



Empa

Materials Science and Technology



Estrategias analíticas y herramientas virtuales para el análisis de parafinas cloradas. Aplicaciones en plásticos y muestras medioambientales

Dr. Óscar Mendo Díaz

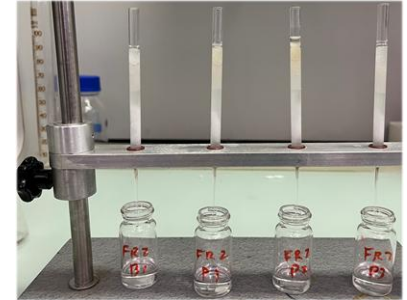
Laboratorios Suizos para la Ciencia de los Materiales y Tecnología (Empa)

Localización: Universidad Austral

Fechas: 26 y 27 de Noviembre, 2025

Índice

- Motivación y estrategias de muestreo en plásticos y muestras ambientales
- Tratamiento de la muestra y controles de calidad
- Métodos analíticos avanzados y resolución de problemas
- Procesamiento de datos de alta resolución



Índice



- Motivación y estrategias de muestreo en plásticos y muestras ambientales
- Tratamiento de la muestra y controles de calidad
- Métodos analíticos avanzados y resolución de problemas
- Procesamiento de datos de alta resolución



Presencia de PCs en distintas matrices



Objetos plásticos cotidianos¹



Riesgo laboral

Uso de productos de consumo



Animales²



Seguridad alimentaria



Ambiente en hogares³



Contaminación localizada



Ponente: Bo Yuan

Lodos de depuradora⁴



Contaminación regional
e inmediata



Sedimentos de lago⁵



Contaminación regional y temporal



- 1) Mendo Diaz, O., et al, *Chemosphere*, **2025** (<https://doi.org/10.1016/j.chemosphere.2025.144239>)
- 2) Krätschmer, K., et al, *Chemosphere*, **2019** (<https://doi.org/10.1016/j.chemosphere.2019.06.022>)
- 3) Yuan, B., et al, *Environ. Sci. Technol.*, **2021** (<https://doi.org/10.1021/acs.est.0c05891>)
- 4) Hutter, J., et al, *Chemosphere*, **2025** (<https://doi.org/10.1016/j.chemosphere.2025.144071>)
- 5) Yang, W., et al, *Environmental Research*, **2025** (<https://doi.org/10.1016/j.envres.2025.122874>)

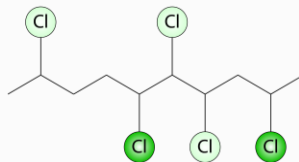
Distribución espacial de PCs



▪ Rango de PCs detectadas:

▪ En plásticos¹: C₉-C₃₁, Cl₃-Cl₁₅

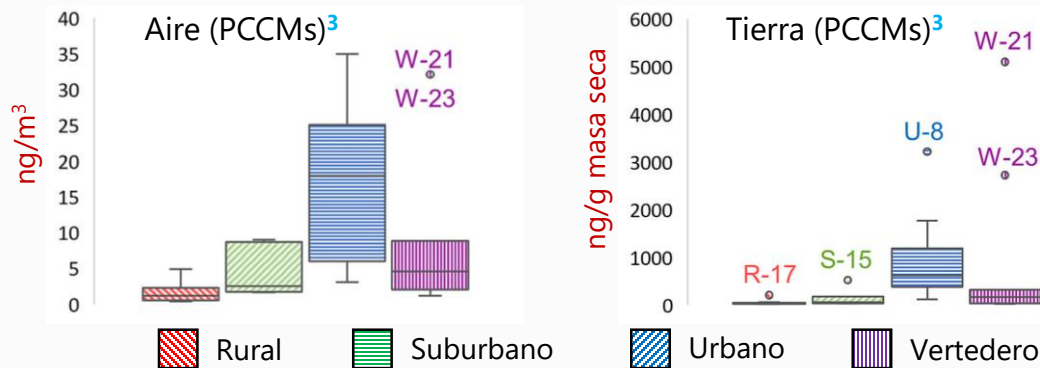
▪ Muestras ambientales^{2,3}: C₆-C₃₄, Cl₃-Cl₁₆



Zonas rurales



Control ambiental en Tanzania



Zonas industriales

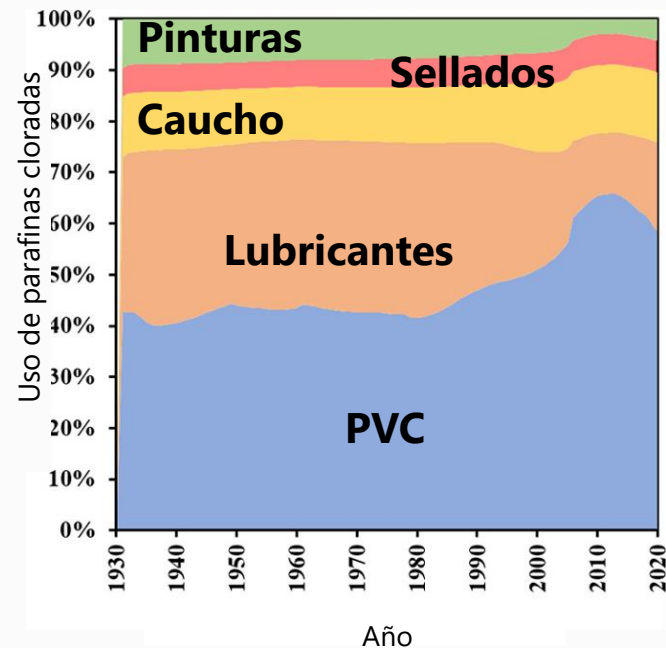


1) Mendo Diaz, O., et al, *Chemosphere*, **2025** (<https://doi.org/10.1016/j.chemosphere.2025.144239>)
 2) Hutter, J., et al, *Chemosphere*, **2025** (<https://doi.org/10.1016/j.chemosphere.2025.144071>)
 3) Nipen, M., et al, *Environmental Pollution*, **2022** (<https://doi.org/10.1016/j.envpol.2021.118298>)

¿Por qué es necesario analizar PCs en plásticos?



- **Principal uso** de PCs como **aditivos** en polímeros¹
- Punto inicial para la **transferencia** y **contaminación** de seres vivos y zonas ambientales
- Falta de **transparencia** en el **etiquetado (trazabilidad)**
 - Importación de **composición desconocida**
- **Concentración límite** nacional, regional o global
 - **PCCCs: 1% m/m de plástico**²



1) Chen, C., et al, *Environ. Sci. Technol.*, **2022** (<https://doi.org/10.1021/acs.est.2c00264>)

2) UNEP 2017, Convenio de Estocolmo

3) Wang, C., et al, *Environmental Pollution*, **2018** (<https://doi.org/10.1016/j.envpol.2018.02.078>)

Investigación de PCCCs en el mercado suizo




- Análisis cualitativo y cuantitativo
- Distribuciones de grupos congéneres de PCCCs, PCCMs y PCCLs
- Campaña del 2021
- Analizados 32 productos plásticos de 144:

 Herramientas (n=7)


Cable de baterías



 Accesorios de casa (n=16)

Neceser

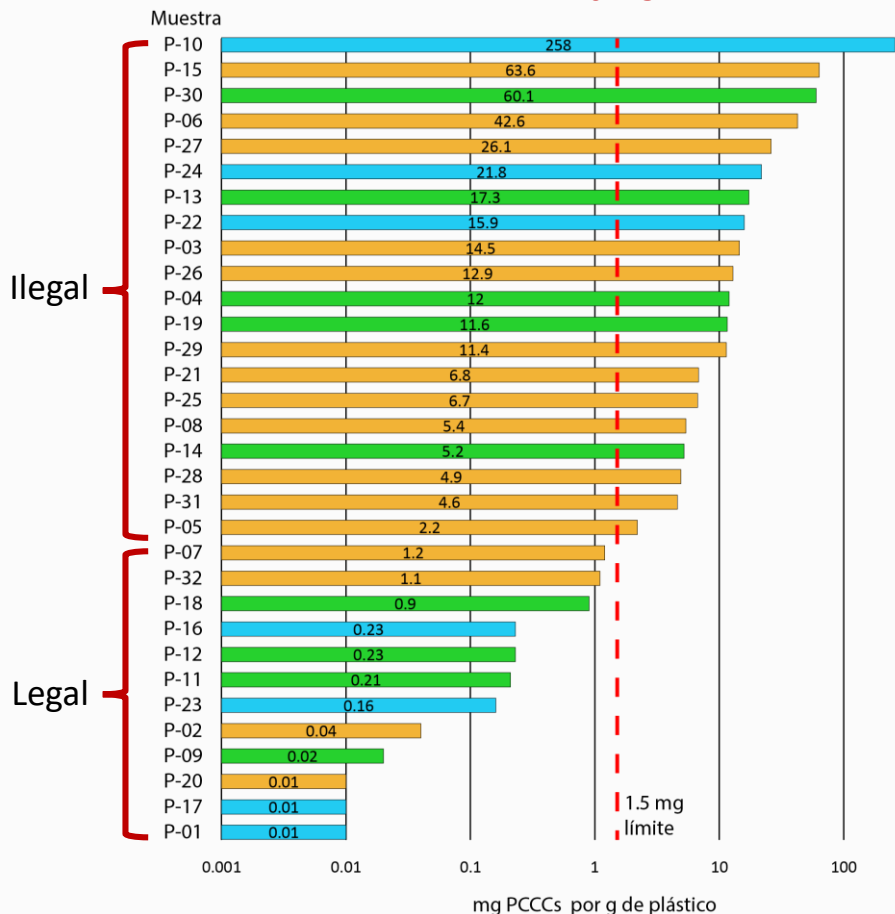


 Objetos personales (n=9)

Dentadura de vampiro



Contenido de PCCCs (C₁₀₋₁₃) en plásticos del mercado suizo



Ilegal

Legal

- Herramientas (n=7)
- Accesorios de casa (n=16)
- Objetos personales (n=9)

Límite legal suizo

1.5 mg por g de plástico

✓ 112/144 (78%) negativos en PCs

✓ 12/144 (8%) < Límite suizo

✗ **20/144 (14%) > Límite suizo**

Cable de baterías



Objeto usado en talleres de automóviles

Alto riesgo de **exposición ocupacional**

Evolución temporal de PCs presentes plásticos del mercado



2017

Mercado sueco¹

2021

Mercado suizo²

2025

Compra online³

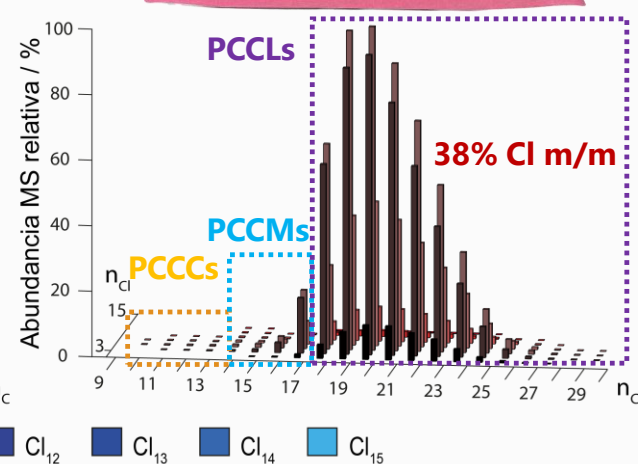
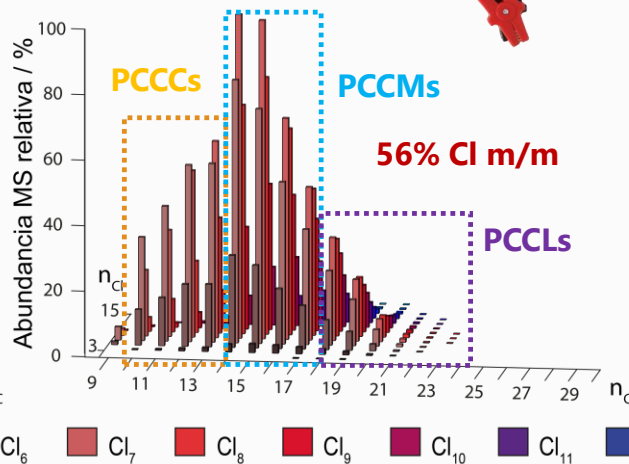
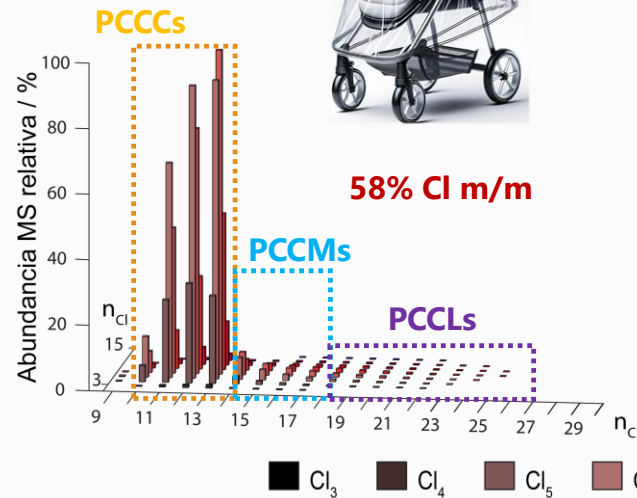
Protector de lluvia



