

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



inifap



Memoria Mesa 4 Química

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



inifap



Coordinadores

Dr. Eleazar Aguirre Mandujano

Dra. Landy Hernández Rodríguez

M.C. Jaime Rocha Quiroz

M.C. Carlos Albor Calderón

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



inifap



Índice

<i>Curva del olvido de la materia de Química de estudiantes de la Preparatoria Agrícola en el periodo 2018-2020</i>	6
Monroy, José Guadalupe; Albor, Calderón, Carlos.....	6
<i>Propiedades fisicoquímicas y funcionalidad de almidón de maíz cacahuacintle</i>	31
Diana Edith López-Vázquez, Eleazar Aguirre-Mandujano, Consuelo Lobato- Calleros, Landy Hernández-Rodríguez.	31
<i>Análisis por Resonancia Magnética Nuclear del extracto activo de acetato de etilo de semillas de Annona pupurea sobre la larva del mosquito vector del dengue (Aedes egypti)</i>	42
Benito Reyes-Trejo, Holber Zuleta Prada, Lino Reyes-Trejo, Hussein Sánchez-Arroyo.....	42
<i>Comparación de actividad antioxidante de aceite esencial de laurel aromático (Litsea glaucescens) de varias accesiones</i>	62
Benito Reyes Trejo, Diana Guerra Ramirez ¹ , Felipe Reyes Fuentes ¹ , Verónica Virginia Tepixtle Colohua ^{1,*}	62
<i>Exploración del Modelado de la Influencia de la Sobrealimentación en la Digestión Anaeróbica Semicontinua de Pollinaza</i>	76
Gerson Esteban Vera Perez, Teodoro Espinosa Solares, Ricardo Domínguez Puerto, Artemio Pérez López.....	76
<i>Efecto del cambio de pH y ultrasonido en la modificación de las propiedades tecnofuncionales de la proteína de amaranto</i>	98
Juan José Figueroa-González, Consuelo Lobato-Calleros, Eduardo Jaime Vernon-Carter, Eleazar Aguirre-Mandujano	98
<i>Triterpenos pentacíclicos e iridoides en Calatola mollis</i>	117
Gabriela Salazar-Cervantes, Benito Reyes Trejo y Enrique Guízar Nolasco.....	117
<i>Análisis QSAR con Machine Learning de una biblioteca virtual de derivados del O-etil-glucósido de semillas de randia aculeata</i>	127

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



Luis Germán López-Valdez, Guillermo Martínez-Blanco y Holber Zuleta-Prada ¹	127
<i>Prediciendo la actividad biológica de bibliotecas virtuales de indazoles y dihidro-indazoles (3,3-disustituidos) a través de análisis QSAR basado en Machine Learning</i>	137
Luis Germán López-Valdez, y Holber Zuleta-Prada ¹	137
<i>Efecto de la temperatura en la extracción y actividad antioxidante de β-glucanos obtenidos de Pleurotus ostreatus PoB</i>	147
Lizbeth León Avendaño, Landy Hernández Rodríguez, Consuelo Lobato Calleros, Angélica Román Guerrero.....	147
<i>Propiedades mecánicas de los frutos: Una revisión sistemática de literatura con análisis bibliométrico</i>	157
Yesenia Manilla Téllez, Artemio Pérez López, Cynthia Serna Abascal	157
<i>Metodología para el cálculo de transferencia de energía térmica en un alambique de producción de mezcal tipo artesanal</i>	165
Regina Marín-Cabrera, Artemio Pérez-López, Carlos Alberto Villaseñor-Perea ³² , Arturo López Mancera.....	165
<i>El aislado de proteína de huitlacoche (Ustilago maydis D.C. Corda) desde una perspectiva fisicoquímica</i>	181
Kassandra Bonnet, Consuelo Lobato Calleros, Blanca Elizabeth Hernández Rodríguez ³⁶ , Landy Hernández Rodríguez ³⁶	181
<i>Actividad biológica de péptidos obtenidos a partir de proteína de hormiga chicatana (Atta mexicana)</i>	198
Daniela Soto-Felix, Eleazar Aguirre-Mandujano, Consuelo S. O. Lobato-Calleros, Blanca E. Hernández-Rodríguez.....	198
<i>Cuantificación del Material Lignocelulósico de la Cascara de Cacao Mexicano</i>	206
Sebastián García Fernández, Holber Zuleta Prada ^{*1} , Benito Reyes Trejo ¹ , Teodoro Espinosa Solarez	206

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



inifap



<i>Características estructurales y propiedades fisicoquímicas del almidón de huauzontle (Chenopodium nuttalliae saff.)</i>	215
López-Monterrubio, Diana I.; Vernon-Carter, E. Jaime; Lobato-Calleros, Consuelo; Alvarez-Ramirez, Jose.....	215

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



inifap



Curva del olvido de la materia de Química de estudiantes de la Preparatoria Agrícola en el periodo 2018-2020

¹Monroy, José Guadalupe; Albor, Calderón, Carlos

Resumen

Generalmente los docentes mencionan cuando van a impartir un curso que ellos inician de cero, asimismo, cuando hay un curso antecedente en el mismo nivel académico o en otro superior comentan que los estudiantes no aprendieron *nada* del curso anterior, lo cual en ambos casos son incorrectos o exagerados. Esta investigación realiza un seguimiento de cuando realizan el examen de ingreso a la UACH hasta cuando terminan de cursar todas las asignaturas de química que se imparten en la Preparatoria Agrícola para conocer el inventario de aprendizajes con el que inician y cuales aprendizajes retienen después de terminado un curso. Asimismo, cual es la diferencia de aprendizaje en la modalidad presencial y a distancia ya que el último curso de química se realizó de esta manera. Aunque los estudiantes reconocen que no es una materia que sea de fácil aprendizaje no le dedican tiempo suficiente para repasar los contenidos que se ven en la sesión de aprendizaje, tampoco el docente que imparte el curso es su primera opción para aclarar sus dudas. Se observó que el aprendizaje significativo para todos los estudiantes, no importando sus conocimientos y habilidades iniciales, se desvanecen aproximadamente hasta el cuarenta por ciento. No hay una diferencia significativa en el aprendizaje presencial y a distancia.

Palabras clave: Olvido, Educación a distancia, Aprendizaje significativo, Enseñanza virtual.

¹ Departamento de Preparatoria Agrícola, Universidad Autónoma Chapingo. Km 38.5 Carretera México-Texcoco. 56230, Chapingo, Estado de México.
correo-e: josegmonroy@chapingo.mx

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



inifap



Abstract

Generally, teachers mention when they are going to teach a course that they start from naught, likewise, when there is a previous course at the same academic level or at a higher level, they comment that students did not learn anything from the previous course. Which in both cases is wrong or exaggerated. This research keep track from when they take the admission test to the UACH until when they finish taking all the chemistry subjects taught in the Agricultural High School to know the inventory of learning with which they start and which learning they retain after finishing a course. Likewise, what is the difference in learning in the face-to-face and distance modality since the last chemistry course was carried out in this way. Although students recognize that it is not a subject that is easy to learn for them, they do not dedicate enough time to review the contents that they saw in the learning session, neither the teacher who teaches the course is not the first option to clarify your doubts. Significant learning for all students, regardless of their initial knowledge and skills, was observed that they forgot to approximately forty percent. There is no significant difference in face-to-face and distance learning.

Keywords: Oblivion, Distance education, Significant Learning,

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



inifap



Marco Metodológico

Se obtuvo información de publicaciones de investigación educativa relacionados con la Química y los informes de los resultados obtenidos. La investigación corresponde a un estudio de caso, es un estudio diagnóstico obteniendo información de estudiantes que cursan las asignaturas de Química en la Preparatoria Agrícola de la UACH por medio de cuestionarios.

Diseño del instrumento

Los cuestionarios se sometieron a una validación de contenido por parte de tres pares de la Academia de Química de la Preparatoria Agrícola de la UACH a los cuales se les solicitó revisar los instrumentos y aportar sugerencias para adecuarlos a los objetivos del estudio y asegurar que fuesen coherentes con las categorías que se pretenden evaluar.

La evaluación se realizó al inicio y final de cada curso de química. De los contenidos se evaluaron: conocimientos, habilidades y actitudes. Cuando los temas fueron seleccionados se elaboraron treinta y seis reactivos de opción múltiple de habilidades y conocimientos y cuatro preguntas de actitudes completando las cuarenta preguntas del examen. La mayoría de los alumnos contestaron responsablemente el examen.

