

# INSTITUTO BOLIVIANO DE METROLOGÍA IBMETRO



PROTOCOLO DE ENSAYOS DE APTITUD

**Código: EQ-0167**

**“DETERMINACIÓN DE AFLATOXINAS EN MANÍ”**

**MATRIZ: MANÍ**


DIRECCIÓN DE METROLOGÍA  
INDUSTRIAL Y CIENTÍFICA – DMIC

AÑO 2024

Elaborado por:	Ing. Yamil Acho Sarzuri	Fecha:	2024-02-09
Revisado y aprobado por:	Lic. Jose Luis Gonzales	Fecha:	2024-02-16
Información actualizada en:		Fecha:	2024-07-26


---

El presente documento ha sido elaborado en la Dirección de Metrología Industrial y Científica del Instituto Boliviano de Metrología.

<b>DMIC-EA-PE-001/F02</b>	<b>FORMULARIO</b>	
<b>V.01</b>	<b>PROTOCOLO DE ENSAYOS DE APTITUD</b>	
<b>Página 2 de 12</b>	<b>Vigente desde: 2024-03-05</b>	<b>N° de Registro: 007/2024</b>

## CONTENIDO

1.	INTRODUCCIÓN .....	3
2.	ORGANIZACIÓN.....	3
3.	UNIDAD DE COORDINACIÓN .....	3
4.	OBJETIVOS .....	4
5.	ALCANCE Y PARTICIPANTES .....	4
6.	GENERALIDADES .....	5
6.1	CRONOGRAMA GENERAL.....	5
6.2	INSCRIPCIÓN DE LOS PARTICIPANTES Y COSTOS.....	5
6.3	DOCUMENTOS GENERADOS.....	6
7.	ÍTEM DE ENSAYO .....	6
7.1	DESCRIPCIÓN DEL ÍTEM .....	6
7.2	HOMOGENEIDAD Y ESTABILIDAD DEL ÍTEM DE ENSAYO.....	7
8.	DISTRIBUCIÓN Y REPOSICIÓN DEL ÍTEM DE ENSAYO .....	7
9.	MANIPULACIÓN, TRANSPORTE Y ALMACENAMIENTO DEL ÍTEM DE ENSAYO.....	8
10.	MEDICIÓN Y CONSIDERACIONES DE IMPORTANCIA .....	8
11.	REGISTRO DE ENVÍO DE RESULTADOS .....	9
12.	EVALUACIÓN DEL DESEMPEÑO DE LOS PARTICIPANTES .....	10
13.	CONSIDERACIONES ANTE LA COLUSIÓN Y/O FALSIFICACIÓN DE RESULTADOS .....	10
14.	CONSIDERACIONES DE CONFIDENCIALIDAD.....	11
15.	PUBLICACIÓN DEL INFORME DE RESULTADOS .....	11
16.	OTRAS CONSIDERACIONES.....	11
17.	REFERENCIAS.....	12

<b>DMIC-EA-PE-001/F02</b>	<b>FORMULARIO</b>	
<b>V.01</b>	<b>PROTOCOLO DE ENSAYOS DE APTITUD</b>	
<b>Página 3 de 12</b>	<b>Vigente desde: 2024-03-05</b>	<b>N° de Registro: 007/2024</b>

## 1. INTRODUCCIÓN

Los Ensayos de Aptitud son una herramienta para la determinación del desempeño de los laboratorios, a través de comparaciones interlaboratorios y, además, son considerados como indispensables para el aseguramiento de la calidad de sus resultados, según la NB-ISO/IEC/17025:2018 "Requisitos generales para la competencia de los laboratorios de ensayo y de calibración".

El Instituto Nacional de Metrología es proveedor de Ensayos de Aptitud y tiene el objetivo de atender las necesidades de los laboratorios nacionales.

El presente Ensayo de Aptitud está dirigido a apoyar a los laboratorios e instituciones en general que realizan mediciones en la matriz de "Maní"; además, permitirá contar con una herramienta mediante la cual se evalúe el estado de las mediciones, según sus métodos de rutina.

