# Caracterización de Compuestos Fenólicos en Sub-productos de Variedades de Mango (Mangifera indica L.) Cultivados en España Mediante HPLC-ESI-QTOF-MS

De Ancos, B.<sup>1</sup>, Sánchez-Moreno, C.<sup>1</sup>, Gómez, R.<sup>1</sup>, Colina-Coca, C.<sup>1</sup>, González, M.<sup>2</sup>, Lobo, M.G.<sup>3</sup>, Dorta, E.<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Dpto. de Caracterización, Calidad y Seguridad, Instituto de Ciencia y Tecnología de Alimentos y Nutrición, Consejo Superior de Investigaciones Científicas (ICTAN-CSIC), 28040-Madrid, España, e-mail: ancos@ictan.csic.es

<sup>2</sup>Dpto.de Análisis Instrumental y Química Ambiental, Instituto de Química Orgánica, Consejo Superior de Investigaciones Científicas (IQOG-CSIC),28006-Madrid, España

<sup>3</sup>Dpto. de Fruticultura Tropical, Instituto Canario de Investigaciones Agrarias, 38200-La Laguna, Tenerife, Islas Canarias, España

# INTRODUCCIÓN

Los sub-productos (piel, semillas) obtenidos del procesado del mango contienen compuestos fenólicos bioactivos. La caracterización de la composición fenólica de dichos sub-productos es un paso esencial para su utilización como ingredientes funcionales

## **OBJETIVO**

Caracterización de la composición fenólica de la piel y semillas de tres variedades de mango (Keitt, Sensation y Gomera 3) cultivados en las Islas Canarias (España), obtenidos por distintos procesos de extracción

# MATERIAL Y MÉTODOS

#### Preparación muestras

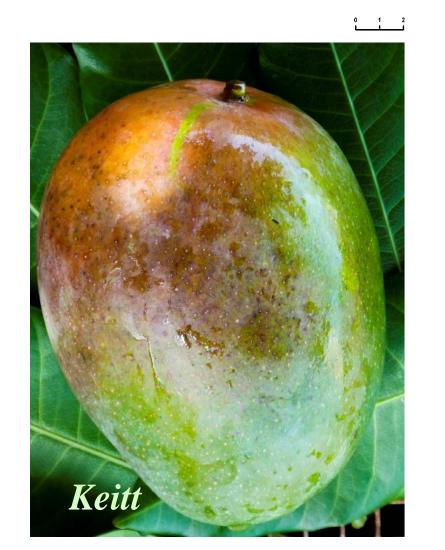






Foto 1. Variedades de mango utilizadas en este estudio

Separación manual (Piel y Semilla) Liofilización (50 mPa, -40ºC) Extracción Condiciones Óptimas

#### Extracción

#### **Extracción Asistida por Microondas**



**PIEL** 

Extracción A (1:50, p:v)

Extracción B (1:10, p:v)

Etanol: Agua (50:50, v:v)

**75 ºC** 

**HPLC-ESI-QTOF** 

Peso: Volúmen

- •Tiempo de Extracción (60 min)
- Procesos de extracción (3)
- •Contenido de agua (50%)
- •pH del agua (3)
- Potencia 500w

#### **SEMILLA**

Acetonal: Agua (50:50, v:v) 50 °C

Peso: Volúmen

Extracción C (1:30, p:v)

### Proceso de Purificación e Idenificación

Concentrar extracto crudo (40 °C)

Columna de Sephadex LH-20

Recuperación fenoles

**Evaporación Sequedad** 

Redisolver, Filtrary
Almacenar-80 °C

#### **HPLC-ESI-QTOF**

Fase móvil: Ácido fórmico 1% en agua Milli-Q (A) y Ácido fórmico 1% en acetonitrilo (B) Tiempo: 70 min

