

1. INTEGRANTES

- Directora: Dra. Julia Culzoni, Prof. Adjunto Dedicación Exclusiva, Investigadora Independiente CONICET.
- Dr. Héctor Goicoechea, Prof. Titular Dedicación Exclusiva, Investigador Superior CONICET.
- Dra. Fabiana Gutierrez, Investigadora Adjunta CONICET.
- Dra. Romina Brasca, Jefe Trabajos Prácticos Dedicación Semiexclusiva, Investigadora Asistente CONICET.
- Dra. Quela Alcaráz, Jefe Trabajos Prácticos Simple, Investigadora Asistente CONICET.
- Dra. Carla Teglia, Jefe Trabajos Prácticos, Investigadora Asistente CONICET.
- Dra. Silvana Azcárate, Jefe Trabajos Prácticos, Investigadora Asistente CONICET.
- Lic. Milagros Montemurro, Beca Doctoral Interna CONICET.
- Lic. Lesly Paradina Fernández, Beca Doctoral Latinoamericana CONICET.
- Lic. Fabricio Chiappini, Beca Doctoral Interna CONICET.

2. INVESTIGACIÓN

Áreas de interés:

El objetivo primario en la investigación que llevamos a cabo consiste en el desarrollo de métodos para la extracción de información a partir de mediciones químicas, o quimiometría. La quimiometría ha sido definida como la aplicación de modelos matemáticos, estadísticos y métodos basados en la lógica formal a la química. El rol de la química analítica ha cambiado significativamente en las últimas dos décadas y el tipo de información solicitada a los químicos puede tener amplias implicancias en la vida real. Los problemas de interés incluyen calibración multivariada, optimización y reconocimiento de pautas (problemas multivariados). En contraste con los métodos analíticos tradicionales, que a menudo requieren solo una medición por muestra, las técnicas modernas producen muchas mediciones por muestra, y la quimiometría permite la extracción de información tanto cualitativa (por ejemplo, clasificación) como cuantitativa (por ejemplo, predicción de una propiedad) a partir de ese tipo de datos. Se requiere a menudo del uso de métodos que están en la vanguardia de la investigación tales como calibración multivariada de segundo orden, redes neuronales artificiales y algoritmos genéticos. Nuestro interés es la exploración de las limitaciones y potencialidades de tales métodos en una variedad de aplicaciones del mundo real.

Proyectos en ejecución

1- Proyecto PICT 2017-0340 (ANPCyT): “Generación y modelado quimiométrico de nuevos datos multidimensionales. Desarrollo de estrategias para optimizar el análisis de muestras altamente complejas”. Director: H.C. Goicoechea.

2- Proyecto PIP 0111 (2015-2017 CONICET): “Generación de datos multidimensionales y su calibración multivaria para la determinación de contaminantes emergentes y pesticidas en muestras de interés biológico y ambiental”. Director: H.C. Goicoechea.

3- Proyecto IQ 2017-00077 (ASaCTel: Agencia Santafesina de Ciencia, Tecnología e Innovación Investigación): “Desarrollo de métodos analíticos para la caracterización del sobrenadante y optimización del fermento de cinco bacterias lácticas utilizadas en la producción de un salmonelecida biológico”. Director: H.C. Goicoechea.

4- Proyecto CTQ2017-82496-P (Ministerio de Ciencia e Innovación de España): “Utilización de datos de tres y cuatro vías combinados con calibración multivariante y análisis discriminante lineal, en los campos alimentario, bioanalítico y forense”. Director: A. Muñoz de la Peña.

5- Proyecto de Investigación CAI+D 2016-50120150100110LI (UNL): “Desarrollo de biosensores selectivos para marcadores tumorales basados en nanopartículas de oro funcionalizadas y detección fluorescente y UV-Vis. Aplicación al diagnóstico de la Leucemia Linfocítica Aguda”. Director: M.J. Culzoni.

Artículos científicos

- 1) "Simultaneous determination of phenobarbital and phenytoin in tablet preparations by multivariate spectrophotometric calibration". H. Goicoechea and A. Olivieri. **Talanta**, 1998, 47(1), 103-108.
- 2) "Simultaneous multivariate spectrophotometric analysis of paracetamol and minor components (diphenhydramine or phenylpropanolamine) in tablet preparations". H. Goicoechea and A. Olivieri. **J. Pharm. Biomed. Anal.**, 1999, 20(1-2), 255-261.
- 3) "Determination of theophylline in blood serum by UV spectrophotometry and partial least-squares (PLS-1) calibration". H. Goicoechea, A. Olivieri and A. Muñoz de la Peña. **Anal. Chim. Acta**, 1999, 384(1), 95-103.
- 4) "Simultaneous determination of rifampicin, isoniazid and pyrazinamide in tablet preparations by multivariate spectrophotometric calibration". H. Goicoechea y A. Olivieri. **J. Pharm. Biomed. Anal.**, 1999, 20, 681-686.
- 5) "Determination of bromhexine in cough-cold syrups by absorption spectrophotometry and multivariate calibration using partial least-squares and hybrid linear analyses. Application of a novel method of wavelength selection". H. Goicoechea and A. Olivieri. **Talanta**, 1999, 49, 793-800.
- 6) "Wavelength selection by net analyte signal calculation with multivariate factor-based hybrid linear analysis (HLA). A theoretical and experimental comparison with partial least-squares (PLS)." H. Goicoechea and A. Olivieri. **Analyst**, 1999, 124 (5), 725-731.
- 7) "Simultaneous determination of timolol maleate and pilocarpine hydrochloride in ophthalmic solutions by first-derivative UV spectrophotometry and multivariate calibration PLS-1". Satuf, L. Goicoechea*, H., Robles, J. and Olivieri, A. **Anal. Lett.**, 1999, 32 (10), 2019-2033.
- 8) "Enhanced Synchronous Spectrofluorometric Determination of Tetracycline in Blood Serum by Chemometric Analysis. Comparison of Partial Least-Squares (PLS-1) and Hybrid Linear Analysis (HLA) Calibrations". H. Goicoechea y A. Olivieri. **Anal. Chem.**, 1999, 71, 4361-4368.
- 9) "Use of chemometrics: principal component analysis (PCA) and principal component regression (PCR) for the authentication of orange juice". S. Vaira, V. E. Mantovani, J. C. Robles, J. C. Sanchis and H. C. Goicoechea*. **Anal. Lett.**, 1999, 32, 3131-3141.
- 10) "Simultaneous spectrophotometric-multivariate calibration determination of several components of ophthalmic solutions: phenylephrine, chloramphenicol, antipyrine, methylparaben and thimerosal". Collado, M.S., Mantovani, V.E., Goicoechea*, H.C. and Olivieri, A.C. **Talanta**, 2000, 52(5), 909-920.
- 11) "MULTIVAR: a program for multivariate calibration incorporating net analyte signal calculations". H. Goicoechea y A. Olivieri. **Trend Anal. Chem. (TRAC)**, 2000, 19(10), 599-605.
- 12) "Simultaneous determination of nicotinamide and inosine in ophthalmic solutions by uv spectrophotometry and PLS -1 multivariate calibration". Collado, M.S., Mantovani, V.E., Goicoechea*, H.C. and Olivieri, A.C. **Anal. Lett.**, 2001, 34(3), 363-376.
- 13) "A comparison of orthogonal signal correction and net analyte preprocessing methods. Theoretical and experimental study". H. Goicoechea y A. Olivieri. **Chemometr. Intell. Lab.**, 2001, 56(2), 73-81.
- 14) "Sustained prediction ability of net analyte preprocessing methods using reduced calibration sets. Theoretical and experimental study involving the spectrophotometric determination of multicomponent mixtures". H. Goicoechea y A. Olivieri. **Analyst**, 2001, 126, 1105-1113.
- 15) "Determination of dexamethasone and two excipients (creatinine and propylparaben) in injections by using UV-spectroscopy and multivariate calibrations". María S. Collado, Juan C. Robles, Mercedes De Zan, María S. Cámara, Víctor E. Mantovani y Héctor C. Goicoechea*. **Int. J. Pharm.**, 2001, 229, 205-211.
- 16) "Chemometric assisted simultaneous spectrophotometric determination of four-component nasal solutions with a reduced number of calibration samples". H. Goicoechea* y A. Olivieri*. **Anal. Chim. Acta**, 2002, 453(2), 289-300.
- 17) "Comparative study of net analyte signal-based methods and partial least squares for the simultaneous determination of amoxicillin and clavulanic acid by stopped-flow kinetic analysis". A. Muñoz de la Peña, A. Espinosa Mansilla, M. Acedo Valenzuela, A. Olivieri and H. Goicoechea. **Anal. Chim. Acta**, 2002, 463, 75-88.
- 18) "Complementary use of partial least-squares and artificial neural networks for the non-linear spectrophotometric analysis of pharmaceutical samples", Collado, MS, Satuf, ML, Goicoechea*, H and Olivieri, AC, **Anal. Bioanal. Chem.**, 2002, 374:460-465.
- 19) "Wavelength selection for multivariate calibration using a genetic algorithm: a novel initialization strategy" H. Goicoechea y A. Olivieri. **J. Chem. Inf. Comp. Sci.** 2002, 42(5), 1146-1153.

