

VIII JORNADAS DE ESPECIACIÓN: DESAFÍOS ANALÍTICOS ACTUALES EN ESPECIACIÓN QUÍMICA

Francisco Calderón Celis

Departamento de Química Física y Analítica, Facultad de Química, Universidad de Oviedo.

El 1 de julio de este año se celebraron en Zaragoza las VIII Jornadas del Grupo de Especiación de la Sociedad Española de Química Analítica (SEQA), en el marco de la XXIV Reunión SEQA. Estas jornadas estuvieron organizadas por el comité organizador de la Reunión SEQA, presidido por Javier Galbán Bernal, y la nueva junta del grupo elegida durante las jornadas anteriores celebradas en 2022 en Oviedo, que actuó en calidad de comité científico. La celebración de estas jornadas se llevó a cabo gracias al apoyo de la SEQA y el patrocinio de Perkin Elmer.

Las jornadas contaron con 51 asistentes inscritos, de los cuales 23 fueron estudiantes que recibieron beca de la SEQA para asistir. Además de la charla invitada inaugural, se presentaron 9 comunicaciones orales de 15 minutos. Cabe destacar que la Royal Society of Chemistry (RSC) patrocinó el premio a la mejor comunicación oral de la Jornada de Especiación.

1. Desafíos analíticos actuales en especiación química

La temática de las jornadas de este año “Desafíos analíticos actuales en especiación química” buscaba seguir la línea de las anteriores, con el fin de establecer un espacio donde presentar y debatir los retos y desafíos actuales que tiene la especiación química en la investigación actual.

En este sentido, para la conferencia plenaria inaugural se contó con el profesor Olivier F.X. Donard, de la Universidad de Pau, Francia. Entre otras distinciones, el profesor Donard es miembro del Consejo Ejecutivo del Instituto Virtual Europeo de Análisis de Especiación (EVISA), y recientemente fue elegido miembro de la Academia Nacional de Ciencias de Francia. Además, creó en Pau el Laboratoire de Chimie Bioinorganique et Environnement (EP 132), que en 2014 se convirtió en el Institut des Sciences Analytiques et de Physico-Chimie pour l'Environnement et les Matériaux (IPREM), del que fue director hasta 2017. De 2012 a 2020, también fue director del centro Mass Spectrometry for Reactivity and Speciation Sciences (MARSS), considerado el mayor centro de espectrometría de masas (especiación e isótopos) de Europa.

En su conferencia plenaria “Speciation challenges from 2D to 3D applied to environmental and food applications. A long journey”, Olivier Donard hizo una revisión de su dilatada carrera, y dio su visión sobre la evolución de la especiación analítica, y los retos y oportunidades que se presentan en este campo.

Durante su charla plenaria, Olivier Donard hizo un recorrido por su trayectoria científica, centrándose en

aquellos trabajos en los que colaboró con investigadores españoles, pues como él ha dicho en varias ocasiones, ha colaborado con un gran número de estudiantes españoles, con un gran éxito. Destacó particularmente su relación profesional a lo largo de los años con investigadores españoles de gran reputación internacional como Carmen Cámara, Alfredo Sanz Medel, o Miguel Valcárcel, entre otros.

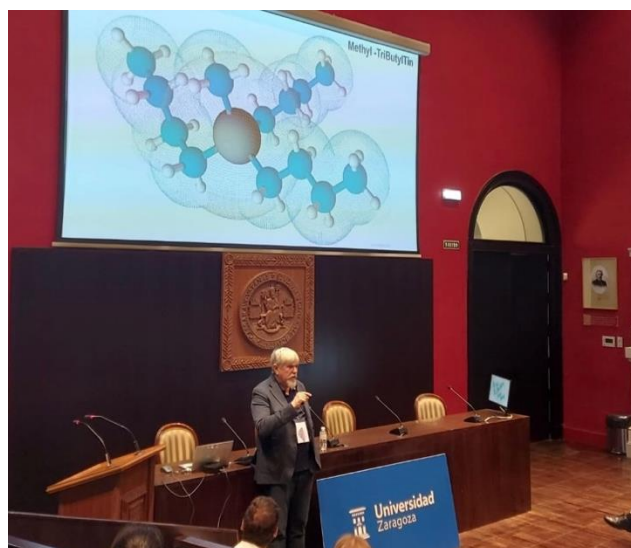


Fig. 1. El profesor Olivier Donard durante su conferencia plenaria.

