

# Instrumentos para Food-ómica

Ricardo López

Vicente Ferreira

17 de Enero de 2017



Instituto Universitario de Investigación Mixto  
**Agroalimentario de Aragón**  
**Universidad** Zaragoza



# ¿Qué queremos hacer?

Ser capaces de abordar de manera integral estudios de metabolómica en sistemas alimentarios



Identificar inequívocamente los metabolitos y proteínas que los estudios anteriores nos indiquen como críticos



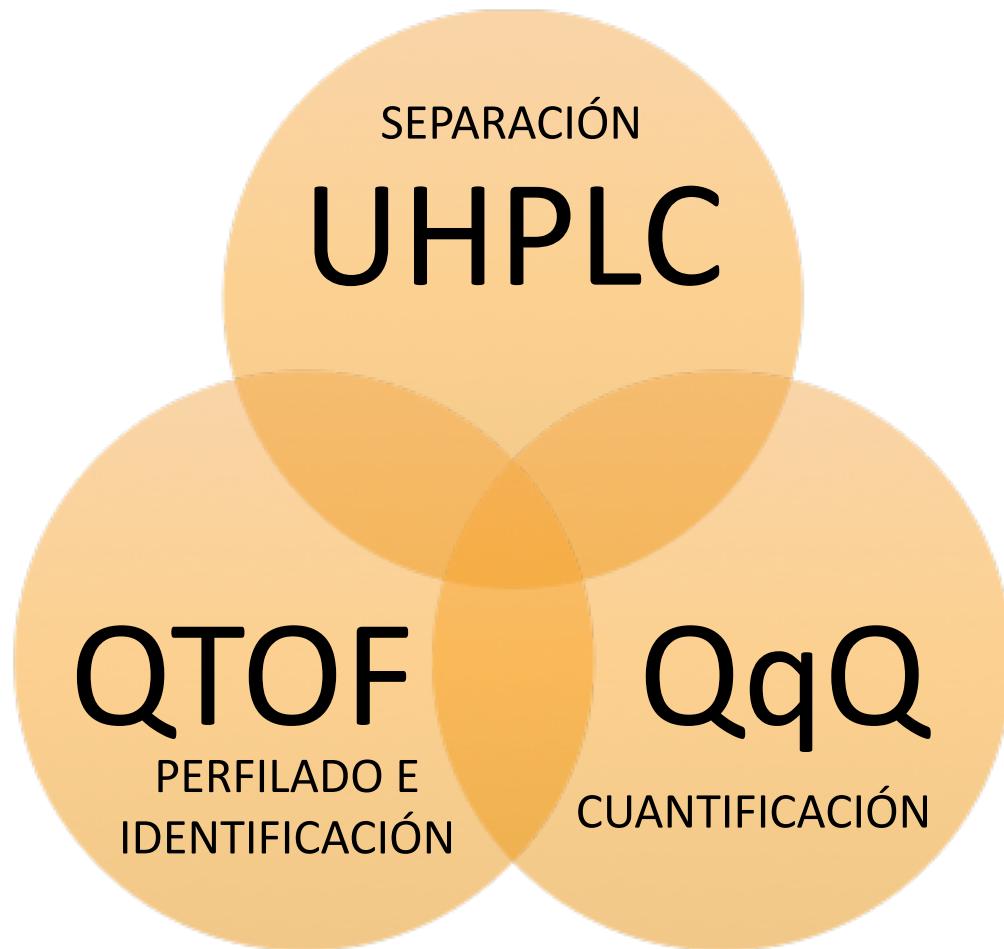
Cuantificar un amplio rango de metabolitos en amplios rangos de concentraciones en matrices alimentarias



Caracterizar perfiles y estructurar rutas metabólicas

# Plataforma Analítico-Foodómica

## INSTRUMENTOS



## PERSONAL



## SOFTWARE



# UHPLC

Permite usar las columnas más eficientes del mercado (pequeño tamaño partícula → altas presiones):

- Mejor acoplamiento para MS
- Caudales más pequeños
- Mayor rapidez manteniendo calidad separación



