

Título: NEW DEVELOPMENTS TO REFINE TARGET, SUSPECT AND NON-TARGET SCREENING STRATEGIES FOR COMPREHENSIVE MONITORING OF THE AQUATIC ENVIRONMENT

Nombre: Celma Tirado, Alberto

Universidad: Universidad Jaume I de Castellón

Departamento: Instituto Universitario de Plaguicidas y Aguas

Fecha de lectura: 27/10/2021

Mención a doctor europeo: concedido

Programa de doctorado: Programa de Doctorado en Ciencias por la Universidad Jaume I de Castellón

Dirección:

> **Director:** Juan Vicente Sancho Llopis

> **Codirector:** Lubertus Bijlsma

Tribunal:

> **presidente:** NESTOR ETXEBARRIA LOIZATE

> **secretario:** Tania Portolés Nicolau

> **vocal:** Nikiforos Alygizakis

> **vocal:** Margaretha Hendrika Lamoree

Descriptor:

> ESPECTROSCOPIA DE MASAS

> AGUAS SUPERFICIALES

> CONTROL DE LA CONTAMINACION DEL AGUA

> ABUSO DE DROGAS

El fichero de tesis ya ha sido incorporado al sistema

> <http://hdl.handle.net/10803/672724>

Localización: BIBLIOTECA UNIVERSITAT JAUME I

Resumen: La cantidad de microcontaminantes orgánicos (OMP) emitidos al medio ambiente acuático en la actualidad es incalculable. Por ello, se han desarrollado distintas estrategias analíticas para monitorizar la incidencia de OMP en muestras ambientales. En esta tesis se han aplicado diferentes herramientas para refinar estrategias de cribado dirigidas, de sospechosos y no dirigidas para la monitorización del medio ambiente acuático con especial énfasis en el acoplamiento de la separación por movilidad iónica (IMS) con espectrometría de masas de alta resolución. Adicionalmente, se ha explorado el desarrollo de herramientas de mejora para los cribados de sospechosos como, por ejemplo, indexación de tiempo de retención o predicción computacional de datos de IMS, así como la implementación de análisis basados en efecto (EDA) para una visión completa de la calidad de los cuerpos acuáticos. Finalmente, se ha evaluado la monitorización de Nuevas

Sustancias Psicoactivas (NPS) en muestras complejas tales como aguas residuales y orina.