

# Aplicación de la espectrometría de masas de alta resolución para la identificación de compuestos fenólicos en macrófitas comestibles

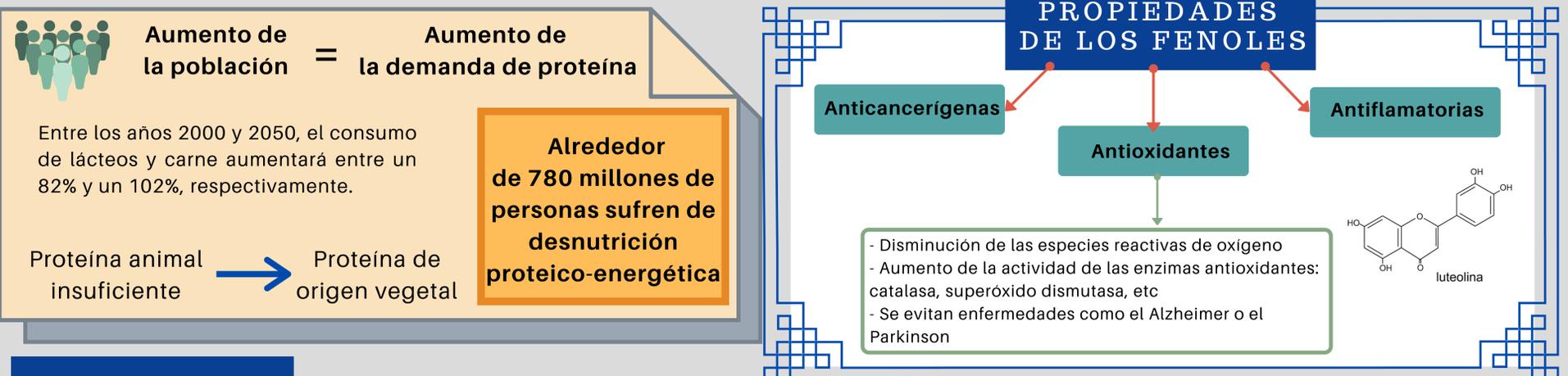
M. GRANADOS POVEDANO, I. DOMÍNGUEZ PÉREZ Y A. GARRIDO-FRENICH

Grupo de investigación de Química Analítica de Contaminantes, Departamento de Química y Física, Facultad de Ciencias Experimentales, Universidad de Almería, E04120 Almería (España); mgp794@inlumine.ual.es



## INTRODUCCIÓN

En la actualidad, la población experimenta una preocupación por la **seguridad alimentaria y el valor nutricional** de los alimentos que consume. Según los expertos, es recomendable aumentar el consumo de frutas y verduras para alcanzar dietas saludables. La dieta basada en vegetales es un movimiento reciente, pero en continuo crecimiento, donde se incluye a los vegetarianos. Siguiendo esta idea, el consumidor demanda alimentos que le aporten compuestos beneficiosos para su salud, como es el caso de los compuestos fenólicos. Éstos están presentes en los productos de origen vegetal y a ellos se les otorga, por su elevado carácter antioxidante, distintos beneficios para la salud humana.<sup>1</sup> Los **compuestos fenólicos** son metabolitos secundarios que pueden actuar sobre la actividad celular y los mecanismos fisiológicos de los individuos.<sup>2</sup>



## METODOLOGÍA

### MÉTODO DE EXTRACCIÓN



1. Pesar 1 g de muestra
2. Adicionar 3 mL de 8:2 Metanol/H<sub>2</sub>O (v/v) pH 4
3. Homogenizar con Politron
4. Centrifugar 10 min 5000 rpm
5. Recoger sobrenadante
6. Filtrar 1,5 mL con filtro de nylon 45 µm
7. Introducir en viales

### CONDICIONES CROMATOGRÁFICAS

- Columna: Hypersil GOLD<sup>TM</sup> (C18, 2,1 mm x 100 mm y 1,9 µm)
- Volumen de inyección: 10 µL
- Fase Móvil: (eluyente A) ácido fórmico (0,1%) y formiato amónico (4 mM) a pH 3 y (eluyente B) metanol
- Temperatura: 25 °C
- Flujo de fase móvil: 0,2 mL/min

### CONDICIONES ESPECTROMÉTRICAS

- Ionización: HESI (+/-)
- Analizador: Exactive Orbitrap
- Temperatura del capilar: 300 °C
- Voltaje del capilar: 4 kV
- Voltaje de entrada: -5 kV
- Energía de colisión: 30 eV
- Modos de trabajo: Full Scan y AIF