Cable de baterías



Esterilla de yoga



1) Mendo Diaz, O., et al, *Chemosphere*, **2023** (<https://doi.org/10.1016/j.chemosphere.2023.139552>)

2) Mendo Diaz, O., et al, *Chemosphere*, **2025** (<https://doi.org/10.1016/j.chemosphere.2025.144239>)

3) Kälin, M., *Tesis de grado de Universidad, ZHAW*, **2025**

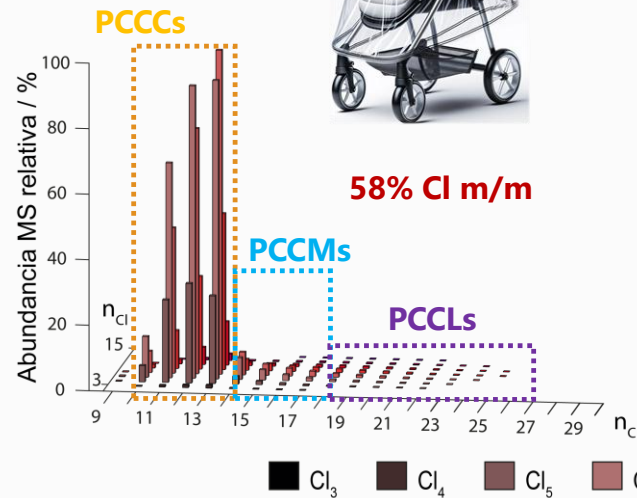
Evolución temporal de PCs presentes plásticos del mercado



2017

Mercado sueco¹

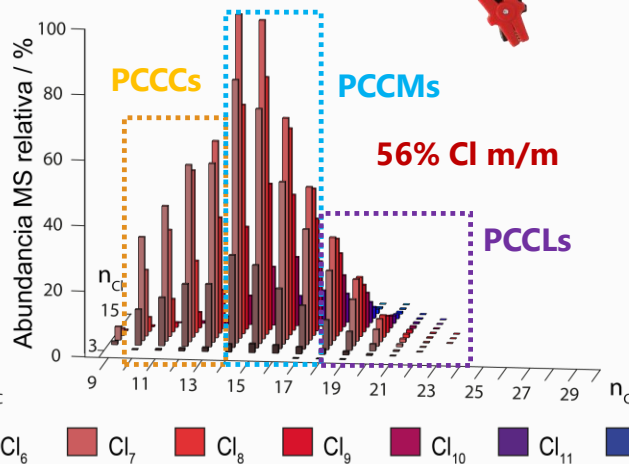
Protector de lluvia



2021

Mercado suizo²

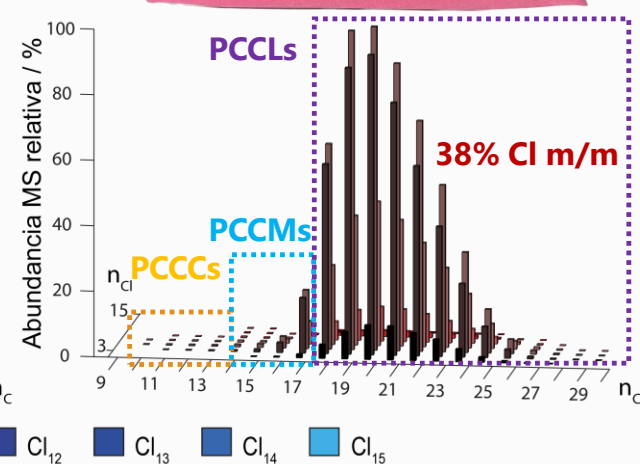
Cable de baterías



2025

Compra online³

Esterilla de yoga



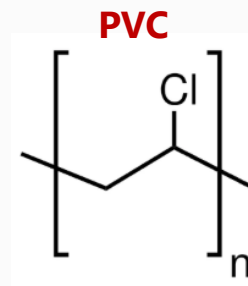
1) Mendo Diaz, O., et al, *Chemosphere*, **2023** (<https://doi.org/10.1016/j.chemosphere.2023.139552>)

2) Mendo Diaz, O., et al, *Chemosphere*, **2025** (<https://doi.org/10.1016/j.chemosphere.2025.144239>)

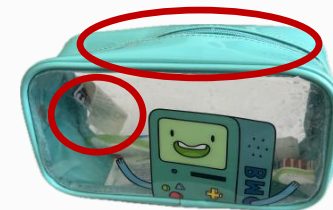
3) Kälin, M., *Tesis de grado de Universidad, ZHAW*, **2025**

Estrategia de muestreo de plásticos

- Búsqueda principalmente de materiales de PVC (homogéneos o heterogéneos)
- **Productos electrónicos, reciclados¹ o juguetes**
- Tiendas físicas, compras online o vertederos de productos electrónicos



Neceser



Plástico A

Función A



Plástico B

Función B



Plástico C

Función C

Composición A



Composición B

?

Composición C



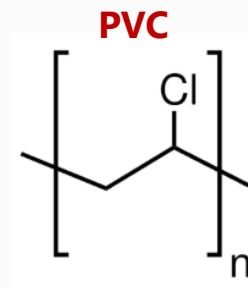
1) Megan, L., et al, *Chemosphere*, **2024** (<https://doi.org/10.1016/j.chemosphere.2024.143319>)

2) Mendo Diaz, O., et al, *Chemosphere*, **2025** (<https://doi.org/10.1016/j.chemosphere.2025.144239>)

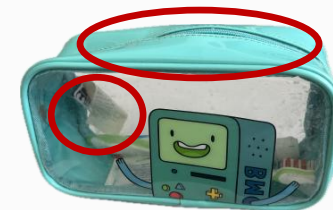
Estrategia de muestreo de plásticos



- Búsqueda principalmente de materiales de PVC (homogéneos o heterogéneos)
- **Productos electrónicos, reciclados¹ o juguetes**
- Tiendas físicas, compras online o vertederos de productos electrónicos



Neceser



Plástico A

Función A



Plástico B

Función B



Plástico C

Función C

Composición A



Composición B

?

Composición C



- Cribado con detector de radiación infrarroja (FT-IR) portátil²

FT-IR portátil



¹ Megan, L., et al, *Chemosphere*, **2024** (<https://doi.org/10.1016/j.chemosphere.2024.143319>)

² Mendo Diaz, O., et al, *Chemosphere*, **2025** (<https://doi.org/10.1016/j.chemosphere.2025.144239>)

¿Por qué es necesario analizar PCs en el lodo de la depuradora?

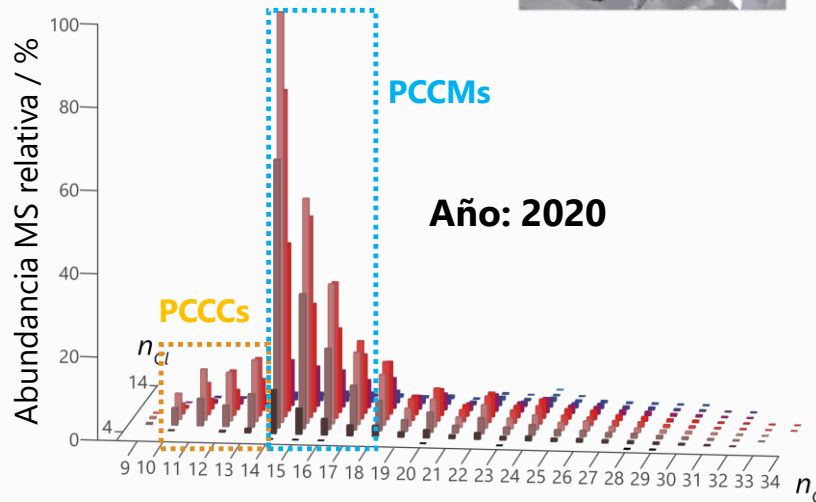
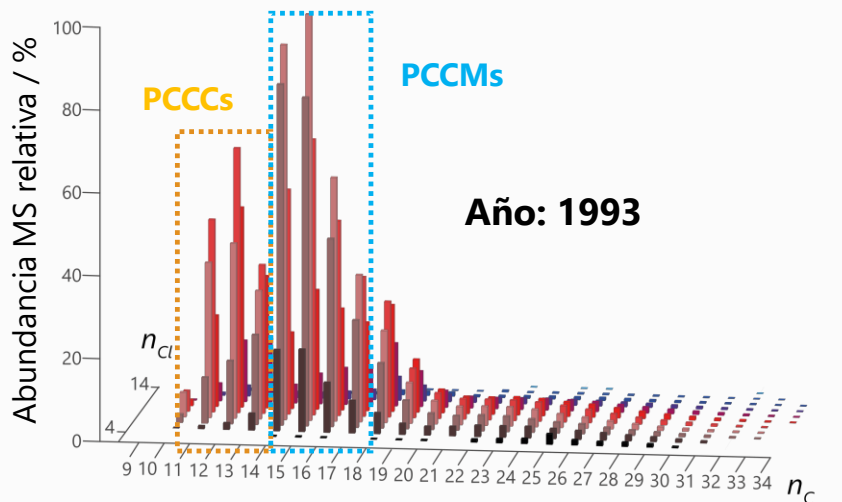


Lodo



- **Contaminación** del lodo proveniente de la **actividad humana** (industria y población)
- Determinación de la **contaminación local** (espacial y temporal) debido a **vertidos**

Ciudad de Winterthur (Suiza), industrial, 120'000 habitantes

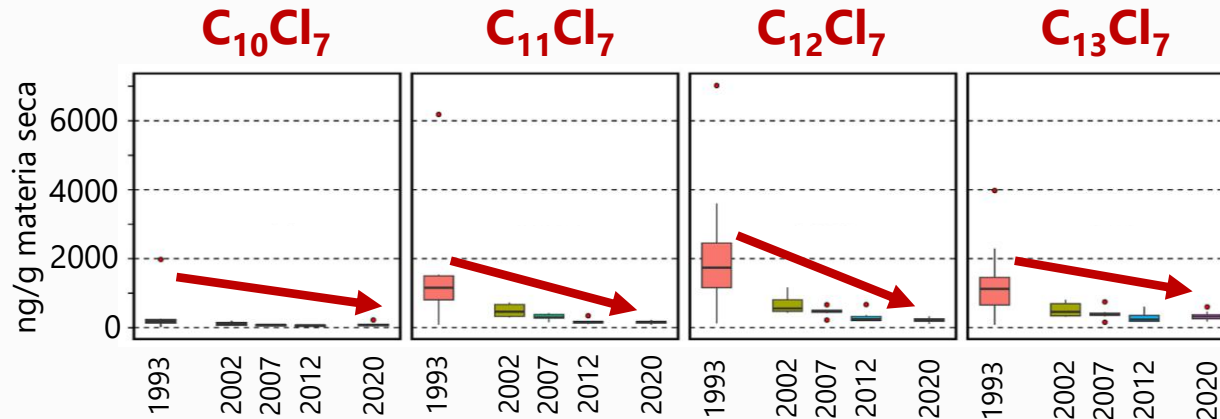


¿Por qué es necesario analizar PCs en el lodo de la depuradora?

Lodo



- **Contaminación** del lodo proveniente de la **actividad humana** (industria y población)
- Determinación de la **contaminación local** (espacial y temporal) debido a **vertidos**
- **Control de la eficacia de las regulaciones**
- Prevenir:
 - Uso de **lodo contaminado como fertilizante**
 - **Pasto de animales en tierras contaminadas**



Estrategia de muestreo de lodos de depuradora



- Recogida de aguas industriales o civiles
- Numero de población
- Niveles regionales de calidad del agua y del lodo
- Cada depuradora es un caso distinto → Procesos de limpieza

Depuradora de agua
(Horgen, E, Suiza)



Agua procesada



Sector de Zurich

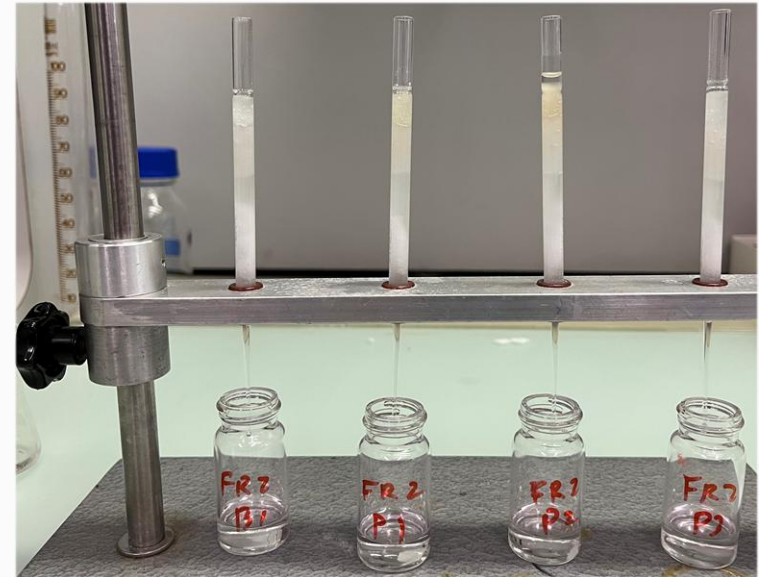
● Depuradoras de agua (A-H)



Índice



- Motivación y estrategias de muestreo en plásticos y muestras ambientales
- Tratamiento de la muestra y controles de calidad
- Métodos analíticos avanzados y resolución de problemas
- Procesamiento de datos de alta resolución



Características de los analitos



Estabilidad química de PCs

Condiciones estándares



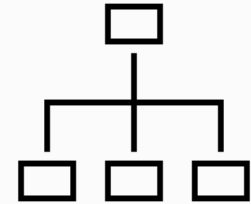
Disolventes apolares y/o halogenados

Diclorometano, metanol, acetonitrilo



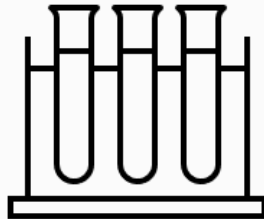
Coextracción de impurezas

Bifenilos, naftalenos, ... policlorados



Concentración desconocida de PCs

Muestras diluidas y concentradas



Abundancias dispares de C_nCl_x

$C_{10}Cl_5$, $C_{13}Cl_8$, $C_{17}Cl_{10}$, ...