Vol inyección: 10 μL Detector: 280,320,360nm

**Condiciones:** 0 min, 100% A; 15 min, 75% A; 30 min, 70% A; 70min, 20% A; 65min, 0%A; 70min, 100% A

## RESULTADOS Y DISCUSIÓN

Tabla 1. Compuestos identificados en piel y semilla de mango de las tres variedades en estudio

Pico	Identificación	Muestra**	HPLC-ESI-QTOF				
			Tr	[M-H] <sup>-</sup>	Iones Fragmentos Mayoritarios m/z (%)	FM	Score
1	Galoil glucosa	KSG	8.3	331.0671	169(100), 151(41), 89(19)	$C_{13}H_{16}O_{10}$	92.93
2	Ácido Gálico	KSG	9.2	169.0142	125(100), 79(26), 69(13)	$C_7H_6O_5$	98.83
3	Teogalin	KSG	10.8	343.0590	192(9), 91(100)	$C_{14}H_{16}O_{10}$	90.18
4	Maclurin-3-C-β-D-glucósido	KPB, GP, KSC, SSC, GSC	14.3	423.0945	333(19), 303(100), 223(7), 193(44), 169(11)	$C_{19}H_{20}O_{11}$	Barreto <sup>∆</sup>
5	Di-galoil-glucosa	KP, SPB, GP	15.8	483.0793	169(100), 125(10)	$C_{20}H_{20}O_{14}$	95.52
6	Di-galoil-glucosa	KP, SPB, GP	16.4	483.0793	169(100), 125(10)	$C_{20}H_{20}O_{14}$	95.52
7	Metil galato	KSG	17	183.0299	124(100), 78(6)	C <sub>8</sub> H <sub>8</sub> O <sub>5</sub>	96.93
8	Maclurin 3-C(2-0-galoil)β-D-glucósido	KP, SPA, GP ,KSC, SSC, GSC	17.7	575.1042	423(34), 407(30), 303(100), 285(80), 193(26), 169(34)	C <sub>26</sub> H <sub>24</sub> O <sub>15</sub>	91.12
9	Iriflophenone 3-C(2-0-galoil)β-D-glucósido	KP, GP, KS	21.3	559.1109	407(63), 389(13), 317(21), 287(100), 269(57), 245(9), 169(56)	C <sub>26</sub> H <sub>24</sub> O <sub>14</sub>	Barreto∆
10	Maclurin 3-C(2,3-di-O-galloyl)β-D-glucósido	KSG	21.9	727.1152	575(100), 407(9), 303(8), 169(7)	$C_{33}H_{28}O_{19}$	91.33
11	Etil galato	KSG	24.2	197.0455	169(13), 125(51), 124(100)	$C_9H_{10}O_5$	94.96
12	Mangiferina	KP, SPA, GP ,KSC ,SSC , GSC	25	421.0776	331(88), 301(100), 271(12), 183(6)	C <sub>19</sub> H <sub>18</sub> O <sub>11</sub>	96.37
13	Metil galato éster	KSG	27.7	335.0409	183(100), 124(8)	$C_{15}H_{12}O_9$	97.44