Entre los trabajos de los que habló, destaca por ejemplo sus estudios de especiación de Sn, Hg y Se, tales como el estudio de la metilación del tributilestano y sus consecuencias, así como mecanismos de fraccionamiento mediante cromatografía, los cuales llevó a cabo en colaboración con investigadores españoles como la profesora Rosa del Carmen Rodríguez Martín-Doimeadios o el profesor Pablo Rodríguez González.

Olivier Donard también compartió su visión más actual de la especiación, destacando los estudios que se han llevado a cabo en los últimos años a través del proyecto MARSS. Entre ellos, mencionó el desarrollo de nueva fuente de nanoSIMS más potente, capaz de medir más elementos y sus isótopos que en versiones anteriores; estudios de *imaging* mediante TEM y nanoSIMS para estudiar la distribución del arsénico y otros elementos en algas; así como el estudio de migración de litio en baterías con ToF-SIMS. En este último caso, comentaba el profesor Donard que han observado que, con el tiempo de uso, la migración de especies en las baterías de litio no es homogénea, y por tanto estos estudios permiten conocer que ocurre y

desarrollar mejores baterías. Estas líneas de investigación responden a su visión del análisis de especiación químico: “Speciation is not only about understanding the reactivity, but to see it”.

En una visión de futuro de la Especiación Analítica, el profesor Donard planteó dos líneas principales: la bioinformática de grandes masas, y las marcas isotópicas para entender procesos (bio)químicos.

2. Comunicaciones orales

Las 9 comunicaciones orales presentadas se dividieron en dos sesiones. Durante la primera sesión, moderada por Elena Peña Vázquez y Francisco Laborda García, se presentaron 5 comunicaciones orales centradas en el estudio de diferentes especies de elementos en aplicaciones y estudios alimentarios y de salud (Fig. 2). Se presentaron trabajos sobre estudios de citotoxicidad y efectos en la salud de nanopartículas de Ti y Si presentes en alimentos, el efecto sinérgico de iones y nanopartículas de Ag con antibióticos, el estudio de la migración del Sb en bebidas embotelladas, estudios de especiación de Hg y Se en alimentos para evaluar su bioaccesibilidad y toxicidad, o la caracterización de nanopartículas en fluidos biológicos mediante espectrometría de masas.



Fig. 2. Comunicación oral presentada en la primera sesión de la Jornada de Especiación.

La segunda sesión de comunicaciones orales, coordinada por Ángeles Sahuquillo Estrugo y Beatriz Gómez Gómez, estuvo centrada en el análisis de especiación químico relacionado con aplicaciones y estudios medioambientales (Fig. 3). Se presentaron trabajos sobre el desarrollo de nuevos instrumentos para el análisis genérico de compuestos de oxígeno en muestras de derivados de petróleo, el análisis de especies de Hg en animales acuáticos, el estudio de bioaccesibilidad y biodisponibilidad de nanopartículas de Ag y Ti en algas marinas, o el estudio del metabolismo de especies de Se mediante trazadores isotópicos.