Introducción

Memoria y procesos esenciales

De forma genérica la palabra *memoria* indica a cualquier material o instrumento que permita almacenar y recuperar información. A continuación, se enumeran procesos esenciales de la memoria para pasar a definirlos y analizarlos de manera más precisa en los incisos siguientes:

- Fuente de la información: estímulo y experiencia;
- Codificación de la información: consolidación y aprendizaje;
- Almacenamiento de la información: huella y engrama;
- Recuperación de la información: recuerdo y reconocimiento;
- Eliminación de la información: olvido. (Díaz, José Luis, 2009)

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



iniqap



Fuente de la información

La palabra *estímulo* remite a señales provenientes del mundo o del propio cuerpo, pero puede suceder que el origen de una información sea también la propia mente, como ocurre cuando recordamos sueños, razonamientos o fantasías.

De acuerdo a José Luis Díaz (2009) *La palabra experiencia (del latín experiri = comprobar) se refiere en su sentido más elemental al evento de haber vivido, sentido, conocido o presenciado algo.*

Codificación de la información: consolidación y aprendizaje

El hecho de tener la intención de recordar una información en el momento en que la recibimos no constituye un factor determinante para el proceso de memoria. No todo estímulo, evento o experiencia se retiene en la memoria, sólo aquellos que se adquieren mediante una codificación que puede seguir varias rutas de asimilación. Es patente que la manera como se incorpora la información como consecuencia de la repetición y de la práctica, tal como ocurre en el estudio de una materia académica

Codificación es el conjunto de procesos necesarios para el almacenamiento de la información en la memoria. La información que se recibe de los estímulos sensoriales se transforma en otro tipo de información significativa que nuestros sistemas de memoria puedan asimilar. Este proceso de transformación de la información que recibimos de los estímulos sensoriales forma parte de la fase de codificación.

La ciencia cognitiva moderna ha reiterado que se aprende mejor el material verbal si se le asocia o *engancha* con alguna imagen mental o bien si se asocia la información con otra que resulte familiar. La memoria mejora cuando el sujeto "hace más". Es decir, cuanto más procesamiento dedicamos a un acontecimiento, mejor retención obtendremos para esta información. (Baqués Cardona Josep, 1998)

Almacenamiento de la información

William James (1842–1910), a finales del siglo XIX, distinguía dos almacenes de memoria, uno de corta y otro de larga duración. Hoy en día se establece que el almacén de corto plazo, es el que empleamos al memorizar efímeramente. El otro almacén es el de largo plazo, aquello que podemos recordar en un periodo muy prolongado de tiempo si no es que por toda la vida. La ciencia cognitiva

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



inifap



actual favorece la hipótesis de un fracaso para transferir la información de la memoria de corto a la de largo plazo

El funcionamiento de nuestra memoria depende de aquello que hacemos con la información que recibimos; de cuáles son las operaciones cognitivas que hacemos mientras manipulamos esta información.

El Efecto de Generación (EG) se refiere a la ventaja memorística que tiene la información que fue generada por nosotros mismos (e.g., dep_rt_me_to), en comparación con la información que recibimos sólo para memorizarla (e.g., departamento).

Recuperación de la información: el reconocimiento y el recuerdo

Conviene distinguir dos procesos cognitivos muy diferentes de recuperación de la información: el reconocimiento y la rememoración. El reconocimiento es el recuerdo sensorial o perceptivo ante estímulos que ya fueron procesados o experimentados. Esto ocurre de manera automática y sumamente rápida mediante procesos de identificación y categorización específicos del tipo de procesamiento perceptual.

En el caso del reconocimiento intervienen entonces dos tipos de influencias en la jerarquía de los sistemas cerebrales, pues por una parte el reconocimiento está guiado por los datos sensoriales, por las características del estímulo, y por otro está guiado por el contexto o por la historia del sistema en relación a ese estímulo, por la atención que se ponga en la escena y que varía según la tarea y por otras características ya no de los datos, sino por la arquitectura y la historia del sistema perceptivo involucrado.

Recuperación es el proceso por el cual la información que se ha almacenado con anterioridad se hace accesible en el momento en que se debe utilizar.

Cuanto más elaborada haya sido la codificación, más fácil será que después podamos recuperar la información.

Cuanto más tiempo hayamos dedicado al estudio o aprendizaje de la información, mejor rendimiento obtendremos en la prueba.

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



Durante la fase de recuperación, si hay intencionalidad o no, la manera de recuperar la información puede ser bastante diferente. Más repaso o repetición de la información supondría una mejor consolidación de la huella de memoria.

En tercer lugar, la fase de recuperación o ejecución es aquella en la que el individuo recuerda la información y efectúa la respuesta. Las teorías de la recuperación afirman que el olvido es la consecuencia de un fallo en la recuperación de información durante la fase de ejecución. (Graf, P.-Mandler, G., 1984)

Eliminación de la información: el olvido

Las primeras hipótesis del olvido fueron propuestas por Hermann Ebbinghaus (1859–1909), el propio pionero de la investigación científica sobre la memoria, quien supuso que debe ocurrir por dos posibles causas:

el deterioro o decaimiento de la huella o bien por la prevención de la consolidación.

Se ha propuesto que un mecanismo del olvido tiene que ver con la *interferencia*, sea retroactiva, cuando un nuevo aprendizaje interfiere con otro anterior o preactiva cuando un recuerdo interfiere con uno nuevo. La interferencia ocurre cuando los recuerdos compiten en sus atributos y contextos.

Es importante señalar que en algunos sistemas de memoria el olvido puede no ocurrir, como es el caso de andar en bicicleta, lo cual, una vez aprendido, no se olvida, aunque no se haya practicado por años.

En busca del engrama

Para el psicólogo Karl Lashley (1890–1958), la pregunta clave para la neurociencia cognitiva de la memoria ha sido y sigue siendo la siguiente: ¿qué es y dónde está el engrama? El término y su sentido fueron sugeridos por el biólogo naturalista alemán Richard Semon (1859–1918) tomando del griego la idea de una huella o línea (*gramma*) que se traza *en* el cerebro. ¿Qué es entonces y dónde está el engrama de la memoria? De acuerdo a la evidencia y al esquema presentados es consecuente y aclaratorio definir al engrama como una modificación plástica del Sistema Nervioso a todos sus niveles, de tal manera que es posible reconocer cambios duraderos en la composición y configuración del cerebro en cualquiera de ellos.

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



inifap



Aprendizaje

De acuerdo con Ausubel, *et al.* (2000) es imperativo indagar en los conocimientos previos de los estudiantes y enseñarse de acuerdo a esto. Mario Carretero (2005), denomina ideas previas a las concepciones basadas en la experiencia cotidiana del estudiante, sin ningún basamento científico. Estas dependen en buena medida de las características de la tarea utilizada y de las preguntas planteadas, pero, no responden a un modelo o representación muy coherente y estable, sino más bien a una representación puntual y difusa que se crea sobre la marcha y en función del problema que el estudiante tiene que resolver.

Se puede señalar también que hay dos principios en los que converge el constructivismo, la idea de que:

- El pensamiento es activo en la construcción del conocimiento, es decir, que el aprendizaje es más una consecuencia de la actividad mental del que aprende, que, de la acumulación de informaciones y procedimientos, y
- Los conceptos son inventados más que descubiertos, es decir, el que aprende construye formas propias de ver y explicar el mundo, cosa distinta de pensar que a través de su actividad redescubre los conceptos y teorías propias de la ciencia actual (Sanmartí, 1995) citado por Gómez-Moliné y Sanmartí (1996).

Procesos de aprendizaje

Aprendizaje intencional. Cuando se tiene la consigna de que se debe recordar la información que se le presenta.

Aprendizaje incidental. En ningún momento se avisa que la información que se presenta sería necesaria para llevar a cabo una prueba de memoria posterior.

La teoría de Ausubel señala que la generación de aprendizaje significativo requiere de dos condiciones fundamentales. La primera, actitud potencialmente significativa de aprendizaje por parte del estudiante y la segunda, presentación de un material potencialmente significativo.

Sin embargo, se ha visto que la simple intención de aprender no constituye un factor relevante para el aprendizaje. La cantidad de esfuerzo que se invierte a la hora de hacer una determinada tarea

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



inifap



cognitiva constituye uno de los factores que determina de manera considerable la cantidad de recuerdo posterior.