- 20) "Simultaneous determination of naphazoline, diphenhydramine and phenylephrine in nasal solutions by capillary electrophoresis", A. Marchesini, M. Wiliner, V. Mantovani, J. Robles and H. Goicoechea*. **J. Pharm. Biomed. Anal.** **2003**, 31, 39-46
- 21) "Spectrophotometric determination of sorbic and benzoic acids in fruit juices by a net analyte signal based method with selection of the wavelength range to avoid non modelled interferences". Nilda R. Marsilli, María S. Sobrero, Héctor C. Goicoechea*. **Anal. Bioanal. Chem.**, **2003**, 376, 126-133.
- 22) "Solid-liquid extraction room temperature phosphorimetry and pattern recognition for screening polycyclic aromatic hydrocarbons and polychlorinated biphenyls in water samples. A. Arruda, H. Goicoechea, M. Santos, A. Campiglia and A. Olivieri. **Environ. Sci. Technol.**, **2003**, 37, 1385-1391.
- 23) "Interference-free analysis using three-way fluorescence data and the parallel factor model. Determination of fluoroquinolone antibiotics in human serum". A. Muñoz de la Peña, A. Espinosa Mansilla, D. Gonzalez Gomez, A. Olivieri and H. Goicoechea. **Anal. Chem.**, **2003**, 75, 2640-2646.
- 24) "A new family of genetic algorithms for wavelength selectio in multivariate analytical spectroscopy". H. Goicoechea and A. Olivieri. **J. Chemometr.**, **2003**, 17, 338-345.
- 25) "Sustained modelling ability of artificial neural networks in the analysis of two pharmaceutical (dextropropoxyphene and dipyrone) present in unequal concentrations". M.S. Camara, F.M. Ferroni, M. De Zan and H. Goicoechea*. **Anal. Bioanal. Chem.**, **2003**, 376, 838-843..
- 26) "Enhanced application of square wave voltammetry with glassy carbon electrode coupled to multivariate calibration tools for the determination of B₆ and B₁₂ vitamins in pharmaceutical preparations". S.R. Hernandez, G.G. Ribero and H. Goicoechea*. **Talanta**, **2003**, 61, 743-753.
- 27) "Two multivariate strategies applied to three-way kinetic spectrophotometric data for the determination of mixtures of the pesticides carbaryl and chlorpyrifos". A. Espinosa Mansilla, A. Muñoz de la Peña, H. Goicoechea and A. Olivieri. **Appl. Spectrosc.**, **2004**, 58, 83-90.
- 28) "Determination of carbamazepine in serum and pharmaceutical preparations using immobilization on a nylon support and fluorescence detection". G.M. Escandar, D. Gonzalez Gomez, A. Espinosa Mansilla, A. Muñoz de la Peña and H. Goicoechea. **Anal. Chim. Acta**, **2004**, 506, 61-70.
- 29) "A new method for the determination of benzoic and sorbic acids in commercial orange juices based on second-order spectrophotometric data generated by a pH gradient flow injection technique". N. Marsili, A. Lista, B. Fernández Band*, H. Goicoechea* and Olivieri*, A. **J. Agr. Food Chem.**, **2004**, 52, 2479-2484.
- 30) "An Investigation on the Analytical Potential of Polymerized Liposomes bound to Lanthanide Ions for Protein Analysis". M. Santos, B. Roy, H. Goicoechea, A. Campiglia and S. Malik. **J. Am. Chem. Soc. (JACS)**, **2004**, 126, 10738-10745.
- 31) "MVC1: An integrated MATLAB toolbox for first-order multivariate calibration". A.C. Olivieri, H.C. Goicoechea and F. Iñón. **Chemometr. Intell. Lab. Syst.**, **2004**, 73, 189-197.
- 32) "Evaluation of two lanthanide complexes for qualitative and quantitative analysis of target proteins via partial least squares analysis". Hector Goicoechea, Bidhan C. Roy, Marina Santos, Andres D. Campiglia and Sanku Mallik. **Anal. Biochem.**, **2005**, 336, 64-74.
- 33) "Four-Way Data Coupled to Parallel Factor Model Applied to Environmental Analysis: Determination of 2,3,7,8-tetrachloro-dibenzo-para-dioxin in Highly Contaminated Waters by Solid-Liquid Extraction Laser- Excited Time-Resolved Shpol'skii Spectroscopy". H. Goicoechea, S. Yu, A. Olivieri and A. Campiglia. **Anal. Chem.**, **2005**, 77, 2608-2616.
- 34) "A New Robust Bilinear Least-Squares Method for the Analysis of Spectral-pH Matrix Data" H. Goicoechea and A.C. Olivieri. **Appl. Spectrosc.**, **2005**, 59, 926-933.
- 35) "Chemometrics-assisted UV-spectroscopic strategies for the determination of theophylline in syrups" J. Culzoni, M.M. De Zan, J.C. Robles, V.E. Mantovani, H.C. Goicoechea*, **J. Pharm. Biomed. Anal.**, **2005**, 39, 1068-1074.
- 36) "Evaluation of Complex Spectral-pH Three-way Arrays by Modified Bilinear Least-Squares: Determination of four Different Dyes in Interfering Systems". NR. Marsili, A Lista, BS Fernandez Band,* HC Goicoechea* and AC Olivieri* **Analyst**, **2005**, 130, 1291-1298.
- 37) "Chemometrics-assisted simple UV-spectroscopic determination of carbamazepine in human serum and comparison with reference methods", MS Cámara, C Mastandrea and HC Goicoechea*, **J. Biochem. Bioph. Met.**, **2005**, 64, 153-166.
- 38) "Monitoring Substrate and Products in a Bioprocess with FTIR Spectroscopy Coupled to Artificial Neural Networks Enhanced with a Genetic-Algorithm-Based Method For Wavelength Selection", V Franco, JC Perín, VE Mantovani, HC Goicoechea*, **Talanta**, **2006**, 68, 1005-1012.
- 39) "Multiple response optimization applied to the development of a capillary electrophoretic method for pharmaceutical analysis", L. Vera Candioti, JC Robles, V. Mantovani, HC Goicoechea*, **Talanta**, **2006**, 69, 140-147.

- 40) "Determination of tetracyclines in surface water by PLS using multivariate calibration transfer to correct the effect of SPE in photochemically induced fluorescence signals". RS Valverde, MD Gil García, M Martínez Galera and HC Goicoechea, **Anal. Chim. Acta**, **2006**, 562, 85-93
- 41) Highly collinear three-way photoinduced spectrofluorimetric data arrays modelled with bilinear least-squares: determination of tetracyclines in surface water samples. RS Valverde, MD Gil García, M Martínez Galera and HC Goicoechea*, **Talanta**, **2006**, 70, 774-783
- 42) Evaluation of partial least-squares with second-order advantage for the multi-way spectroscopic analysis of complex biological samples in the presence of analyte-background interactions". MJ Culzoni, HC Goicoechea*, M Bearzoti, M Cabezón and AC Olivieri. **Analyst**, **2006**, 131, 718 - 723.
- 43) "Artificial neural networks for qualitative and quantitative analysis of target proteins with polymerized liposome vesicles", M. Santos, S. Nadi, H.C. Goicoechea, M.K. Haldar, A.D. Campiglia, S. Mallik, **Anal. Biochem.**, **2007**, 361, 109-119.
- 44) "Crossed mixture design and multiple response analysis for developing complex culture media used in recombinant protein production". C Didier, M: Etcheverrigaray, R. Kratjie, H.C Goicoechea.* **Chemom. Intell. Lab. Syst.**, **2007**, 86, 1-9.
- 45) "Successive projections algorithm improving the multivariate simultaneous direct spectrophotometric determination of five phenolic compounds in sea water". María S. Di Nezio, Marcelo F. Pistonesi, Wallace D. Fragoso, Márcio J.C. Pontes, Héctor C. Goicoechea, Mário C.U. Araujo and Beatriz S. Fernández Band. **Microchem. J.**, **2007**, 85, 194-200.
- 46) "Sonication-Laser excited time-resolved Shpol'skii spectrometry: A facile method for the direct screening of fifteen priority pollutants in soil samples", S. Yu, H.C. Goicoechea, A.D. Campiglia, **Appl. Spectrosc.**, **2007**, 61, 165-170.
- 47) "Optimization of the *Bacillus thuringiensis* var. *kurstaki* HD-1 δ -endotoxins production by using experimental mixture design and artificial neural networks" GA Moreira, GA Micheloud, AJ Beccaria, HC Goicoechea*, **Biochem. Eng. J.**, **2007**, 35, 48-55.
- 48) "Evaluation of Unfolded-Partial Least-Squares Coupled to Residual Trilinearization for Four-Way Calibration of Folic Acid and Methotrexate in Human Serum Samples" A. Muñoz de la Peña, I. Durán Merás, A. Jiménez Girón and H. C. Goicoechea. **Talanta**, **2007**, 72, 1261-1268 (doi:10.1016/j.talanta.2007.01.018)
- 49) "Determination of pesticides and metabolites in wine samples by HPLC-DAD and second-order calibration methods" JWB. Braga, CBG Bottoli, I. Jardim, HC. Goicoechea, AC. Olivieri and RJ. Poppi. **J. Chromatogr. A**, **2007**, 1148, 200-210..
- 50) "Experimental study of non-linear second-order analytical data with focus on the second-order advantage". MJ. Culzoni, PC. Damiani, A. García-Reiriz, HC. Goicoechea* and AC. Olivieri. **Analyst**, **2007**, 132, 654-663 (doi: 10.1039/b617171k)
- 51) "Simultaneous multiresponse optimization applied to epinastine determination in human serum by using capillary electrophoresis", L Vera Candiotti, AC. Olivieri and HC. Goicoechea*, **Anal. Chim. Acta.**, **2007**, 595, 310-318 (doi: 10.1016/j.aca.2007.04.032).
- 52) "Representative subset selection and standardization techniques. A comparative study using NIR and a simulated fermentative process UV data". G. Siano, H. Goicoechea*, **Chemom. Intell. Lab. Syst.**, **2007**, 88, 204-212 (10.1016/j.chemolab.2007.05.002).
- 53) "Determination of loratadine and pseudoephedrine sulfate in pharmaceuticals based on non-linear second-order spectrophotometric data generated by a pH gradient flow injection technique and artificial neural networks". MJ Culzoni and HC Goicoechea*. **Anal. Bioanal. Chem.**, **2007**, 389, 2217-2225 (DOI 10.1007/s00216-007-1656-6).
- 54) "Solving matrix-effects exploiting the second order advantage in the resolution and determination of eight tetracycline antibiotics in effluent wastewater by modelling liquid chromatography data with multivariate curve resolution-alternating least squares and unfolded-partial least squares followed by residual bilinearization algorithms. I. Effect of signal pre-treatment". MM De Zan, MD Gil García, MJ Culzoni, GG Siano, HC Goicoechea*, M Martinez Galera*. **J. Chromatogr. A**, **2008**, 1179, 106-114
- 55) "Solving matrix-effects exploiting the second order advantage in the resolution and determination of eight tetracycline antibiotics in effluent wastewater by modelling liquid chromatography data with multivariate curve resolution-alternating least squares and unfolded-partial least squares followed by residual bilinearization algorithms. II. Prediction and figures of merit", mi
- 56) "A versatile strategy for achieving the second-order advantage when applying different artificial neural networks to non-linear second-order data: unfolded principal component analysis/residual bilinearization", A. García-Reiriz, P.C. Damiani, M.J. Culzoni, H.C. Goicoechea* and A.C. Olivieri*, **Chemom. Intell. Lab. Syst.**, **2008**, 92, 61-70.