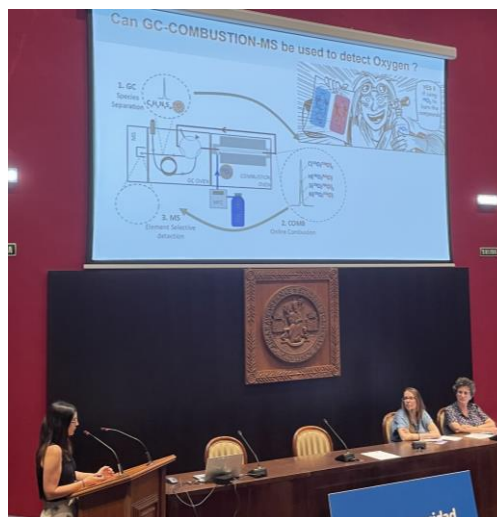


Fig. 3. Comunicación oral presentada en la segunda sesión de la Jornada de Especiación.

Una vez finalizada la última sesión de presentaciones orales, antes de comenzar la asamblea del grupo se entregó el premio a la presentación oral, patrocinado por la revista *Analyst* de la RSC, a la comunicación “Estrategias analíticas para el estudio de la actividad bactericida de iones plata y nanopartículas y sus efectos sinérgicos con antibióticos”, presentada por Isabel Abad Álvaro, de la Universidad de Zaragoza (Fig. 4).



Fig. 4. Isabel Abad, ganadora del premio a la mejor comunicación, durante su presentación oral.

En las comunicaciones orales presentadas se plasmó la coexistencia de dos tendencias marcadas en el análisis de especiación químico actual. Por un lado, sigue avanzándose en la investigación de especiación más “clásica” con desarrollos instrumentales y metodológicos empleando técnicas cromatográficas. Por otro lado, la especiación química de especies nanoparticuladas de elementos de interés ha crecido con el desarrollo de las técnicas de *single particle*-ICP-MS, presentándose varias comunicaciones muy interesantes en las que se estudia el impacto de estas especies en el medio ambiente y la salud.

3. Asamblea y actividades del Grupo de Especiación de la SEQA

Al finalizar la Jornada de Especiación tuvo lugar la asamblea del Grupo de Especiación de la SEQA. Esta asamblea, presidida por primera vez por la junta elegida en 2022, se hizo balance de las actividades realizadas por el Grupo de Especiación desde su elección.

En primer lugar, la puesta a punto del apartado del Grupo de Especiación en la nueva página web de la SEQA (<https://seqa.es/quienes-somos/grupo-especiacion/>) (Fig. 5). En esta web rediseñada, se encuentra información del grupo, incluyendo la composición de la junta, fotos y archivos de los eventos realizados por el grupo tales como congresos y jornadas, publicaciones y noticias, o enlaces de interés. También se informó sobre el nuevo correo electrónico de contacto del grupo (especiacion@seqa.es).



Fig. 5. Portada de la web del Grupo de Especiación de la SEQA.

También se informó sobre el nuevo sistema de inscripción al grupo. Para aquellas personas que se inscriban en la SEQA como socios, tienen ya la opción de seleccionar que quieren ser miembros del Grupo de Especiación. Para aquellos socios de la SEQA que quieran hacerse miembros del grupo, deberán enviar un correo al Grupo de Especiación y se les enviará un formulario web. Se invita además a todos los socios de la SEQA que deseen ser miembros del grupo o que quieran confirmar su membresía que escriban al correo anteriormente mencionado. La membresía es gratuita, el único requisito es ser socio de la SEQA.

A continuación, se informó de las publicaciones en la revista Actualidad Analítica de trabajos realizados por miembros del Grupo de Especiación y aquellos derivados de las Jornadas de Especiación 2022 de Oviedo. En el Número 79 se publicó el trabajo "Transformaciones metabólicas de nanopartículas de selenio por plantas y bacterias mediante la aplicación de una plataforma multitécnica" presentado por Gustavo Moreno Martín, ganador de premio a comunicación oral. En el Número 80 se publicaron la reseña de las jornadas, por la Sra. Presidenta del Grupo de Especiación hasta julio de 2022, M^a Carmen Barciela Alonso, y el trabajo de la comunicación plenaria presentada por Heidi Goenaga Infante "A metrological approach towards absolute quantification of protein biomarkers of metal metabolism disorders". Finalmente, en el Número 81 se publicó el trabajo "Determinación de especies de Se y Hg en pescados de