## 2. ORGANIZACIÓN



Dirección de Metrología Industrial y Científica  
 Instituto Boliviano de Metrología - IBMETRO  
 La Paz, Av. Camacho N° 1488  
 Contacto: (+591) 72015382; (+591) 71543136  
[www.ibmetro.gob.bo](http://www.ibmetro.gob.bo)


## 3. UNIDAD DE COORDINACIÓN

### COMITÉ TÉCNICO – CIENTÍFICO

Ing. Yamil Acho Sarzuri – Coordinador del Ensayo de Aptitud  
 Lic. Julian Morales – Responsable Técnico y Estadístico del Ensayo de Aptitud  
 Lic. Jose Luis Gonzales – Supervisor de Metrología Química  
 Ing. Henry Paco Marino – Director de Metrología Industrial y Científica

### PERSONAL DE APOYO

Lic. Jimena Torrez - Colaborador Técnico  
 Lic. Gilda Cruz Ochoa - Colaborador Técnico  
 Lic. María Eugenia Marcelo Choqueticlla - Colaborador Técnico

<b>DMIC-EA-PE-001/F02</b>	<b>FORMULARIO</b>	
<b>V.01</b>	<b>PROTOCOLO DE ENSAYOS DE APTITUD</b>	
<b>Página 4 de 12</b>	<b>Vigente desde: 2024-03-05</b>	<b>N° de Registro: 007/2024</b>

### **ACTIVIDADES SUBCONTRATADAS**

Ninguna de las actividades necesarias para el desarrollo del presente Ensayo de Aptitud será subcontratada por el proveedor.

### **4. OBJETIVOS**


- Evaluar el desempeño de los laboratorios e instituciones participantes, proporcionando la oportunidad de realizar comparaciones y tener una valoración independiente de los datos del laboratorio, comparados con valores de referencia o con el desempeño de organismos similares en el ensayo propuesto.
- Contribuir en la identificación de problemas de ensayo y/o medición en los organismos, en la implementación, toma y adopción de acciones correctivas.
- Apoyar a los organismos en el cumplimiento de la NB-ISO/IEC/17025:2018 requerido por laboratorios de ensayos.
- Proveer confianza a los clientes de los laboratorios.
- Fortalecer el desarrollo de la infraestructura metrológica boliviana y la confianza de los usuarios de dicha infraestructura.

### **5. ALCANCE Y PARTICIPANTES**

El presente Ensayo de Aptitud tiene la siguiente denominación:

Código: EQ-0167  
Matriz: Maní  
Ensayo: Determinación de aflatoxinas en Maní

Este Ensayo de Aptitud considera, dentro de su alcance, a laboratorios de ensayos, acreditados y no acreditados, que trabajan con la matriz de "Maní" dentro de su alcance de medición.

<b>DMIC-EA-PE-001/F02</b>	<b>FORMULARIO</b>	
<b>V.01</b>	<b>PROTOCOLO DE ENSAYOS DE APTITUD</b>	
<b>Página 5 de 12</b>	<b>Vigente desde: 2024-03-05</b>	<b>N° de Registro: 007/2024</b>

## 6. GENERALIDADES

### 6.1 Cronograma General

**Tabla 1:** Cronograma del presente Ensayo de Aptitud.

<b>Código del Ensayo de Aptitud</b>	<b>Actividades</b>	<b>Fecha</b>	
EQ-0165	Fecha límite de inscripción	2024-03-08	
	Envío y/o recojo del ítem de ensayo	2024-03-11	2024-03-15
	Etapa de Mediciones	2024-03-15	2024-04-05
	Fecha límite de envío de resultados	2024-04-05	
	Publicación de Informe Preliminar	2024-06-13	
	Fecha límite de recepción de observaciones al Informe Preliminar	2024-06-20	
	Publicación del Informe Final	2024-06-21	

**NOTA:** Las fechas podrán ser reprogramadas por el organizador por causas de fuerza mayor, sin embargo, dichos cambios serán informados oportunamente.

### 6.2 Inscripción de los participantes y costos

Para participar, los interesados pueden inscribirse a través del formulario DMIC-EA-PE-001/F03, que será enviado por correo electrónico a todos los interesados. Dicho documento deberá ser completado con todos los datos requeridos y remitido al correo electrónico: [cotizaciones@ibmetro.gob.bo](mailto:cotizaciones@ibmetro.gob.bo), con copia a [yacho@ibmetro.gob.bo](mailto:yacho@ibmetro.gob.bo). Una vez recibido el formulario, IBMETRO enviará la cotización respectiva.