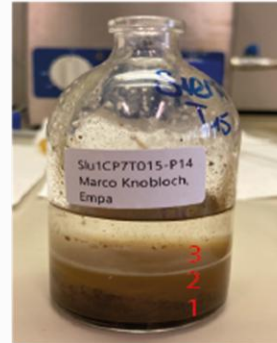


Opciones de almacenamiento y material

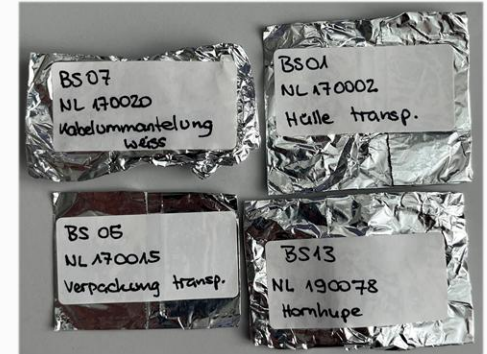


- **Contaminación cruzada a nivel de traza**
- Recolección de muestra en botellas de cristal
- Evitar materiales plásticos → Cristal o aluminio
- Lavar todo el material con disolventes
- Disolventes de grado HPLC
- Hexano (C_6H_{14}) y diclorometano (CH_2Cl_2)

Lodo de depuradora



Almacenamiento de muestras



Disolventes de grado HPLC

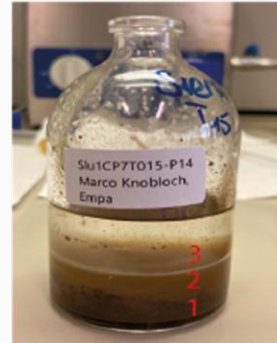


Opciones de almacenamiento y material

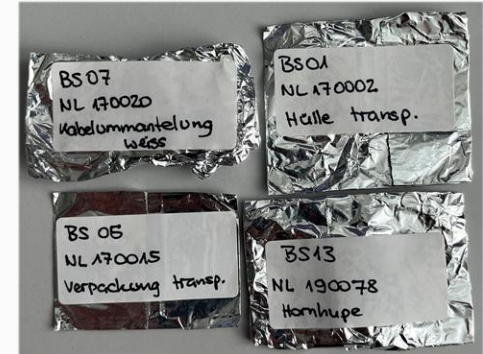


- **Contaminación cruzada a nivel de traza**
- Recolección de muestra en botellas de cristal
- Evitar materiales plásticos → Cristal o aluminio
- Lavar todo el material con disolventes
- Disolventes de grado HPLC
- Hexano (C_6H_{14}) y diclorometano (CH_2Cl_2)
- Utilizar herramientas de cristal o metal (espátulas, pipetas, etc.)
- Laboratorio limpio de partículas de polvo

Lodo de depuradora



Almacenamiento de muestras



Disolventes de grado HPLC

Material de cristal o metal lavado con disolventes



Extracción de PCs y limpieza de la muestra (1)



Plástico

Cable de baterías



Extracción

Microondas (PVC)

Acetona/ciclohexano (1:1, v/v)



Sólida

Soxhlet (DCM)



Precipitación

DCM/MeOH, 1:1 v/v



Limpieza

Fraccionamiento con sílice

Horneada a 450°C

Fr 1: Hexano → apolar

Fr 2: Hexano/DCM, 1:4 v/v → PCs

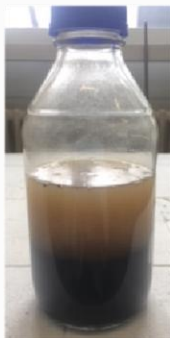


Extracción de PCs y limpieza de la muestra (2)



Lodo

Líquido



Agua procesada



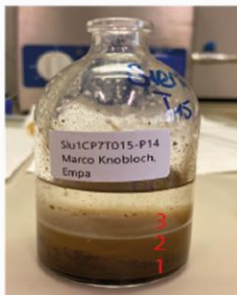
Lodo



Extracción

Líquida

Acetato de etilo



Sólida

Soxhlet

(Acetona/Hexano,

1:1 v/v)



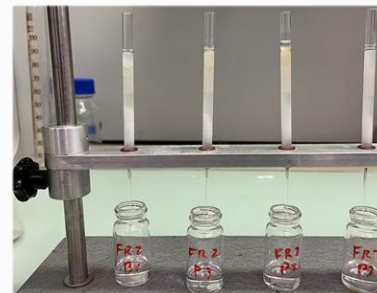
Limpieza

Fraccionamiento con sílice y **sílice acida**

Horneada a 450°C

Fr 1: Hexano → apolar

Fr 2: Hexano/DCM, 1:1 v/v → PCs



Cobre activado



Soluciones estándares comerciales



- **Tipo A:** Mezclas de PCs con múltiples longitudes de cadena de carbono y distintos grados de cloración: **PCCCs, PCCMs, PCCLs**
- **Tipo B:** Mezclas de PCs de longitud de cadena de carbono individual con distintos grados de cloración: **de C₁₀ a C₂₄**
- **Tipo C:** PCs definidas constitucionalmente: **1,2,5,6,9,10-hexaclorodecano**. Estereoisómeros no especificados.
- **Tipo D:** PCs marcadas isotópicamente con una constitución definida: **[¹³C₁₀] 1,5,5,6,6,10-hexaclorodecano**

Chloroparaffin C10-C13, 55,5% Cl 100 µg/mL in Cyclohexane

Product Code: DRE-X23105500CY
CAS Number: 85535-84-8
Brand: [redacted]
Product Format: Single Solution
Regulatory Method: H 48, Stockholm POP, DIN EN ISO 12010 DIN...
Analytes: Chloroparaffin C10-C13

ISO 17034 ⓘ

Freight restricted. Transport method and cost may change after order is placed.

CoA SDS

Chloroparaffin C11 60.53% Cl 10 µg/mL in Cyclohexane

Product Code: DRE-LA11457526CY
CAS Number: 85535-84-8
Brand: [redacted]
Product Format: Single Solution
Regulatory Method: DIN EN ISO 12010 DIN, H 47, H 48, DIN EN ...
Analytes: Chloroparaffin C10-C13 10 µg/mL

ISO 17034 ⓘ

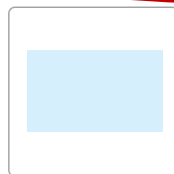
CoA SDS

Soluciones estándares comerciales



- **Tipo A:** Mezclas de PCs con múltiples longitudes de cadena de carbono y distintos grados de cloración: **PCCCs, PCCMs, PCCLs**
- **Tipo B:** Mezclas de PCs de longitud de cadena de carbono individual con distintos grados de cloración: **de C₁₀ a C₂₄**
- **Tipo C:** PCs definidas constitucionalmente: **1,2,5,6,9,10-hexaclorodecano**. Estereoisómeros no especificados.

1,5,5,6,6,10-Hexachlorodecane (13C10) 100 µg/mL in Nonane



Product Code: **CIL-CLM-9000-1.2**
Brand: [redacted]
Product type: **Stable Isotope Labeled**
Product Format: **Single Solution**
Analytes: **1,5,5,6,6,10-Hexachlorodecane 13C10**
100.0 µg/mL

[SDS](#)

Freight restricted. Transport method and cost may change after order is placed.

Chloroparaffin C10-C13, 55,5% Cl 100 µg/mL in Cyclohexane



Product Code: **DRE-X23105500CY**
CAS Number: **85535-84-8**
Brand: [redacted]
Product Format: **Single Solution**
Regulatory Method: **H 48, Stockholm POP, DIN EN ISO 12010 DIN...**
Analytes: **Chloroparaffin C10-C13**

[CoA](#) [SDS](#)

ISO 17034 ⓘ

Freight restricted. Transport method and cost may change after order is placed.

Chloroparaffin C11 60.53% Cl 10 µg/mL in Cyclohexane

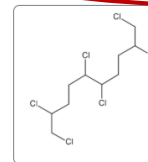


Product Code: **DRE-LA11457526CY**
CAS Number: **85535-84-8**
Brand: [redacted]
Product Format: **Single Solution**
Regulatory Method: **DIN EN ISO 12010 DIN, H 47, H 48, DIN EN ...**
Analytes: **Chloroparaffin C10-C13 10 µg/mL**

[CoA](#) [SDS](#)

ISO 17034 ⓘ

1,2,5,6,9,10-Hexachlorodecane CP-4 10 µg/mL in Cyclohexane



Product Code: **DRE-LA14171500CY**
CAS Number: **189350-94-5**
Brand: [redacted]
Product Format: **Single Solution**
Analytes: **1,2,5,6,9,10-Hexachlorodecane (CP-4)**
10.0 µg/mL

[CoA](#) [SDS](#)

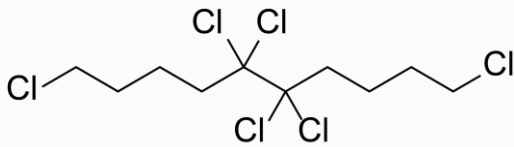
ISO/IEC 17025 ⓘ

Patrón interno

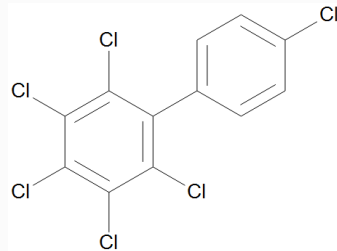


- Estándar interno o sustancia sustituta
- Factor de recuperación del analito y repetibilidad del método
- Rango de precios disponibles

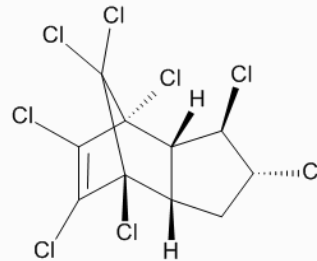
1,5,5,6,6,10-hexaclorodecano
(carbono-13 HCD, CAS: 111-84-2)



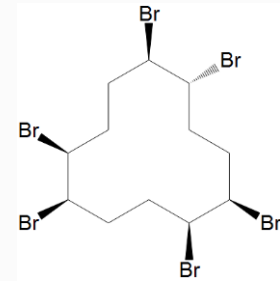
Bifenilo policlorado 166
(PCB, CAS: 41411-63-6)



Trans-chlordane
(CAS: 5103-74-2)



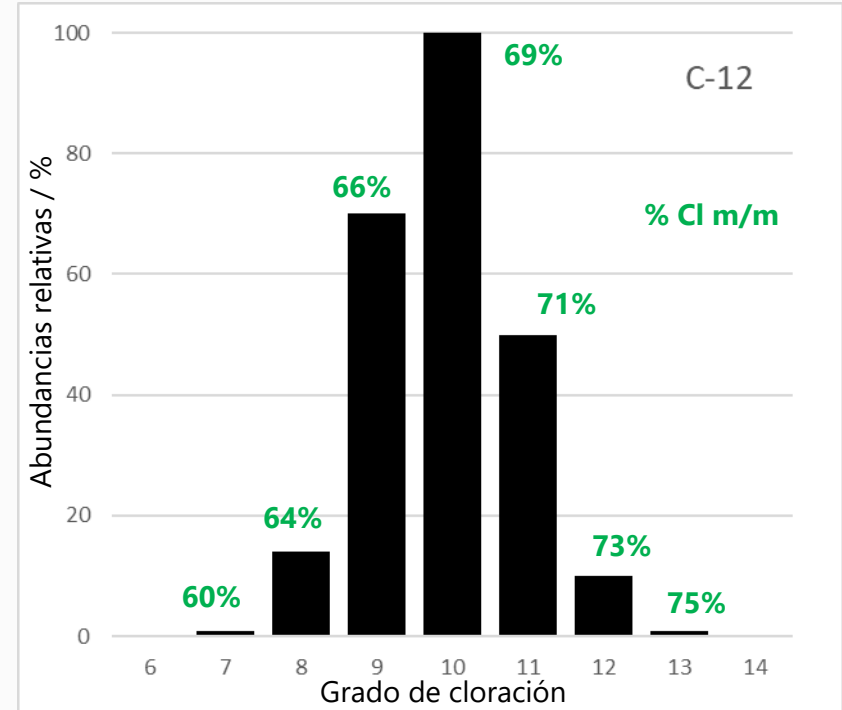
Beta-1,2,5,6,9,10-Hexabromociclododecano
(CAS: 134237-51-7)



