

# ANÁLISIS QUIMIOMÉTRICO COMO NUEVO MÉTODO PARA LA DETERMINACIÓN DE ÁCIDOS GRASOS EN SEMILLAS DE MANÍ POR MEDIO DE LA RESONANCIA MAGNÉTICA NUCLEAR

Medina M.<sup>2</sup>, García S.E.<sup>2</sup>, García J.I.<sup>2</sup> y Pusiol D.J.<sup>1,2</sup>  
1-CONICET. 2-Spinlock SRL – Córdoba, Argentina.  
mmedina@spinlock.com.ar

La determinación del contenido de ácidos grasos, en particular de ácidos oleico y linoleico en semillas de maní es de gran importancia en esta industria.

En este trabajo se presenta una nueva metodología para determinar el contenido de ácidos grasos en semillas de maní, tanto en muestras formadas por grupos de semillas así como en semillas individuales utilizando un equipo de Resonancia Magnética Nuclear (RMN) de baja resolución. El procesamiento de los datos se realizó mediante técnicas quimiométricas.

El desarrollo de dispositivos para la determinación de ácidos oleico y linoleico por medio de la RMN y el sensor especial para la medición de semillas individuales son desarrollos innovadores de la empresa Spinlock SRL. El espectrómetro SLK-200 permite la determinación de aceite, humedad y ácidos grasos en segundos, por medio de una técnica no invasiva. Debido a que la RMN es una técnica no destructiva, permite la selección de los mejores individuos para la reproducción y cultivo.

## Introducción

El contenido de aceite en semillas de maní representa entre un 40% y 50% de su peso. El aceite de maní, como el de otras semillas, está constituido por numerosos ácidos grasos, entre los principales se encuentran el oleico y el linoleico, que aportan aproximadamente el 90 % del contenido total del aceite. Diversos estudios coinciden en que a mayor razón entre los contenidos de ácido oleico y linoleico, mayor es la durabilidad y la calidad del maní y sus productos derivados. Las semillas de maní de alto oleico (aquellas que poseen más de un 75 % de este ácido en su composición, aunque no existe una definición unívoca al respecto) cuya relación [ácido oleico/ácido linoleico] es mayor a 20, presentan una vida útil mayor que las semillas de medio o bajo oleico, perdurando las propiedades del maní y sus productos por más tiempo, evitando el llamado “maní rancio”.

La ventaja principal de determinar el contenido de ácido oleico y linoleico por RMN radica en que la muestra no es destruida por lo cual la semilla puede ser plantada luego de la medición.

La metodología de calibración fue desarrollada utilizando técnicas quimiométricas. La quimiometría es la aplicación de métodos estadísticos y matemáticos a los sistemas o procesos químicos con el objetivo de obtener la máxima información de un sistema y utilizarla de la forma más eficiente.

En trabajos anteriores hemos presentado una metodología para la determinación del contenido de ácido oleico en semillas de girasol, en muestras de aproximadamente 15 g., correlacionando el contenido de este ácido graso con los tiempos de relajación espín-espín ( $T_2$ ). En ese caso se obtuvieron resultados con coeficientes de correlación mayores a 0,95 y residuos menores al 1% para ácido oleico. Esta metodología fue extendida para la caracterización de semillas de maní.

## Objetivos

El objetivo de este trabajo es presentar una nueva metodología para la determinación del índice de calidad obtenido a partir de la razón ácido oleico/ácido linoleico (O/L) en semillas de maní a partir de la medición de la señal de RMN y técnicas quimiométricas de análisis.

## Materiales y métodos

Para este estudio se utilizó un espectrómetro SLK-200 de 11,35 MHz desarrollado por la empresa Spinlock SRL. El equipo cuenta con dos tipos de sensores diferentes, uno para muestras compuestas por varias semillas (volumen de 35 cm<sup>3</sup>) y otro para la medición de semillas individuales (tamaño variable según la aplicación). Este último porta muestra es una innovación desarrollada en la compañía Spinlock SRL.