El laboratorio participante recibirá, mediante correo electrónico, su código de identificación, previo al pago y facturación del servicio.


De carácter informativo, presentamos los costos que se generan por la participación en el Ensayo de Aptitud.

El costo se genera a partir de la cantidad de parámetros a medir y el o los ítem(s) del ensayo. El costo final será tomado de la cotización emitida a cada institución participante.

**CÁLCULO:** Costo total de participación en Ensayos de Aptitud = costo por parámetros a participar + costo por ítem de ensayo + gastos adicionales.

a. Por la cantidad de parámetros a participar:

1 Parámetro	Bs 440
2 a 4 parámetros	Bs 550

<b>DMIC-EA-PE-001/F02</b>	<b>FORMULARIO</b>	
<b>V.01</b>	<b>PROTOCOLO DE ENSAYOS DE APTITUD</b>	
<b>Página 6 de 12</b>	<b>Vigente desde: 2024-03-05</b>	<b>N° de Registro: 007/2024</b>

5 a 7 parámetros

Bs 660

**NOTA:** La cantidad de parámetros a considerar es la sumatoria de los parámetros de cada ítem.

b. Costo de Material de Referencia (MR): Cada ítem a Bs 400

c. Gastos adicionales

Informe Final (Formato Físico)

Bs 50

Informe Final (Formato Digital)

El informe en formato digital será enviado a todos los participantes de manera gratuita.

En caso de la participación de más de un (1) analista por institución, se considera un descuento del 50%.

**NOTA:** El Porcentaje (%) de descuento se realiza por la cantidad de parámetros a participar, y no al ítem de ensayo.

### 6.3 Documentos Generados

Los documentos generados en el presente ensayo son:

- |  |                    |
|--|--------------------|
| ○ Protocolo del Ensayo de Aptitud            | DMIC-EA-PE-001/F02 |
| ○ Formulario de Inscripción                  | DMIC-EA-PE-001/F03 |
| ○ Formulario de Recepción del Ítem de Ensayo | DMIC-EA-PE-001/F04 |
| ○ Certificado de Participación               | LP-CEQ-0XXX-2024   |
| ○ Formulario de Reporte de Resultados        | DMIC-EA-PE-001/F05 |
| ○ Informe de Resultados (Final)              | DMIC-EA-PE-001/F06 |

**NOTA:** Toda la documentación generada por los laboratorios participantes, a solicitud de los organizadores, debe ser remitida al correo electrónico [yacho@ibmetro.gob.bo](mailto:yacho@ibmetro.gob.bo), en las fechas previstas.


## 7. ÍTEM DE ENSAYO

### 7.1 Descripción del Ítem

Cada laboratorio participante recibirá el ítem de ensayo según inscripción y detalle de matriz y analitos presentados a continuación:

**Tabla 2:** Descripción del presente ítem de Ensayo de Aptitud.

Identificación	Matriz	Cantidad de Muestra	Parámetros
EQ-0167	Aflatoxinas	Aprox. 100 g	Aflatoxina B1 Aflatoxina B2 Aflatoxina G1 Aflatoxina G2 Aflatoxina Totales (B1, B2, G1, G2)

<b>DMIC-EA-PE-001/F02</b>	<b>FORMULARIO</b>	
<b>V.01</b>	<b>PROTOCOLO DE ENSAYOS DE APTITUD</b>	
<b>Página 7 de 12</b>	<b>Vigente desde: 2024-03-05</b>	<b>N° de Registro: 007/2024</b>

Los valores de referencia y su incertidumbre serán asignados por consenso entre los laboratorios participantes, siguiendo los requisitos de las normas ISO/IEC 17043 e ISO/IEC 13528.

## 7.2 Homogeneidad y estabilidad del ítem de ensayo

Los estudios de homogeneidad y estabilidad serán realizados por IBMETRO siguiendo los requisitos establecidos en la Norma ISO 13528:2015 "Statistical methods for use in proficiency testing by interlaboratory comparisons".

## 8. DISTRIBUCIÓN Y REPOSICIÓN DEL ÍTEM DE ENSAYO

Los ítems de ensayo serán entregados a los participantes en las instalaciones del Centro de Alimentos y Productos Naturales (CAPN) de la Facultad de Ciencias y Tecnología de la Universidad Mayor de San Simón, Calle Sucre y Parque la Torre en Cochabamba, respetando el cronograma definido.