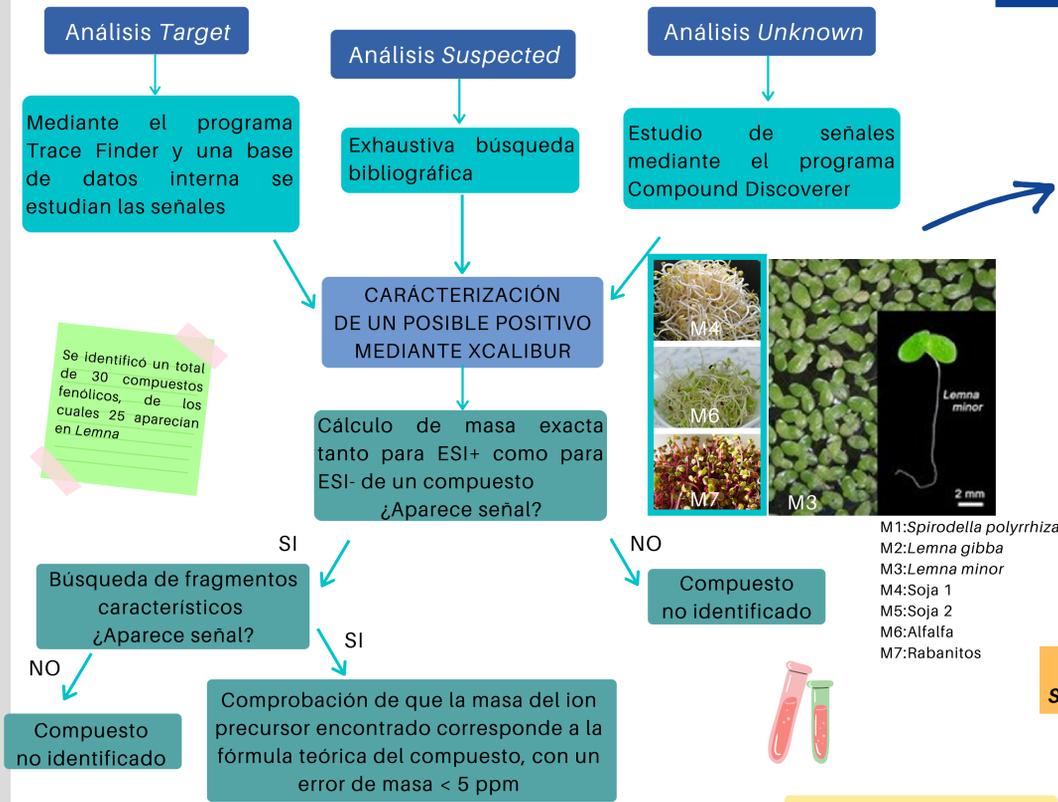
## RESULTADOS

### Resultados globales

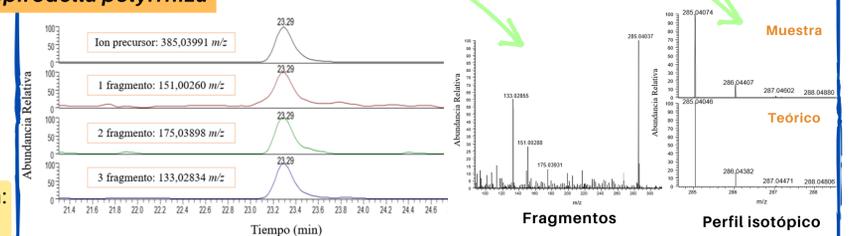
Nombre del compuesto	M1	M2	M3	M4	M5	M6	M7
Acido 4-metoxicinámico <sup>c</sup>							
Sinapina <sup>b</sup>							
Escoparona <sup>c</sup>							
Lucidumósido C <sup>c</sup>							
Daidzina <sup>a</sup>							
Acido p-cumárico <sup>a</sup>							
Cianidina 3-glucósido <sup>b</sup>							
Luteolina-6-C-glucósido <sup>a</sup>							
Vitexina <sup>a</sup>							
Apigetrin <sup>c</sup>							
Acido salicílico <sup>b</sup>							
Isovitexina <sup>a</sup>							
Luteolina-7-O-glucósido <sup>a</sup>							
Quercitrina <sup>c</sup>							
Naringina <sup>b,c</sup>							
Quercetina-3-O-rutinósido <sup>c</sup>							
Rhoifolin <sup>c</sup>							
Acido cinámico <sup>c</sup>							
Hesperidina <sup>a,c</sup>							
Baicalinc							
Kaempferol-3-O-rutinósido <sup>a,c</sup>							
Kaempferol-3-O-glucósido <sup>a</sup>							
Prunetrin <sup>b</sup>							
Naringenina <sup>a,c</sup>							
Luteolina <sup>a</sup>							
Hesperetina <sup>a</sup>							
Apigenina <sup>a</sup>							
Genisteína <sup>a</sup>							
Cumestrol <sup>a</sup>							
Licoriso flavona A <sup>c</sup>							
N.º compuestos detectados:	22	20	18	22	19	19	16

Verde: detectado; Rojo: no detectado; <sup>a</sup>Compuesto target; <sup>b</sup>Compuesto suspected y <sup>c</sup>Compuestos unknown

### Workflow Global



### Luteolina en Spirodella polyrrhiza



## CONCLUSIONES

- Gracias a la metodología empleada se han identificado compuestos fenólicos no descritos con anterioridad en estas matrices. Además, se presenta un estudio pionero en el análisis de tres especies de macrófitas del género *Lemna*.
- El uso de UHPLC-Orbitrap-MS junto a la combinación de los análisis *target*, *suspected* y *unknown* han permitido ampliar el abanico de búsqueda e identificación de compuestos fenólicos en las matrices abordadas.

1. Yi, J.; Qu, H.; Wu, Y.; Wang, Z.; Wang, L. Study on Antitumor, Antioxidant and Immunoregulatory Activities of the Purified Polyphenols from Pinecone of Pinus koraiensis on Tumor-Bearing S180 Mice in Vivo. Int. J. Biol. Macromol. 2017, 94, 735-744.

2. de la Rosa, L. A.; Moreno-Escamilla, J. O.; Rodrigo-García, J.; Alvarez-Parrilla, E. Phenolic Compounds. In Postharvest Physiology and Biochemistry of Fruits and Vegetables; Elsevier, 2019; 253-271.