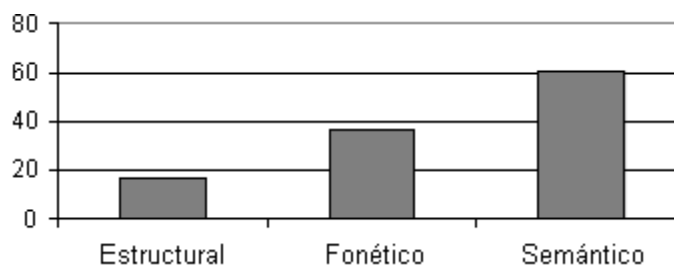
Para aprender necesitamos de los factores fundamentales: *motivación, experiencia, inteligencia y conocimientos previos*.

- A pesar de que todos los factores son importantes, debemos señalar que sin motivación «querer aprender», cualquier acción que realicemos no será completamente satisfactoria.
- La experiencia es el «saber aprender», ya que el aprendizaje requiere determinadas técnicas básicas tales como: técnicas de comprensión (vocabulario), conceptuales (organizar, seleccionar, etc.), repetitivas (recitar, copiar, etc.) y exploratorias (experimentación).
- Por último, nos queda la inteligencia y los conocimientos previos, que al mismo tiempo se relacionan con la experiencia. Con respecto al primero, decimos que, para poder aprender, el individuo debe estar en condiciones de hacerlo, es decir, tiene que disponer de las capacidades cognitivas para construir los nuevos conocimientos.

Lo primordial para retener la información presentada no es tener la intención de recordarla, sino el tipo de procesamiento que se hace con esta información. Para Craik y Lockhart (1972) el tiempo deja de ser un punto fundamental y el nivel de profundidad al que se procesa la información pasa a ser el factor determinante.

El procesamiento semántico llevado a cabo durante la fase de codificación de la información da lugar a unos porcentajes de acierto superior comparado con otros tipos de codificación.

Gráfica N° 1 Porcentaje de reconocimiento



Craik y Lockhart (1972). Levels of processing: a framework for memory research. Journal of Verbal Learning and Verbal behavior, 11, 680.

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



iniap



De acuerdo con los resultados de Slamecka, N. J., & Graf, P. (1978) aprender de una manera activa es mejor que el sujeto que se encuentra en una actitud pasiva.

Norman, D. A. & Rumelhart, D. E. (1975) defienden que el aprendizaje, y por tanto la formación de esquemas, no es un proceso unitario, sino que obtenemos el conocimiento a través de tres modos de adquisición: la acumulación, el ajuste y la reestructuración. El proceso básico es la acumulación espontánea de información que llevamos a cabo a través de los sentidos y la cognición.

No obstante, la acumulación sólo es posible cuando la nueva información es compatible con los esquemas que ya poseemos. Cuando existe una discrepancia resulta necesario modificar la estructura cognitiva; si ésta es de intensidad leve tiene lugar un proceso de ajuste, que mantiene la red relacional básica del esquema, cambiando sólo algunas variables.

En cambio, cuando la discrepancia entre los recuerdos y la información novedosa es muy fuerte el ajuste no es suficiente, sino que recurrimos a la reestructuración. Este proceso se define como la creación de un nuevo esquema a partir de la combinación de esquemas existentes o de la detección de patrones comunes entre algunos de estos.

En palabras de Rumelhart, D. E. (1980). «*un esquema es una estructura de datos para representar conceptos genéricos almacenados en la memoria*». Por ello, la teoría de los esquemas puede considerarse como una teoría de la representación y utilización de los conceptos almacenados en la memoria. (Pozo, 2010, p.136-137)

según Rumelhart, (1980). la teoría de los esquemas se ocupa de un modo general de cómo se representa el conocimiento y de cómo se usa el conocimiento almacenado. Se refiere también, por lo tanto, a la estructura de la memoria semántica. La unidad básica del procesamiento sería el "esquema", que es un "paquete de información" sobre un concepto genérico, constituido por los diversos atributos del concepto, incluyendo a la vez el "qué" y el "cómo" que facilitan su uso tanto declarativo como procedimental.

Como sistemas de representación, los esquemas tienen las siguientes características fundamentales:

Los esquemas tienen variables.

Los esquemas pueden encajarse unos en otros.

Los esquemas representan conceptos genéricos que varían en sus niveles de abstracción.

Los esquemas representan conocimientos más que definiciones. (Pozo, 2010, p.138)

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



inifap



Según Norman, D. A. & Rumelhart, D. E. (1975). *desde un punto de vista lógico pueden distinguirse tres tipos de aprendizaje: el crecimiento, la reestructuración y el ajuste*. Mediante el crecimiento se acumula nueva información en los esquemas ya existentes. Las reglas que rigen este crecimiento son básicamente asociativas. [...] No modifica la estructura interna de los esquemas ni genera por sí mismo esquemas nuevos. [...] Cuando los esquemas disponibles no bastan para comprender o interpretar una situación es necesario generar nuevos esquemas o modificar los existentes. La modificación o evolución de los esquemas disponibles tiene lugar mediante un proceso de ajuste. Se utiliza cuando, para formar el nuevo esquema, basta con realizar modificaciones en las variables y constantes de un esquema sin que sea necesario cambiar la estructura interna del mismo. [...] La generación o creación de nuevos esquemas tiene lugar mediante el proceso de reestructuración, que consiste en la «formación de nuevas estructuras conceptuales o nuevas formas de concebir las cosas». (Pozo, 2010, p.141-142)

Olvido

El concepto del olvido hace referencia a la pérdida de accesibilidad a la información anteriormente procesada en la memoria, pudiéndose dar este olvido por muy diversas circunstancias. Generalmente este fenómeno es debido a desviaciones de la atención, o bien al simple paso del tiempo, si bien es posible que se produzca un olvido como forma de bloqueo de una situación estresante o debido a la presencia de algún tipo de trastorno, sea orgánico o psicológico.

Olvidar cumple con una función adaptativa, a través del olvido somos capaces de eliminar de nuestro cerebro las informaciones y conceptos que no necesitamos ni empleamos, de modo que ignoramos los detalles y elementos circunstanciales con el fin de permitir centrarnos en el núcleo del problema.

El olvido es un fallo en el proceso general de la memoria (en alguna de sus fases), que se pone de manifiesto en el momento en que debemos recuperar la información. (Baqués Cardona Josep, 1998)

La Curva del Olvido

Uno de los primeros estudios sistemáticos que se llevaron a cabo respecto al olvido fueron los experimentos de memoria de Ebbinghaus (1885), definiendo lo que se conoce como la curva del Olvido. Una de las primeras conclusiones a las que llegó Ebbinghaus fue que la mente humana le atribuye significados a los elementos que quiere memorizar incluso aunque no los tengan previamente.

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021

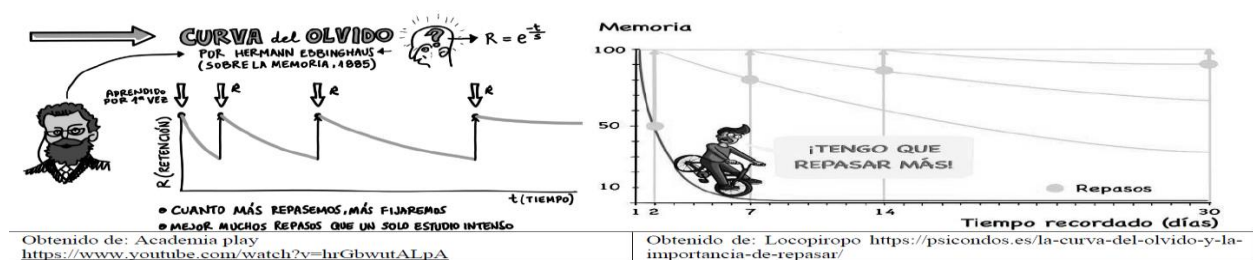


iniqap



La curva del olvido es una gráfica que permite tener en cuenta la progresiva pérdida del material memorizado anteriormente, siempre y cuando no se practique el repaso de dicho material.

Gráfica N° 2 Curva del olvido



Olvidar. Hoy en día la mayoría de las personas nos pasamos la vida haciendo esfuerzos por adquirir nuevos conocimientos y habilidades, registrando y codificando distintas informaciones que retener en la memoria, tanto de forma consciente como inconsciente.

En la mayoría de los casos el olvido se da de forma totalmente involuntaria.

Algunos aspectos destacables que se dejan ver a partir de la curva del olvido es que, en todo momento, es necesario menos tiempo para reaprender un material que para aprenderlo desde cero, incluso en los fragmentos que se han desvanecido de la memoria. De este modo, este junto a otras investigaciones de diversos autores ayudan a hacer ver que en el proceso de olvido la información no se desvanece de la mente, sino que pasa a un nivel inconsciente que permite su recuperación mediante el esfuerzo y el repaso.