# UHPLC

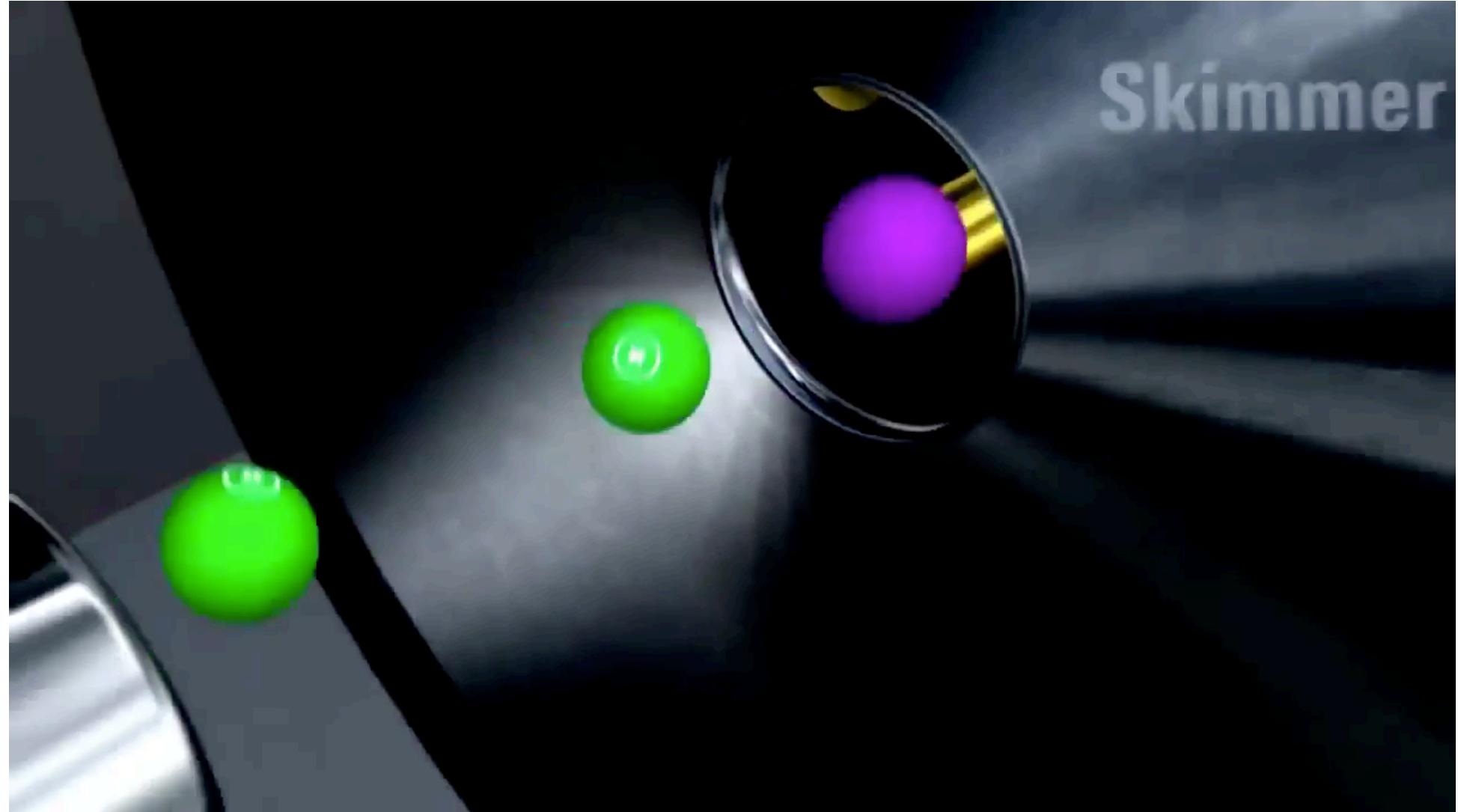


- Cada sistema MS requiere uno independiente
- Un UHPLC adicional con detector diode-array es conveniente para desarrollo de métodos y dereplicación