14	Tetra-O-galoil-glucósido	KSG	35.8	787.0999	635(39), 617(100), 465(16), 300(5), 169(16)	$C_{34}H_{28}O_{22}$	Barreto <sup>∆</sup>
15	Quercetin-3-O-diglicósido	KP, SP, GP	36.4	595.1305	595(100), 301(20), 300(74)	$C_{26}H_{28}O_{16}$	94.91
16	Metil galato éster	KSG	38.7	335.0409	183(100), 124(8)	$C_{15}H_{12}O_9$	97.44
17	Quercetin-3-O-glucósido (Isoquercitrin)	KSG	39.7	463.0882	301(72), 300(100), 179(6), 151(7)	$C_{21}H_{20}O_{12}$	90.28
18	Ácido Elágico	KSG	40	300.9990	300(100), 257(5), 164(7), 145(5)	$C_{14}H_6O_8$	98.71
19	Quercetin-3-O-galactósido	KSG	40.3	463.0882	301(72), 300(100), 179(6), 151(7)	$C_{21}H_{20}O_{12}$	90.28
20	Ácido valoneico dilactona	KSG	41.5	469.0524	433 (62), 301 (100), 169 (48)	$C_{24}H_{22}O_{10}$	Meyers <sup>∆</sup>
21	Penta-O-galoil-glucósido	KSG	41.5	939.1109	787(83), 769(100), 617(16), 770(28)	$C_{41}H_{32}O_{26}$	Barreto <sup>∆</sup>
22	Quercetin pentósido	KP, SP, GP	41.7	433.0776	301(82), 300(100)	$C_{20}H_{18}O_{11}$	89.71
23	Quercetin pentósido	KP, SP, GP	42.0	433.0776	301(82), 300(100)	$C_{20}H_{18}O_{11}$	89.71
24	Quercetin-3-O-ramnósido (Quercitrin)	KP, SP, GP	42.5	447.0933	301(97), 300(100), 285(31), 284(24), 255(8), 197(12)	C <sub>21</sub> H <sub>20</sub> O <sub>11</sub>	93.36
25	Quercetin-3-O-rutinósido	KSG	42.8	609.1813	302(19), 301(100), 169(6)	$C_{27}H_{30}O_{16}$	90.78
26	Quercetin pentósido	KP, SP, GP	43.0	433.0776	301(82), 300(100)	C <sub>20</sub> H <sub>18</sub> O <sub>11</sub>	89.71
27	Derivado de la ramnetina	KSG	44.1	545.0583	477(100), 315(29), 314(29), 169(27)	$C_{24}H_{18}O_{15}$	
28	Etil 2,4-dihidroxi-3-(3,4,5- trihidroxibenzoil)oxibenzoato	KSG	45.8	349.0576	198 (12), 197(100), 169(6), 124(5)	C <sub>16</sub> H <sub>14</sub> O <sub>9</sub>	91.35
29	Etil p-trigalato	KP, SPB, GP	50	501.0691	349(16), 197(100)	$C_{23}H_{18}O_{13}$	86.69
30	Ramnetina hexósido	KP, SP, GP	50.2	477.1038	315(90), 314(100), 299(16), 169(12)	$C_{22}H_{22}O_{12}$	93.91