A partir de las observaciones que conllevaron a su realización han surgido diferentes teorías que intentan explicar dicha pérdida, siendo las siguientes:

Teoría de la Represión

Según Freud, S. (tr.2005) la mayor parte del olvido se produce como resultado de la represión. En palabras del mismo Freud:

"La esencia de la represión reside simplemente en apartar algo y mantenerlo a distancia del consciente."

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



iniqap



Desde la Psicología cognitiva, se ha comprobado que tener la intención de olvidar es bastante eficaz de cara a producir olvido. Los sujetos son capaces de recordar muchas más palabras de las listas con la instrucción de recordar que de las listas con la instrucción de olvidar.

Teoría del desuso o Teoría del decaimiento de huella

Thorndike, E. L. (1913b) concebía el aprendizaje como la formación y fortalecimiento de las relaciones estímulo-respuesta gracias a la práctica, en lo que él denominaba ley del ejercicio. Desde su punto de vista, cuanto más se practique una conexión, más se reforzará esta última, y más difícil será que se debilite con el paso del tiempo. Por el contrario, si una conexión no es practicada, su fuerza va decreciendo gradualmente con el paso del tiempo y, por último, se acaba perdiendo. Es lo que él llamaba ley del desuso.

La teoría del decaimiento de la huella es una teoría elaborada por el propio Ebbinghaus que pretende explicar la curva del olvido. Para el autor, la pérdida de información es debida principalmente al poco uso dado a dicha información, con lo que la huella de memoria dejada en nuestro organismo se debilita y desvanece con el paso del tiempo. A nivel biológico se considera que las estructuras neuronales acaban por perder las modificaciones que el aprendizaje produce en ellas, con lo que se volvería a un estado similar al previo al aprendizaje.

Las investigaciones reflejan que el decaimiento de la memoria se da especialmente en la memoria a corto plazo, pero si la información consigue pasar a la memoria a largo plazo pasa a ser permanente. (Baddeley, A., 2010)

Sin embargo, esta teoría es criticada por el hecho de que no tiene en cuenta diversos factores, como el hecho de que aparezca nuevo material que dificulte el acceso a la información. Además, existen muy diversas variables que influyen en la capacidad de recuerdo, como la propia cantidad de material a recordar o la significación emocional de la información procesada. Así, a mayor cantidad de material mayor la dificultad de mantenerlo en el tiempo y en el caso de que el conocimiento despierte sensaciones y emociones fuertes en el aprendiz resulta más sencillo que el recuerdo permanezca.

Teorías de la interferencia

Diversos autores consideraron que la teoría de la decadencia de la huella no era suficiente para explicar el proceso del olvido. Teniendo en cuenta que el ser humano está constantemente

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



inifap



aprendiendo cosas nuevas, un elemento que dichos autores consideraron que no se había tenido en cuenta son los problemas que provoca el solapamiento de nuevos o viejos conocimientos con el material aprendido.

Así surgieron las teorías de la interferencia, que plantean que la información a aprender se pierde porque otras informaciones interfieren en el acceso a ella. Dicha interferencia puede darse de manera retroactiva o proactiva.

En el caso de la interferencia proactiva un aprendizaje previo dificulta la adquisición de uno nuevo. Si bien no explica propiamente el olvido, sino un problema en codificar la información. La interferencia retroactiva es la que produce la presencia de un nuevo conocimiento que solapa el material a recordar. Así, aprender algo nuevo hace que nos sea difícil recordar lo anterior. Este fenómeno explicaría en gran medida la pérdida de información que se da en la curva del olvido.

Es decir, no es preciso que sea el simple paso del tiempo lo que produzca el olvido, sino la adquisición de nueva información que se superpone o interfiere en la información anterior.

Los resultados indican que en situación de inactividad se produce una tasa de olvido inferior que, en situación de actividad, lo que sería favorable a la teoría de la interferencia. Cuanto más distintivas sean dos informaciones, más difícil es que una pueda interferir sobre la otra. (Tulving, E., 1966)

¿Qué debemos repasar?

Es más útil repasar de un material que no sea el mismo que se ha utilizado para el aprendizaje. Con el repaso, el material estudiado puede aprenderse permanentemente y evitarse el olvido. Un plan de repasos espaciados efectivo es parte de un Método de Estudio sistemático y un método así es esencial para potenciar al máximo nuestro aprendizaje. Incluso si el cerebro pierde neuronas y otras células importantes por el paso del tiempo, las que quedan pueden comunicarse de un modo más eficiente, reteniendo la información importante.

¿Cómo podemos mejorar la memorización?

1. Etchepareborda (2005) da unas pautas. Aprendizaje multisensorial, haciendo que intervenga el mayor número de sentidos posibles a la hora de retener los datos; facilitar la concentración creando un entorno adecuado libre de interferencias; aplicar el aprendizaje significativo, relacionando lo

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



inifap



nuevo con lo ya aprendido; recuperar la información fraccionada, de adelante hacia atrás y viceversa, comprobando cada cierto tiempo nuestra capacidad de memorizar.

2. Fabricio Ballarini (2015) ha descubierto que los aprendizajes que se producen durante una hora antes y una hora después de haber vivido un hecho novedoso y motivador, se recuerdan mejor que el resto, por lo que el proceso de aprendizaje realizado en esa franja de tiempo es más eficaz.

3. Salisbury (1990) nos demuestra con su experimento científico, que la repetición constante pero cada vez más espaciada en el tiempo es sinónimo de éxito.

Objetivos generales

Conocer los aprendizajes y la recuperación de ellos cuando transcurre el tiempo durante su permanencia en la Preparatoria Agrícola (PA) de 2020-2021.

Determinar la diferencia del aprendizaje presencial y el aprendizaje a distancia ya que el último curso de Química fue a distancia. La situación de emergencia sanitaria, declarada en el mes de marzo, aunada a la situación de huelga por la que atravesaba la UACH, llevó a un atraso en el desarrollo de las actividades académicas. Fue en el mes de julio de 2020 cuando se determinó el realizar las actividades docentes a distancia, puesto que el trabajo presencial no era posible.

Objetivos específicos

- Elaborar tablas de especificación de los aprendizajes que deben de poseer los estudiantes al cursar las asignaturas de Química I, II y III.
- Elaboración de los instrumentos de las evaluaciones inicial y final.
- Tomar en cuenta que esta evaluación inicial estará en constante revisión y mejora.
- La Evaluación inicial, tiene como objetivo, obtener datos previos al inicio de cada una de las asignaturas de Química (I, II, III)

Resultados y Discusión

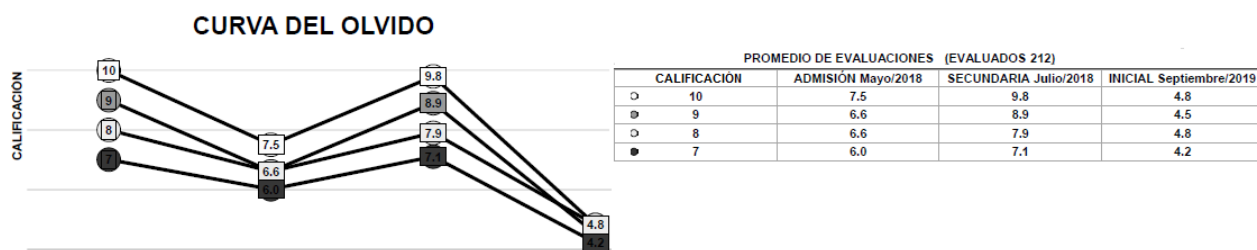
1ª. Parte de la investigación

Gráfica N° 1 Curva del olvido de cuando estudian en la secundaria hasta cuando inician el curso de Química I

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



En la gráfica N° 1 se puede observar la calificación del último curso en secundaria, después la calificación del examen de admisión que es menor, los aprendizajes aumentan al terminar el curso de Química en la secundaria y, por último, hay un olvido al inicio del curso de Química I.