Estos ítems vienen en frascos herméticos de plástico resistente, que serán sellados en bolsas al vacío, y envueltos en film alveolar para mayor protección y evitar golpes, por lo que no se podrá disponer de frascos para reposición.

Es responsabilidad de los laboratorios participantes recoger la muestra, asimismo se recomienda enfáticamente que los participantes cuenten con los implementos necesarios para asegurar el transporte del ítem de ensayo (recipiente térmico, hielo o refrigerante), el proveedor no se hará responsable si la muestra sufre daño alguno durante el transporte.

Los participantes deberán informar a los organizadores sobre la recepción del ítem de ensayo a través del Formulario DMIC-EA-PE-001/F04, documento que deberá ser enviado vía correo electrónico al Coordinador Técnico del Ensayo de Aptitud en un plazo máximo de cinco (5) días hábiles después de la entrega/envío del ítem de ensayo.

En relación con la reposición de ítems de ensayo dañados o perdidos en el presente Ensayo de Aptitud, se consideran los siguientes aspectos:

- En caso de que el formulario DMIC-EA-PE-001/F04 no sea completado y enviado en el tiempo establecido, IBMETRO no aceptará reclamos posteriores.
- Al momento de la entrega, el participante deberá realizar la inspección de los ítems de ensayo. En caso de detectar que alguno de ellos no se encuentra debidamente sellado o presenta algún tipo de daño, deberá informar los pormenores al personal de IBMETRO para su inmediata reposición.
- En lo referente a la entrega vía Courier, en caso de que algún ítem de ensayo presentara problemas, el participante podrá informar la situación al proveedor a través del correo electrónico [yacho@ibmetro.gob.bo](mailto:yacho@ibmetro.gob.bo). En dicho caso, se evaluará la posibilidad de una reposición, dependiendo de la disponibilidad de ítems en

DMIC-EA-PE-001/F02	FORMULARIO	
V.01	PROTOCOLO DE ENSAYOS DE APTITUD	
Página 8 de 12	Vigente desde: 2024-03-05	N° de Registro: 007/2024

custodia.

**NOTA:** IBMETRO no se hace responsable de problemas o daños presentados en el ítem por mala disposición o manejo inadecuado por parte del participante después de su entrega.

Asimismo, IBMETRO se reserva el derecho de limitar la cantidad de ítems de Ensayo de Aptitud que pueden ser adquiridos por laboratorio, en caso de que no se cuente con suficientes unidades en stock para asegurar la participación de una mayor cantidad de laboratorios.

## 9. MANIPULACIÓN, TRANSPORTE Y ALMACENAMIENTO DEL ÍTEM DE ENSAYO

Los ítems de ensayos deben permanecer cerrados y deben estar almacenados en un cooler de plastaformo con el respectivo refrigerante. Cuando los frascos lleguen a destino deber inmediatamente almacenados en un congelador. Es necesario que las muestras estén almacenados por lo menos a -20 °C hasta su análisis.

## 10. MEDICIÓN Y CONSIDERACIONES DE IMPORTANCIA


Las mediciones se realizarán mínimamente por duplicado en los parámetros propuestos para cada matriz según la siguiente tabla:

**Tabla 3:** Esquema de mediciones y métodos sugeridos para los parámetros del presente Ensayo de Aptitud.

Parámetro	Unidades
Aflatoxina B1	ng/g
Aflatoxina B2	ng/g
Aflatoxina G1	ng/g
Aflatoxina G2	ng/g
Aflatoxina (B1,B2,G1,G2)	ng/g

Los resultados de medición deben ser reportados en las unidades determinadas en la Tabla 3. Respecto a los métodos de medición, los participantes de este Ensayo de Aptitud pueden utilizar los métodos de medición que habitualmente emplean para realizar los análisis de este tipo de ítems de ensayo.