# Triple cuadrupolo (QqQ)

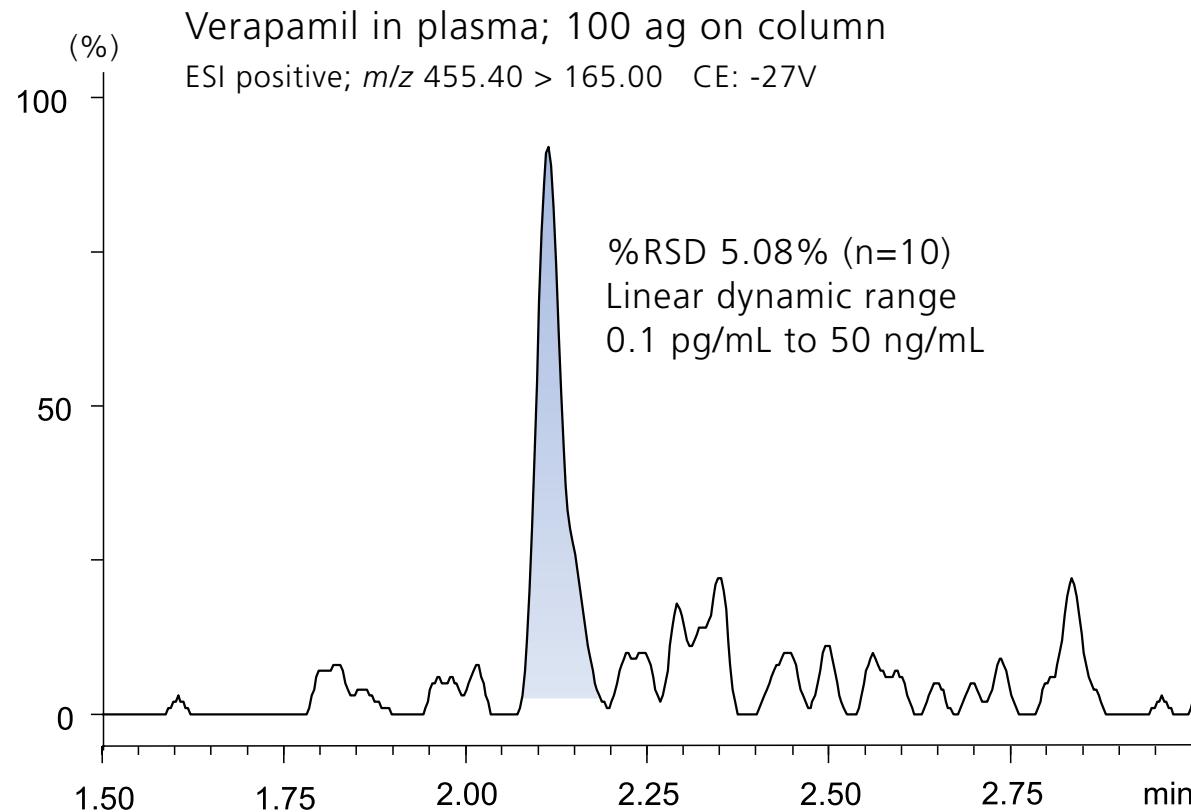


# Triple cuadrupolo (QqQ)



# QqQ especificaciones

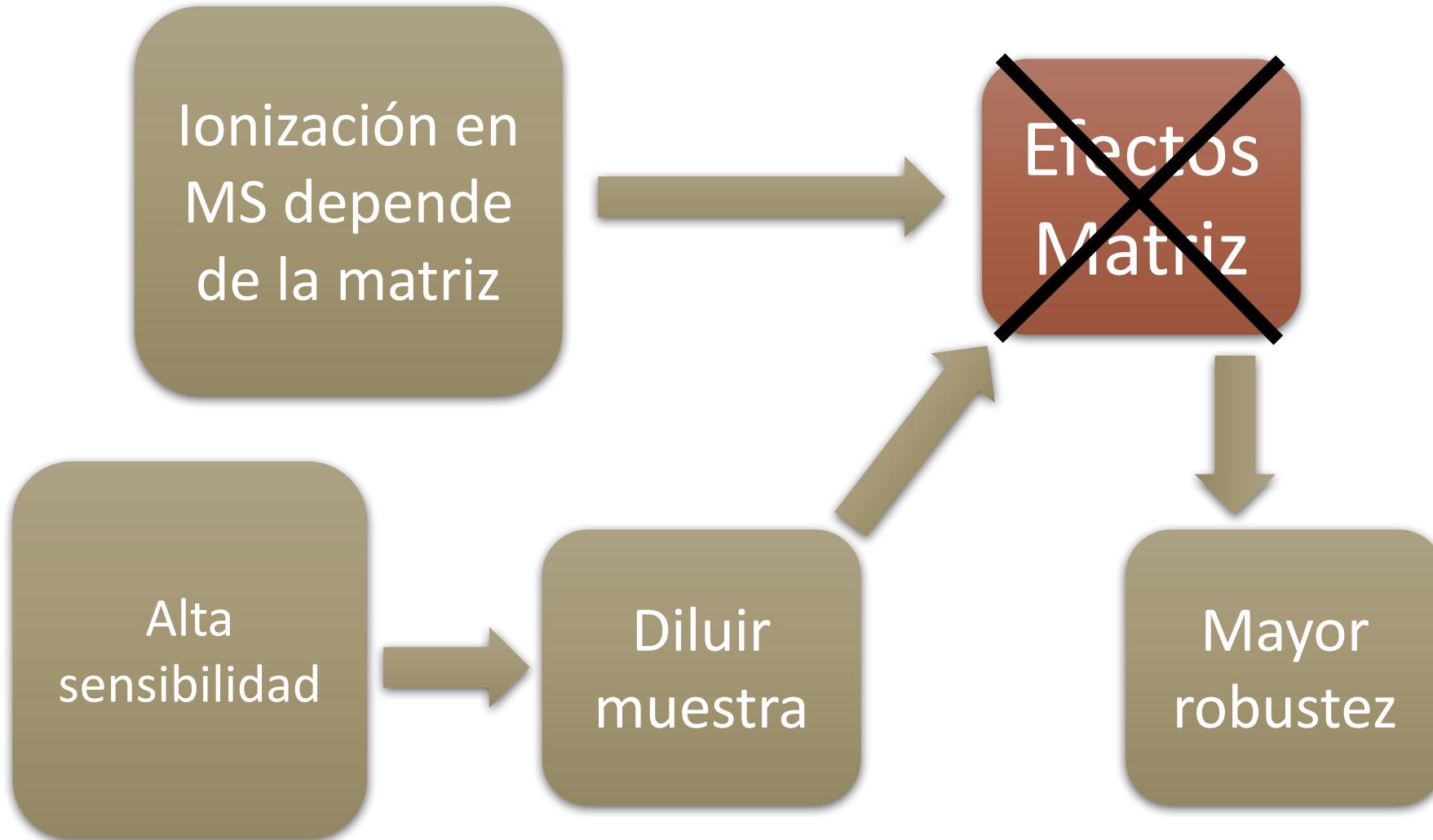
- Triple cuadrupolo de MUY alta sensibilidad
  - Aprox. 100 ag en columna (pg/L)