Tabla N° 1 Facilidad de aprendizaje

Las asignaturas que más se te facilitan para aprender (elige tres):	
47.1 % Agronomía III	26.44% Química I
46.28 % Introducción a la filosofía	23.97% Geometría y trigonometría
30.58% Literatura I	15.7 % Física II
27.27% Inglés I	

Tabla N° 2 Tiempo empleado fuera del aula

Cuanto tiempo le dedicas a la asignatura de química fuera del aula para lograr los aprendizajes propuestos en el programa:	
63.63 % 1 hora por día	20.66 % Menos de una hora
17.36 % 2 horas por día	3.3 % Mas de 3 horas por día
12.4 % no contestaron	

Los estudiantes no consideran a la química de fácil aprendizaje (tabla N° 1), sin embargo, la mayoría sólo le dedica como máximo una hora para su aprendizaje fuera del aula entre semana (tabla N° 2).

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



iniap



Tabla N° 3 Actividades para aprender

Para lograr aprendizajes en Química realizas las siguientes actividades:	
55.37 % Buscan información en Internet	47.11 % Preguntan a uno o a varios compañeros
41.32 % Escriben notas especiales en los apuntes	38.84 % Preguntan en clase al docente
14.88 % Leen libros	6.61 % Estudian por adelantado los temas
4.96 % No se preocupan porque ya todo lo saben	2.5 % Preguntan en asesoría al docente

No hay confianza para preguntar al docente (tabla N° 3), en las sesiones de aprendizaje solamente algunos preguntan en asesoría lo que de cierta manera implicaría que les hacen bullying por no lograr aprendizajes. Para complementar su aprendizaje los estudiantes buscan información en Internet, preguntan a sus compañeros y escriben notas especiales en sus apuntes.

Tabla N° 4 Oportunidad de aprender

Los Docentes que te han enseñado mejor Química; ¿por qué?	
73.55 % Explican bien	19.83 % Dan retroalimentación sobre las tareas.
47.93 % Dan Ejemplos	9.09 % Realizan experimentos de cátedra
44.63 % Aclaran las dudas	8.26 % Son exigentes
27.27 % Motivan la participación en clase	7.44 % Dan asesorías
21.49 % Preparan las clases	0 % Aman su trabajo

Se sugiere para recuperar la información proporcionada que se involucren todos los sentidos, también motivarlos y que exista una interactividad (tabla N° 4) porque si no se realiza, sólo se recuerda menos del 30 %

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021

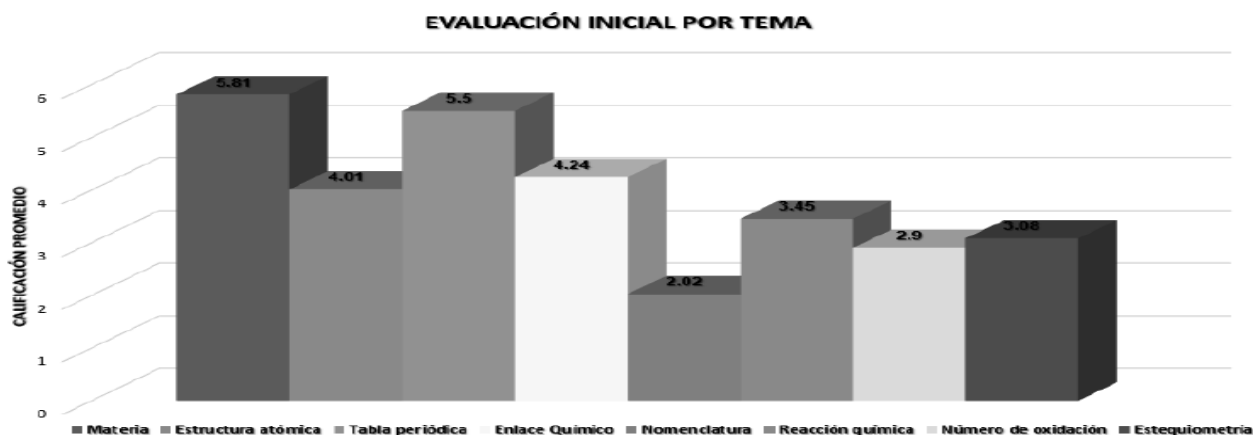


Tabla N° 5 Aspectos evaluados

ASPECTO	CONOCIMIENTOS	HABILIDADES	ACTITUDES
PORCENTAJE	32.5 %	57.5 %	10 %

Se prioriza en el programa de Química I el desarrollo de habilidades (tabla N° 5)

Gráfica N° 2 Resultados de evaluación inicial por tema al iniciar el curso de Química I.



Cómo se observa en la gráfica N° 2 Materia es el tema que más se recuerda porque tiene menor grado de complejidad, pero también porque se deben de utilizar los conocimientos en física y biología

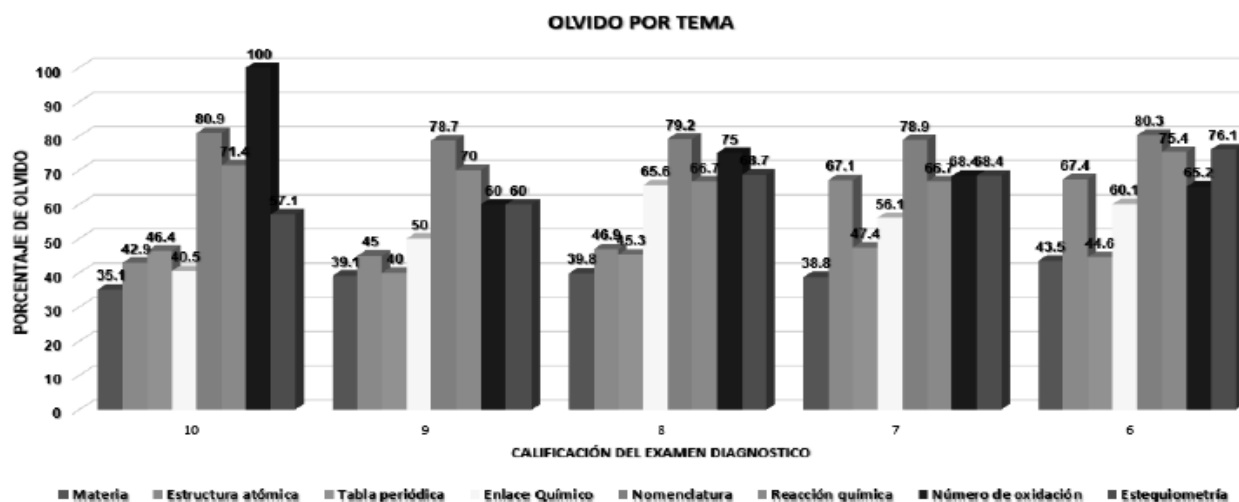
10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



Gráfica N° 3 Contenidos olvidados al terminar el curso de Química I



Existe variación en la recuperación de los conocimientos y habilidades como se observa en la gráfica N° 3

Tabla N° 6 Porcentaje de temas evaluados de los que se estudian en secundaria.

Secundaria	Química I	Química I	Química I
Porcentaje impartido y evaluado	100%	18.75%	5.55%

De los contenidos de los programas de Química a nivel medio, todos se estudian en Química I - esto ocurre en México y en el mundo-, pero casi no se repasan en Química II o Química III como se observa en la tabla N° 6.

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas - Universidad Autónoma Chapingo

