

Colaboración entre la Dirección General del Agua del MITECO y el Laboratorio de Espectrometría de Masas- Contaminantes Orgánicos del IDAEA-CSIC para la investigación de contaminantes emergentes en aguas superficiales, subterráneas y residuales: análisis de la lista de observación y determinación de contaminantes específicos de cuenca.

**“INFORME DE RESULTADOS DEL ANÁLISIS NO DIRIGIDO”
Muestras 2025**

Barcelona, febrero de 2026

En el marco de la subvención concedida al CSIC por parte del MITERD- Dirección General del Agua- para llevar a cabo labores en materia de investigación en recursos e infraestructuras hidráulicas, dentro de la actuación “Investigación de contaminantes emergentes en aguas superficiales, subterráneas y residuales: análisis de la lista de observación y determinación de contaminantes específicos de cuenca”, se emite el “Informe de resultados del análisis no dirigido”.

El siguiente informe tiene por objeto la presentación de los resultados obtenidos en el análisis de criba (*screening*) para el control de contaminantes no determinados en aguas subterráneas. Este análisis se llevó a cabo en el año 2025 en el Laboratorio de Espectrometría de Masas- Contaminantes Orgánicos del IDAEA-CSIC.

En la tabla 1 se recogen las referencias de las 20 muestras de agua subterráneas objeto de estudio, de las cuales 4 corresponden a zonas de captación.

Tabla 1: Muestras de aguas subterráneas y zonas de captación.

| CH | Tipo | Municipio | Provincia | Nombre PM | Código PM | Fecha muestreo |
|--------|--------------------------|--------------------|------------|--|---------------|----------------|
| CMA | Agua Subterránea | Málaga | Málaga | 60037 Bajo Guadalhorce | MD5247 | 29/05/2025 |
| DCFC | Agua Subterránea | Ripollet | Barcelona | Pou de la sinia ajunt Ripollet | 08180-0009 | 05/05/2025 |
| DHCOcc | Agua Subterránea | Gozón | Asturias | La Magdalena | NOS01400001 | 21/04/2025 |
| DHCOcc | Agua Subterránea | Astilero | Cantabria | Bergueres | NOS03500002 | 22/04/2025 |
| DHCOOr | Agua Subterránea | Guernica | Vizcaya | OKOKA-S01 | OKOKA-S01 | 21/05/2025 |
| DHE | Agua Subterránea | Zaragoza | Zaragoza | Abantos. El Hortal | 281510217 | 06/05/2025 |
| DHGC | Agua Subterránea | Ames | Pontevedra | Campo 1 | 14.GW.0460 | 03/03/2025 |
| DHGq | Agua Subterránea | Peligros | Granada | Tostadero Sol de Alba | 5.32.02.03 | 23/04/2025 |
| DHGq | Agua Subterránea | Carmona | Sevilla | Pozo Tefluplac, S.L. (Antiguos Escayolas Álvaro) | 5.47.00.03 | 14/04/2025 |
| DHMS | Agua Subterránea | Carracedelo | León | Posada del bierzo | MS010SUB | 04/03/2025 |
| DHS | Agua Subterránea | Murcia | Murcia | Pozo del Perpétuo Socorro | CA0724-SIC02S | 06/05/2025 |
| DHIB | Agua Subterránea | Palma | I.Baleares | P-1-a Pont d'inca Vell | MA1438 | 29/04/2025 |
| DHJ | Agua Subterránea | Albacete | Albacete | Pozo Parque Lineal | 08-129-CA807 | 27/03/2025 |
| DHJ | Agua Subterránea | Alicante | Alicante | Pozo Calle Teulada | 08-190-CA042 | 05/05/2025 |
| DHJ | Agua Subterránea | Paterna | Valencia | Pozo Municipal - Bomba 1 | 08-131-CA005 | 26/03/2025 |
| DHD | Agua Subterránea | Valladolid | Valladolid | Pinar de Antequera | PC0267014 | 03/04/2025 |
| DCFC | Agua Subterránea (Z-CAP) | Vila-seca | Tarragona | Peirats | 43171-0013 | 06/05/2025 |
| DHT | Agua Subterránea (Z-CAP) | Madrid | Madrid | S. Club de Campo Villa de Madrid - Madrid | 11-07 | 07/04/2025 |
| DHT | Agua Subterránea (Z-CAP) | Alcobendas | Madrid | S-Polideportivo - Alcobendas | 10-02 | 02/04/2025 |
| DHT | Agua Subterránea (Z-CAP) | Mejorada del Campo | Madrid | P. Vivero don Pedro - Mejorada del Campo | 07-08 | 07/04/2025 |