# ¿Por qué muy alta sensibilidad?

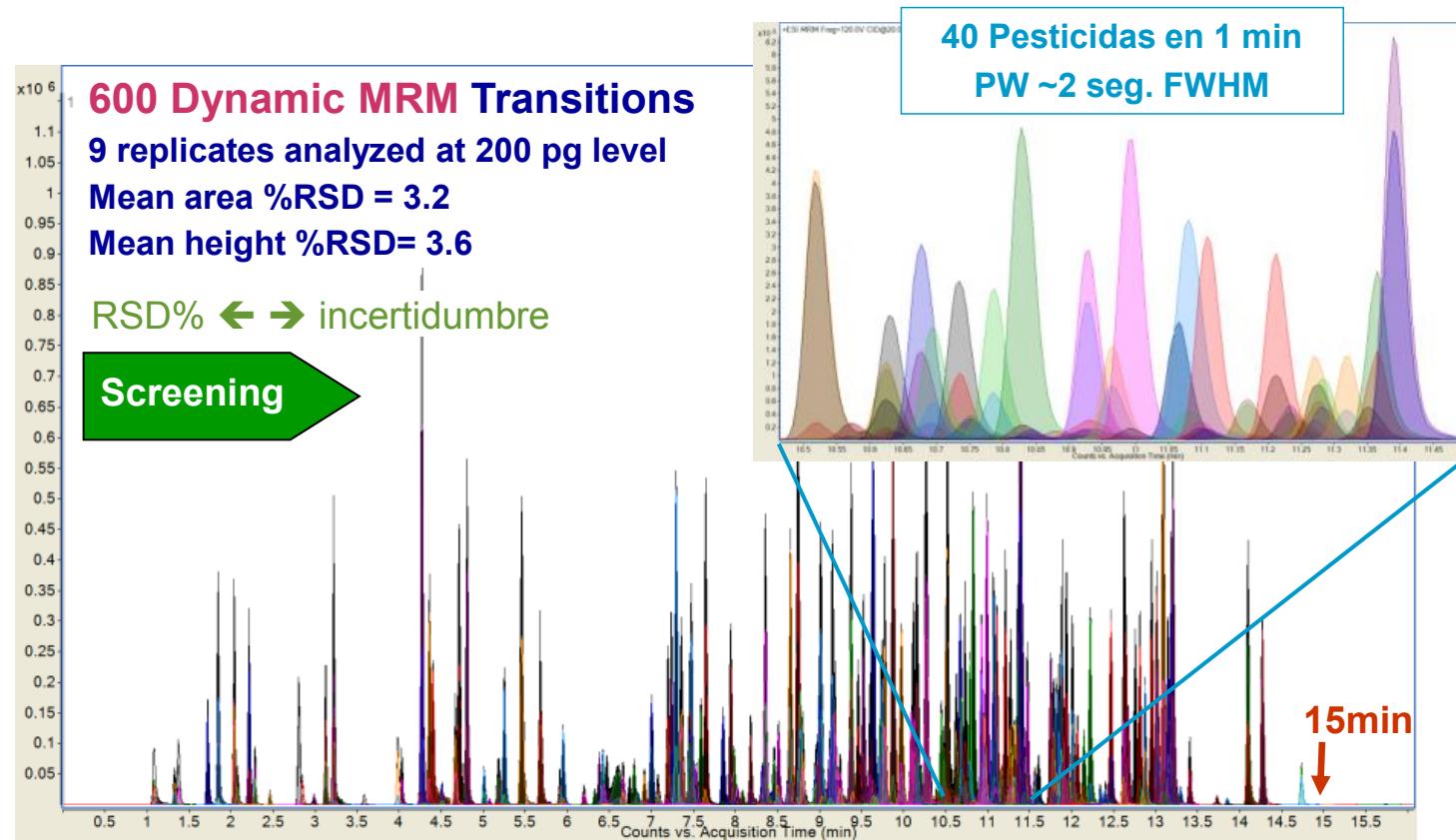
- Para determinar bajas concentraciones
  - Fitotoxinas, micotoxinas ( $\mu\text{g/kg}$ )
  - Precursores cisteínicos ( $\mu\text{g/L}$ )
  - Pesticidas ( $\mu\text{g/L}-\text{ng/L}$ )
  - Dioxinas ( $\text{ng/kg}$ )
  - ...