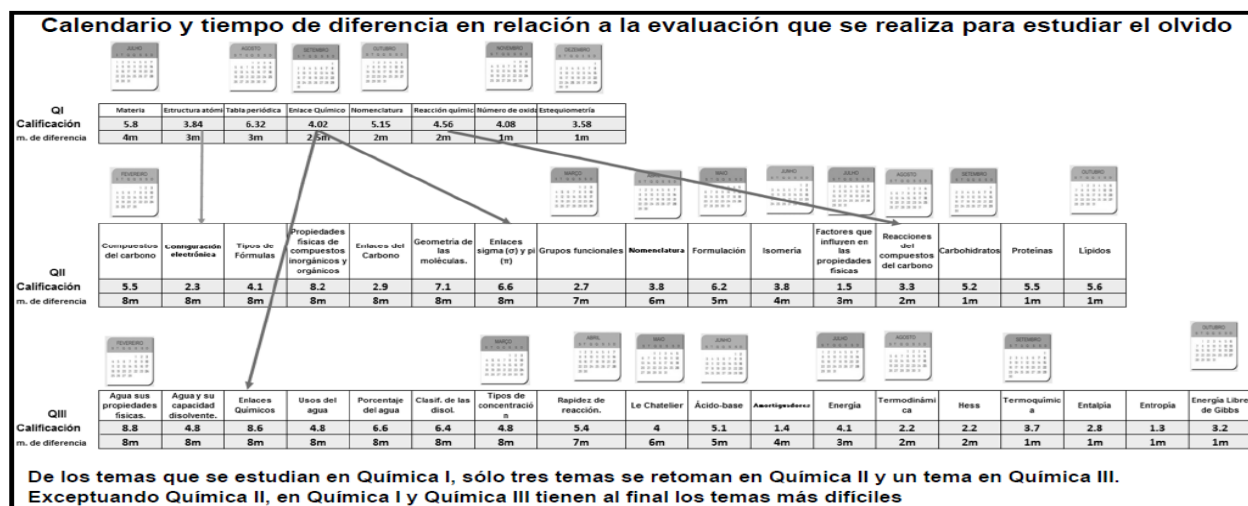
21 y 22 de octubre de 2021



RESULTADOS

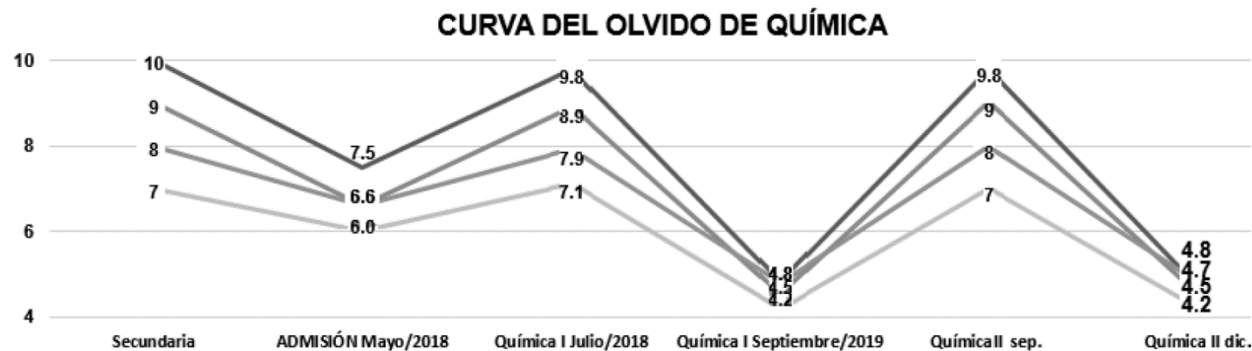
2ª. Parte Está relacionada con los aprendizajes de Química II y Química III

Gráfica N° 4 Calendarización de los contenidos de Química



En la gráfica N° 4 Se puede observar que de los temas que se estudian en Química I, sólo tres temas se retoman en Química II y un tema en Química III

Gráfica N° 5 Curva del olvido de la materia de Química I y Química II



10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021

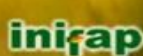


Tabla N° 7 Aprendizaje y Olvido de Química I y Química II

Secundaria	ADMISIÓN	Química I ■	Química I ■	Química II ■	Química II ■
	may./18	jul./19	dic./19	mar./20	dic./20
10	7.5	9.8	4.8	9.8	4.7
9	6.6	8.9	4.5	9	4.5
8	6.6	7.9	4.8	8	4.8
7	6.0	7.1	4.2	7	4.2

■ Aprendizaje ■ Olvido

Tanto en la gráfica N° 5 como en la tabla N° 7 se puede observar que hay una disminución de la recuperación de los aprendizajes de cuando cursan en la secundaria, hacen el examen de admisión y cursan Química I y Química II

Tabla N° 8 Aprendizaje y Olvido de Química I, Química II, Química III

	Química I	Química I	Olvido	Química II	Química II	Olvido	Química III	Química III	Olvido
10	9.8	4.8	51.0	9.8	4.7	52.0	9.9	4.7	52.5
9	8.9	4.5	48.9	9	4.5	50.0	8.9	4.4	50.6
8	7.9	4.8	38.8	8	4.8	40.0	8	3.9	51.3
7	7.1	4.2	41.4	7	4.2	40.0	7	4.4	37.1

En tabla N° 8 se aprecia que los estudiantes tienen menor recuperación de aprendizajes son los que lograron la mayor calificación en el curso y los que tuvieron menor aprendizaje también tienen menor porcentaje de olvido.

Gráfica N° 6 Olvido de Temas de Química II

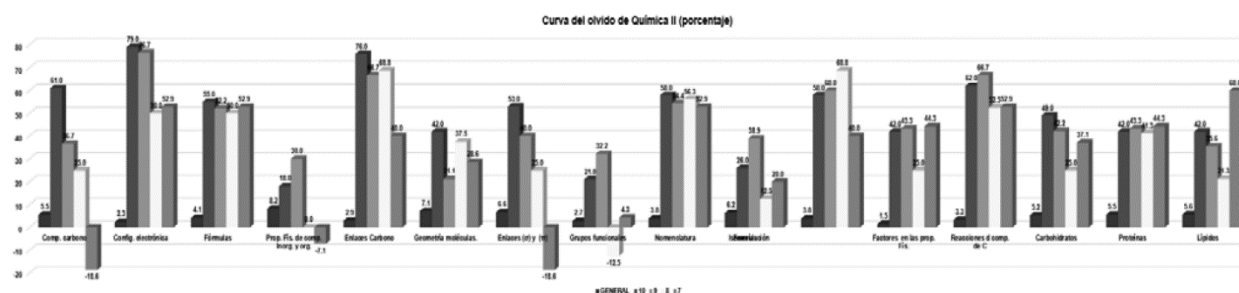


Tabla N° 9 Evaluación de los contenidos de Química II

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



QII	Comp. carbono	Config. electrónica	Fórmulas	Prop. Fis. de comp. Inorg y org.	Enlaces Carbono	Geometría moléculas.	Enlaces (n) y (l)	Grupos funcionales	Nomenclature	Formulación	Isomerías	Factores en las prop. Fis.	Reacciones d comp. de C	Carbohidratos	Proteínas	Lípidos
GENERAL	5.5	2.3	4.1	8.2	2.9	7.1	6.6	2.7	3.8	6.2	3.8	1.5	3.3	5.2	5.5	5.6
10	61.0	79.0	55.0	18.0	76.0	42.0	53.0	21.0	58.0	26.0	58.0	42.0	62.0	49.0	42.0	42.0
9	36.7	76.7	52.2	30.0	66.7	21.1	40.0	32.2	54.4	38.9	60.0	43.3	66.7	42.2	43.3	35.6
8	25.0	50.0	50.0	0.0	68.8	37.5	25.0	-12.5	56.3	12.5	68.8	25.0	52.5	25.0	41.3	21.3
7	-18.6	52.9	52.9	-7.1	40.0	28.6	-18.6	4.3	52.9	20.0	40.0	44.3	52.9	37.1	44.3	60.0

En la gráfica N° 6 y en la tabla N° 9 se observa que en los temas de Química II donde hay un repaso se recuperan los aprendizajes, pero en los temas “nuevos” hay olvido.