CH: confederación hidrográfica

PM: punto de muestreo

Z-CAP: zona de captación

Equipo de trabajo:

Eva M^a Herrera

Dra. Cintia Flores

Arancha Bartolomé

Metodología analítica

Compuestos polares, no polares / semivolátiles: Extracción líquido-líquido (LLE) con diclorometano. Posteriormente se llevan a cabo dos métodos de análisis para abarcar el mayor espectro de compuestos.

Compuestos polares: Cromatografía de líquidos acoplada a Espectrometría de Masas de alta resolución (LC-HRMS) con analizador híbrido cuadrupolo-tiempo de vuelo (q-TOF), *suspect screening analysis (SSA)*.

Se realiza un barrido en el intervalo de m/z 30-1000 en modo de ionización positivo y negativo. Las señales se identifican de forma tentativa mediante el *software* TASDQ2023b (Bruker) y las bases de datos propias (Tabla 2). Los criterios utilizados para la identificación son: tolerancia en el tiempo de retención < 0,5 min; exactitud de la medida de la masa < 5 ppm y parámetro de similitud entre el perfil isotópico (huella dactilar) observado y el teórico de la sustancia (mSigma) < 40, evaluados para la señal del ion precursor (MS) y de al menos un ion producto (MS2).

Compuestos no polares y semi-volátiles: Cromatografía de gases acoplada a Espectrometría de Masas de alta resolución con analizador híbrido q-Orbitrap (GC-HRMS), *non-targeted analysis (NTA)*.

El tratamiento y la identificación de los datos se lleva a cabo con el *software* Compound Discoverer 3.3. Se establecen criterios en el flujo de trabajo para la identificación: exactitud de masa (< 5ppm), coincidencia con el patrón isotópico, umbral de corriente iónica total (TIC) (10^6), relación muestra/blanco > 5, solapamiento de iones (98%), entre otros.

Tras el procesamiento de los datos, se aplican filtros para acotar el número de compuestos identificados provisionalmente como: áreas de la señal > 10^5 , puntuaciones de las asignaciones HRF (*high-resolution filtering score*) > 80%, SI (*search index*) > 700 y RSI (*reverse search index*) > 700.

Finalmente se realiza una revisión manual de los compuestos asignados para refinar los resultados. Las librerías utilizadas en la identificación provisional de los compuestos son: *NIST Mass Spectral Library*, *GC-Orbitrap Contaminants Library*, *GC-Orbitrap other environmental*, *GC-Orbitrap PCBs*, *GC-Orbitrap Pesticides*, *mainlib*, *Wiley 6* y *7*.

Tabla 2: Compuestos que se incluyen en las bases de datos del análisis *Suspect Screening* mediante LC-HRMS (TargetScreener HR 4.0 Plaguicidas/Tóxicos/Drogas veterinarias).

| Bases de datos | Nº de compuestos |
|---|------------------|
| Plaguicidas | 1264 |
| Tóxicos (fármacos, drogas de abuso, plaguicidas, otros) | 1476 |
| Drogas veterinarias | 319 |

Compuestos volátiles: Extracción y análisis mediante el procedimiento de purga y trampa acoplado a Cromatografía de gases y Espectrometría de Masas de impacto de electrones (GC-MS).

A continuación, se presentan los resultados obtenidos en el análisis de *screening*. Con este tipo de análisis se obtienen resultados cualitativos, presencia o no presencia del compuesto en la muestra. La asignación de los compuestos se hace de manera tentativa en base a los criterios y puntuaciones teóricas de identificación anteriormente descritos.