elevado consumo mediante HPLC-ICP-MS y HPLC-ESI-MS" por Tamara Fernández Bautista, Beatriz Gómez-Gómez, Emma García-Lor, Teresa Pérez-Corona y Yolanda Madrid. Otra de las actividades de la que se informó fue la realización de Seminarios Web por parte del Grupo de Especiación. Estos seminarios, de 2 horas de duración, se llevaron a cabo mediante la plataforma Microsoft Teams y estuvieron abiertos a todos los socios SEQA, previa inscripción gratuita mediante un cuestionario online. Además, se emitieron certificados a los asistentes que lo solicitasen, ya que al tener una duración de 2 horas pueden ser válidos para las escuelas de doctorado.

Hasta la fecha se han realizado dos seminarios web (Fig. 6). El primero de ellos trató sobre el "Aseguramiento de la Calidad de los Resultados en Análisis de Especiación Química", el cual fue impartido en diciembre de 2023 por la profesora Ángeles Sahuquillo Estrugo, de la Universidad de Barcelona. El segundo seminario tuvo lugar en abril de 2024, trató sobre el uso del *single particle*-ICP-MS en el análisis de especiación, y fue impartido por el profesor Francisco Laborda García, de la Universidad de Zaragoza.



Fig. 6. Carteles de los Seminarios Web organizados por el Grupo de Especiación.

Ambos seminarios tuvieron un gran éxito, con un elevado número de asistentes, cercano a la centena. Las presentaciones de ambos seminarios pueden encontrarse en la sección correspondiente de la página web del grupo (Fig. 7). La intención del Grupo de Especiación es la realización de 2 seminarios al año. Por supuesto, se invita a todos los miembros del grupo y a todos los socios de la SEQA que estén interesados a escribir a la dirección de correo electrónico del grupo si tienen interés particular en algún tema relacionado con la Especiación Química sobre el que hacer un seminario. También cabe la posibilidad de proponer (y proponerse) como ponente de un seminario.



Fig. 7. Sección de Seminarios Web en la página web del Grupo de Especiación de la SEQA.

Finalmente, se comunicó a los miembros del grupo durante la asamblea de la apertura de un perfil del Grupo de

Especiación (@EspeciacionSEQA) en la red social x.com - antes conocido como Twitter-, en el cual se informará de actividades y eventos relacionados con el grupo y sus miembros (Fig. 8). Se invita a todos los miembros a ponerse en contacto por correo electrónico para compartir cualquier información (eventos, publicaciones, etc.) que consideren relevante y que deseen que se difunda mediante la página web y/o las redes sociales.



Fig. 8. Perfil de la red social X.com del Grupo de Especiación de la SEQA.

4. Agradecimientos

Quisiera agradecer a la organización de la reunión SEQA, tanto al comité local liderado por Javier Galbán, como a la SEQA, y en particular a su presidenta María Montes Bayón, por el apoyo para la celebración de estas VIII Jornadas de Especiación. Agradecer especialmente el apoyo económico de la empresa Perkin Elmer y el patrocinio de la Royal Society of Chemistry. Cabe un agradecimiento especial a todos los ponentes y asistentes de las jornadas, que volvieron a ser un éxito.

Para finalizar, os invito a uniros al Grupo de Especiación de la SEQA, y animaros a participar en los Seminarios Web, tanto si tenéis alguna idea sobre una temática que se quiera dar, como si queréis impartirla. Para cualquier cuestión, no dudéis en contactar con el grupo (especiacion@seqa.es).

Un cordial saludo
Francisco Calderón Celis
Presidente del Grupo de Especiación