Gráfica N° 7 Olvido de Temas de Química III

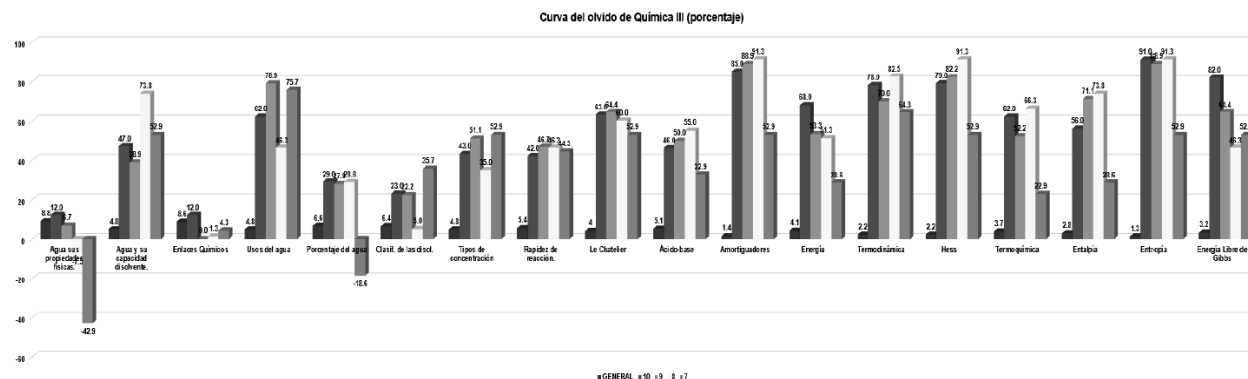


Tabla N° 10 Evaluación de los aprendizajes de los contenidos de Química III

QIII	Agua sus propiedades físicas.	Agua y su capacidad disolvente.	Enlaces Químicos	Usos del agua	Porcentaje del agua	Clasif. de las disol.	Tipos de concentración	Rapidez de reacción.	Le Châtelier	Ácido-base	Amortiguadores	Energía	Termodinámica	Hess	Termoquímica	Entalpia	Entropía	Energía Libre de Gibbs
GENERAL	8.8	4.8	8.6	4.8	6.6	6.4	4.8	5.4	4	5.1	1.4	4.1	2.2	2.2	3.7	2.8	1.3	3.2
10	12.0	47.0	12.0	62.0	29.0	23.0	43.0	42.0	63.0	46.0	85.0	68.0	78.0	79.0	62.0	56.0	91.0	82.0
9	6.7	38.9	0.0	78.9	27.8	22.2	51.1	46.7	64.4	50.0	88.9	53.3	70.0	82.2	52.2	71.1	88.9	64.4
8	-7.5	73.8	1.3	46.3	28.8	5.0	35.0	46.3	60.0	55.0	91.3	51.3	82.5	91.3	66.3	73.8	91.3	46.3
7	-42.9	52.9	4.3	75.7	-18.6	35.7	52.9	44.3	52.9	32.9	52.9	28.6	64.3	52.9	22.9	28.6	52.9	52.9

En la gráfica N° 7 y en la tabla N° 10 se observa que en los temas de Química III donde hay un repaso se recuperan los aprendizajes, pero en los temas “nuevos” hay olvido.

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



Tabla N° 11 Contenidos olvidados

Química I	Menor olvido	Mayor olvido	Prom. de olvido
CONOCIMIENTOS	Propiedades periódicas (36.44%)	Estructura atómica (74.58%)	53.88 %
HABILIDADES	Separación de mezclas (4.24%)	Reacción Química (90.68%)	56.30 %
Química II	Menor olvido	Mayor olvido	Prom. de olvido
CONOCIMIENTOS	Compuestos del carbono (-18.6 %)	Configuración electrónica (79.0 %)	54.0 %
HABILIDADES	Grupos funcionales (-12.5)	Reacciones del carbono (66.7 %)	61.0 %
Química III	Menor olvido	Mayor olvido	Prom. de olvido
CONOCIMIENTOS	Agua y sus propiedades y porcentaje (-42.9 %)*	Amortiguadores (91.3 %)	52.5 %
HABILIDADES	Rapidez de reacción (42 %)	Entropía (91.3 %)	55.0 %

Nota: los valores negativos quieren decir que hubo aprendizaje

En la tabla N° 11 se aprecia que el olvido de conocimientos y habilidades es casi el mismo. Con la calificación más alta se tiene el porcentaje más alto de olvido en todas las Químicas, lo que implica, que ésta no siempre está relacionada con los aprendizajes.

Algunos hábitos que se puede adoptar para hacer que el proceso aprendizaje sea lo más eficiente posible:

Antes: Realizar un repaso breve antes de ver el tema en clase de al menos 10 min, el cual permitirá tener un panorama general del tema que se verá en clase.

Durante: Resolver todas las dudas que surjan durante la sesión de aprendizaje, es muy importante haber entendido por completo el tema y no acumular dudas del mismo.

Posteriormente: Complementar dicho aprendizaje con el mayor número posible de ejercicios, empezando desde el más básico hasta el más complicado.

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



inifap



Conclusiones

De acuerdo con la teoría de los esquemas, cuando se pone atención por más de tres segundos los aprendizajes nunca se olvidan, sólo que no se recupera la información cuando uno desea, sino cuando no se necesita.

Desde la perspectiva de la Psicología cognitiva se entiende el olvido no tanto como una pérdida de información, sino como la dificultad para acceder a esta última. Hay que distinguir entre disponibilidad de la información (la información todavía existe) de la accesibilidad de la información (la información existe, pero no podemos acceder a ésta).

Se reconoce que no hay continuidad en los programas de Química para poder hacer un repaso de los contenidos aprendidos, ya que se tienen otros nuevos conocimientos por aprender.

No hay una diferencia significativa en el aprendizaje presencial y a distancia.

Parece que no existe una diferencia entre el que demostró un mayor aprendizaje con el que tuvo un menor aprendizaje ya que finalmente los dos tienen casi el mismo valor en los resultados de aprendizaje. Pero la recuperación de la información será más fácil para quienes en algún momento lo pudieron hacer mejor.

Finalmente hay que reconocer que es más fácil recuperar la información cuando en el aprendizaje intervienen todos los sentidos y las emociones.

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



iniap



Literatura Citada

Baddeley, A.; Eysenck, M. W. & Anderson, M. C. (2010). Memoria. Alianza.

Baqués Cardona Josep (1998) Participación de la memoria de trabajo en el funcionamiento de la memoria implícita. Universitat Autònoma de Barcelona España. recuperado en:
<https://dialnet.unirioja.es/servlet/tesis?codigo=143363>

Carretero, Mario (2005). Construir y enseñar ciencias experimentales. Buenos Aires. Argentina: AIQUE.

Craik F. I. M. y Lockhart R. S. (1972). Levels of processing: a framework for memory research. Journal of Verbal Learning and Verbal behavior, 11, 676.

Craik F. I. M. y Tulving E. (1975). Depth of processing and the retention of words in episodic memory. Journal of Experimental Psychology: General, 104, 268-294.

Díaz, José Luis. (2009). Persona, mente y memoria. *Salud mental*, 32(6), 513-526. Recuperado en 14 de agosto de 2021, de http://www.scielo.org.mx/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S0185-33252009000600009&lng=es&tlng=es.

Ebbinghaus, H. (1885). Memory: A Contribution to Experimental Psychology. Teachers College, Columbia University. New York.

Freud, S. (tr.2005). *Obras Completas. Tomo II. XC. La represión. (1915)*. Buenos Aires, Argentina: El ateneo editorial.

Gómez Moliné, Sanmartí Puig (1996) La didáctica de las ciencias. Una necesidad

Vol. 7, No 3 (1996) recuperado de:

<http://www.revistas.unam.mx/index.php/req/article/view/66663/0>

Graf, P.-Mandler, G. 1984). Activation makes words more accesible, but not necessarily more retrievable. Journal of Verbal Learning and Verbal Behavior, 23, 553-568

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



iniqap



Norman, D. A. & Rumelhart, D. E. (1975). Explorations in cognition. San Francisco: Freeman
Ruiz-Vargas J. M. (1991) Psicología de la memoria (pp. 154-173). Madrid: Alianza.

Rumelhart, D. E. (1980). Schemata: the building blocks of cognition. En R.J. Spiro et al. (Eds.),
“Theoretical Issues in Reading Comprehension”. Hillsdale, Nueva Jersey: Lawrence Erlbaum.

Slamecka Norman J. and Graf Peter (Nov. 1978) The Generation Effect: Delineation of a
Phenomenon Journal of Experimental Psychology: Human Learning and Memory Vol. 4, No. 6,
592-604

Thorndike, E.L. (1911a). Animal intelligence: Experimental Studies. Nueva York: MacMillan.

Thorndike, E. L. (1913b). *Educational psychology: Vol. 2. The psychology of learning*. Nueva
York: Teachers College Press.

Tulving, E.; Pearlstone, Z. (1966) *Availability versus accessibility of information in Memory for
words*. En Journal of verbal learning and verbal behaviour, 5. Vol. 5, Number 4, August 1966.
Canada: University of Toronto, p. 381-391.

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



Propiedades fisicoquímicas y funcionalidad de almidón de maíz cacahuacintle

*Diana Edith López-Vázquez², Eleazar Aguirre-Mandujano³, Consuelo Lobato- Calleros⁴,
Landy Hernández-Rodríguez⁵.*

Resumen

En los últimos años, el interés de la industria alimentaria por el desarrollo de ingredientes biofuncionales ha aumentado, debido a un número creciente de consumidores que exigen productos alimenticios más saludables. En este sentido, el almidón de maíz es un ingrediente valioso utilizado por sus propiedades fisicoquímicas y tecno-funcionales en la producción de alimentos y actualmente, la industria se está enfocando en su digestibilidad. Sin embargo, se requiere explorar nuevas fuentes de obtención de almidón puesto que sus características intrínsecas están influenciadas por origen botánico y geográfico. El maíz es una de las principales fuentes de almidón y México ofrece muchas variaciones de este cereal que se agrupan en 68 razas, entre las que se encuentran algunas variedades que no han sido estudiadas, como el maíz cacahuacintle. En este estudio se aisló almidón a partir de maíz cacahuacintle var. ARR-11, cuyo rendimiento fue de 61.96 % y con una pureza del 97.61 %. El almidón presentó un contenido de humedad de 7.3 %, el contenido de amilosa fue 19.27% y tamaño de partícula de los gránulos fue 14.5 μm . En cuanto a sus propiedades funcionales, el almidón de maíz cacahuacintle presentó un índice de solubilidad de 13.08 (%) y poder de hinchamiento 14.86 (g/g). Las propiedades térmicas fueron: $T_0=60.6$ °C, $T_p=66.9$ °C, $T_c=72.8$ °C y $\Delta H_{\text{gel}} 4.5 \text{ J g}^{-1}$. Los datos encontrados revelan que el maíz cacahuacintle puede ser una buena alternativa para la obtención de almidón además permite diversificar el uso de ingredientes obtenidos a partir de cultivares regionales.