- 57) "Direct quantification of monohydroxy-polycyclic aromatic hydrocarbons in urine samples via Solid-Phase Extraction Room-Temperature Fluorescence Excitation-Emission Matrix spectroscopy". K Vatsavai, HC Goicoechea, AD. Campiglia. **Anal. Biochem.** **2008**, 376, 213-220.
- 58) "Second-order advantage from kinetic-spectroscopic data matrices in the presence of extreme spectral overlapping. A multivariate curve resolution - alternating least-squares approach". MJ Culzoni, HC Goicoechea*, GA Ibañez, VA Lozano, NR Marsili, AP Pagani, AC Olivieri*. **Anal Chim. Acta** **2008**, 614 (2008) 46-57.
- 59) "Chemometric resolution of fully overlapped capillary electrophoresis peaks: quantitation of carbamazepine in human serum in the presence of several interferences". L. Vera-Candioti, M.J. Culzoni, AC. Olivieri*, HC. Goicoechea*, **Electrophoresis**, **2008**, 29, 4527-4537.
- 60) "Chemometric assisted solid-phase microextraction for the determination of anti-inflammatory and antiepileptic drugs in river water by liquid chromatography diode array detection". L Vera-Candioti, M.D. Gil García, M. Martínez Galera*, HC Goicoechea*. **J. Chromatogr. A**, **2008**, 1211, 22-32.
- 61) "Calibration Maintenance and Transfer Using Tikhonov Regularization Approaches" JH. Kalivas, GG. Siano, E Andries, HC Goicoechea. **Appl. Spectrosc.** **2009**, 63, 800-809.
- 62) "Development and validation of a simple stability-indicating high performance liquid chromatographic method for the determination of miconazole nitrate in bulk and cream formulation". MM. De Zan, MS Cámara, JC. Robles, SV. Kergaravat, HC. Goicoechea. **Talanta** **2009**, 79, 762-767.
- 63) "Chemometric tools improving the determination of anti-inflammatory and antiepileptic drugs in river and wastewater by solid-phase microextraction and liquid chromatography diode array detection" M.D. Gil García, F. Cañada Cañada, M.J. Culzoni, L.Vera-Candioti, G.G. Siano, H.C. Goicoechea* and M. Martínez Galera*. **J. Chromatogr. A**, **2009**, 1216, 5489-5496.
- 64) Novel chemometric strategy based on the application of artificial neural networks to crossed-mixture design for the improvement of recombinant protein production in continuous culture", C Didier, G. Forno, M, Etcheverrigaray, R. Kratjie, H.C Goicoechea.*. **Anal. Chim. Acta** **2009**, 650, 167-174.
- 65) "Fast chromatographic method for the determination of dyes in beverages by using high performance liquid chromatography-diode array detection data and second order algorithms" MJ Culzoni, AV Schenone, NE Llamas, M Garrido, MS Di Nezio, BS Fernández Band, HC. Goicoechea*. **J. Chromatogr. A**, **2009**, 1216, 7063-7070.
- 66) "Detection of unintended stress effects based on a metabonomic study in tomato fruits after treatment with carbofuran pesticide. Capabilities of MCR-ALS applied to LC-MS three-way data arrays". I Sánchez Pérez, MJ Culzoni, GG Siano, MD Gil García, HC. Goicoechea* and M Martínez Galera*, **Anal. Chem.**, **2009**, 81, 8335-8346.
- 67) "Application of the correlation constrained multivariate curve resolution alternating least-squares method for analyte quantitation in the presence of unexpected interferences using first-order instrumental data", H Goicoechea*, A Olivieri, R Tauler, **Analyst**, **2010**, 135, 636-642.
- 68) "Determination of pharmaceuticals in river water by column switching of large sample volumes and liquid chromatography-diode array detection, assisted by chemometrics. An integrated approach to green analytical methodologies" M Martínez Galera, MD Gil García, MJ Culzoni, HC Goicoechea*, **J. Chromatogr. A**, **2010**, , 1217, 2042-2049.
- 69) "Development of a novel strategy for preconcentration of antibiotic residues in milk and their quantitation by capillary electrophoresis". L. Vera Candioti, AC Olivieri, HC Goicoechea*, **Talanta** **2010**, 82, 213-221.
- 70) "Application of response surface methodology and artificial neural networks for optimization of recombinant *Oriza sativa* non-symbiotic hemoglobin 1 production by *Escherichia coli* in medium containing byproduct glycerol", PC Giordano, HD. Martínez, AA Iglesias, AJ. Beccaria, HC Goicoechea*, **Bioresource Tech.** **2010**, 101, 7537-7544.
- 71) "Optimization of ultrasound assisted-emulsification-dispersive liquid-liquid microextraction by experimental design methodologies for the determination of sulfur compounds in wines by gas chromatography-mass spectrometry". Viviana P. Jofré, Mariela V. Assof, Martín L. Fanzone, Héctor C. Goicoechea, Luis D. Martínez, María F. Silva. **Anal. Chim. Acta**, **2010**, 683, 126-135.
- 72) "Science Based Calibration for the extraction of 'analyte-specific' HPLC-DAD chromatograms in environmental analysis" J. Kuligowski, M. Martínez Galera, M.D. Gil García, M.J. Culzoni, H.C. Goicoechea, S. Garrigues, G. Quintás, M. de la Guardia, **Talanta** **2011**, 83, 1158-1165.
- 73) "Chemometric strategies for enhancing the chromatographic methodologies with second-order data analysis of compounds when peaks are overlapped". H.C. Goicoechea,* M.J. Culzoni, M.D. Gil García, M. Martínez Galera. **Talanta** **2011**, 83, 1098-1107.
- 74) "Determination of marker pteridines in urine by HPLC with fluorimetric detection and second-order multivariate calibration using MCR-ALS". A. Mancha de Llanos, M.M. De Zan, M.J. Culzoni, A.

- Espinosa-Mansilla, F. Cañada-Cañada, A. Muñoz de la Peña, H.C. Goicoechea*. **Anal. Bional. Chem.**, **2011**, 399, 2123–2135.
- 75) "A novel ion-pairing chromatographic method for the simultaneous determination of both nicarbazin components in feed additives. Chemometric tools for improving the optimization and validation" M.M. De Zan, C.M. Teglia, J.C. Robles, H.C. Goicoechea. **Talanta**, 85 (2011) 142–150.
 - 76) "Multivariate curve resolution modelling of liquid chromatography-mass spectrometry data in a comparative study of the different endogenous metabolites behaviour in two tomato cultivars treated with carbofuran pesticide" GG Siano, I. Sanchez Pérez, MD Gil García, M. Martínez Galera*, HC Goicoechea*. **Talanta**, 85 (2011) 264–275.
 - 77) "Multivariate optimization and validation of a CZE method for the analysis of pridinol mesylate and meloxicam in tablets". S. Vignaduzo, L. Vera Candioti, H. Goicoechea,* T. Kaufman.* **Chromatographia**, (2011) 74:609–617.
 - 78) "Room-temperature fluorescence spectroscopy of monohydroxy metabolites of polycyclic aromatic hydrocarbons on octadecyl extraction membranes". K Calimag-Williams, H.C. Goicoechea and A.D. Campiglia. **Talanta**, 85 (2011) 1805–1811.
 - 79) "Enhanced MCR-ALS modeling of HPLC with fast scan fluorimetric detection second-order data for quantitation of metabolic disorder marker pteridines in urine" M.J. Culzoni, A. Mancha de Llanos, M.M. De Zan, A. Espinosa-Mansilla, F. Cañada-Cañada, A. Muñoz de la Peña, H.C. Goicoechea*. **Talanta**, 85 (2011) 2368–2374.
 - 80) "Significant factors selection in the chemical and enzymatic hydrolysis of lignocellulosic residues by a genetic algorithm analysis and comparison with the standard Plackett-Burman methodology" P.C. Giordano, A.J. Beccaria, H.C. Goicoechea*, **Bioresorc. Technol.** 2011, 102 (2011) 10602–10610.
 - 81) "Multi-way partial least-squares and residual bi-linearization for the direct determination of monohydroxy-polycyclic aromatic hydrocarbons on octadecyl membranes via room-temperature fluorescence excitation emission matrices". HC Goicoechea, K. Calimag-Williams, AC Campiglia, **Anal. Chim. Acta**, 717 (2012) 100–109.
 - 82) "Four-way modeling of 4.2K time-resolved excitation emission fluorescence data for the quantitation of polycyclic aromatic hydrocarbons in soil samples". HC. Goicoechea, S. Yu, Anthony F.T. Moore, A.D. Campiglia. **Talanta**, 101 (2012) 330–336.
 - 83) "High-performance liquid chromatography with fast-scanning fluorescence detection and multivariate curve resolution for the efficient determination of galantamine and its main metabolites in serum". M.J. Culzoni, R.Q. Aucelio, G.M. Escandar. **Anal. Chim. Acta**, 740, 31 (2012) 27–35.
 - 84) "Spectrofluorimetry in organized media coupled to second-order multivariate calibration for the determination of galantamine in the presence of uncalibrated interferences". María J. Culzoni, Ricardo Q. Aucelio, Graciela M. Escandar. **Talanta**, 82 (2010) 325 - 332.
 - 85) "Determination of tartrazine in beverage samples by stopped-flow analysis and three-way multivariate calibration of non-linear kinetic-spectrophotometric data", A.V. Schenone, M.J. Culzoni, N.R. Marsili, H.G. Goicoechea*, **Food Chem.** 138 (2013) 1928–1935.
 - 86) "Hybrid hard- and soft- modeling of spectrophotometric data for monitoring of ciprofloxacin and its main photodegradation products at different pH values". M Razuc, M Garrido, YS Caro, CM Teglia, HC Goicoechea, BS Fernández Band. **Spectrochim. Acta A**, 106 (2013) 146–154.
 - 87) "Second order advantage achieved by modeling excitation-emission fluorescence matrices affected by inner filter effects using a strategy which combines standardization and calibration. Reducing experimental and increasing analytical sensitivity." A.V. Schenone, M.J. Culzoni, M. Martínez Galera, H.C. Goicoechea.* **Talanta**, 109 (2013) 107–115.
 - 88) "Spectroscopic behavior of loratadine and desloratadine in different aqueous media conditions studied by means of TD-DFT calculations". R. Brasca, M.A. Romero, H.C. Goicoechea, A-M. Kelterer, W.M.F. Fabian, **Spectrochim. Acta A**, 115 (2013) 250–258.
 - 89) "Investigation of interaction of nuclear fast red with human serum albumin by experimental and computational approaches". M-B. Gholivanda, A.R. Jalalvand, H.C. Goicoechea, M. Omid. **Spectrochim. Acta A**, 115 (2013) 516–527.
 - 90) "Total synchronous fluorescence spectroscopic data modeled with first- and second-order algorithms for the determination of doxorubicin in human plasma". A.V. Schenone, M.J. Culzoni, A.D. Campiglia, H.C. Goicoechea.* **Anal. Bional. Chem.** 405 (2013) 8515–8523.
 - 91) "Microextraction procedure based on an ionic liquid as ion pairing agent optimized using a design of experiments for chromium species separation and determination in water samples". P Berton, L Vera-Candioti, HC Goicoechea, RG. Wuilloud. **Anal. Methods**, 5 (2013) 5065–5073.