Los compuestos detectados de manera tentativa se han clasificado en 3 categorías según su uso: plaguicidas, fármacos / drogas de abuso y compuestos de aplicaciones diversas (otros). Se han detectado 70 plaguicidas, 50 fármacos / drogas de abuso y 23 compuestos englobados en la categoría de otros.

Las tablas 3 y 4 muestran los compuestos detectados tentativamente y las muestras donde se han detectado.

Tabla 5. Frecuencias de detección de compuestos sobre el total de muestras.

| CATEGORIA | COMPUESTOS | AGUAS SUBTERRÁNEAS N = 16 | AGUAS DE CAPTACIÓN N = 4 | TOTAL N = 20 |
|-------------|---|------------------------------|-----------------------------|-----------------|
| PLAGUICIDAS | N,N-dietil-toluamida (DEET) | 9 | 2 | 11 |
| | Simazina | 9 | 1 | 10 |
| | Diuron | 6 | 3 | 9 |
| | Nicotina | 7 | 2 | 9 |
| | Terbutilazina-desetil | 6 | 2 | 8 |
| | Nitroguaiacol 5 | 6 | 2 | 8 |
| | Azoxistrobina | 6 | 1 | 7 |
| | Terbutilazina | 5 | 1 | 6 |
| | Atrazina-desetil | 6 | 0 | 6 |
| | Cloruro de bencildimetildodecilamonio (BAC 12) | 5 | 0 | 5 |
| | Cloruro de didecildimetilamonio (DDAC-C10) | 5 | 0 | 5 |
| | Fluxapiraxad | 4 | 1 | 5 |
| | Tiabendazol | 3 | 1 | 4 |
| | Diflufenican | 3 | 1 | 4 |
| | Imidacloprid | 3 | 1 | 4 |
| | Fipronil sulfona | 3 | 1 | 4 |
| | Clotianidina | 4 | 0 | 4 |
| | Fludioxonil | 2 | 1 | 3 |
| | Dinoterb | 2 | 1 | 3 |
| | Fipronil-sulfuro | 2 | 1 | 3 |
| | Clorantraniliprol | 2 | 1 | 3 |
| | Cloruro de bencildimetiltetradecilamonio (BAC 14) | 2 | 0 | 2 |
| | Cloruro de bencildimetiloctadecilamonio (BAC 18) | 1 | 1 | 2 |
| | Carbendazim | 2 | 0 | 2 |
| | Propiconazol | 1 | 1 | 2 |
| | Tetraconazole | 1 | 1 | 2 |
| | Boscalid | 2 | 0 | 2 |
| | Metalaxilo | 1 | 1 | 2 |
| | Tebuconazol | 1 | 1 | 2 |
| | Monuron | 1 | 1 | 2 |
| | Diclorobenzamida | 1 | 1 | 2 |
| | Hexazinona | 1 | 1 | 2 |
| | Sebutilazina | 1 | 1 | 2 |
| | Metomilo | 2 | 0 | 2 |
| | Fipronil | 2 | 0 | 2 |
| | Cloruro de bencildimetilhexadecilamonio (BAC 16) | 0 | 1 | 1 |
| | Epoxiconazol | 1 | 0 | 1 |
| | Climbazol | 1 | 0 | 1 |
| | Metconazol | 1 | 0 | 1 |
| | Disulfuro de tetrametiltiuram | 0 | 1 | 1 |
| | Tiofanato-etilo | 1 | 0 | 1 |
| | Fluopiram | 0 | 1 | 1 |
| | 4-Hidroxi-clorotanolil | 0 | 1 | 1 |
| | Terbutrina | 1 | 0 | 1 |
| | Prometrina | 1 | 0 | 1 |
| | Clorotoluron | 1 | 0 | 1 |
| | Monometildiuron | 1 | 0 | 1 |
| | Fluometuron | 0 | 1 | 1 |
| | Fomesafen | 0 | 1 | 1 |
| | Atrazina | 1 | 0 | 1 |
| | Bromacil | 1 | 0 | 1 |
| | Terbumeton | 1 | 0 | 1 |
| | Secbumeton | 1 | 0 | 1 |
| | Atrazina-desisopropil | 3 | 0 | 1 |
| | Norflurazon | 1 | 0 | 1 |
| | Propazina | 1 | 0 | 1 |
| | Terbacil | 0 | 1 | 1 |
| | Tiametoxam | 1 | 0 | 1 |
| | Fipronil-desulfenil | 1 | 0 | 1 |
| | Butóxido de piperonilo | 0 | 1 | 1 |
| | Carbanilida | 1 | 0 | 1 |
| | Ciduron | 1 | 0 | 1 |
| | Melamina | 1 | 0 | 1 |
| | Ftalato de dimetilo | 0 | 1 | 1 |
| | Pirimicarb | 0 | 1 | 1 |
| | Acetamiprid | 0 | 1 | 1 |
| | Flupiradifurona | 0 | 1 | 1 |
| | Diflubenzuron | 0 | 1 | 1 |
| | Carbofuran 3-keto- | 0 | 1 | 1 |
| | Flubendiamida | 0 | 1 | 1 |

