológicos.

F. Hernández.

III Cicle de Conferències sobre Medi Ambient, Fundació Universitat Jaume I-Empresa (UJI). Patrocinat per Iberdrola. Castelló de la Plana, 29 de novembre de 2005.

Contaminación de aguas por plaguicidas.

F. Hernández.

II Jornades d'Agricultura Sostenible. Societat Espanyola d'Agricultura Sostenible. Castelló de la Plana, octubre de 2005.

Fundamentos de la Espectrometría de Masas.

Juan Vicente Sancho Llopis.

Espectrometria de Masses Aplicada al Medi Ambient i Proteòmica, Universitat d'Oviedo, Oviedo, 2005.

Análisis de contaminantes ambientales por LC-MS y GC-MS.

Juan Vicente Sancho Llopis.

Espectrometria de Masses aplicada al Medi Ambient i Proteòmica, Universitat d'Oviedo, Oviedo, 2005.

Los manantiales, fuentes de vida.

Ignacio Morell Evangelista.

Jornades sobre l'aigua, Ajuntament de Castelló de la Plana. Castelló de la Plana, 12 de novembre de 2005.

Proceso de salinización de acuíferos.

Ignacio Morell Evangelista.

Universitat d'Alacant. Alacant, 17 de novembre de 2005.

2. Premis i distincions

Ó. J. Pozo Mendoza. Juny de 2005:

Premi extraordinari de tesi doctoral en ciències aplicades, atorgat per la Universitat Jaume I.

Use of quadrupole time-of-flight mass spectrometry in the elucidation of unknown compounds present in environmental water

M. Ibáñez, J. V. Sancho, Ó. Pozo, W. Niessen i F. Hernández.

Rapid Communications in Mass Spectrometry, 19, 169-178 (2005).

Treball inclòs entre **entre l'1% dels treballs de major influència en el seu àmbit**, d'acord amb Essential Science Indicators, Thomson. **Inclòs entre els quatre articles classificats com «core papers»** en «Quadrupole TOF MS; LC-MS/MS; LC-TOF MS anàlisi; LC-TOF-MS; environmental water».

3. Pressupost del IUPA en 2005

Font de finançament	Euros (€)
Universitat Jaume I (pressupost ordinari)	6.000
Universitat Jaume I (pressupost d'investigació)	4.044
Projectes d'investigació	102.475
Generalitat Valenciana (ajuda a grups d'investigació)	20.000
Contractes amb empreses	365.888
TOTAL	498.407