- 92) "Photoinduced electron transfer fluorometric Hg(II) chemosensor based on a BODIPY armed with a tetrapod receptor", M.J Culzoni, A. Muñoz de la Peña, A. Machuca, H.C. Goicoechea, R. Brasca, R. Babiano. **Talanta**, 117(2013)288–296.
- 93) "Optimization of the hydrolysis of lignocellulosic residues by using radial basis functions modelling and particle swarm optimization". P.C. Giordano, A.J. Beccaria, H.C. Goicoechea*, A.C. Olivieri, **Biochem. Eng. J.** 80 (2013) 1– 9.
- 94) "Modeling of second-order spectrophotometric data generated by a pH-gradient flow injection technique for the determination of doxorubicin in human plasma", M.R. Alcaráz, A.V. Schenone, M.J. Culzoni, H.C. Goicoechea*, **Microchem. J.** 112 (2014) 25–33.
- 95) "Multi-analyte quantification in bioprocesses by FTIR spectroscopy using Partial Least Squares Regression and Multivariate Curve Resolution", Cosima Koch, Andreas E. Posch, Héctor C. Goicoechea, Christoph Herwig, Bernhard Lendl, **Anal. Chim. Acta** 807 (2014) 103-110.
- 96) "Chemometrics-assisted simultaneous voltammetric determination of ascorbic acid, uric acid, dopamine and nitrite: Application of non-bilinear voltammetric data for exploiting first order advantage". M-B Gholivand, AR. Jalalvand, HC. Goicoechea. **Talanta** 119 (2014) 553-563.
- 97) "Achieving second order advantage with multi-way partial least squares and residual bilinearization with total synchronous fluorescence data of monohydroxy- polycyclic aromatic hydrocarbons in urine samples", K. Calimag-Williams, G. Knobel, H. Goicoechea, A Campiglia. **Anal. Chim. Acta.** 811 (2014) 60-69.
- 98) "Modeling four and three-way fast high-performance liquid chromatography with fluorescence detection data for quantitation of fluoroquinolones in water samples". M. Alcaráz, G. Siano, M. Culzoni, A. Muñoz de la Peña, HC. Goicoechea*, **Anal. Chim. Acta.** 809 (2014) 37-46.
- 99) "The successive projections algorithm for interval selection in trilinear partial least-squares with residual bilinearization". A.A Gómez, MR Alcaraz; M C Ugulino Araujo, HC. Goicoechea*, **Anal. Chim. Acta.** 811 (2014) 13-22.
- 100) "Ultrafast quantitation of six quinolones in water samples by second order capillary electrophoresis data modeling with multivariate curve resolution–alternating least squares". MR Alcaraz. L Vera-Candioti, MJ Culzoni, H Goicoechea*. **Anal. Bioanal. Chem.** 406 (2014) 2571–2580.
- 101) "Enhanced high-performance liquid chromatography method for the determination of retinoic acid in plasma. Development, optimization and validation". Carla Teglia, María Gil García, María Martínez Galera, Hector Goicoechea*. **J. Chromatogr. A** en prensa.
- 102) "Fabrication of an ultrasensitive impedimetric buprenorphine hydrochloride biosensor from computational and experimental angles". M-B Gholivand, AR. Jalalvand, HC. Goicoechea. **Talanta**, 124 (2014) 27–35.
- 103) "Rational design of a culture medium for the intensification of lipid storage in *Chlorella* sp.. Performance evaluation in air-lift bioreactor". P. Giordano, A. Beccaria, H.C. Goicoechea.* **Biores. Technol.** 158 (2014) 269-277.
- 104) "Computer-assisted electrochemical fabrication of a highly selective and sensitive amperometric nitrite sensor based on surface decoration of electrochemically reduced graphene oxide nanosheets with CoNi bimetallic alloy nanoparticles". MB Gholivand, AR. Jalalvand, HC. Goicoechea. **Mater. Sci. Eng. C Mater. Biol.Appl.** 40 (2014) 109–120.
- 105) "Developing a novel computationally designed impedimetric pregabalin biosensor", MB Gholivand, A R. Jalalvand, HC. Goicoechea. **Electrochim. Acta**, 133 (2014)123–131.
- 106) "Multivariate analysis for resolving interactions of carbidopa with dsDNA at a fullerene-C60/GCE". MB Gholivand, A R. Jalalvand, HC. Goicoechea. **Int. J. Biol. Macromol.** 69 (2014) 369-381.
- 107) "Fabrication of a novel naltrexone biosensor based on a computationally engineered Nanobiocomposite" MB Gholivand, AR. Jalalvand, G Paimard, HC. Goicoechea, T Skov, R Farhadia, S Ghobadi, N Moradi, V Nasirian. **Int. J. Biol. Macromol.** 70 (2014) 596-605.
- 108) "Surface exploration of a room-temperature ionic liquid-chitin composite film decorated with electrochemically deposited PdFeNi trimetallic alloy nanoparticles by pattern recognition: An elegant approach to developing a novel biotin biosensor". MB Gholivand, AR. Jalalvand, HC. Goicoechea, G Paimard, T Skov. **Talanta** 131 (2015) 249-258.
- 109) "Combination of electrochemistry with chemometrics to introduce an efficient analytical method for simultaneous quantification of five opium alkaloids in complex matrices". MB Gholivand, AR. Jalalvand, HC. Goicoechea, R Gargallo, T Skov, G Paimard. **Talanta** 131(2015) 26-37.

- 110) "Second-order advantage maintenance with voltammetric data modeling for quantitation of ethiofencarb in presence of interferences". N. Mora Diez, A. Guiberteau Cabanillas, A. Silva Rodríguez, HC Goicoechea*. **Talanta** 132 (2015) 851–856.
- 111) "Generation of non-multilinear three-way voltammetric arrays by an electrochemically oxidized glassy carbon electrode as an efficient electronic device to achieving second-order advantage: Challenges, and tailored applications". Ali R. Jalalvand, Mohammad-Bagher Gholivand, Hector C. Goicoechea, Raimundo Gargallo, Thomas Skov. **Talanta** 134 (2015) 607-618.
- 112) "Modeling nonbilinear total synchronous fluorescence data matrices with a novel adapted partial least squares method". A. Schenone, A A. Gomes, MJ Culzoni, MC Ugulino de Araújo, AD Campiglia, H.C. Goicoechea*, **Anal. Chim. Acta** 859 (2015) 20-28.
- 113) "A new modeling strategy for third-order fast high-performance liquid chromatographic data with fluorescence detection. Quantitation of fluoroquinolones in water samples". MR Alcaráz, Santiago Bortolato, HC Goicoechea*, AC Olivieri*. **Anal. Bional. Chem.** 407 (2015) 1999-2011.
- 114) "Modeling excitation-emission fluorescence matrices with pattern recognition algorithms for classification of Argentine white wines according grape variety". Azcárate, S, Araújo Gomes, A., Alcaráz, MR, Ugulino de Araujo, MC, Camiña, J.*. Goicoechea, HC.* **Food Chem.** 184 (2015) 214-219.
- 115) "Plasma retinoids concentration in *Leptodactylus chaquensis* (Amphibia: Leptodactylidae) from rice agroecosystems, Santa Fe province, Argentina". Carla M. Teglia, Andrés M. Attademo*, Paola M. Peltzer, Héctor C. Goicoechea, Rafael C. Lajmanovich. **Chemosphere** 134 (2015) 24-30.
- 116) "Parallel Factor Analysis of 4.2K Excitation-Emission Matrices for the Direct Determination of Dibenzopyrene Isomers in Coal-Tar Samples with a Cryogenic Fiber Optic Probe Coupled to a Commercial Spectrofluorimeter". A. Moore, HC Goicoechea, F Barbosa Jr, AD Campiglia. **Anal. Chem.** 87 (2015) 5232–5239.
- 117) "Unfolded partial least squares/residual bilinearization combined with the successive projections algorithm for interval selection: enhanced excitation-emission fluorescence data modeling in presence of inner filter effect". A. Araujo Gomes, A. Schenone, HC Goicoechea*, MC Ugulino Araujo. **Anal. Bioanal. Chem.** 407 (2015) 5649-5659.
- 118) "A fast chromatographic method for determination of daidzein and genistein in spiked water river samples using multivariate curve resolution". E.D.T. Moreira, L. Pinto, A. Araujo Gomes, H.C. Goicoechea*, M.C. Ugulino de Araújo.* **J. Braz. Chem. Soc.** 26 (2015) 1573-1582.
- 119) "Mimicking enzymatic effects of cytochrome P450 by an efficient biosensor for in vitro detection of DNA damage". AR. Jalalvand, MB Gholivand, HC. Goicoechea, T Skov, K Mansouri, M Mojarab. **Int. J. Biol. Macromol.** 79 (2015) 1004-1010.
- 120) "EC-QC laser spectroscopy for mid-IR transmission measurements of proteins in aqueous solution". MR Alcaráz, A Schwaighofer, C Kristament, G Ramer, M Brandstetter, HC Goicoechea, B Lendl. **Anal. Chem.** 87 (2015) 6980–6987.
- 121) "Advanced and tailored applications of an efficient electrochemical approach assisted by AsLSSRCOW-rPLS and finding ways to cope with challenges arising from the nature of voltammetric data". A.R. Jalalvand, M-B. Gholivand, H.C. Goicoechea, Å. Rinnan, T. Skov. **Chemom.Intell. Lab. Syst.**, 146 (2015) 437-446.
- 122) "Multi-dimensional voltammetry: Four-way multivariate calibration with third-order differential pulse voltammetric data for multi-analyte quantification in the presence of unexpected interference". A.R. Jalalvand, M-B. Gholivand, H.C. Goicoechea,. **Chemom.Intell. Lab. Syst.**, 148 (2015) 60-71.
- 123) "A novel approach based on capillary electrophoresis coupled to augmented multivariate curve resolution-alternating least squares modeling for the determination of pKa of 2-hydroxy-4,6-dimethylpyrimidine in nicarbazin", C.M. Teglia, R. Brasca, L. Vera-Candioti and H. Goicoechea*, **Chemom.Intell. Lab. Syst.**, 150 (2016)1-8.
- 124) "Enhanced fluorescence sensitivity by coupling yttrium-analyte complexes and three-way fast high-performance liquid chromatography data modeling". M.R. Alcaráz, M.J. Culzoni and H. Goicoechea*, **Anal. Chim. Acta**, 902 (2016) 50-58.
- 125) "A multiple response function for optimization of analytical strategies involving multielemental determination". C.G. Novaes, S.L.C. Ferreira, J.H.S. Neto, F.A. de Santana, L.A. Portugal, H.C. Goicoechea. **Curr. Anal. Chem.** 12, 2016, 94-101.
- 126) "A novel combination of experimental design and artificial neural networks as an analytical tool for improving performance in thermospray flame furnace atomic absorption spectrometry". E. Morzan, J Stripeikis, H. Goicoechea, M. Tudino. **Chemom.Intell. Lab. Syst.**, 151 (2016) 44-50.