DMIC-EA-PE-001/F02	FORMULARIO	
V.01	PROTOCOLO DE ENSAYOS DE APTITUD	
Página 9 de 12	Vigente desde: 2024-03-05	N° de Registro: 007/2024

## 11. REGISTRO DE ENVÍO DE RESULTADOS

Los laboratorios deberán realizar los registros de las mediciones en el formulario de registro de resultados DMIC-EA-PE-001/F05. Dichos documentos, deberán ser remitidos al correo electrónico [yacho@ibmetro.gob.bo](mailto:yacho@ibmetro.gob.bo) en la fecha programada para el envío de los ítems de ensayo. **No se aceptarán formularios enviados después del plazo establecido.**

Respecto a la confirmación de los resultados, los organizadores enviarán un correo electrónico solicitando confirmar los valores reportados en el formulario DMIC-EA-PE-001/F05. El laboratorio participante tiene tres (3) días para confirmar los datos reportados, posteriormente, **se considerará sólo los valores reportados inicialmente.**

El Informe Final, en su versión preliminar, se enviará por correo electrónico a todos los laboratorios participantes para la revisión de sus datos y posibles errores de transcripción, ya que éstos se usarán para preparar el documento final. No se aceptarán solicitudes de cambios en los valores reportados.

Los laboratorios participantes deben revisar el informe preliminar y hacer llegar cualquier observación a los organizadores antes de la fecha indicada en el cronograma del Ensayo de Aptitud. No se recibirán observaciones de forma posterior.


Para reportar sus resultados, el participante debe llenar el Formulario DMIC-EA-PE-001/F05, donde se incluirá la siguiente información:

- Código del participante.
- Fechas de medición.
- Valor reportado.
- Incertidumbre expandida.
- Factor de cobertura.
- Número de mediciones (réplicas).
- Detalle de técnicas analíticas utilizadas para cada mensurando.
- Detalle de la trazabilidad de los resultados para cada mensurando.
- Observaciones adicionales.

Toda esta información debe ser reportada en los formularios de presentación de resultados o en documentos adicionales.

Los procedimientos para la estimación de la incertidumbre de medida asociada a los resultados de los ensayos utilizados por los participantes pueden estar basados en:

- Guía para la expresión de la incertidumbre de medición JCGM 100:2008 (GUM).
- Datos obtenidos durante la validación y verificación de un método de ensayo antes de su aplicación en las condiciones del ensayo.

DMIC-EA-PE-001/F02	FORMULARIO	
V.01	PROTOCOLO DE ENSAYOS DE APTITUD	
Página 10 de 12	Vigente desde: 2024-03-05	N° de Registro: 007/2024

- Estudios de comparaciones interlaboratorios para conocer las características de los métodos de ensayo conforme a la Norma ISO 5725 o su equivalente.
- Datos sobre el control interno de la calidad de los procedimientos de ensayo o medida.
- Datos obtenidos de ensayos de aptitud.
- Datos o procedimientos descritos en las normas de ensayo aplicables.
- Combinar las anteriores posibilidades.

## 12. EVALUACIÓN DEL DESEMPEÑO DE LOS PARTICIPANTES

El tratamiento de los datos para la evaluación del desempeño estará basado en la Norma ISO 13528:2015, "Statistical methods for use in proficiency testing by interlaboratory comparisons". El desempeño de cada laboratorio participante en el Ensayo de Aptitud será evaluado mediante el "z-score".

$$Z_i = \frac{x_i - x_{pt}}{\sigma_{pt}}$$

**Donde:**

$x_i$  = Resultado del participante "i"

$x_{pt}$  = Valor asignado

$\sigma_{pt}$  = Desviación estándar para la evaluación de aptitud


Se determinará el valor de "z-score" para cada laboratorio participante. El desempeño será clasificado como **SATISFACTORIO - CUESTIONABLE - INSATISFACTORIO**, a partir de la interpretación de este parámetro. A menor valor absoluto de "z" mejor es el desempeño del laboratorio.

$ z  \leq 2$	Satisfactorio
$2 <  z  < 3$	Cuestionable
$ z  \geq 3$	Insatisfactorio

IBMETRO se reserva el derecho de cambiar el criterio de evaluación de este Ensayo de Aptitud para garantizar que la evaluación del desempeño de los participantes sea la más adecuada. Si IBMETRO decidiera cambiar el criterio de evaluación, los pormenores serán comunicados oportunamente, junto a la justificación respectiva.