Soluciones estándares comerciales de cadenas de carbono individuales



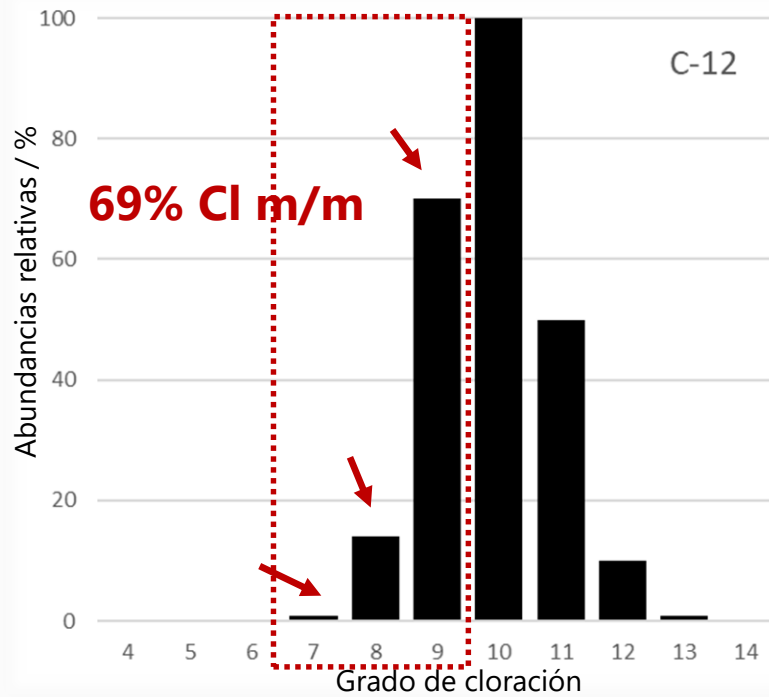
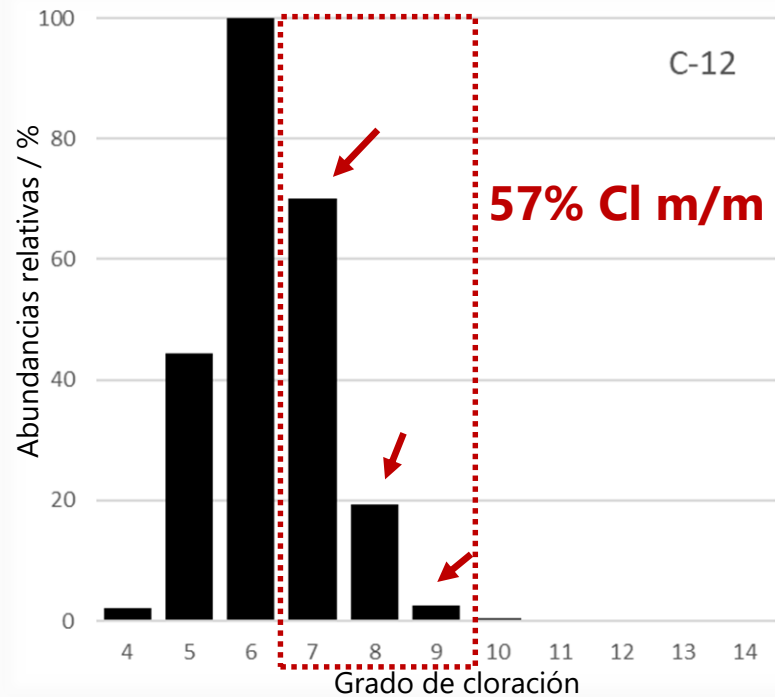
- **Proveedor:**
 - Índice de refracción
 - **C₁₂-PCs con 70% Cl m/m**
 - Concentración global: 10 µg/mL
- **Laboratorio:**
 - Cromatografía + Espectrometría de masas
 - C₁₂Cl₆ – C₁₂Cl₁₄
 - **69% Cl m/m**
 - Distribución Gaussiana
- **¿Cuál es la concentración real de cada C_nCl_x grupo congénere?**



Soluciones estándares comerciales de cadenas de carbono individuales



- Grupos congéneres presentes y abundantes en ambas muestras: $C_{12}Cl_7 - C_{12}Cl_9$
- Regulaciones basadas en % Cl y grupos congéneres → **ambiguas**



Índice



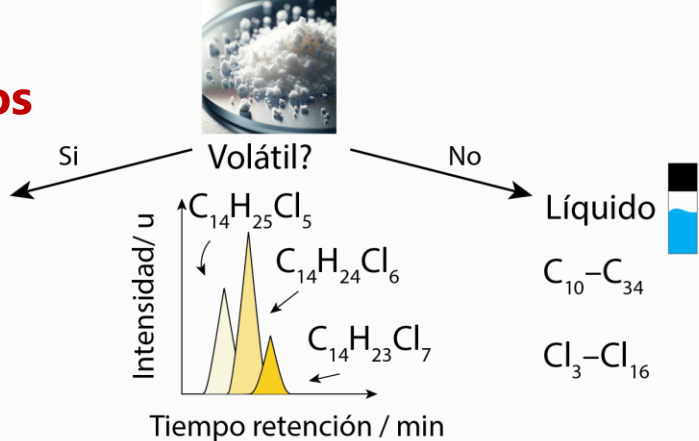
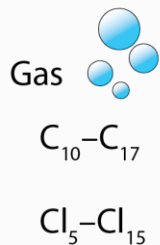
- Motivación y estrategias de muestreo en plásticos y muestras ambientales
- Tratamiento de la muestra y controles de calidad
- Métodos analíticos avanzados y resolución de problemas
- Procesamiento de datos de alta resolución



Resumen de métodos analíticos



Cromatografía

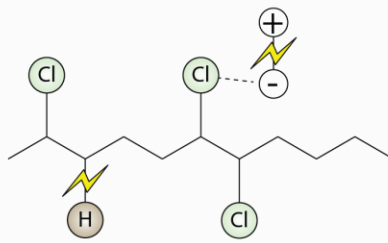


Espectrometría de masas

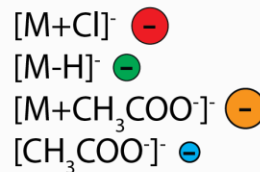
Ionización

Ion aducto ⚡

Fragmentación ⚡⚡⚡



Formación de distintos iones

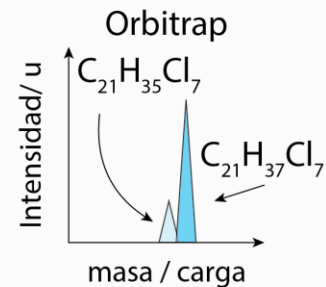
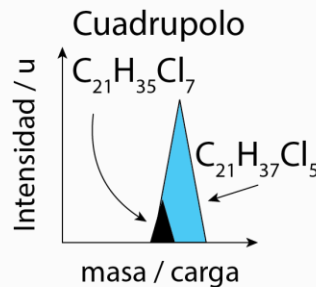


Analizador de masas

Cuadrupolo, Resolución = 3000

Tiempo de vuelo,
Resolución = 40000

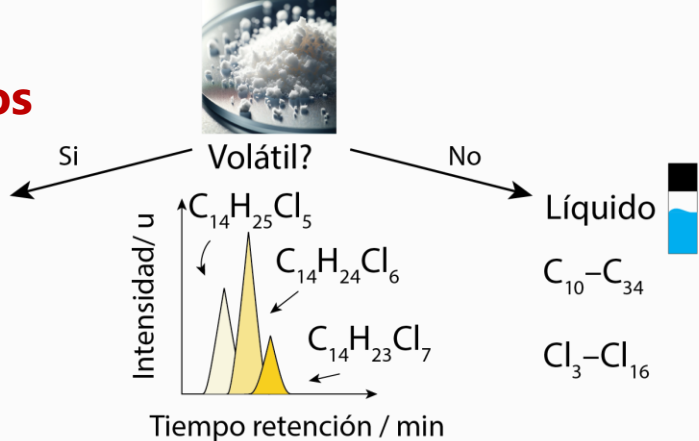
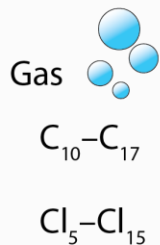
Orbitrap, Resolución = 120000



Resumen de métodos analíticos





Cromatografía

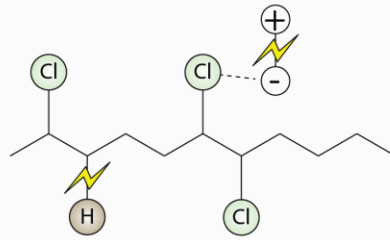


Espectrometría de masas

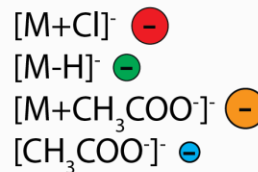
Ionización

Ion aducto 

Fragmentación 



Formación de distintos iones

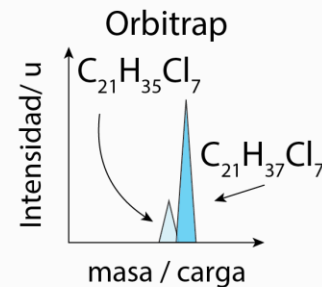
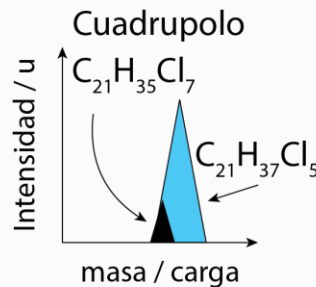


Analizador de masas

Cuadrupolo, Resolución = 3000

Tiempo de vuelo,
Resolución = 40000

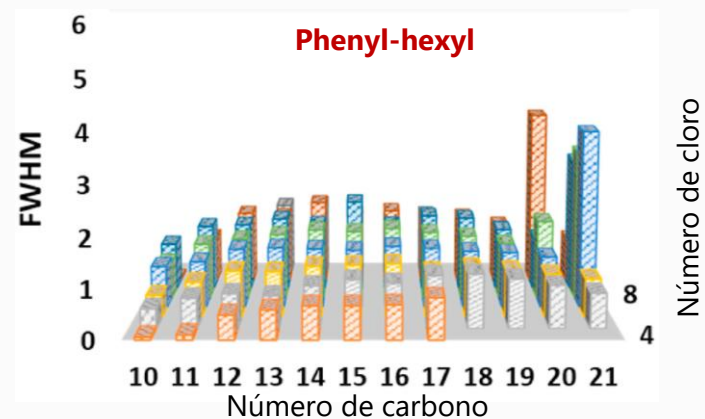
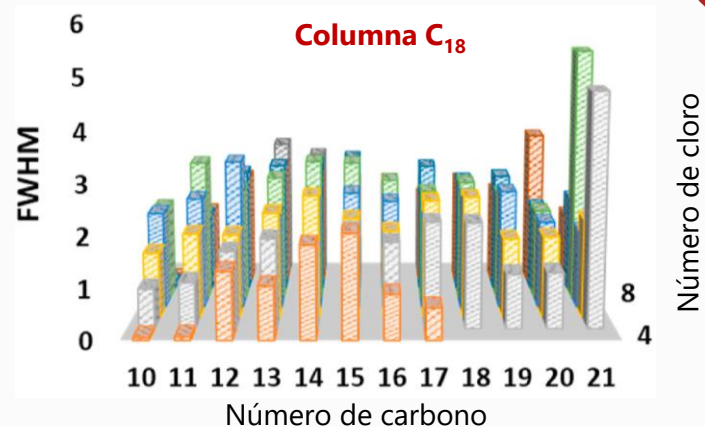
Orbitrap, Resolución = 120000



Separación de PCs por cromatografía de líquidos



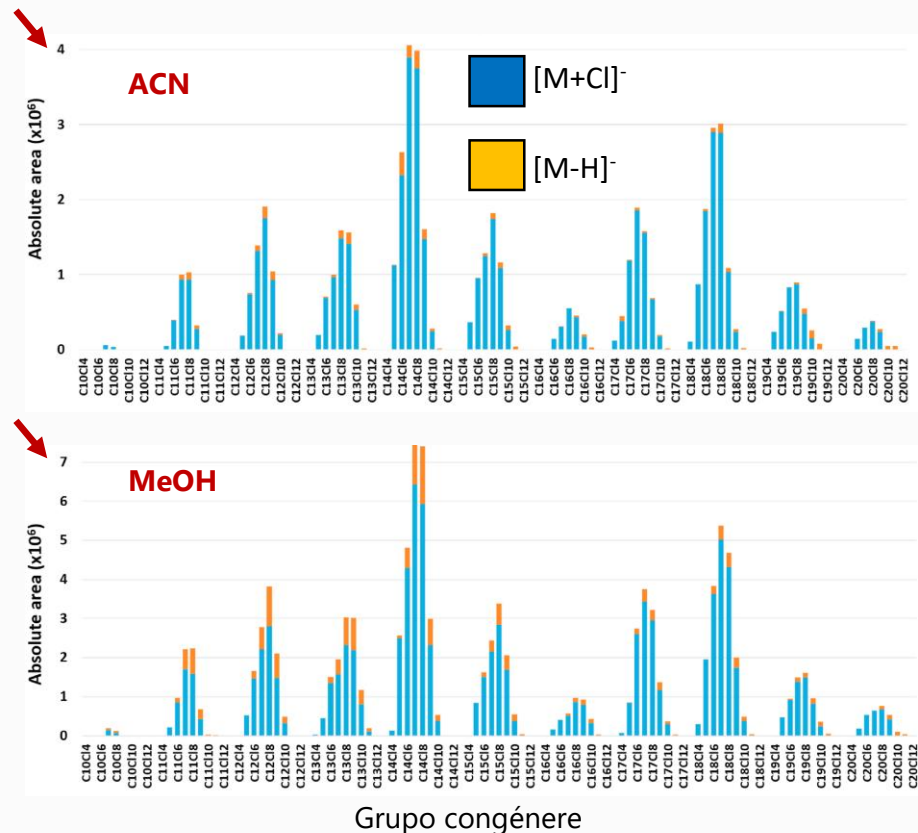
- Fase estacionaria: Columna apolar del tipo C₁₈
- Recomendación: Pre-columna y filtro
 - Polímeros y aditivos de plásticos desconocidos
 - Residuos de muestras medio ambientales