- 127) "Nondestructive Total Excitation-Emission Fluorescence Microscopy Combined with Multi-Way Chemometric Analysis for Visually Indistinguishable Single Fiber Discrimination" Muñoz de la Peña A, Mujumdar N, Heider E, Goicoechea H, Muñoz de la Peña D, Campiglia A. **Anal. Chem.** 88 (2016) 2967-2975.
- 128) "EC-QCL mid-IR transmission spectroscopy for monitoring dynamic changes of protein secondary structure in aqueous solution on the example of β -aggregation in alcohol-denatured α -chymotrypsin". MR Alcaráz, A Schwaighofer, HC Goicoechea, B Lendl. **Anal. Bioanal. Chem.** 408 (2016) 3933–3941.
- 129) "Chemometric optimization and validation of a novel dispersive liquid-liquid microextraction-HPLC method for gliclazide, glibenclamide and glimepiride quantitation in serum samples". Monzón C, Teglia C, Delfino M, H Goicoechea*. **Microchem. J.** 127 (2016) 113-119.
- 130) "Second-order capillary electrophoresis diode array detector data modeled with the Tucker3 algorithm. A novel strategy for Argentinean white wine discrimination respect to grape variety". SM. Azcarate, A de Araújo Gomes, L Vera-Candioti, MC Ugulino de Araújo, JM. Camiña, HC. Goicoechea*. **Electrophoresis**, 37 (2016) 1902-1908.
- 131) "Highly sensitive quantitation of pesticides in fruit juice samples by modeling four-way data gathered with high-performance liquid chromatography with fluorescence excitation-emission detection". M Montemurro, L Pinto, G Vêras, A de Araújo Gomes, MJ. Culzoni, MC. Ugulino de Araújo,* HC. Goicoechea, **Talanta**, 154 (2016) 208-218.
- 132) "Room temperature fluorescence spectroscopy of benzo[a]pyrene metabolites on octadecyl extraction membranes", B. Alfarhani, M. Al-tameemi, A.V. Schenone, HC. Goicoechea, F. Barbosa Jr., AD. Campiglia. **Microchem. J.** 129 (2016) 83–89.
- 133) "External cavity-quantum cascade laser infrared spectroscopy for secondary structure analysis of proteins at low concentrations". A. Schwaighofer, M.R. Alcaráz, C. Araman, H.C. Goicoechea, B. Lendl. **Sci Reports**, 6 (2016) 33556.
- 134) "Highly selective and ultrasensitive turn-on luminescence chemosensor for mercury (II) determination based on the rhodamine 6G derivative FC1 and Au nanoparticles." R Brasca, MC Onaindia, HC. Goicoechea, A Muñoz De La Peña, MJ. Culzoni. **Sensors**, 16 (2016) 1652-1663.
- 135) "Excitation-Emission Matrix Fluorescence Spectroscopy combined with MCR-ALS as a tool for the forensic analysis of similar and dissimilar sets of textile fiber extracts". Matthew Rex, Arsenio Muñoz de la Peña, Héctor C. Goicoechea, Andrés Campiglia. **Anal. Methods** 8, 2016, 8314 – 8321.
- 136) "Automatic generation of photochemically induced excitation-emission-kinetic four-way data for the highly selective determination of azinphos-methyl in fruit juices". M. Montemurro, G.G. Siano, M.J. Culzoni*, H.C. Goicoechea*. **Sensors & Actuators B**, 239 (2017) 397–404.
- 137) "Ecotoxicity of veterinary enrofloxacin and ciprofloxacin antibiotics on anuran amphibian larvae". PM Peltzer, RC Lajmanovich, AM Attademo, CM Junges, CM Teglia, C Martinuzzi, L Curi, MJ Culzoni, HC Goicoechea. **Environmental Toxicology and Pharmacology**. 51(2017)114-123.
- 138) "Simultaneous multi-residue determination of twenty one veterinary drugs in poultry litter by multivariate modeling of liquid chromatography with fluorescence and UV detection data". C.M. Teglia, PM Peltzer, SN Seib, MJ Culzoni, HC Goicoechea. **Talanta** 167 (2017) 442-452.
- 139) "A novel fast quality control strategy for monitoring spoilage on mayonnaise based on modeling second-order front-face fluorescence spectroscopy data". S. Azcárate, C. Teglia, F. Karp, J. Camiña, H.C. Goicoechea*, **Microchem. J.** 133 (2017) 182-187.
- 140) "Application of MCR-ALS to reveal intermediate conformations in the thermally induced α - β transition of poly-L-lysine monitored by FT-IR spectroscopy". Mirta R. Alcaráz, Andreas Schwaighofer, Héctor Goicoechea, Bernhard Lendl. **Spectrochim. Acta A: Mol. Biomol. Spectrosc.** 185 (2017) 304–309.
- 141) "Open-source Assisted Laboratory Automation through Graphical User Interfaces and 3D Printers. Application to Equipment Hyphenation for Higher-order data Generation". Gabriel Siano, Milagros Montemurro, Mirta Alcaráz, Héctor Goicoechea*. **Anal. Chem.** 89 (2017) 10667-10672.
- 142) "SRO_ANN: An integrated MatLab toolbox for multiple surface response optimization using radial basis functions", P.C. Giordano, H.C. Goicoechea, A.C. Olivieri. **Chemom. Intell. Laborat. Syst.** 171 (2017) 198–206.
- 143) "Direct analysis of benzo[a]pyrene metabolites with strong overlapping in both the spectral and lifetime domains". B. Alfarhani, M Al-Tameemi, H.C. Goicoechea, F. Barbosa Jr., A.D. Campiglia. **Microchem. J.** 137 (2018) 51–61.
- 144) "Multiway calibration strategy with chromatographic data exploiting the second-order advantage for quantitation of three antidiabetic and three antihypertensive drugs in serum samples" Monzón C, Teglia C, Delfino M, HC Goicoechea*. **Microchem. J.** 136 (2018) 185–192.

- 145) "Intellectual modifying a bare glassy carbon electrode to fabricate a novel and ultrasensitive electrochemical biosensor: Application to determination of acrylamide in food samples". K. Varmira, Omid Abdi, M-B. Gholivand, H.C. Goicoechea, A.R. Jalalvand. **Talanta** 176 (2018) 509–517.
- 146) "Determination of six veterinary pharmaceuticals in egg by liquid chromatography: chemometric optimization of a novel air assisted-dispersive liquid-liquid microextraction by solid floating organic drop". C. Teglia, L. Gonzalo, M.J. Culzoni, H.C. Goicoechea. **Food Chem.** 2017, en prensa.
- 147) External cavity-quantum cascade laser (EC-QCL) spectroscopy for protein analysis in bovine milk, J. Kuligowski, A. Schwaighofer, M.R. Alcaráz, G. Quintás, H. Mayer, M. Vento, B. Lendl. **Anal. Chim. Acta.** 963 (2017) 99-105.
- 148) Prevalence of Substandard and Falsified Artemisinin-Based Combination Antimalarial Medicines on Bioko Island, Equatorial Guinea. Harparkash Kaur, Elizabeth Louise Allan, Ibrahim Mamadu, Zoe Hall, Michael D Green, Isabel Swamidoss, Prabha Dwivedi, Maria Julia Culzoni, Dianna Hergott, Facundo M Fernández, Guillermo García, Feliciano Monti. **BMJ Global Health** (2017) <http://dx.doi.org/10.1136/bmjgh-2017-000409>.
- 149) "Dispersive liquid-liquid microextraction of quinolones in porcine blood: Validation of a CE method using univariate calibration or multivariate curve resolution-alternating least squares for overlapped peaks". C.M. Teglia, M.S. Cámara, L. Vera-Candioti. **Electrophoresis** 38 (2017) 1122-1129.
- 150) "Vis-NIR spectrometric determination of Brix and sucrose in sugar production samples using kernel partial least squares with interval selection based on the successive projections algorithm". V. El. de Almeida, A. de Araújo Gomes, D. D. de Sousa Fernandes, H. C. Goicoechea, R. K. Harrop Galvão, M. C. Ugulino Araújo. **Talanta** 181 (2018) 38-43.
- 151) "Fabrication of a novel enzymatic electrochemical biosensor for determination of tyrosine in some food samples". K Varmira, G. Mohammadi, M. Mahmoudi, R. Khodarahmi, K. Rashidi, M. Hedayati, H.C. Goicoechea, A.R. Jalalvand. **Talanta** 183 (2018) 1-10.
- 152) "Chemometrics-assisted investigation of interactions of Tasmar with human serum albumin at a glassy carbon disk: Application to electrochemical biosensing of electro-inactive serum albumin". G Mohammadi, E Faramarzi, M Mahmoudi, S Ghobadi, A R Ghiasvand, H C. Goicoechea, A R. Jalalvand, **J. Pham. Biomed. Anal.** 156 (2018) 23-35.
- 153) "Exploiting second-order advantage from mathematically modeled voltammetric data for simultaneous determination of multiple antiparkinson agents in the presence of uncalibrated interference". G. Mohammadi, K. Rashidi, M. Mahmoudi, H.C. Goicoechea, A.R. Jalalvand, **J. Taiwan Inst. Chem. Eng.**, 88 (2018) 49-61.
- 154) "Exploiting the Synergistic Effect of Concurrent Data Signals: Low-Level Fusion of Liquid Chromatographic with Dual Detection Data". CM. Teglia, SM. Azcarate, MR. Alcaráz, HC. Goicoechea, MJ Culzoni, **Talanta** 186 (2018) 481-488.
- 155) "Developing a novel paper-based enzymatic biosensor assisted by digital image processing and first-order multivariate calibration for rapid determination of nitrate in food samples", Ali R. Jalalvand, Majid Mahmoudi, Héctor C. Goicoechea. **RSC Adv.** 8 (2018)23411-23420.
- 156) "Investigation of interactions of Comtan with human serum albumin by mathematically modeled voltammetric data: A study from bio-interaction to biosensing". Ali R. Jalalvand, Sirous Ghobadi, Hector C. Goicoechea, Hui-Wen Gu, Esmael Sanchooli. **Bioelectrochemistry** 123 (2018) 162–172.
- 157) "A simple, rapid and novel method based on salting-out assisted liquid–liquid extraction for ochratoxin A determination in beer samples prior to ultra-high-performance liquid chromatography coupled to tandem mass spectrometry". Leonardo Mariño-Repizo, Hector Goicoechea, Julio Raba & Soledad Cerutti. **Food Additives & Contaminants: Part A**, 35 (2018) 1622-1632.
- 158) "Multiway analysis through direct excitation-emission matrix imaging", M.R. Alcaraz, E. Morzán, C. Sorbello, H.C. Goicoechea, R. Etchenique. **Anal. Chim. Acta**, 1032 (2018) 32-39.
- 159) "An interesting strategy devoted to fabrication of a novel and highperformance amperometric sodium dithionite sensor", Ali R. Jalalvand, Hector C. Goicoechea, Hui-Wen Gu, **Microchem. J.** en prensa (2018).
- 160) "Simultaneous co-immobilization of three enzymes onto a modified glassy carbon electrode to fabricate a high-performance amperometric biosensor for determination of total cholesterol", K. Rashidi, M. Mahmoudi, G. Mohammadi, M. Zangeneh, S. Korani, Hector C. Goicoechea, Hui-Wen Gu, Ali R. Jalalvand, **Int. J. Biol. Macromol.** en prensa (2018).
- 161) "Beyond Fourier Transform Infrared Spectroscopy: External Cavity Quantum Cascade Laser-Based Mid-infrared Transmission Spectroscopy of Proteins in the Amide I and Amide II Region", A.