# ¿Por qué muy alta sensibilidad?



# QqQ prestaciones

- Métodos multiresiduo con >100 analitos detectados simultáneamente



# QqQ: Cuantificación de compuestos diana conocidos

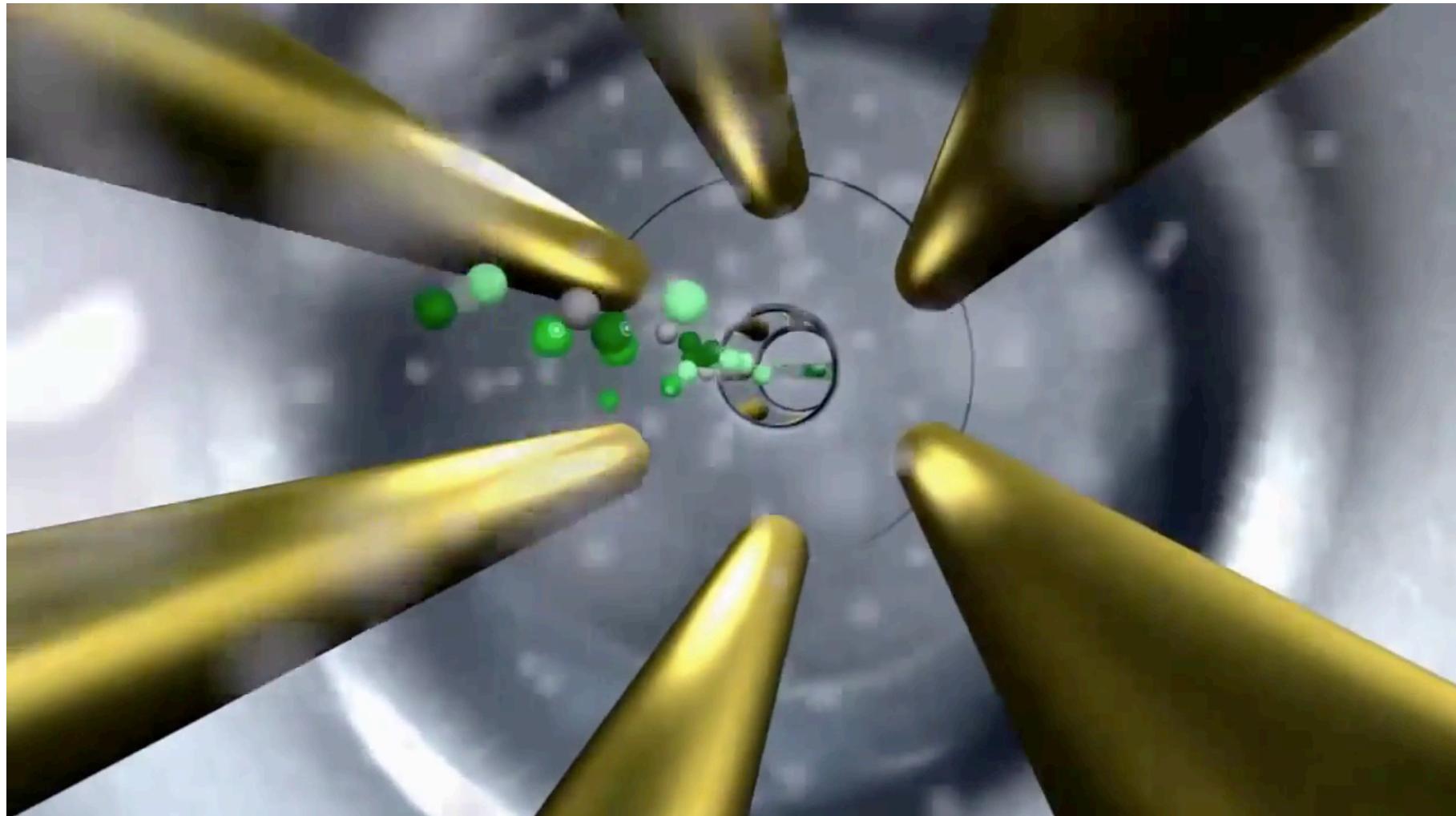
- Pesticidas
- Esteroides
- Antioxidantes
- Agentes antimicrobianos
- Precursores
- Vitaminas
- Oligosacáridos
- Péptidos, proteínas
- Micotoxinas
- Famacocinéticas