\*\*KSG, extractos de piel y semilla de mango de las tres variedades; KP, GP, SP, extractos de piel de mango de las variedades "Keitt", "Gomera 3" y "Sensation", respectivamente; KPB, SPB extractos piel de mango variedad "Keitt" y "Sensation" obtenidos con la extracción B, respectivamente; SPA, extractos piel de mango variedad "Sensation" obtenidos con la extracción A; KSC, SSC, GSC, extractos de semilla de mango de las variedades "Keitt", "Sensation" y "Gomera 3", respectivamente. **Tr**, Tiempo de retención; **FM**, Fórmula Molecular; **Score**, porcentaje de proximidad entre la fórmula molecular generada por el software Masshunter con la masa exacta y el patrón de distribución isotópica; Δ Autores que describen el compuesto

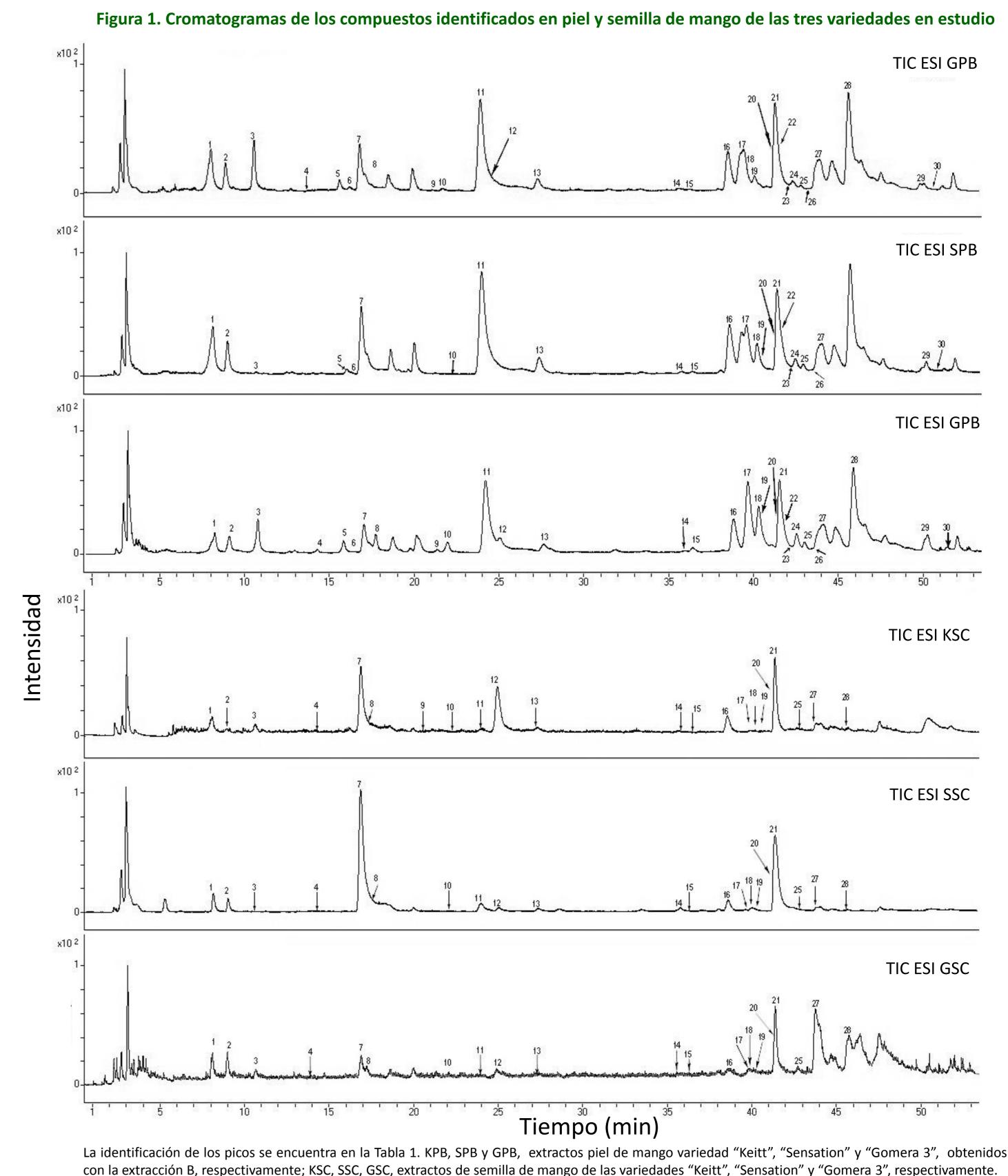
# 5 grupos principales

- Galatos y Galotaninos Benzofenonas
- FlavonoidesXantonas
- Ácidos elágico y Derivados

- Mayoritarios
- Galato de etilo
   Galato de metilo
- 2,4-dihidroxi-3(3,4,5)trihidroxibenzoil) oxibenzoato de etilo
- Penta-O-galloil-glucósido

# CONCLUSIÓN

Se puede concluir que la metodología utilizada ha permitido separar e identificar los compuestos fenólicos de los sub-productos de mango. La extracción selectiva permite obtener extractos enriquecidos en determinados compuestos fenólicos en función del tipo de ingrediente funcional que se quiera diseñar.



## **AGRADECIMIENTOS**

Este trabajo ha sido financiado por el proyecto RTA2006-00187 del INIA, el proyecto AGL2010-15910 (subprograma ALI) y parcialmente por el proyecto Consolider-Ingenio 2010, FUN-*C*-FOOD, CSD2007-00063. Eva Dorta agradece al INIA la concesión de la beca predoctoral