- Schwaighofer, M. Montemurro, S. Freitag, C. Kristament, M.J. Culzoni, B. Lendl, **Anal. Chem.** 90 (2018) 7072-7079.
- 162) "An interesting strategy devoted to fabrication of a novel and highperformance amperometric sodium dithionite sensor", Ali R. Jalalvand, Hector C. Goicoechea, Hui-Wen Gu, **Microchem. J.** 144 (2019) 6-12.
 - 163) "Determination of six veterinary pharmaceuticals in egg by liquid chromatography: chemometric optimization of a novel air assisted-dispersive liquid-liquid microextraction by solid floating organic drop". C. Teglia, L. Gonzalo, M.J. Culzoni, H.C. Goicoechea. **Food Chem.** 273 (2019) 194-202.
 - 164) "Resolution of intermediate surface species by combining modulated infrared spectroscopy and chemometrics", M.R. Alcaraz, A. Aguirre, H.C. Goicoechea, M.J. Culzoni, S. Collins, **Anal. Chim. Acta** 1049 (2019) 38-46.
 - 165) "High-performance organized media-enhanced spectrofluorimetric determination of pirimiphos-methyl in maize", M. Montemurro, R. Brasca, M.J. Culzoni, H.C. Goicoechea, **Food Chem.** 278 (2019) 711-719.
 - 166) "Fabrication of a novel impedimetric biosensor for label free detection of DNA damage induced by doxorubicin" MM Zangeneha, H Norouzi, M Mahmoudi, Hector C. Goicoechea, Ali R. Jalalvand. **Int. J Biol Macromol.** 124 (2019) 963-971.
 - 167) "An improved signal-conservative approach to cope with Rayleigh and Raman signals in fluorescence landscapes", F. Chiappini, Mirta Alcaráz*, H.C. Goicoechea*, **Chemom. Intell. Lab. Syst.** 187 (2019) 6-10.
 - 168) "Developing a four-dimensional voltammetry as a powerful electroanalytical methodology for simultaneous determination of three colorants in the presence of an uncalibrated interference". A.R. Jalalvand, F. Farzadfar, H.C. Goicoechea, K. Ghanbari, M. Roushani, **Chemom. Intell. Lab. Syst.** 189 (2019) 27-38.
 - 169) "Fabrication of a novel biosensor for biosensing of bisphenol A and detection of its damage to DNA", Ali R. Jalalvand, Ali Haseli, Farshad Farzadfar, Hector C. Goicoechea. **Talanta** 201 (2019) 350-357.
 - 170) "Determination of 2-hydroxy-4-methoxybenzophenone in mice serum and human plasma by ultra-high-performance liquid chromatography enhanced by chemometrics". Carla Teglia, C.G. Santamaría, H. Rodriguez, M.J. Culzoni, H.C. Goicoechea. **Microchem. J.** 148 (2019) 35-41.
 - 171) "Chemometrical-electrochemical investigation for comparing inhibitory effects of quercetin and its sulfonamide derivative on human carbonic anhydrase II: Theoretical and experimental evidence". R Khodarahmi, S Khateri, H Adibi, V Nasirian, M Hedayati, E Faramarzi, S Soleimani, H.C. Goicoechea, A.R. Jalalvand. **Int. J. Biol. Macromol.** 136 (2019) 377-385.
 - 172) "Occurrence, distribution and ecological risk of fluoroquinolones in rivers and wastewaters", CM Teglia, FA Perez, N Michlig, MR Repetti, HC Goicoechea, MJ Culzoni, **Environm. Toxicol. Chem** 389 (2019) 2305-2313.
 - 173) "A Graphical User Interface as a new tool for scattering correction in fluorescence data". F.A. Chiappini, M.R. Alcaraz,* H.C. Goicoechea,* A.C. Olivieri. **Chemom. Intell. Lab. Syst.** 1936(2019)103810.
 - 174) "Matrix augmentation as an efficient method for resolving interaction of bromocriptine with human serum albumin: trouble shooting and simultaneous resolution". A.R. Jalalvand, S Ghobadi, H.C. Goicoechea, E. Faramarzi, M. Mahmoudi. **Heliyon** 5 (2019) e02153.
 - 175) "Mathematical modeling of interactions of cabergoline with human serum albumin for biosensing of human serum albumin". A.R. Jalalvand, S. Ghobadi, V. Akbari, H.C. Goicoechea, E. Faramarzi, M. Mahmoudi, **Sensing Bio-sensing Res.** 25 (2019) 100297.
 - 176) "Developing an elegant and integrated electrochemical-theoretical approach for detection of DNA damage induced by 4-nonylphenol", K. Ghanbari, M. Roshani, H.C. Goicoechea, A.R. Jalalvand, **Heliyon** 5 (2019) e27055.
 - 177) "Enhancement of multianalyte mass spectrometry detection through response surface optimization by least squares and artificial neural network modeling", Carla M. Teglia, María Guiñez, Héctor C. Goicoechea, María J. Culzoni, Soledad Cerutti. **J. Chromatogr. A**, 1611 (2020) 460613.
 - 178) "Modelling of bioprocess non-linear fluorescence data for at-line prediction of etanercept based on artificial neural networks optimized by response surface methodology". F. Chiappini, C.M. Teglia, G. Forno, H.C. Goicoechea.* **Talanta** 210 (2020) 120664.
 - 179) "Application of pareto-optimal front as an option to desirability function for the optimization of a microbiological process", P.C. Giordano, V. Pereyra, A.J. Beccaria, S. Vero, H.C. Goicoechea, **Microchem. J.** 155 (2020) 104682.

- 180) "Fluorescence spectroscopy application for Argentinean yerba mate (*Ilex paraguariensis*) classification assessing first- and second-order data structure properties", M. Santos, S. Azcarate, K. Lima, H.C. Goicoechea, **Microchem J**, 155 (2020) 104783
- 181) "Coupling of digital image processing and three-way calibration to assist a paper-based sensor for determination of nitrite in food samples", Z. Almasvandi, A. Vahidinia, A. Heshmati, M. M. Zangeneh, H. C. Goicoechea and A. R. Jalalvand, **RSC Adv.** 10 (2020) 14422-14430.
- 182) "Fabrication of a novel electrochemical aptasensor assisted by a novel computerized monitoring system for real-time determination of the prostate specific antigen: A computerized experimental method brought elegance", S Soleimani, E Arkan, AR. Jalalvand, H. C. Goicoechea, **Microchem. J**, 157 (2020) 104898.
- 183) "Multi-level Data Fusion Strategies for Modeling Three-way Electrophoresis Capillary and Fluorescence Arrays Enhancing Geographical and Grape-variety Classification of Wines", Rocío Ríos-Reina, Silvana M. Azcarate, José M. Camiña, Héctor C. Goicoechea, **Anal. Chim. Acta**, 1126 (2020) 52-62.
- 184) "In-syringe dispersive liquid-liquid microextraction vs. solid phase extraction: a comparative analysis for the liquid chromatographic determination of three neonicotinoids in cotyledons". CM Teglia, ML Senovieski, SA Gegenschatz, F Chiappini, MJ Culzoni, HG Goicoechea. **Microchem J**, 158 (2020) 105181.
- 185) "Bioaccumulation and glutathione S-transferase activity on *Rhinella arenarum* tadpoles after short-term exposure to antiretrovirals", Fernández, L.P., Brasca, R., Attademo, A.M., Peltzer, P.M., Lajmanovich, R.C., Culzoni, M.J., **Chemosphere** 246 (2020) 125830.
- 186) "On second-order calibration based on multivariate curve resolution in the presence of highly overlapped profiles", Alcaraz, M.R., Culzoni, M.J., Ibañez, G.A., Lozano, V.A., Olivieri, A.C., **Anal. Chim. Acta** 1096 (2020) 53-60.
- 187) "Dermal exposure to the UV filter benzophenone-3 during early pregnancy affects fetal growth and sex ratio of the progeny in mice", Santamaria, C.G., Meyer, N., Schumacher, A., Zenclussen, M.L., Teglia, C.M., Culzoni, M.J., Zenclussen, A.C., Rodriguez, H.A, **Archives of Toxicology** 2020.

10.2. Reviews y Tutorials

- 188) "Multivariate calibration: a powerful tool in pharmaceutical analysis". P. Damiani, G. Escandar, A. Olivieri* and H.C. Goicoechea*, **Curr. Pharm. Anal.**, **2005**, 1, 145-154.
- 189) "A review of multivariate calibration methods applied to biomedical analysis", G. Escandar, P. Damiani, H. Goicoechea and A. Olivieri, **Microchem. J.**, **2006**, 82, 29-42.
- 190) "Second and third-order multivariate calibration: Data, algorithms and applications". GM. Escandar, NM. Faber, HC. Goicoechea, A. Muñoz de la Peña, AC. Olivieri, RJ. Poppi. **Trends Anal. Chem. (TRAC)**, **2007**, 26, 752-765.
- 191) "The application to wastewaters of chemometric approaches to handling problems linked to highly complex matrices". M. Martínez Galera, M. Gil García y HC. Goicoechea, **Trends Anal. Chem. (TRAC)**, **2007**, 26, 1032-1042.
- 192) "Rhodamine and BODIPY chemodosimeters and chemosensors for the detection of Hg²⁺, based on fluorescence enhancement effects" M.J. Culzoni, A. Muñoz de la Peña, A. Machuca, H.C. Goicoechea, R. Babiano, **Anal. Methods**, 5 (2013) 30-49.
- 193) "Second- and higher-order data generation and calibration: A tutorial". GM Escandar, HC Goicoechea, A. Muñoz de la Peña, AC Olivieri. **Anal. Chim. Acta** 806 (2014) 8-26.
- 194) "Experimental design and multiple response optimization. Using the desirability function in analytical methods development". L Vera-Candioti, M Cámara, MM De Zan*, H Goicoechea*. **Talanta** 124 (2014) 123–138.
- 195) "Ambient mass spectrometry technologies for the detection of falsified drugs". M.J. Culzoni, P. Dwivedi, M. Green, P: N. Newton, F. Fernández. **Med. Chem. Commun.** 5, **2014**, 9-19.
- 196) "Applications and challenges of multi-way calibration in electrochemical analysis". AR. Jalalvand, HC. Goicoechea, Douglas N. Rutledge. **Trends Anal. Chem. (TRAC)** 87 (2017) 32-48.
- 197) "Applications of electrochemical data analysis by multivariate curve resolution-alternating least squares" AR. Jalalvand, HC. Goicoechea. **Trends Anal. Chem. (TRAC)** 88 (2017) 134-166.
- 198) "Third order chromatographic-excitation-emission fluorescence data: Advances, challenges and prospects in analytical applications". M. Montemurro, G.G. Siano, M.R. Alcaráz,* H.C. Goicoechea,* **Trends Anal. Chem. (TRAC)** 93 (2017) 119-133.