Tabla 5. Frecuencias de detección de compuestos sobre el total de muestras (continuación).

| | | | | |
|-------------------|--|----|---|----|
| DROGAS - FÁRMACOS | Carbamazepina | 5 | 3 | 8 |
| | Benzethonium | 5 | 2 | 7 |
| | Cotina | 6 | 1 | 7 |
| | Benzododecinium | 5 | 1 | 6 |
| | Cafeína | 4 | 1 | 5 |
| | Alprazolam | 3 | 0 | 3 |
| | Telmisartan | 2 | 1 | 3 |
| | Nicotinamida | 3 | 0 | 3 |
| | Fenazona | 1 | 1 | 2 |
| | Lidocaina | 2 | 0 | 2 |
| | Fluconazol | 2 | 0 | 2 |
| | Cocaína | 2 | 0 | 2 |
| | Anabasina | 2 | 0 | 2 |
| | Tapentadol | 1 | 0 | 1 |
| | Tramadol | 1 | 0 | 1 |
| | Metadona | 1 | 0 | 1 |
| | Bupivacaína | 1 | 0 | 1 |
| | Diazepam | 1 | 0 | 1 |
| | Estazolam | 1 | 0 | 1 |
| | Oxazepam | 1 | 0 | 1 |
| | Lorazepam | 1 | 0 | 1 |
| | Disopiramida | 1 | 0 | 1 |
| | Trimetoprima | 1 | 0 | 1 |
| | Ofloxacina | 1 | 0 | 1 |
| | Azitromicina | 1 | 0 | 1 |
| | Salinomicina | 1 | 0 | 1 |
| | Apixaban | 1 | 0 | 1 |
| | Zonisamida | 0 | 1 | 1 |
| | Carbamazepina-10-11-epóxido | 1 | 0 | 1 |
| | Venlafaxina | 1 | 0 | 1 |
| | Desvenlafaxina | 1 | 0 | 1 |
| | Oxcarbazepina | 1 | 0 | 1 |
| | Topiramato | 1 | 0 | 1 |
| | Levamisol | 1 | 0 | 1 |
| | Bisoprolol | 1 | 0 | 1 |
| | Celiprolol | 1 | 0 | 1 |
| | Irbesartan | 1 | 0 | 1 |
| | Doxylamine | 1 | 0 | 1 |
| | Cetirizina | 1 | 0 | 1 |
| | Temazepam | 1 | 0 | 1 |
| | Ácido salicílico | 1 | 0 | 1 |
| | Dimetridazol | 1 | 0 | 1 |
| | Amisulpirida | 1 | 0 | 1 |
| | Dextrometorfano | 1 | 0 | 1 |
| | Dextroorfano | 1 | 0 | 1 |
| Ketamina | 1 | 0 | 1 | |
| Norcocaína | 1 | 0 | 1 | |
| Teobromina | 1 | 0 | 1 | |
| Memantina | 1 | 0 | 1 | |
| Lamotrigina | 1 | 0 | 1 | |
| OTROS | Diethylftalato u otro | 14 | 4 | 18 |
| | Metil palmitato | 14 | 4 | 18 |
| | Butilhidroxitolueno (BHT) | 14 | 4 | 18 |
| | Trifenilfosfato | 15 | 3 | 18 |
| | Benzotiazol | 13 | 4 | 17 |
| | Ftalato | 13 | 4 | 17 |
| | Difenilsulfona | 13 | 4 | 17 |
| | Dibutilftalato | 13 | 4 | 17 |
| | Fenantreno | 12 | 4 | 16 |
| | Homosalate(3,3,5-trimetil-ciclohexil salicilato) | 12 | 4 | 16 |
| | Pireno | 12 | 4 | 16 |
| | C3-Benceno (Trimetil benceno) | 11 | 3 | 14 |
| | 1-etil-2,4-dimetilbenceno | 11 | 3 | 14 |
| | 1,2,4-triclorobenceno | 10 | 4 | 14 |
| | DEHP u otro | 10 | 3 | 13 |
| | 2-metilfenol (o-cresol) | 9 | 3 | 12 |
| | Cloroformo | 8 | 2 | 10 |
| | 2-metil-2H-benzotriazol | 7 | 3 | 10 |
| | Tetracloroetileno | 2 | 2 | 4 |
| | Tolueno | 2 | 1 | 3 |
| | Cloruro de metileno | 2 | 0 | 2 |
| | Metil terc-butil éter | 2 | 0 | 2 |
| | Tricloretileno | 1 | 1 | 2 |