La calibración se realizó con trece muestras patrón de aproximadamente 20 g cada una, cuyos contenidos de ácidos grasos fueron determinados previamente por cromatografía gaseosa. La señal de RMN fue obtenida a partir de una secuencia de pulsos CPMG. Para asegurar un régimen estacionario de temperatura durante el proceso de medición, se dejó a la muestra tres minutos bajo la acción del flujo de aire antes de realizar cada medida. Los datos obtenidos a partir de estas señales, junto a los datos informados de las muestras, fueron procesados mediante un análisis quimiométrico.

El método quimiométrico utilizado es “Partial Least Squares 2” (PLS2) que permite, mediante una única calibración, correlacionar la señal medida con todos los parámetros a determinar y que hayan sido incluidos en dicha calibración. Para calibrar se utilizó la técnica de “validación cruzada”.

Una vez calibrado el equipo se utilizó dicha calibración para determinar el contenido de ácido oleico y linoleico en muestras de maní.

## Resultados y discusión

En la calibración se obtuvo una desviación estándar de los residuos de 1,04 para el ácido oleico y de 0,73 para el ácido linoleico. Cada una de las mediciones de contenido de ácido oleico y de ácido linoleico se llevaron a cabo en simultáneo en 8 segundos sin contar el tiempo de espera de estabilización en temperatura.

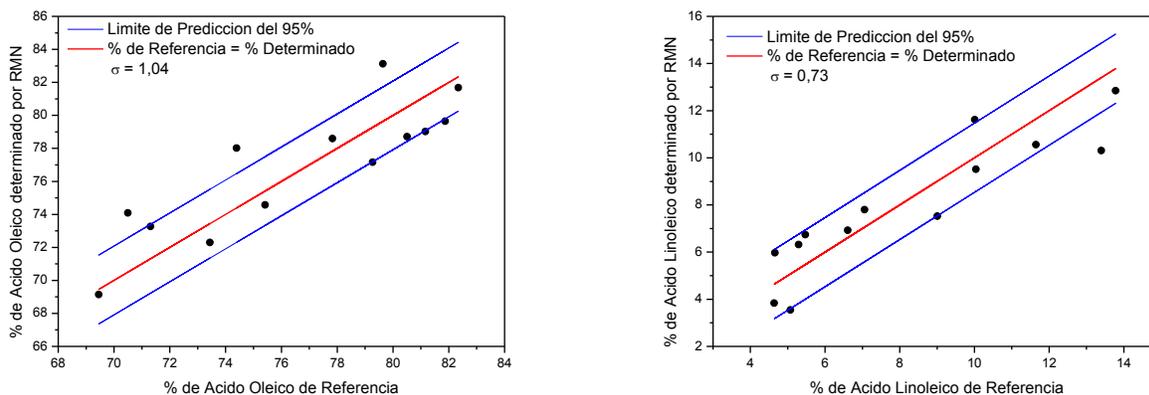


Figura 1: Comparación entre los valores de ácidos grasos de referencia y los valores de ácidos grasos determinados mediante RMN. a) Ácido oleico; b) Ácido linoleico.

## Conclusión

Se presentó una novedosa metodología para la determinación del contenido de ácido oleico y ácido linoleico en muestras patrón de semillas de maní, haciendo uso del análisis quimiométrico para relacionar las señales obtenidas a través del espectrómetro de RMN SLK-200.

Esta técnica de análisis permite obtener resultados tan o más confiables como los que arrojan las mediciones hechas por el espectrómetro SLK-100, pero optimizando el tiempo total de medición.

El análisis con el espectrómetro SLK-200 permite la clasificación de las semillas de maní en alto y bajo oleico, no solo en muestras formadas por grupos de semillas, sino también en semillas individuales utilizando un sensor especialmente diseñado para la aplicación. Esto posibilitaría la utilización de la RMN como una herramienta rápida y de bajo costos para el control de calidad, facilitando la labor diaria de criadores de semillas de maní, laboratorios de servicios y de investigación. De esta manera se cuenta con una técnica alternativa al análisis químico, y a diferencia de éste, la RMN es una técnica no destructiva y no requiere una preparación previa de la muestra.