Separación de PCs por cromatografía de líquidos



- Fase estacionaria: Columna apolar del tipo C₁₈
- Recomendación: Pre-columna y filtro
 - Polímeros y aditivos de plásticos desconocidos
 - Residuos de muestras medio ambientales
- Fases móviles: **A** → H₂O, **B** → Acetonitrilo o MeOH (orgánica)
 - **Opción 1:** Dopante: CH₂Cl₂ para producir [M+Cl]⁻
 - *Opción 2: Dopante sal de cloruro [M+Cl]⁻
 - *Opción 3: Dopante Acetato de amonio [M+Ac]⁻



Separación de PCs por cromatografía de líquidos



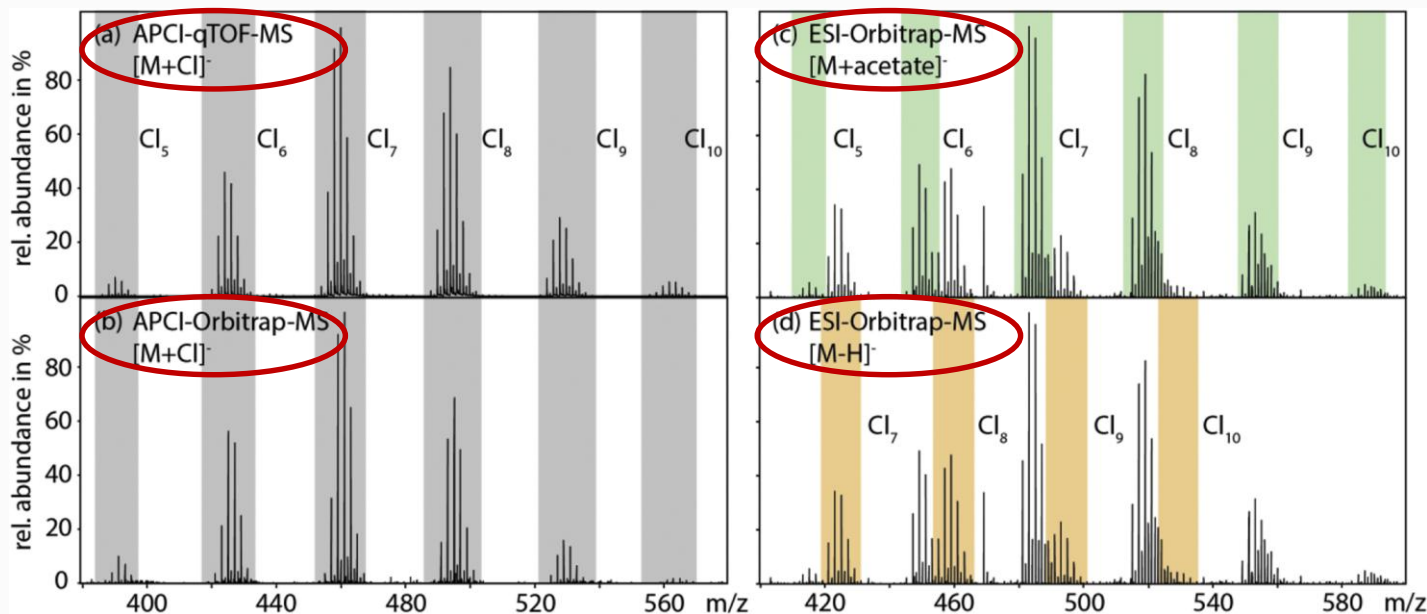
- Fase estacionaria: Columna apolar del tipo C₁₈
- Recomendación: Pre-columna y filtro
 - Polímeros y aditivos de plásticos desconocidos
 - Residuos de muestras medio ambientales
- Fases móviles: **A** → H₂O, **B** → Acetonitrilo o MeOH (orgánica)
 - **Opción 1:** Dopante: CH₂Cl₂ para producir [M+Cl]⁻
 - *Opción 2: Dopante sal de cloruro [M+Cl]⁻
 - *Opción 3: Dopante Acetato de amonio [M+Ac]⁻
- Gradiente largo de fases móviles (> 20 minutos)



Espectro de masas simples son la clave



- Ajuste de condiciones cromatográficas y fuente de ionización
- Potenciar la creación de un tipo de ion para minimizar la complejidad
- Eficiencia de ionización en función del C_nCl_x grupo congénere → selectividad y sensibilidad



Espectrometría de masas – Detector de masas



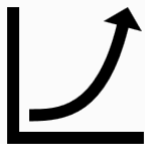
- Compromiso entre la calidad de los resultados y la infraestructura disponible
- Ejercicios de práctica con datos de baja y alta resolución (Jueves 27)

Característica	Cuadrupolo	Tiempo de Vuelo	Orbitrap
Resolución	~3000	~40000	~140000
Precisión	Moderada (10 ppm)	Buena (1–5 ppm)	Excelente (< 1 ppm)
Aplicación en PCs	Monitoreo de iones (dinámico)	Escaneo completo	Escaneo completo
Coste	Bajo	Moderado	Alto
Calidad de resultados (fiabilidad)	Baja en general	Buena para compuestos abundantes	Excelente incluso para compuestos poco abundantes
Procesamiento de datos	Desafiante (días)	Ejecutable (horas)	Sencillo (segundos)

Resolución de problemas (LC-APCI-Orbitrap-HRMS)



Presión



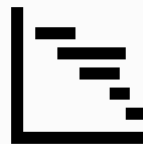
Aglomeración de impurezas
(plásticos, lodo, disolventes)

Sensibilidad



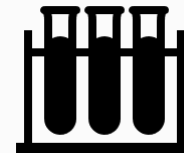
Supresión de iones
(coelución o mantenimiento)

Reproducibilidad



Carry-over de la distribución
de C_nCl_x grupos congéneres

Bancos con PCs



Tubos del instrumento

Pérdida de la distribución isotópica



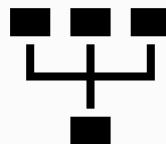
Interferencias individuales o
eliminación instrumental (Orbitrap)

Hipercloración¹



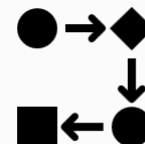
Origen desconocido

Oligómeros de cloruro de polivinilo (+ C_2H_3Cl)²



Artefactos observados
en plásticos

Olefinas cloradas³



Productos de transformación
durante la exposición al calor

1) Fabienne Jackle, Tesis de grado de Universidad, ZHAW, 2023

2) Godere, M., et al, *Science of the Total Environment*, 2025 (<https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2025.178890>)

3) Schinkel, L., et al, *Chemosphere*, 2018 (<https://doi.org/10.1016/j.chemosphere.2017.11.168>)

Índice



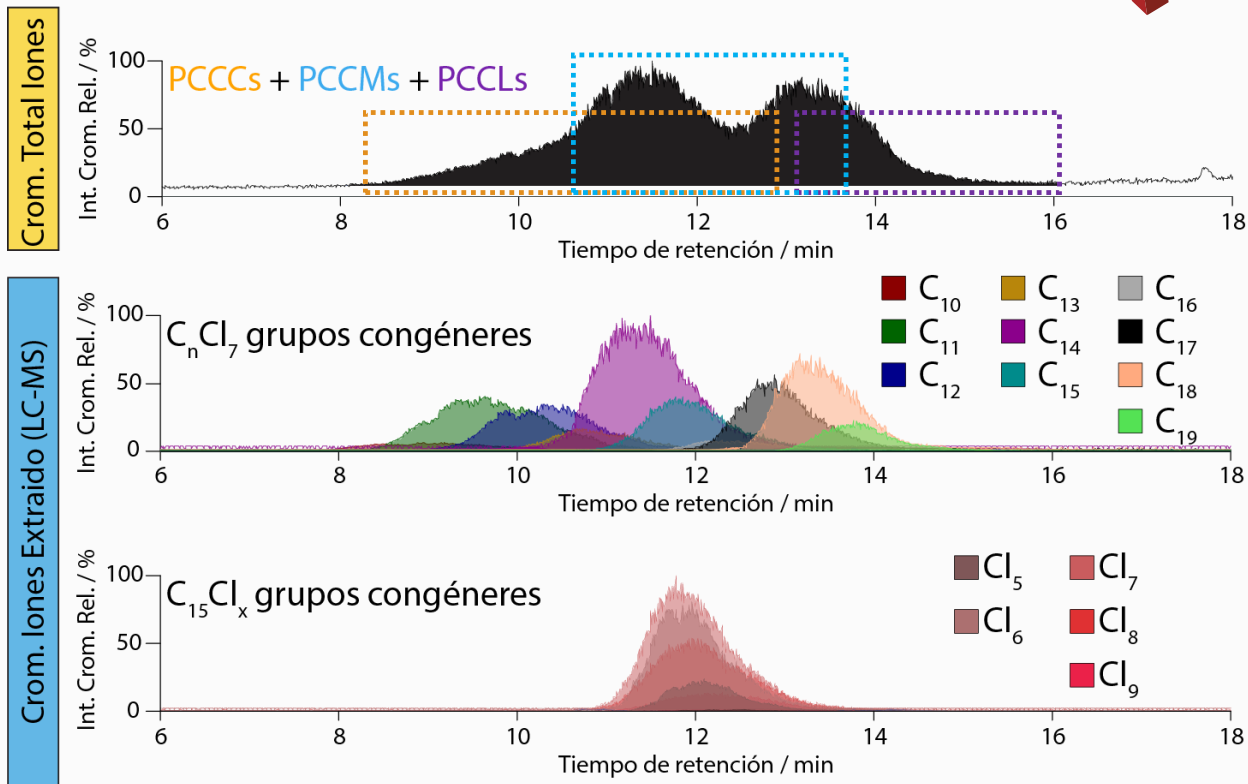
- Motivación y estrategias de muestreo en plásticos y muestras ambientales
- Tratamiento de la muestra y controles de calidad
- Métodos analíticos avanzados y resolución de problemas
- Procesamiento de datos de alta resolución



Cromatogramas de las PCs (LC-APCI-Orbitrap-HRMS)



- Combinación de soluciones estándares
 - PCCCs (C_{10} – C_{13})
 - PCCMs (C_{14} – C_{17})
 - PCCLs ($C_{>17}$)
- Selectividad y sensibilidad
- Señales amplias (2-3 min) e irregulares
- Solape cromatográfico entre cadenas de carbonos y grados de cloración
- Integración del cromatograma durante todo el periodo de elución (7 – 21 min)



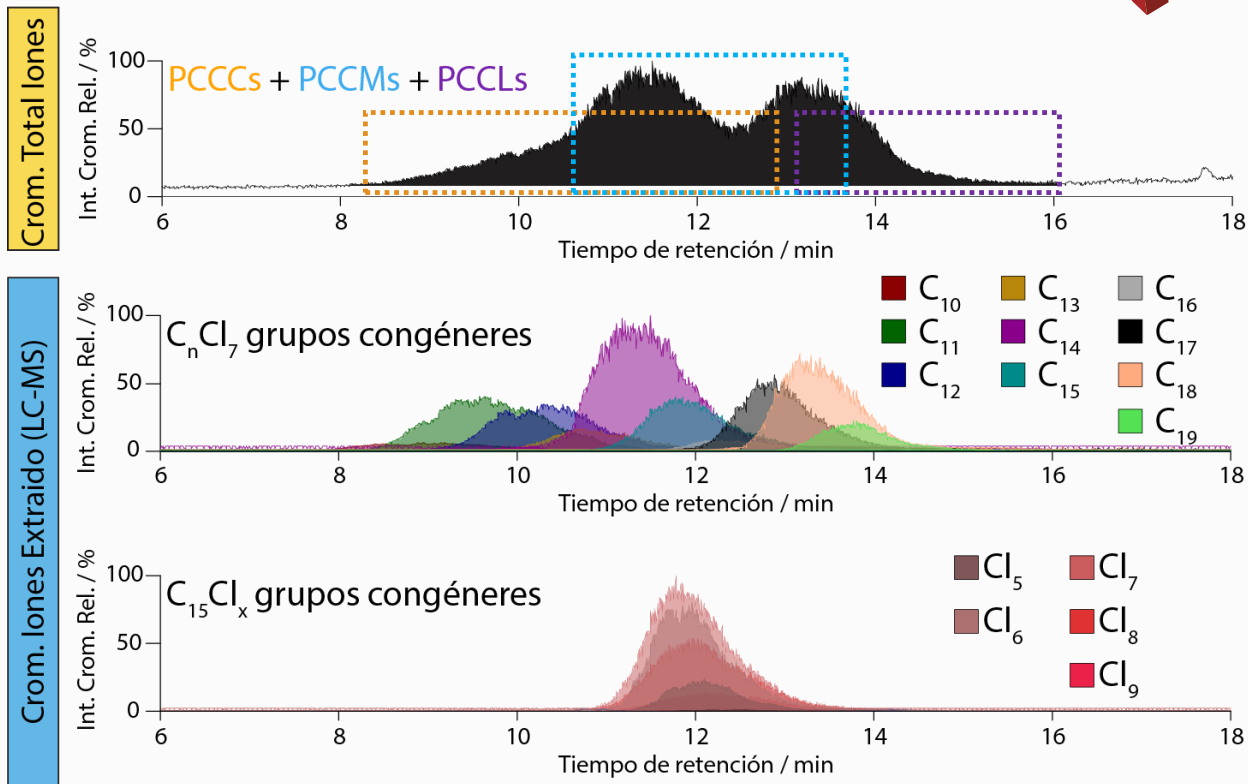
Cromatogramas de las PCs (LC-APCI-Orbitrap-HRMS)