# Cuadrupolo-Tiempo de Vuelo (QTOF)

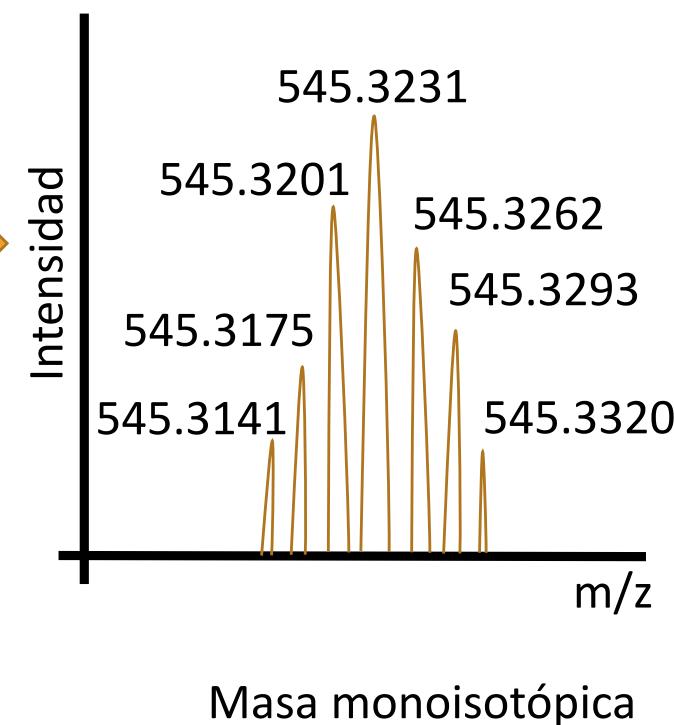
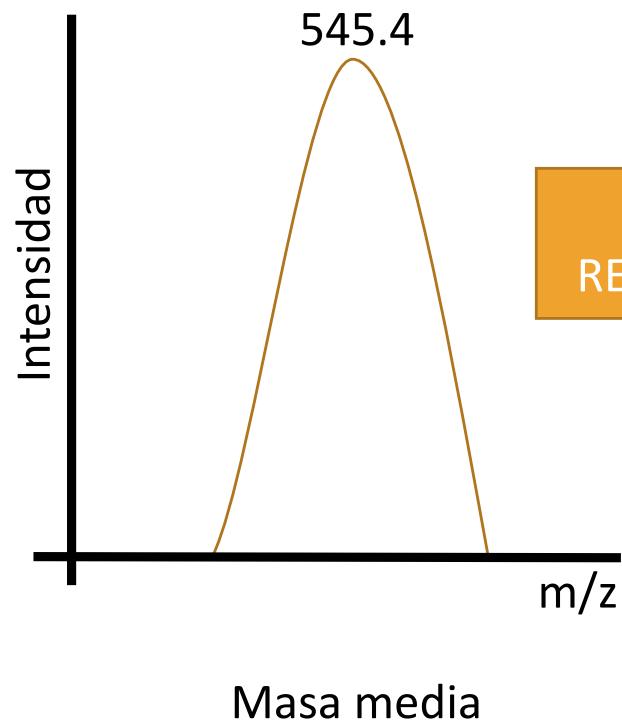


# Cuadrupolo-Tiempo de Vuelo (QTOF)



# QTOF Prestaciones

- Masa exacta (<5 ppm exactitud de masa)



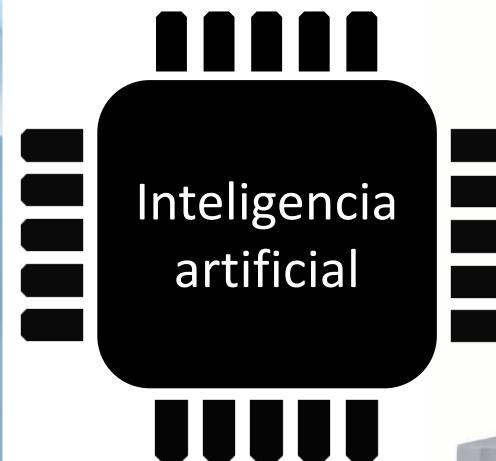
# QTOF Prestaciones

- Velocidad 20-50 espectros/s
- Sensibilidad (peor que QqQ)
- **Identificación** mediante masa exacta, deconvolución isotópica, iones precursores

Masa medida	Precisión	Posibles formulas moleculares
545.4	0.1	2272
545.40	0.01	171
545.400	0.001	18
545.4000	0.0001	1

# QTOF Prestaciones

- Posibilidad de incorporar sistemas de movilidad iónica para diferenciar isómeros
- Imprescindible apoyo de software y bases de datos