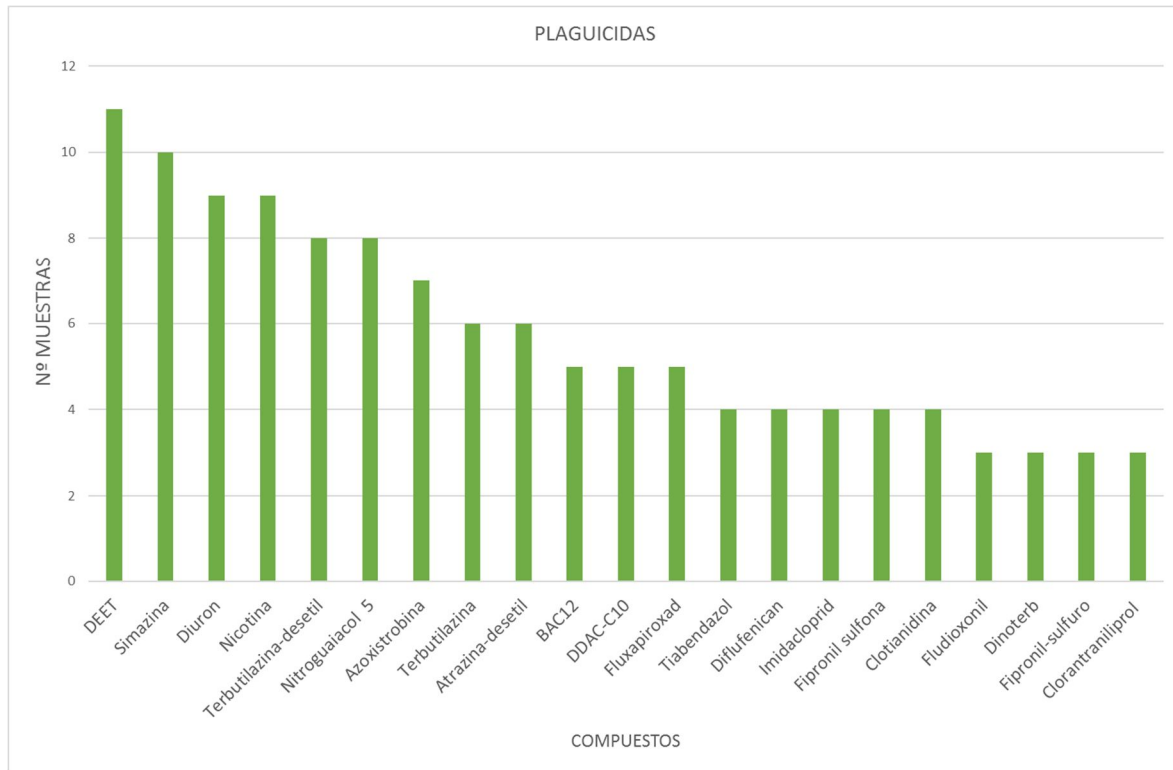


Gráfico 1. Plaguicidas detectados en más de 2 muestras.