- Combinación de soluciones estándares
 - PCCCs (C_{10} – C_{13})
 - PCCMs (C_{14} – C_{17})
 - PCCLs ($C_{>17}$)
- Selectividad y sensibilidad
- Señales amplias (2-3 min) e irregulares
- Solape cromatográfico entre cadenas de carbonos y grados de cloración
- Integración del cromatograma durante todo el periodo de elución (7 – 21 min)



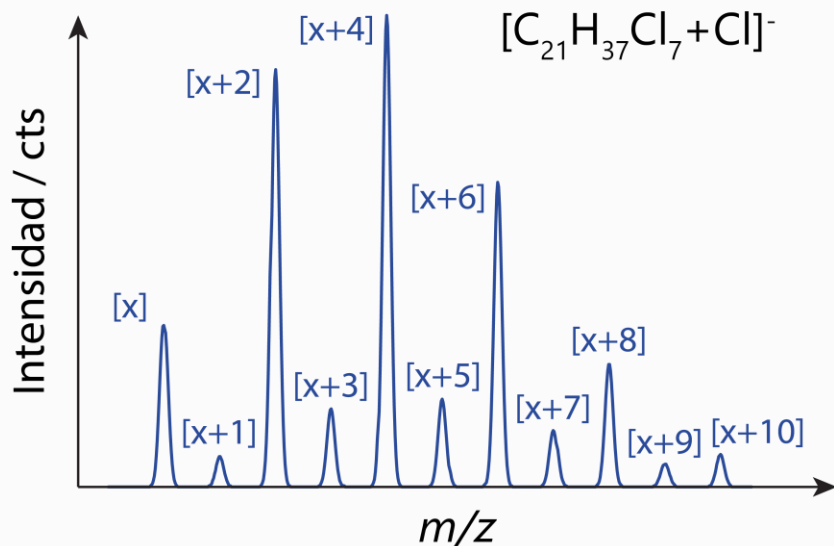
Espectro de masas promedio



Espectro de masas de PCs (LC-APCI-Orbitrap-HRMS)



- Señales en espectrometría de masas de isótopos de C y Cl
- Abundancia natural relativa $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$: **99%/1%**
- Abundancia natural relativa $^{35}\text{Cl}/^{37}\text{Cl}$: **76%/24%**
- Un grupo congénere $\text{C}_n\text{Cl}_x \rightarrow$ entre 7 y 18 señales
- Calculador de patrones de isótopos: **EnviPat** (EAWAG)



Cualitativo →

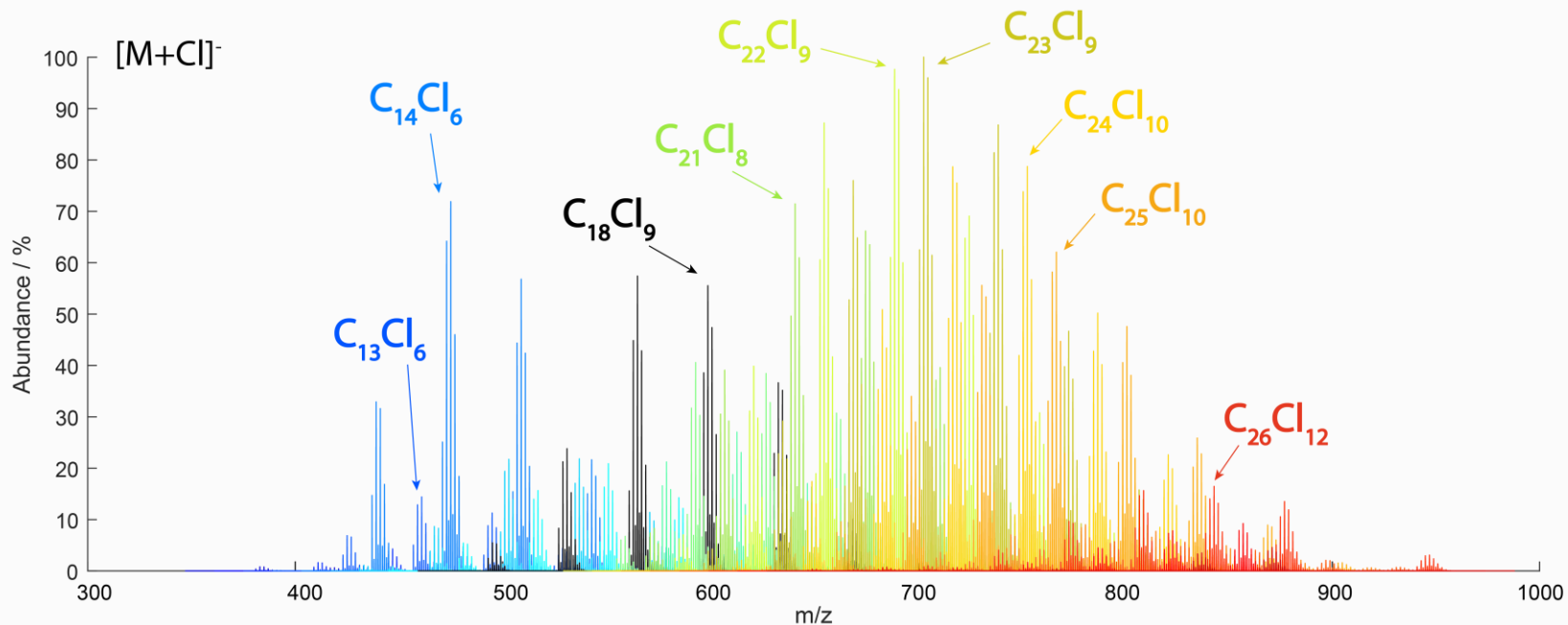
Cuantitativo →

Señal	m/z	Ion
[x]	569.0409	$^{12}\text{C}_{21}\text{H}_{37}^{35}\text{Cl}_8$
[x+1]	570.0443	$^{12}\text{C}_{20}^{13}\text{C}_1\text{H}_{37}^{35}\text{Cl}_8$
[x+2]	571.0379	$^{12}\text{C}_{21}\text{H}_{37}^{35}\text{Cl}_7^{37}\text{Cl}_1$
[x+3]	572.0413	$^{12}\text{C}_{20}^{13}\text{C}_1\text{H}_{37}^{35}\text{Cl}_7^{37}\text{Cl}_1$
[x+4]	573.0350	$^{12}\text{C}_{21}\text{H}_{37}^{35}\text{Cl}_6^{37}\text{Cl}_2$
[x+5]	574.0384	$^{12}\text{C}_{20}^{13}\text{C}_1\text{H}_{37}^{35}\text{Cl}_6^{37}\text{Cl}_2$
[x+6]	575.0320	$^{12}\text{C}_{21}\text{H}_{37}^{35}\text{Cl}_5^{37}\text{Cl}_3$
[x+7]	576.0354	$^{12}\text{C}_{20}^{13}\text{C}_1\text{H}_{37}^{35}\text{Cl}_5^{37}\text{Cl}_3$
[x+8]	577.0291	$^{12}\text{C}_{21}\text{H}_{37}^{35}\text{Cl}_4^{37}\text{Cl}_4$
[x+9]	578.0325	$^{12}\text{C}_{20}^{13}\text{C}_1\text{H}_{37}^{35}\text{Cl}_4^{37}\text{Cl}_4$
[x+10]	579.0261	$^{12}\text{C}_{21}\text{H}_{37}^{35}\text{Cl}_3^{37}\text{Cl}_5$

Espectrómetro de alta resolución es clave



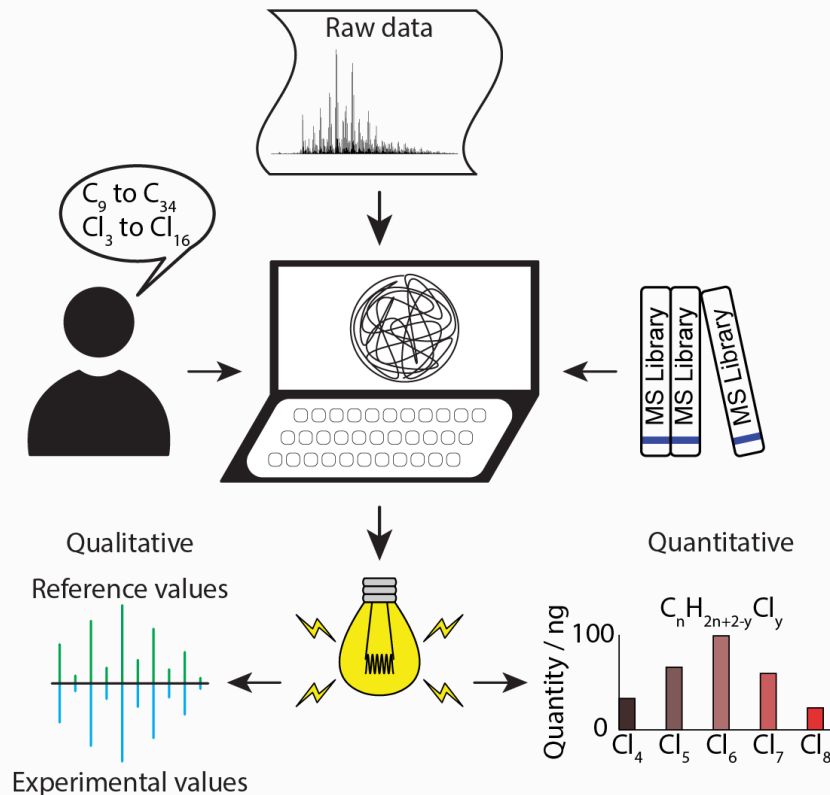
- ~4000 señales
- Verificación de tiempos de retención, m/z y fidelidad isotópica
- Resolución: 140000 (en m/z 200)



Herramientas virtuales para el análisis semiautomático de PCs



- Proceso manual es laborioso → días por muestra
- Uso de herramientas virtuales → ~1-3 minutos por muestra
- Requiere conocimiento en espectrometría de masas



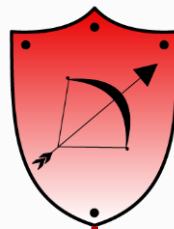
Herramientas virtuales para el análisis semiautomático de PCs