- 199) "Modeling second-order data for classification issues: data characteristics, algorithms, processing procedures and applications". S Azcarate, A. de Araújo Gomes, A. Muñoz de la Peña, H.C. Goicoechea. **Trends Anal. Chem. (TRAC)** 107(2018) 151-169.
- 200) "MATLAB in Electrochemistry: A review". Ali R. Jalalvand, Farid Najafi, Hector C. Goicoechea, Douglas N. Rutledge, Hui-Wen Gu, **Talanta**, 194(2019)205-225.
- 201) "Four- and five-way excitation-emission luminescence-based data acquisition and modeling for analytical applications. A review" M R Alcaraz, O Monago-Maraña, H C Goicoechea, A Muñoz de la Peña. **Anal. Chim. Acta** 1083 (2019) 41-57.
- 202) "Applications of liquid-phase microextraction procedures to complex samples assisted by response surface methodology for optimization". M. Carabajal, C.M. Teglia, S. Cerutti, M.J. Culzoni, H.C. Goicoechea*, **Microchem. J.**, 152 (2020)104436.
- 203) "Applications of mixture experiments for response surface methodology implementation in analytical methods development" S. Azcarate, Licarion Pinto, H.C. Goicoechea*, **Journal of Chemometrics** 2020; e3246. <https://doi.org/10.1002/cem.3246>

3 CONFERENCIAS

- 1) **"Recientes aplicaciones en análisis farmacéutico asistido por técnicas quimiométricas"** Conferencia Semiplenaria en el III Congreso Argentino de Química Analítica, Merlo, San Luís, Argentina, 1-4 de noviembre de 2005.
- 2) **"Aportes de la informática al desarrollo de la química analítica"**. En la Universidad de Extremadura, Badajoz, España, el 27 de diciembre de 2007.
- 3) **"Evaluation of chemometric approaches for the analysis of textile fibers via room-temperature fluorescence excitation emission matrices"**. FACSS, Reno, USA, 30 de septiembre de 2008.
- 4) **"Modelado quimiométrico con señales de segundo orden. Aplicación al análisis de fármacos y aditivos alimentarios en muestras complejas"** Departamento de Química, Universidad Federal de Paraíba, Joao Pessoa, Brasil. 19 de febrero de 2009.
- 5) **"Nuevas estrategias para el análisis de fármacos"**. Ciclo de Ateneos organizado por el Museo Provincial de Ciencias Naturales. Ministerio de Innovación y Cultura. 26 de junio de 2009, Santa Fe, Argentina.
- 6) **"Recientes aplicaciones de diseño experimental para la optimización de múltiples respuestas"**. 3er Workshop de Quimiometría, Arembepe, Brasil, 26 de abril de 2012.
- 7) "Applications of Multivariate Analysis to Analytical Methods Developments" **Institut für Chemische, Technologien und Analytik, Technische Universität, Viena, Austria**. Julio 2 de 2012.
- 8) "Applications of Multivariate Analysis to Analytical Methods Developments" **Universidad Federal de Sao Carlos, Brasil**. Febrero 03 de 2013.
- 9) "Calibração Multivariada em desenvolvimento de métodos analíticos" **Universidade Estadual de Paraíba, Campina Grande, Brasil**. Mayo 02 de 2013.
- 10) "Applications of Multivariate Calibration to analytical developments" **Universidad Federal de Rio Grande do Norte, Natal, Brasil**. Mayo 03 de 2013.
- 11) "Recientes desarrollos analíticos usando datos de orden superior". Conferencia en el VI Congreso Argentino de Química Analítica, Mendoza, Argentina, 1-4 de octubre de 2013.
- 12) **"Calibración con datos multidimensionales"**. En la Universidad de Extremadura, Badajoz, España, el 07 de mayo de 2014.
- 13) María Julia Culzoni. **Multi-platform technologies for the integral characterization of poor-quality medicines**. Chemistry in Motion, 246th American Chemical Society National Meeting. Indianapolis, IN, Estados Unidos, 9 de septiembre de 2013.
- 14) "Aplicaciones analíticas y biotecnológicas de diseño experimental y optimización de respuestas múltiples". Conferencia plenaria en el XXI Encuentro Argentino de Biometría, Corrientes, Argentina, 28-30 de septiembre de 2016.
- 15) "Datos de tercer orden: un pequeño paso para el hombre, un gran paso para la química analítica". Presentación oral en el VI Congreso Iberoamericano de Química Analítica, Cancún, México, 15 al 18 de noviembre de 2016
- 16) "Diseño experimental y optimización de múltiples respuestas. Recientes aplicaciones analíticas". Conferencia plenaria en el VI Congreso Iberoamericano de Química Analítica, Cancún, México, 15 al 18 de noviembre de 2016.

17)“Datos multidimensionales aplicados al análisis forense y alimentario: aumentando la capacidad analítica.”. Palestra en el VIII Workshop de quimiometria y Simposio de Química Forense, Salvador, Brasil, 24 al 27 de abril de 2017.

18)“Design of experiments (DOE) and response surface methodology (RSM): nowadays it is a necessity and an obligation for the analytical chemists”. Palestra en el VIII Workshop de quimiometria, Salvador, Brasil, 24 al 27 de abril de 2017.

19)“Aplicaciones quimiométricas para la resolución de diferentes problemas. Generación y modelado de datos multidimensionales”. Seminario en el Departamento de Química Orgánica de la Fac. de Cs. Exactas y Naturales de la Universidad de Buenos Aires, 25 de octubre de 2017.

20)“Recientes aplicaciones de modelado de datos multidimensionales al análisis de muestras ambientales”. Conferencia en el Primer Taller de Química Analítica Ambiental, realizado en la Universidad Nacional de San Martín el 30-11 y 1-12 de 2017.

21) “Mesa Redonda: la Educación en la Química Analítica”. Panelista en el Primer Taller de Química Analítica Ambiental, realizado en la Universidad Nacional de San Martín el 30-11 y 1-12 de 2017.

22)“Datos multidimensionales aplicados al análisis agroalimentario. Aumentando la capacidad analítica”. Conferencia en la Universidad de Cádiz, España, el 16 de marzo de 2018.

23) “Generation and proper modeling of third-order chromatographic data for quantitation of analytes in complex samples”. Invitado a Conferencia plenaria en el Chemometrics in Analytical Chemistry (CAC XVII), Halifax Canadá, 25-29 junio de 2018.

4. FORMACIÓN DE RECURSOS HUMANOS

4.1. Dirección de Tesis Doctorales y becas de CONICET

Finalizadas:

- 1) Nilda Raquel Marsilli, Doctorado en Ciencias Biológicas de la Facultad de Bioquímica y Ciencias Biológicas de la UNL. Tema: “Desarrollo de nuevos métodos analíticos basados en técnicas espectroscópicas y electroquímicas. Resolución de problemas relacionados con aditivos alimentarios y muestras ambientales.” Defendida 16/03/06. Nota: Sobresaliente (10).
- 2) María Silvia Cámara, Doctorado en Ciencias Biológicas de la Facultad de Bioquímica y Ciencias Biológicas de la UNL. Tema: “Nuevas estrategias analíticas basadas en la combinación de técnicas computacionales y espectroscopia dinámica y de equilibrio. Aplicación a muestras biológicas, farmacéuticas y ambientales”. Defendida 24/10/06. Nota: Sobresaliente (10).
- 3) Julia Culzoni: Dirección beca doctoral Conicet 2004. Tema: “Desarrollo de nuevas estrategias analíticas para la determinación de fármacos en estudios de bioequivalencia y monitoreo terapéutico basadas en señales de primer y segundo orden”. Defendida 15/12/08. Nota: Sobresaliente (10).
- 4) Luciana Vera Candiotti: Co-Dirección beca doctoral Conicet 2004. Tema: “Desarrollo de nuevas estrategias analíticas basadas en técnicas separativas acopladas a metodologías de preconcentración y modelado quimiométrico para el análisis de fármacos y sus metabolitos en muestras complejas”. Defendida 17/03/09. Nota: Sobresaliente (10).
- 5) María Mercedes De Zan, inscripta 2006. Tema: “Desarrollo de métodos analíticos basados en técnicas cromatográficas (CLAR y CG) acopladas a modelado quimiométrico. Resolución de problemas analíticos relacionados con fármacos y sus metabolitos en fluidos biológicos. Defendida 26/08/11. Nota: Sobresaliente (10).
- 6) Pablo Giordano. Dirección beca doctoral t I y II Conicet 2007. Tema: “Aplicación de técnicas quimiométricas avanzadas a la optimización de procesos biotecnológicos. Defendida 31/03/13. Nota: Sobresaliente (10).
- 7) Gabriel Siano. Dirección beca doctoral Tipo I y II Conicet 2005-2009. Tema: “Aplicación de redes neuronales artificiales en sistemas analíticos y procesos biotecnológicos”. Defendida 09/12/13. Nota: Sobresaliente (10).
- 8) Agustina Schenone. Dirección beca doctoral tipo I Conicet 2009 (Tipo II 2011). Tema: “Aplicación de modelado quimiométrico a datos de segundo orden como herramienta para la corrección de problemas de interferencias en la determinación de analitos en muestras complejas”. Defendida 20/04/14. Nota: Sobresaliente (10).
- 9) Adriano Araújo Gomes. Dirección de doctorado sándwich en conjunto con Dr. Mario Ugulino de Araújo. Beca doctoral de CAPES. Doctorado en Química de la Universidad Federal de Paraíba, Brasil. Tema:” Algoritmo das projeções sucessivas para seleção de variáveis em métodos de calibração de ordem superior”. Defendida y aprobada (10) el 29-06-2015.
- 10) Mirta Raquel Alcaráz. Dirección beca doctoral Tipo I Conicet 2011. Tema: “Nuevas estrategias analíticas para el análisis de muestras de composición compleja, basadas en generación y modelado de datos cromatográficos multidimensionales”. Defendida 27/12/16. Nota: Sobresaliente (10).

- 11) Carla Teglia. Dirección beca doctoral Tipo I Conicet 2012. Co-dirección de tesis en Tema: "Desarrollo de estrategias analíticas basadas en técnicas cromatográficas y modelado quimiométrico para la determinación de residuos de coccidiostatos y de ácido retinoico como marcadores de contaminación en muestras biológicas". Defendida 04/12/17. Nota: Sobresaliente (10).
- 12) Milagros Montemurro. Dirección beca doctoral Tipo I Conicet 2013. Tema: "Desarrollo de estrategias analíticas basadas en generación de datos de orden superior para la cuantificación de residuos agrotóxicos en frutas". Comienzo el 01 de abril de 2014. Defendida 21/03/19. Nota: Sobresaliente (10).
- 13) Lesly Paradina Fernández, Directora María Julia Culzoni, Co-dir: Romina Brasca. Tema: "Desarrollo de estrategias analíticas para la determinación de fármacos antirretrovirales presentes como contaminantes emergentes en muestras ambientales y la evaluación ecotoxicológica en muestras biológicas". Doctorado en Ciencias Biológicas FBCB-UNL. Fecha de admisión 06/07/2016. En desarrollo. N° de resolución: 676. Defendida 15/03/20. Nota: Sobresaliente (10).