## 13. CONSIDERACIONES ANTE LA COLUSIÓN Y/O FALSIFICACIÓN DE RESULTADOS

Como aspectos relevantes para prevenir la colusión o falsificación de resultados del presente Ensayo de Aptitud, se consideran los siguientes:

<b>DMIC-EA-PE-001/F02</b>	<b>FORMULARIO</b>	
<b>V.01</b>	<b>PROTOCOLO DE ENSAYOS DE APTITUD</b>	
<b>Página 11 de 12</b>	<b>Vigente desde: 2024-03-05</b>	<b>N° de Registro: 007/2024</b>

- El registro de participantes es de entera responsabilidad del encargado de laboratorio u otro equivalente de cada institución.
- Al realizar el pago de la cotización por el Ensayo de Aptitud, el participante acepta un compromiso de no colusión y/o falsificación de resultados.
- Las cotizaciones enviadas a los participantes de Ensayos de Aptitud y el formulario de inscripción tienen el siguiente enunciado: "El participante se compromete a no realizar colusión con otros participantes, ni falsificar los resultados enviados al proveedor del Ensayo de Aptitud. En caso de sospecha, autorizo a IBMETRO a realizar la investigación pertinente, de acuerdo con sus procedimientos internos".
- En caso de incumplimiento al compromiso de no colusión y/o falsificación de resultados, el participante se someterá a los procedimientos internos del IBMETRO.

#### **14. CONSIDERACIONES DE CONFIDENCIALIDAD**

Los aspectos más relevantes del manejo de la confidencialidad de la información del presente Ensayo de Aptitud son los siguientes:

- La totalidad del personal del proveedor cuenta con un compromiso de confidencialidad firmado.
- Toda información entregada por los participantes será confidencial, sólo conocida por el proveedor y el mismo participante.
- La identidad de los participantes será protegida mediante el uso de un código numérico en sus resultados, que será enviado al participante vía correo electrónico. Es responsabilidad de cada participante preservar la confidencialidad del código individualizado asignado por el proveedor.
- Los informes de resultados, en los que se muestran los resultados y las conclusiones del ensayo de aptitud, son públicos, respetando el código confidencial asignado a los participantes.
- En caso de que una parte interesada (por ejemplo, una autoridad reglamentaria) solicite los resultados del ensayo de aptitud, los participantes serán notificados sobre dicha solicitud.


#### **15. PUBLICACIÓN DEL INFORME DE RESULTADOS**

El informe final del Ensayo de Aptitud será enviado a cada participante vía correo electrónico y será publicado en la página web del IBMETRO ([www.ibmetro.gob.bo](http://www.ibmetro.gob.bo)).

El informe final impreso puede ser solicitado en la inscripción del ensayo (el mismo tendrá un costo adicional).

#### **16. OTRAS CONSIDERACIONES**

El proveedor del Ensayo de Aptitud se reserva el derecho de editar la información presentada en este documento y se compromete a informar oportunamente a todos los participantes de cualquier cambio que se genere en dichas ediciones.

<b>DMIC-EA-PE-001/F02</b>	<b>FORMULARIO</b>	
<b>V.01</b>	<b>PROTOCOLO DE ENSAYOS DE APTITUD</b>	
<b>Página 12 de 12</b>	<b>Vigente desde: 2024-03-05</b>	<b>N° de Registro: 007/2024</b>

El proveedor del Ensayo de Aptitud se reserva el derecho de utilizar los resultados del presente Ensayo de Aptitud en publicaciones o labores didácticas, siempre que se respete el anonimato de los participantes.

## 17. REFERENCIAS

- ISO/IEC 17043:2023. Evaluación de la conformidad – Requisitos generales para los ensayos de aptitud.
- BIPM, IEC, IFCC, ILAC, ISO, IUPAC, IUPAP & OIML (2008). Evaluación de datos de medición – Guía para la expresión de la incertidumbre de medida JCGM 100:2008 (GUM 1995 con ligeras correcciones). Edición digital 1 en español realizada por CEM, autorizada por el Comité Conjunto de Guías en Metrología (JCGM).
- ISO 13528:2022. Métodos estadísticos para utilizar en ensayos de aptitud mediante comparaciones interlaboratorios.
- ISO Guide 35:2017. Reference materials – Guidance for characterization and assessment of homogeneity and stability.
- Thompson, Michael; Ellison, Stephen L. R.; Wood, Roger (2006). The International Harmonized Protocol for the proficiency testing of analytical chemistry laboratories (IUPAC Technical Report). Pure and Applied Chemistry, 78(1), doi:10.1351/pac200678010145