CPSeeker



CP-Hunter



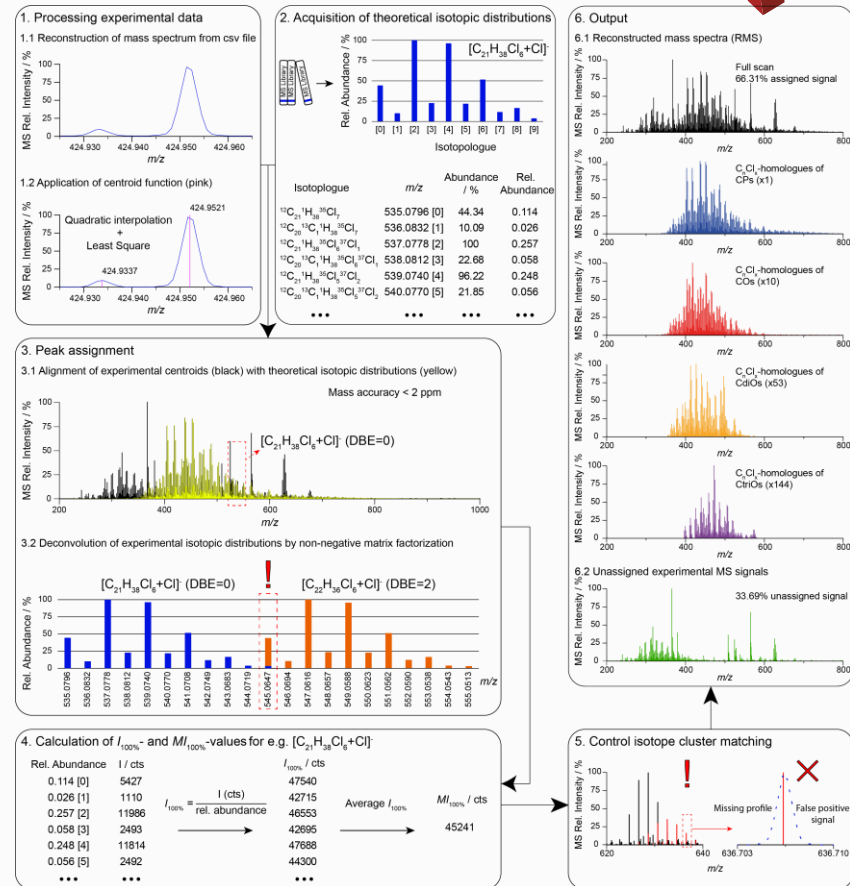
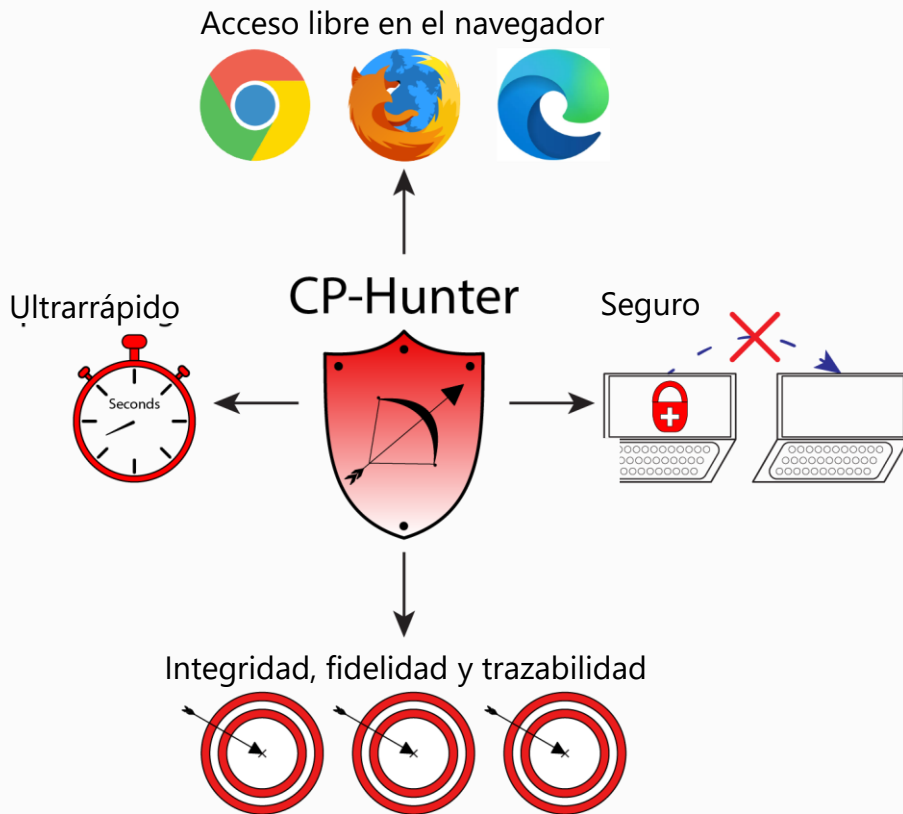
Empa

Materials Science and Technology

CPexplorer



Procesamiento de datos con CP-Hunter



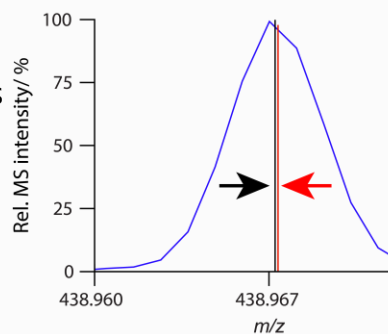
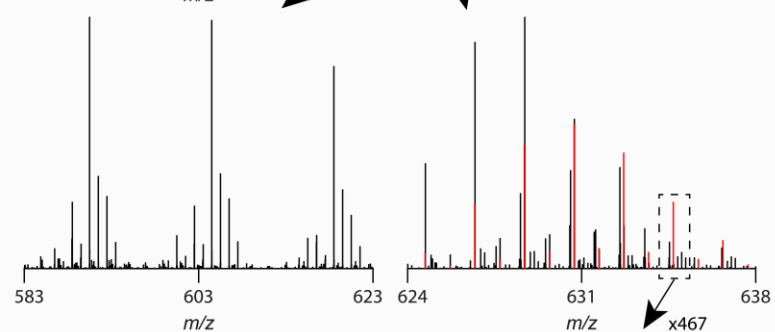
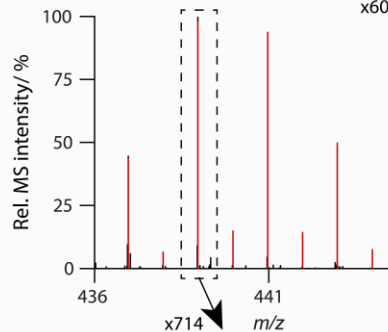
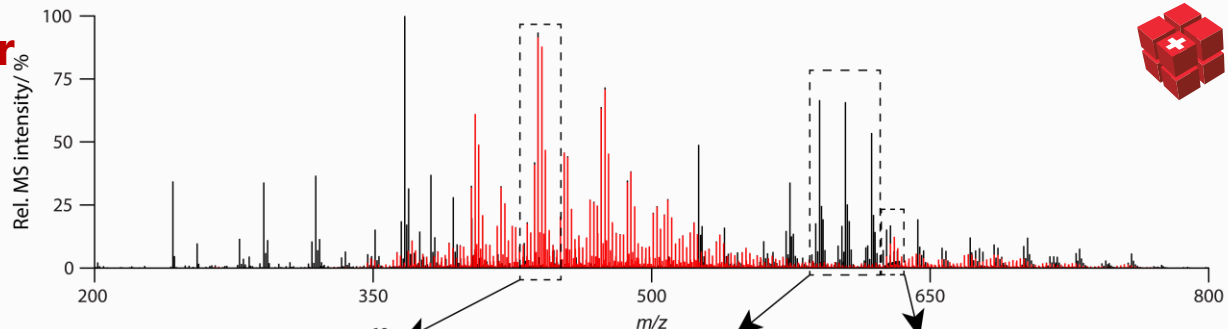
Resultados de CP-Hunter



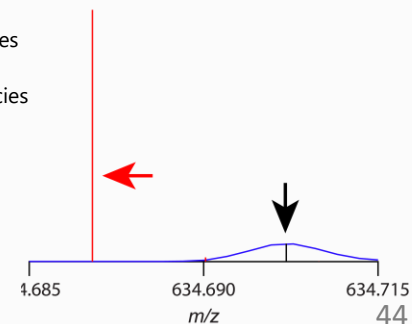
Lodo de depuradora



- Identificación de PCs en función de los grupos de isótopos
- Asignación de señal < 0.5 mDa
- Revelación de señales no asignadas
- Control de falsos positivos



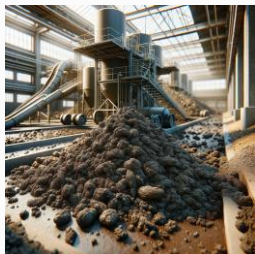
- Datos centroides experimentales
- Señales reconstruidas de especies detectadas
- Datos de perfil experimentales



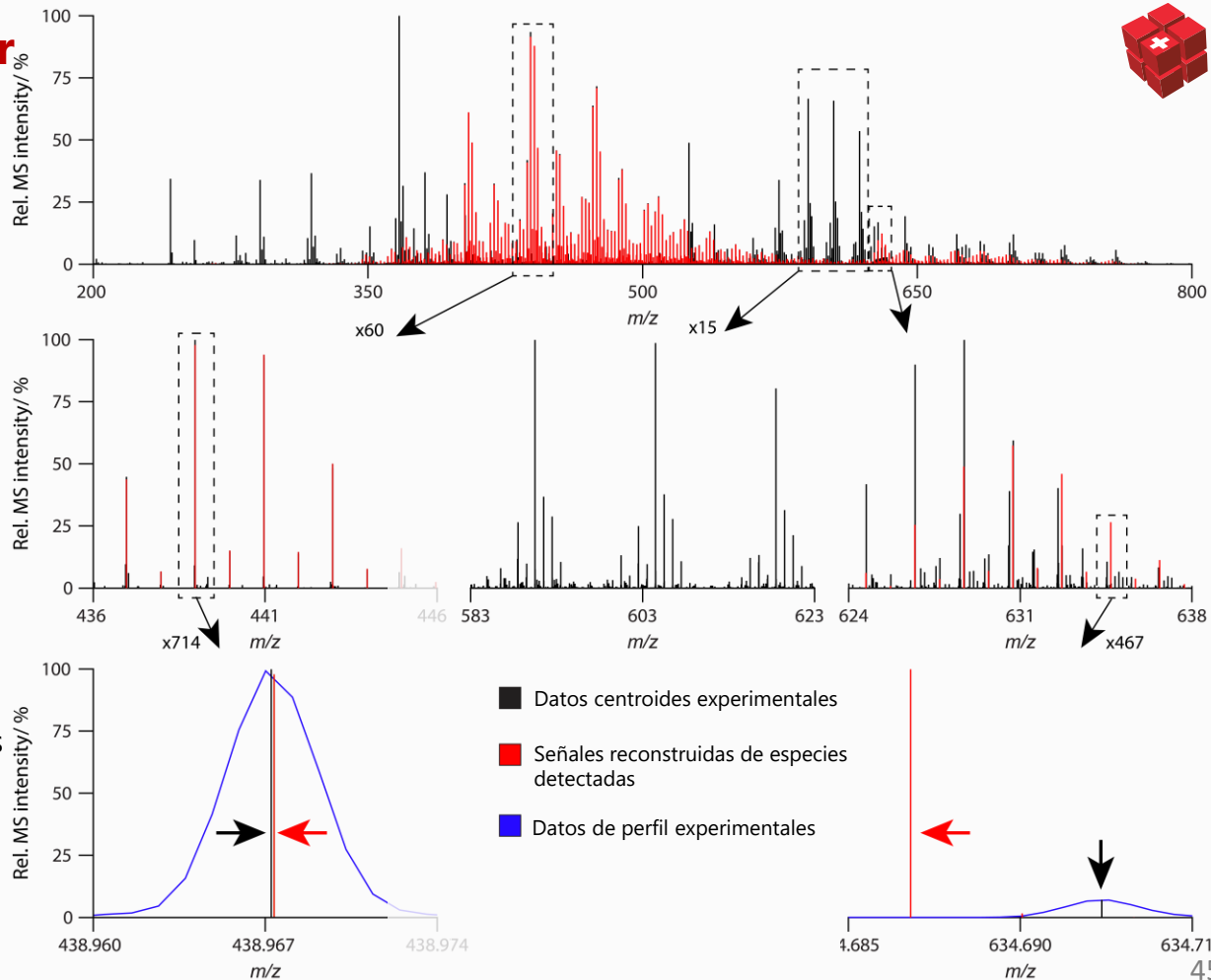
Resultados de CP-Hunter



Lodo de depuradora



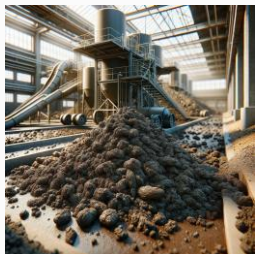
- Identificación de PCs en función de los grupos de isótopos
- Asignación de señal < 0.5 mDa
- Revelación de señales no asignadas
- Control de falsos positivos