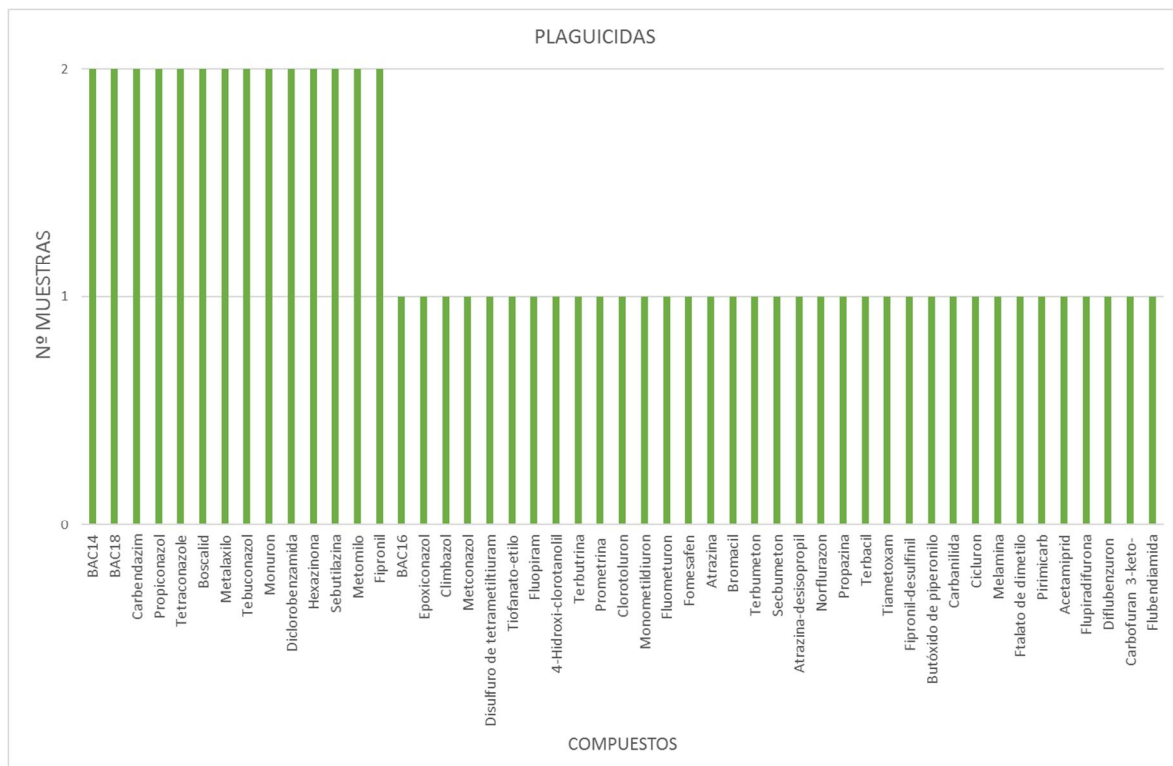


Gráfico 2. Plaguicidas detectados en 1 o 2 muestras.