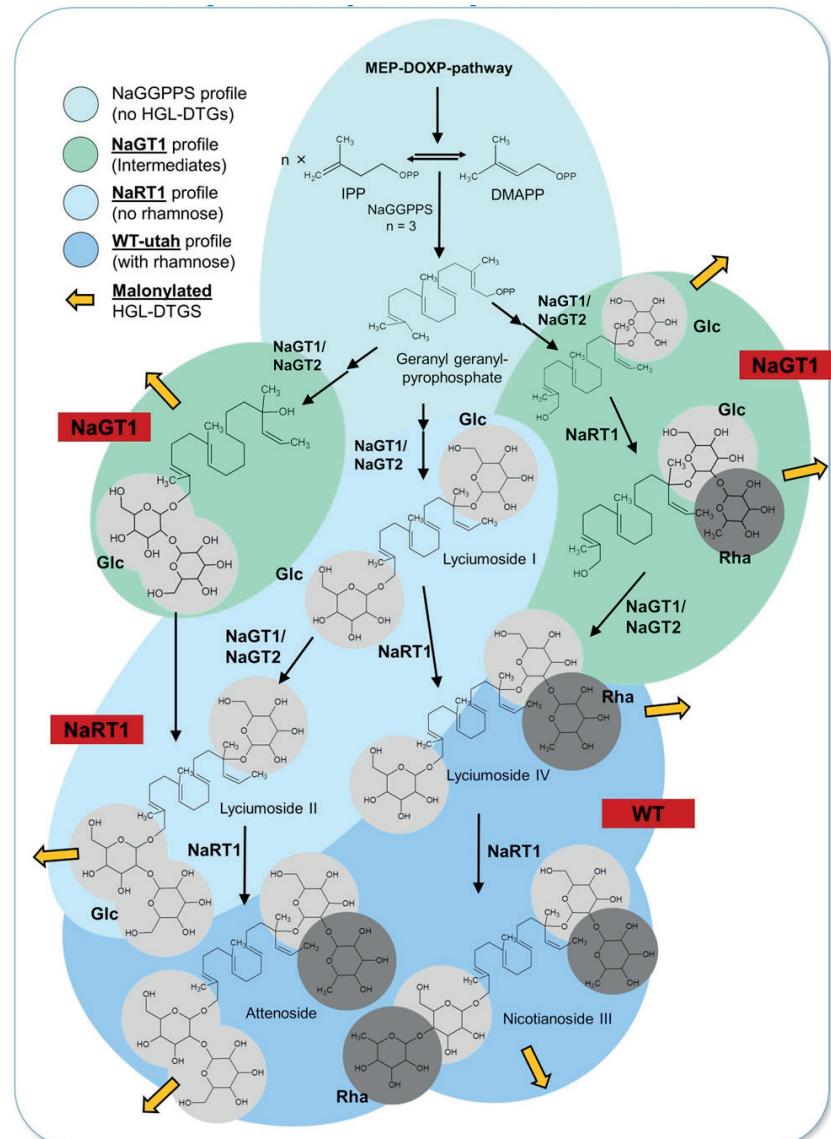
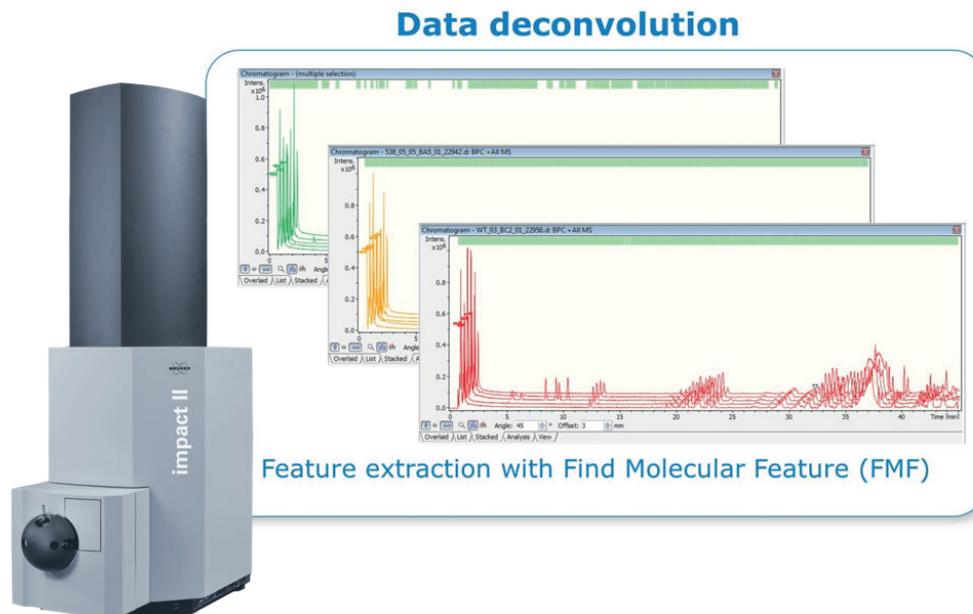
# QTOF Prestaciones

- Imprescindible apoyo de software y bases de datos:
  1. Sistemas de alineamiento y deconvolución de señal
  2. Procesado de señal para identificación de perfiles (non-target metabolomics)
  3. Confirmación estadística de perfiles
  4. Propuesta rápida de fórmula molecular y estructura química probable
  5. Propuesta de fragmentación MS/MS
  6. Consulta rápida bases de datos externas
  7. Establecimiento de rutas metabólicas