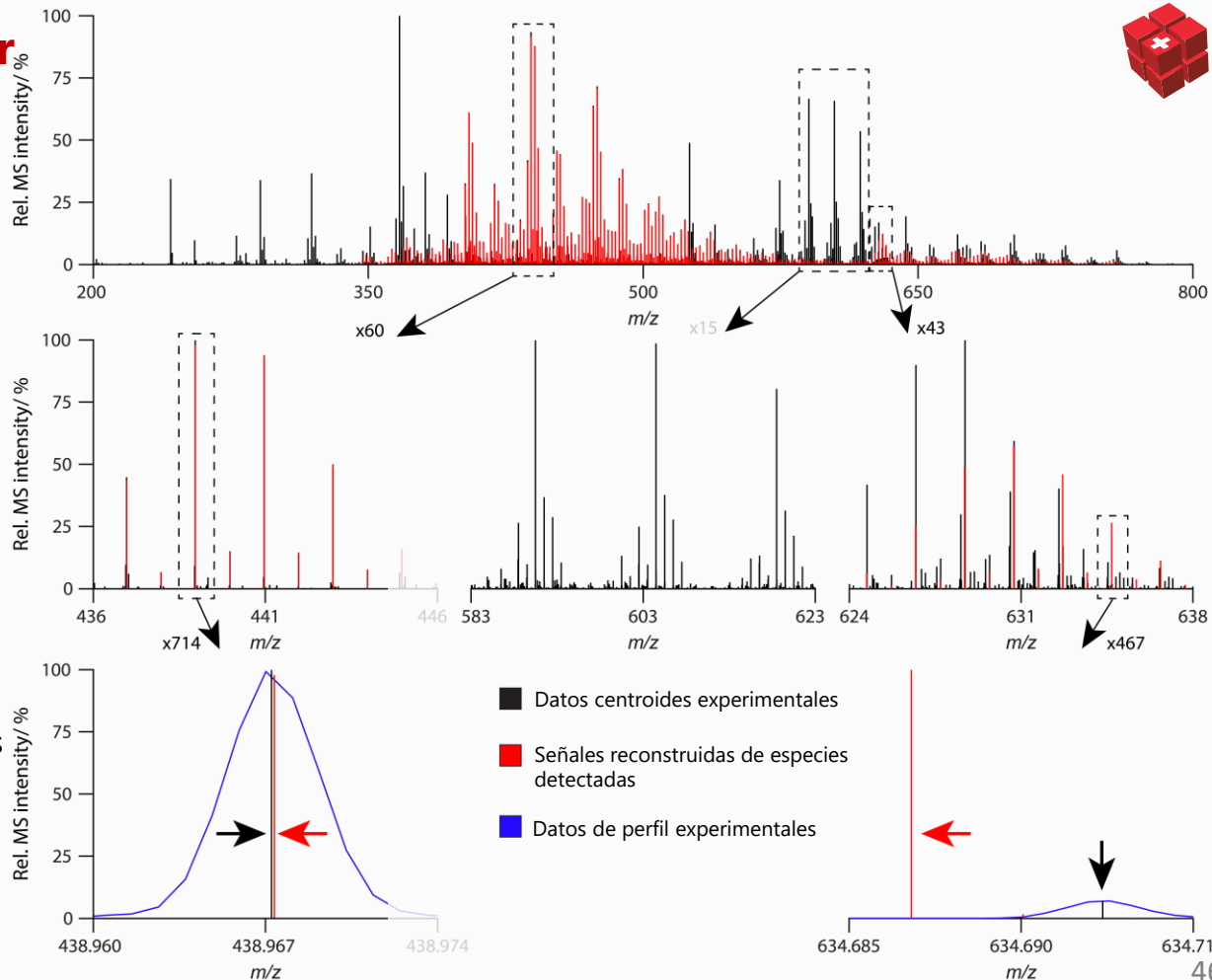
Resultados de CP-Hunter



Lodo de depuradora



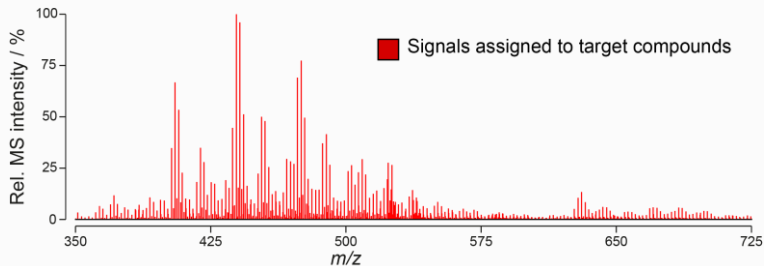
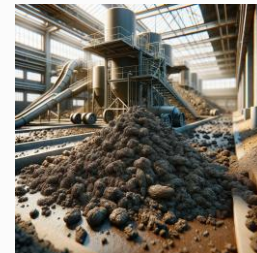
- Identificación de PCs en función de los grupos de isótopos
- Asignación de señal < 0.5 mDa
- Revelación de señales no asignadas
- Control de falsos positivos



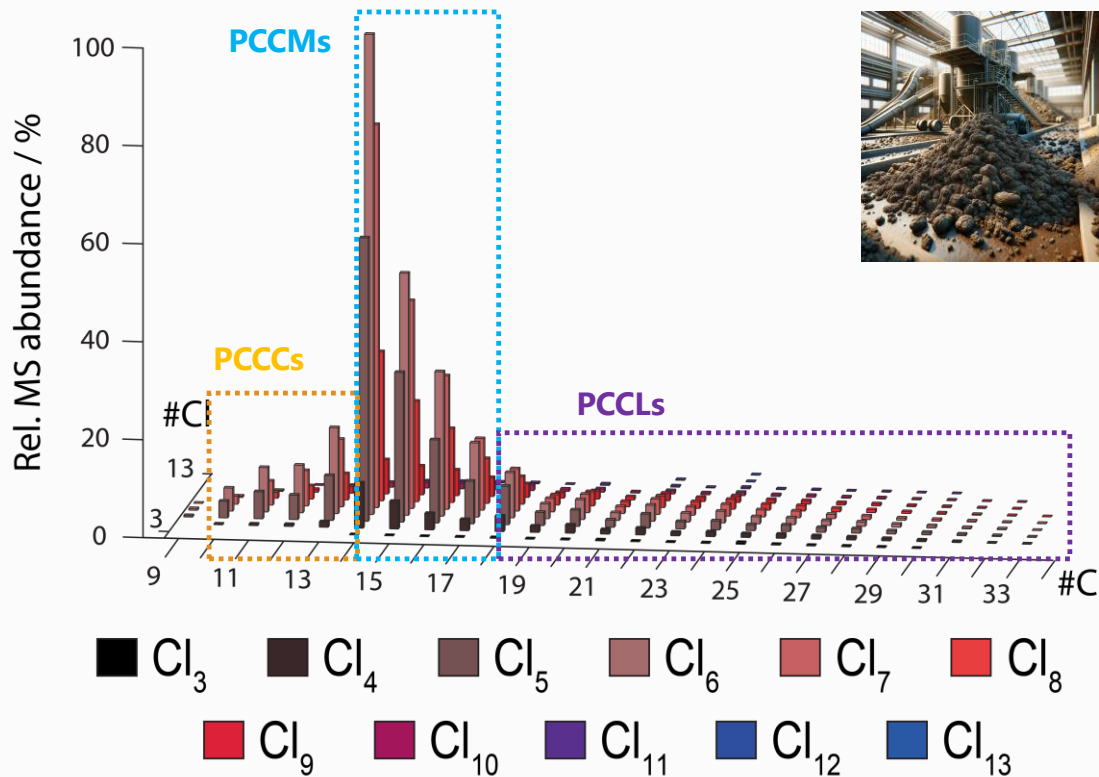
Resultados de CP-Hunter: distribución de C_nCl_x grupos congéneres



Sewage sludge

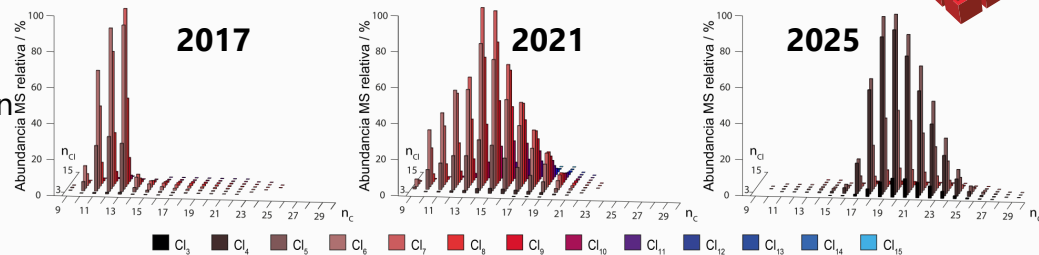


- 201 C_nCl_x grupos congéneres
- Desde C_9 hasta C_{33}
- Desde Cl_3 hasta Cl_{13}



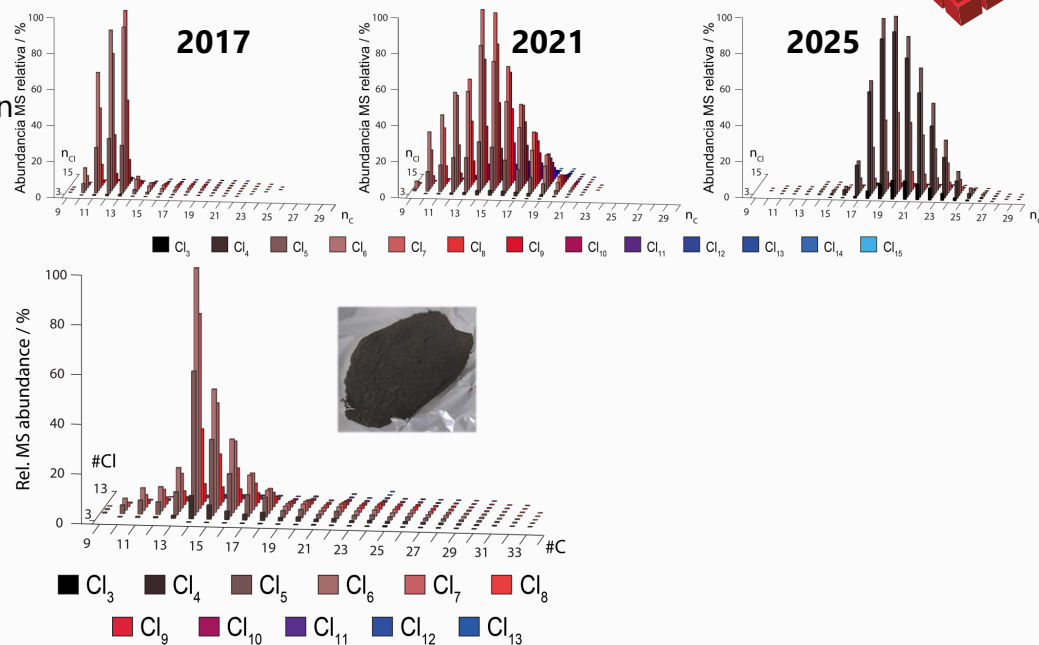
Conclusiones

- **Controlar la importación de plásticos** que contienen PCs como primera medida de prevención



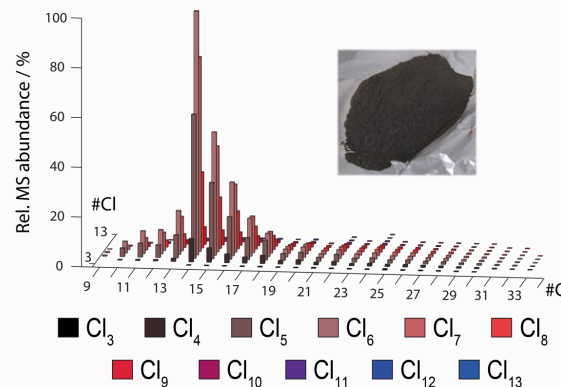
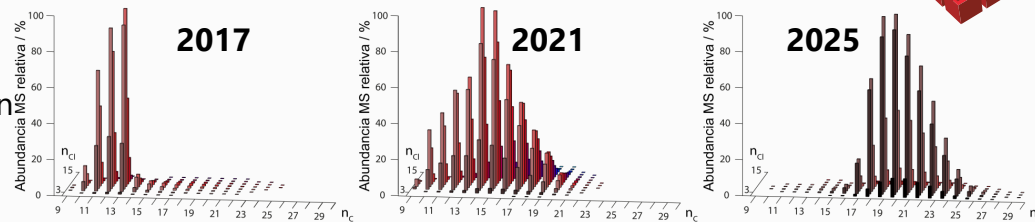
Conclusiones

- **Controlar la importación de plásticos** que contienen PCs como primera medida de prevención
- **Investigar lodos de depuradora** para detectar contaminación ambiental local



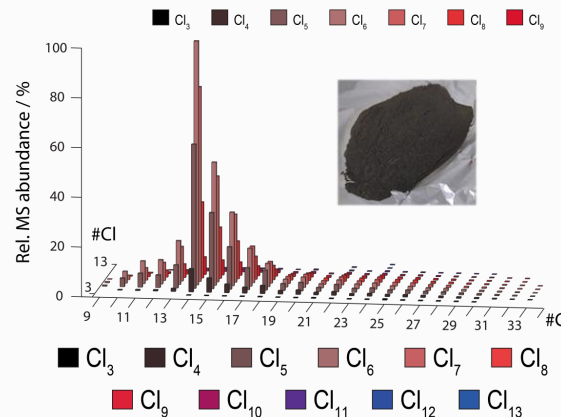
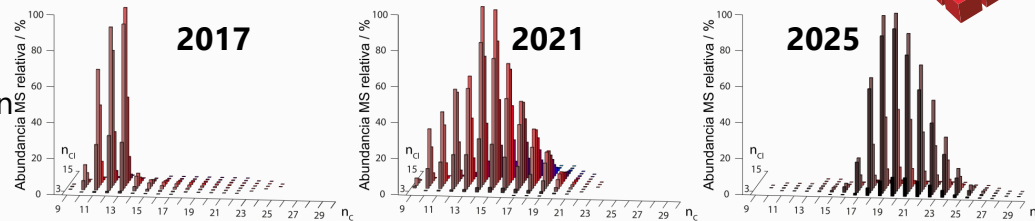
Conclusiones

- **Controlar** la **importación** de **plásticos** que contienen PCs como primera medida de prevención
- **Investigar lodos de depuradora** para detectar contaminación ambiental local
- **Compromiso** entre la **calidad de resultados** y la **tecnología**



Conclusiones

- **Controlar** la **importación** de **plásticos** que contienen PCs como primera medida de prevención
- **Investigar lodos de depuradora** para detectar contaminación ambiental local
- **Compromiso** entre la **calidad de resultados** y la **tecnología**
- **Recomendación:** Uso de tecnología de **alta resolución** y aplicación de **herramientas virtuales** para el procesamiento de datos



CPSeeker

CP-Hunter

CPxplorer



Agradecimientos a entidades colaboradoras en proyectos científicos



- Laboratorios Suizos para la Ciencia de los Materiales y Tecnología (**Empa**)
- Universidad de Zúrich (**UZH**)
- Universidad de Ciencias Aplicadas de Zúrich (**ZHAW**)
- Instituto Federal Suizo de Ciencias y Tecnologías Acuáticas (**EAWAG**)
- **Zakodium**
- Proyectos financiados por la Oficina federal suiza para el medio ambiente (**BAFU**)



Zürcher Hochschule
für Angewandte Wissenschaften



University of
Zurich ^{UZH}

eawag
aquatic research ^{ooo}



Schweizerische Eidgenossenschaft
Confédération suisse
Confederazione Svizzera
Confederaziun svizra



Gracias por su atención

¿Preguntas?