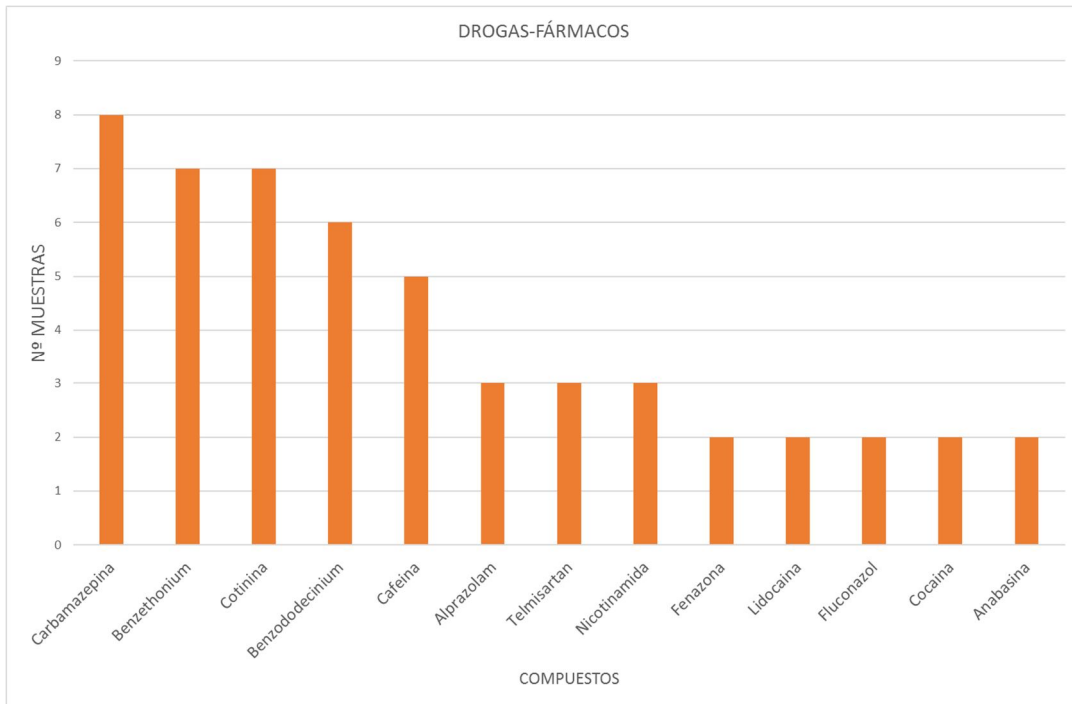


Gráfico 3. Fármacos y drogas de abuso detectados en más de 1 muestra.