En ejecución:

- 1) Ana Enderle. Directora Dra Culzoni. "New ionic materials based on polyoxometalates with activity against pathogenic microorganisms". Doctorado mixto UNL-ULM (Alemania).
- 2) Fabricio Chiappini. Dirección beca doctoral Conicet 2017. Dirección de tesis en tema: "Generación y evaluación de datos multidimensionales para el control de calidad y la optimización de procesos de producción de proteínas recombinantes". Comienzo agosto de 2017.
- 3) Agostina Mangussi. Dirección beca doctoral Conicet 2019. **Dirección** de tesis en tema: "Estrategias de generación y modelado quimiométrico de datos de segundo y tercer orden para la cuantificación de compuestos de interés en plantas medicinales". Comienzo en abril de 2019
- 4) Alejandro Jurado. Dirección doctorado Universidad Nacional de Salta. Tema: "Aplicación de herramientas multivariadas a datos químicos y fisicoquímicos derivados del monitoreo de fuentes de polución de aguas superficiales". Comienzo en 2018.

4.2. Dirección de becas posdoctorales de CONICET

- 1) Romina Brasca: dirección en beca posdoctoral CONICET (2011-2013).
- 2) Gabriel Siano: dirección en beca posdoctoral CONICET (2014-2015).
- 3) Celina Monzón: dirección en beca posdoctoral CONICET (2014-2015).
- 4) Luis Escudero: dirección en beca posdoctoral CONICET (2014-2015).
- 5) Silvana Azcárate: dirección en beca posdoctoral CONICET (2016-2017).
- 6) Leonardo Mariño Repizo beca posdoctoral CONICET (2018-2019).
- 7) Diego Onna beca posdoctoral CONICET (2018-2019).
- 8) Diana Fetcher beca posdoctoral CONICET (2019-2020).
- 9) Maia Carabajal beca posdoctoral CONICET (2019-2020)

4.3. Dirección de investigadores extranjeros

- 1) Dirección de la Dra. María Dolores Gil García en su estancia durante el mes de setiembre de 2006 en el marco del proyecto AEI (A/4015/05): "Desarrollo de estrategias analíticas basadas en métodos quimiométricos de primer y segundo orden aplicadas al análisis de antibióticos presentes como contaminantes ambientales"
- 2) Dirección de la Dra. María Dolores Gil García en su estancia durante el mes de setiembre de 2007 en el marco del proyecto AEI (A/4015/05): "Aplicación de modelado quimiométrico con ventaja de segundo orden para resolver problemas complejos en análisis ambiental"
- 3) Dirección de Alicia Mancha de Llanos (DNI: 76.260.113) en su estancia desde el 15 de septiembre al 15 de diciembre de 2009. Tema: "Determinación de 7,8-dihidro-l-biopterin (BH2); 5,6,7,8-tetrahydrobiopterin (BH4) y diversas pteridinas marcadoras mediante combinación de cromatografía líquida y calibración multivariante de segundo orden utilizando MCR/ALS, U-PLS/RBL Y N-PLS/RBL". Beca de Junta de Extremadura. (GRU 08126).
- 4) Dirección de Adriano Araujo en su estancia durante el año 2013 en el marco de un doctorado sándwich proveniente de la Universidad Estadual de Paraíba: "Selección de variables para algoritmos de segundo orden"
- 5) Mónica Palomino Vasco. Universidad de Extremadura. Febrero a mayo de 2020.

4.4. Becas de Iniciación a la Investigación o Cientibecas

- 1) Subdirección de Collado, María Sol (Director: Dr. Víctor E. Mantovani). Tema: "Desarrollo y puesta a punto de nuevas estrategias espectroscópicas para el análisis de fármacos en formas farmacéuticas". Fecha de comienzo: 24 de marzo de 1999 Fecha de finalización: 24 junio de 2000. Expte N° 321.366/12. Resolución 73 (1999).
- 2) Dirección de Ribero, Gustavo. Tema: "Desarrollo de técnicas electroanalíticas para la determinación de principios activos de importancia farmacéutica y su acoplamiento a métodos quimiométricos para la cuantificación de mezclas de compuestos". Fecha de comienzo: octubre de 2000. Fecha de finalización: diciembre de 2001.
- 3) Dirección de Ferroni Félix. Tema: "Desarrollo y validación de métodos analíticos para la determinación fármacos y sus metabolitos en mezclas complejas (formulaciones y material biológico), basados en el acoplamiento de técnicas espectroscópicas y quimiometría". Fecha de comienzo: enero de 2002. Expte. N° 414.601.

4.5. Dirección de Tesinas de Licenciatura en Biotecnología:

- 1) María Sol Collado. Tema: "Desarrollo y validación de métodos espectroscópicos acoplados a técnicas computacionales para el análisis de mezclas de principios activos en fármacos de uso frecuente, como gotas oftálmicas e inyectables". Nota: sobresaliente (10).
- 2) Gabriela Capello. Tema: "Aportes de la química analítica a la optimización de procesos biotecnológicos". Nota: sobresaliente (10).
- 3) Luciana Vera Candioti. Tema: "Diseño y optimización sistemática de metodologías analíticas basadas en electroforesis capilar para la identificación y cuantificación de principios activos y sustancias relacionadas en materias primas y preparados farmacéuticos". Defendida el 27-12-04. Nota: sobresaliente (10).
- 4) Gabriel A. Hunzicker. Tema: "Determinación conductimétrica de aspirina en materias primas y formas farmacéuticas. Desarrollo y validación de una metodología analítica". Defendida diciembre 2004. Nota: sobresaliente (10).
- 5) Culzoni Julia. Tema: "Estudio y desarrollo de metodologías analíticas basadas en la técnica de espectroscopia derivada. Aplicación al control de calidad de fármacos". Defendida marzo 2005. Nota: sobresaliente (10).
- 6) Gaston Narcoti. Tema: "Aplicación de técnicas de reconocimiento de pautas para la clasificación de acelerantes de combustión en incendios mediante cromatografía gaseosa rápida acoplada a espectrometría de masas (GC-MS)". Defendida mayo 2005. Nota: sobresaliente (10).
- 7) Vanina G. Franco. Tema: "Desarrollo de una metodología analítica para el control de un bioproceso productor de ácido glucurónico mediante la combinación de espectroscopia de infrarrojo (FT-IR) con métodos de calibración multivariada". Defendida mayo 2005. Nota: sobresaliente (10).
- 8) Gabriel Siano. Tema: "Transferencia de modelos en calibración multivariada. Aplicación al monitoreo de bioprocesos". Defendida marzo 2006. Nota: sobresaliente (10).
- 9) Pablo Giordano. Tema: "Aplicación de herramientas quimiométricas para la optimización de un cultivo empleado en el crecimiento de bacterias recombinantes". Nota: distinguido (9)
- 10) Hugo Daniel Martínez. Tema: "Puesta a punto e intensificación de una tecnología de producción de proteínas recombinantes mediante cultivos semicontinuos". Defendida 26 febrero 2009. Nota: sobresaliente (10).
- 11) Yamile Soledad Caro. Tema: "Desarrollo de métodos analíticos cinéticos asistidos por modelado quimiométrico para determinar principios activos en preparados farmacéuticos". Defendida 29 abril 2009. Nota: sobresaliente (10).
- 12) Mariana Buyati. Tema: "Nuevos métodos analíticos para sustancias de interés clínico en líquidos biológicos absorbidos en papel de filtro. Estudios mediante absorciometría, cinética y calibración multivariada". Defendida 22 mayo 2009. Nota: sobresaliente (10).
- 13) Verónica Fontana. Tema: "Desarrollo, optimización y validación de un método analítico mediante electroforesis capilar para la cuantificación indirecta de esporas de *Bacillus thuriengensis* a través de la determinación de dipicolinato". Defendida 10 diciembre 2010. Nota: sobresaliente (10)

5. REUNIONES CIENTÍFICAS

5.1. Presentaciones: 200 en total (nacionales e internacionales)

5.2. Organización de reuniones científicas

- 1) **Primer Encuentro Nacional de Profesores Universitarios de Química Analítica.** Santa Fe, octubre de 1988.
- 2) **XXIV Congreso Argentino de Química (Comité Científico).** Santa Fe, 7-9 de agosto de 2002.
- 3) **III Encuentro Bioquímico del Litoral y VI Jornadas de Comunicaciones Técnico-Científicas (Comité Científico).** Santa Fe, 16-18 de junio de 2005. Expte 77.177-s/04.
- 4) **IV Congreso Argentino y II Iberoamericano de Química Analítica (Comité Científico).** Buenos Aires, 27 al 30 de agosto de 2007.
- 5) **V Congreso Argentino de Química Analítica (Comité Científico).** Bahía Blanca, 2 al 6 de noviembre de 2009.
- 6) **VI Congreso Argentino de Química Analítica (Presidente Comité Organizador).** Santa Fe, setiembre de 2011
- 7) **LACE 2012. 18 Simposio Latinoamericano en Aplicaciones de la Electroforesis Capilar y Tecnología del Microchip..." (Comité Organizador)**Bs. As. 30/11-04/12 de 2012.
- 8) **VII Congreso Argentino de Química Analítica (Comité Científico).** Mendoza, octubre de 2013.

6. VINCULACIÓN TECNOLÓGICA

- 1) A través del convenio celebrado con Lafedar S.A., se desarrolló e instaló un programa de computación para la realización del análisis por calibración multivariada de difenhidramina, fenilefrina y nafazolina en las gotas oftálmicas Alvonasal, en el laboratorio de control de calidad de la planta.
- 2) Laboratorio Pharmagreen (Paraná, Entre Ríos). Solicitud de asistencia técnica para la puesta a punto, optimización y desarrollo de metodologías analíticas a utilizar en el control de calidad de materias primas usadas y preparaciones farmacéuticas producidas. Nota 05-05-2003.
- 3) Productos Veterinarios S.A. Solicitud de servicios de asistencia técnica para la puesta a punto, optimización y desarrollo de metodologías analíticas a utilizar en el control de calidad de materias primas usadas y preparaciones de uso veterinario. Nota 15-04-2003.
- 4) Desarrollo y transferencia de una técnica para la determinación de ácido benzoico en concentrado de jugos para una empresa productora de concentrado de jugos de Concordia, Entre Ríos
- 5) Desarrollo y transferencia de una técnica para la determinación de alcaloides en extracto vegetal por electroforesis capilar a Eriochem SA.
- 6) Asesoría técnica en diseño experimental y procesamiento de datos para un estudio de robustez del proceso de purificación de una proteína recombinante a Zelltek SA. Factura 0058-00002361 (\$ 5.000) del 25-08-2010.
- 7) Convenio SAT con INTA Paraná, Entre Ríos, para la realización de análisis de pesticidas en granos.