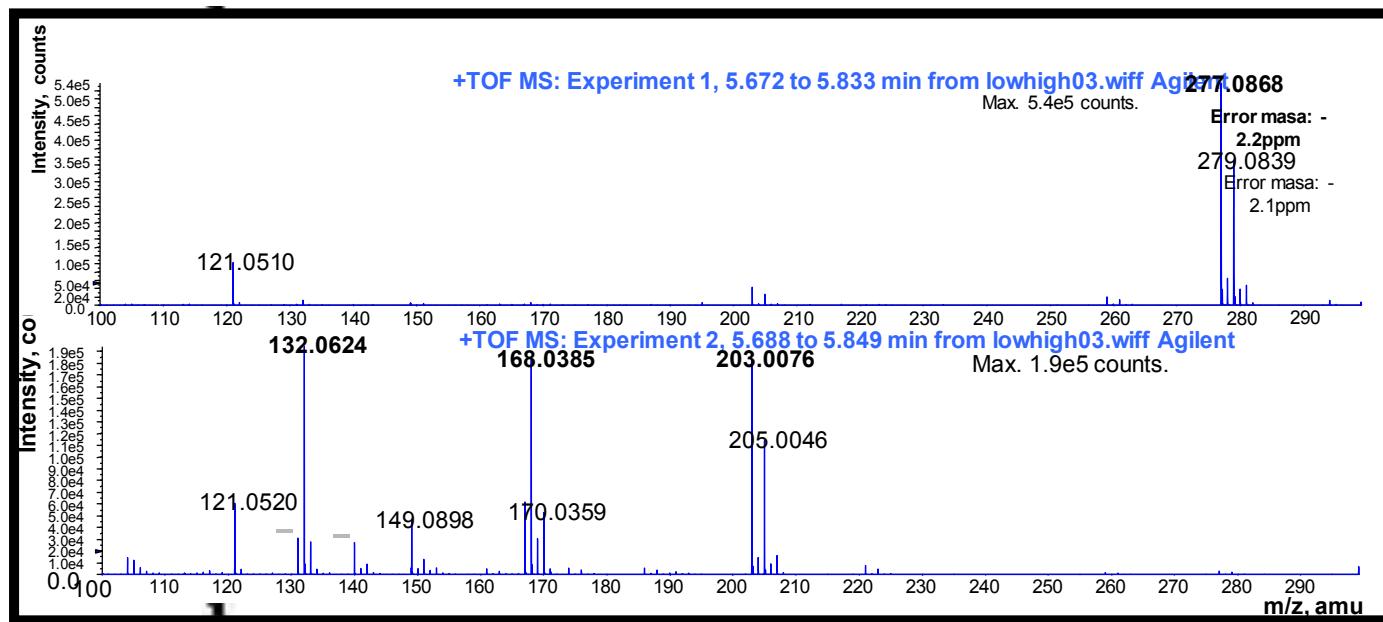
# Aplicaciones QTOF

- Identificación automática en rutas metabólicas



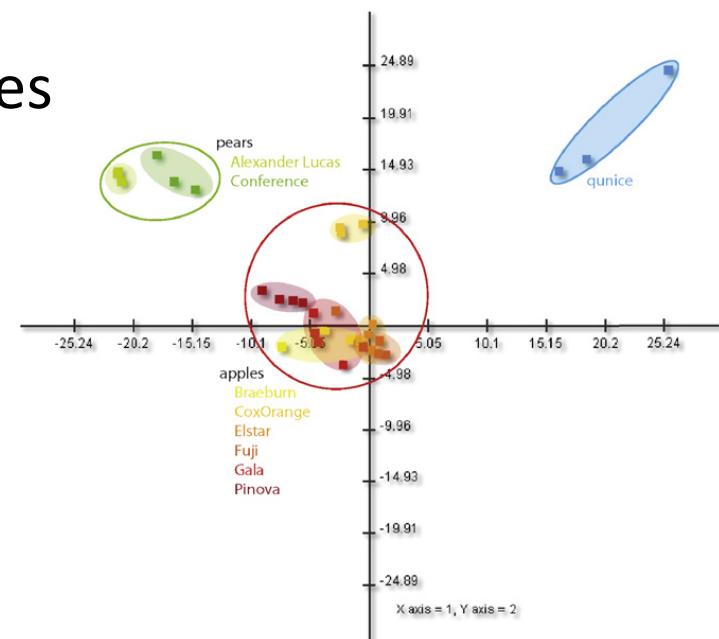
# Aplicaciones QTOF

- Screening de un número muy elevado de compuestos **sin disponibilidad** de patrones
  - Seguridad alimentaria y medioambiental
  - Análisis retrospectivo



# Aplicaciones QTOF

- Análisis no dirigido de muestras desconocidas.  
Identificación por análisis diferencial
  - Análisis "ómico" (proteómica, metabolómica, foodómica)
  - Descubrimiento de biomarcadores
  - Comprobación origen
  - Comprobación adulteraciones



- Cuarto limpio y termostatizado  $\geq 30\text{ m}^2$
  - Laboratorio preparación muestra  $\geq 30\text{ m}^2$
  - Zona de almacenamiento  $15\text{ m}^2$
  - Despacho  $15\text{ m}^2$
- Doctor con experiencia en metabolómica
  - Técnico de laboratorio



# Coste (aprox. IVA inc.)

UHPLC-DAD

90.000 €

UHPLC-QqQ

450.000 €

UHPLC-QTOF

690.000 €

HPLC prep.

120.000 €