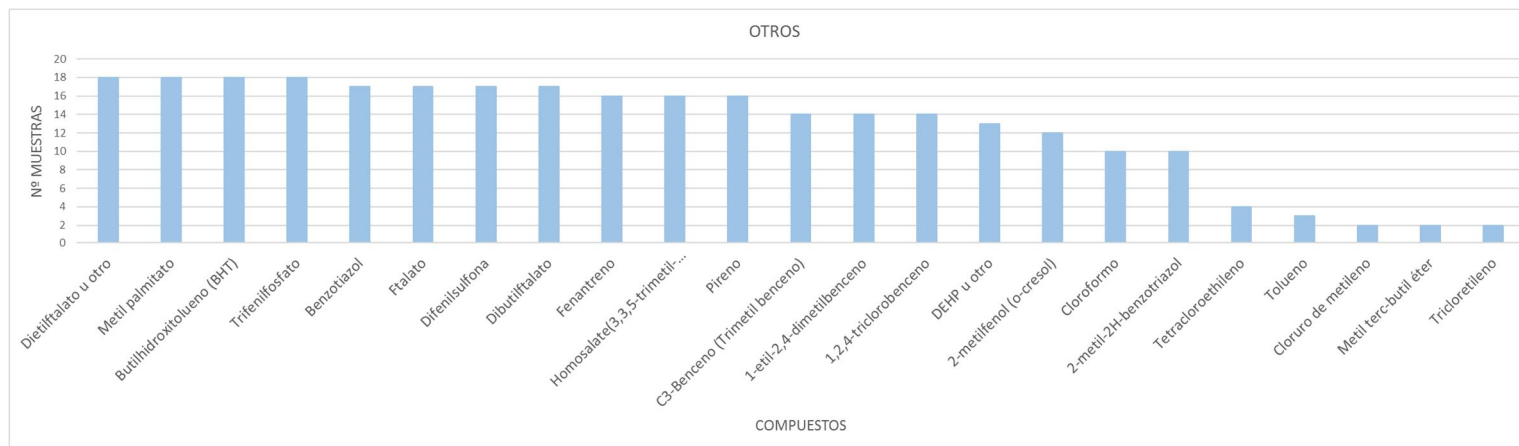


Gráfico 4. Frecuencia de detección de otros compuestos.

Por último, en el gráfico 5 se representa el número total de compuestos detectados de cada grupo en cada una de las muestras.

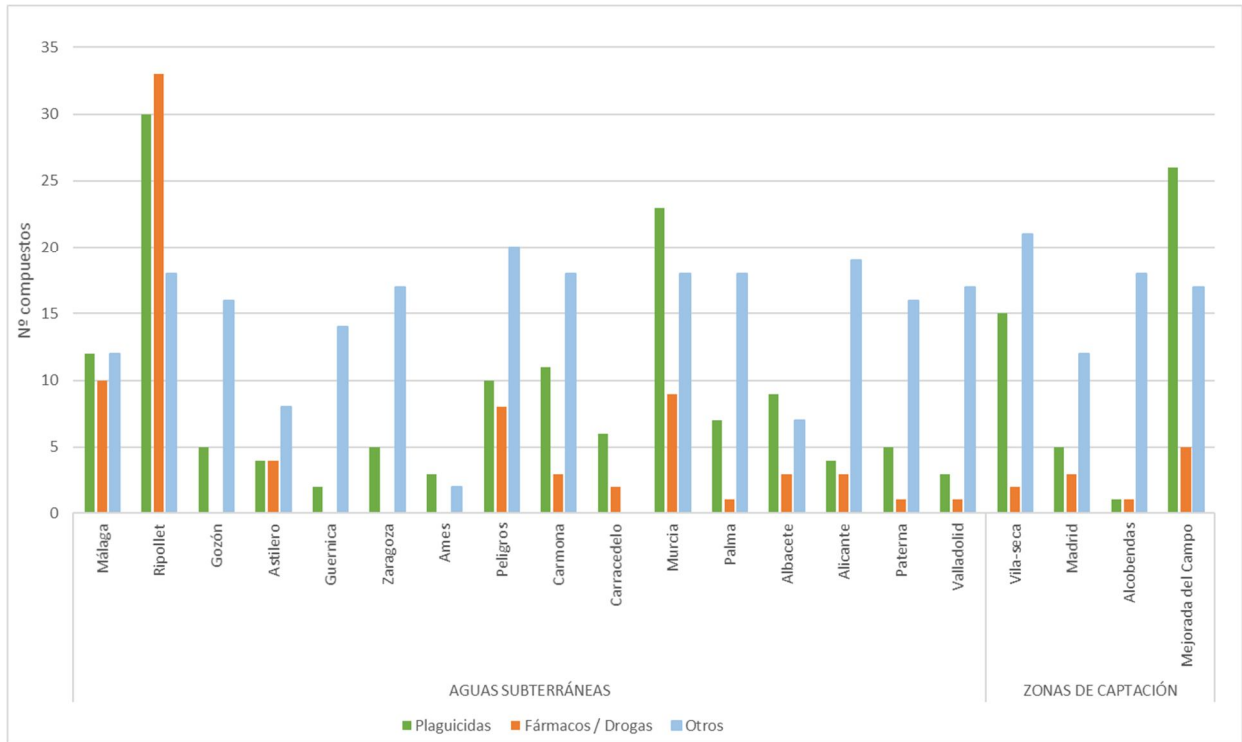


Gráfico 5. Número de compuestos detectados por grupos y punto de muestreo (municipio).