Palabras clave: Almidón, maíz cacahuacintle, propiedades funcionales, digestibilidad.

² Maestra en Ciencias, Programa de Posgrado en Ciencia y Tecnología Agroalimentaria, Universidad Autónoma Chapingo, dianae.lopez.vazquez@gmail.com

³ Doctor, Departamento de Preparatoria Agrícola, Universidad Autónoma Chapingo, eleagman@yahoo.com

⁴ Doctora, Departamento de Preparatoria Agrícola, Universidad Autónoma Chapingo, consuelobato@yahoo.com

⁵ Doctora, Departamento de Preparatoria Agrícola, Universidad Autónoma Chapingo, landy14hr@yahoo.com.mx

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



inifap



Abstract

In recent years, the interest of the food industry for the development of biofunctional ingredients has increased, due to a growing number of consumers demanding more healthy food products. In this sense, cornstarch is a valuable ingredient used for its physicochemical and techno-functional properties in food production and the industry is currently focusing on its digestibility. However, it is necessary to explore new sources of obtaining starch since its intrinsic characteristics are influenced by botanical and geographical origin. Corn is one of the main sources of starch and Mexico offers many variations of this cereal that are grouped into 68 races, among which are some varieties that have not been studied, such as cacahuacintle corn. In this study, starch was isolated from maize cacahuacintle var. ARR-11, whose yield was 61.96% and with a purity of 97.61%. The starch presented a moisture content of 7.3%, the amylose content was 19.27% and the particle size of the granules was 14.5 μm . Regarding its functional properties, cacahuacintle corn starch presented a solubility index of 13.08 (%) and swelling power of 14.86 (w / w). The thermal properties were: $T_o = 60.6 \text{ }^\circ\text{C}$, $T_p = 66.9 \text{ }^\circ\text{C}$, $T_c = 72.8 \text{ }^\circ\text{C}$ and $\Delta H_{\text{gel}} 4.5 \text{ J g}^{-1}$. The data found reveal that cacahuacintle maize can be a good alternative for obtaining starch, as well as allowing diversification of the use of ingredients obtained from regional cultivars.

Keywords: Starch, cacahuacintle corn, functional properties, digestibility

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



inifap



Introducción

Los consumidores están cada vez más conscientes sobre su alimentación por lo cual demandan ingredientes que sean saludables. El almidón es un ingrediente ampliamente utilizado en la producción de alimentos debido a su alta biodisponibilidad, bajo costo, buena compatibilidad y lo más importante que es reconocido generalmente como seguro (GRAS, por sus siglas en inglés) (Hang et al., 2019, Gheng et al., 2021).

Actualmente, la industria alimentaria se centra en la búsqueda de nuevas fuentes de almidón y en particular que presenten baja digestibilidad (Miñon-Hernández et al., 2018). El almidón se puede clasificar con respecto a su grado y velocidad de digestión como: almidón de rápida digestión (RDS), almidón de digestión lenta (SDS) y almidón resistente (RS). El RDS aumenta los niveles de glucosa en la sangre inmediatamente después de la ingestión, que puede repercutir en la aparición de enfermedades crónicas relacionadas con la dieta, como la diabetes mellitus (Chi et al., 2021). El SDS se digiere de forma lenta y prolongada en el intestino delgado, pero mantiene la concentración de glucosa estable en el torrente sanguíneo. Por otro lado, el almidón resistente (RS) puede resistir la digestión e hidrólisis de enzimas que están presentes en el tracto gastrointestinal, pero puede ser degradado por la microbiota colónica y proporciona muchos beneficios para la salud de los seres humanos, incluida la reducción de los niveles de glucosa en sangre posprandial y la mejora de la sensibilidad a la insulina (Martínez-Ortiz et al., 2017; Han, Kim, Moon y Choi, 2021).

En este sentido, se requiere explorar nuevas fuentes de obtención de almidón, ya que es bien sabido que las características intrínsecas del almidón están fuertemente influenciadas por su origen botánico y geográfico. México al ser el centro de origen y distribución del maíz (*Zea mays*) cuenta con una gran diversidad de recursos genéticos, con alrededor de 68 razas de maíz (Caballero-García et al., 2019).

Dentro de estos maíces destaca el maíz cacahuacintle, ya que su grano se caracteriza por ser de color blanco, textura harinosa y de tamaño grande, que es empleado en la cocina mexicana para la elaboración de pozole, atoles, pinoles, esquites, etc. Se cultiva principalmente en los estados de Puebla, Estado de México y Morelos, que para el año 2019 tuvieron una producción de 1 388, 9 249 y 10 215 toneladas, respectivamente (SIAP, 2019). Los estudios han demostrado que el maíz cacahuacintle presenta niveles superiores de aminoácidos esenciales como lisina y triptófano (3.7 y 0.78 g/100 g de proteína, respectivamente), en comparación de otros maíces que son deficientes en este tipo de aminoácidos, además cabe resaltar que contiene un alto contenido de almidón siendo aproximadamente del 70.8 %, por lo que tiene potencial para la obtención de dicho ingrediente (Téllez-Silva et al., 2016, Vázquez & Santiago, 2013). A pesar de la gran diversidad de variedades

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



de maíz, no existe información sobre almidones nativos obtenidos de maíz cacahuacintle, ni sobre sus propiedades fisicoquímicas, funcionales, térmicas y biológicas. En consecuencia, este trabajo tiene como objetivo caracterizar las propiedades fisicoquímicas, funcionales y digestibilidad del almidón de una variedad mejorada de maíz cacahuacintle var. ARR-11 (*Zea mays*).

Materiales y métodos

Materiales

Los granos de maíz cacahuacintle var. ARR-11 (*Zea mays*) se obtuvieron de un productor local de la comunidad de Juchitepec, Estado de México, México, con coordenadas GPS de 19 ° 52 ' 28 " N y 98 ° 52 ' 54 " O y una elevación sobre el nivel del mar de 2 511 m. El ácido clorhídrico (HCl), el hidróxido de sodio (NaOH) y el etanol eran de calidad analítica y se adquirieron de J.T. Baker (Xalostoc, Estado de México, México). Kit GO-POD adquirido de Sigma Aldrich (A3176, Sigma Aldrich, St Louis, MO, EE. UU.). El agua utilizada en todos los experimentos fue destilada y desionizada.

Extracción de almidón de maíz cacahuacintle

El almidón de maíz cacahuacintle var. ARR-11 se obtuvo por el método descrito por Mir et al., (2016) con ligeras modificaciones. Se sumergieron 200 g de granos de maíz en 200 mL de solución bisulfito de sodio al 0.16% (p/p) durante 24 h. Posteriormente se drenó la solución de bisulfito de sodio y los granos de maíz se lavaron con 200 mL de agua destilada y se molieron en una licuadora (Oster, México). La mezcla se tamizó a través de una malla 100. El sobrenadante se descartó y el sedimento se mezcló con una solución de hidróxido de sodio al 0.2% (p/p). El sobrenadante se desechó y el sedimento de almidón se suspendió en agua. Después, la suspensión de almidón se pasó a través de una malla 325. El almidón se lavó repetidamente con agua destilada hasta que el pH de la suspensión de almidón llegó a 7. El sobrenadante se desechó y la capa de almidón sedimentado se resuspendió en agua destilada y se colocó en una centrífuga (5810R, Eppendorf, Hamburgo, Alemania) a 3000 × g por 10 min. Posteriormente, la capa blanca se recogió y se secó en una estufa de aire forzado (HCF-62, Riossa Digital, Puebla, México) a 40 °C durante 24 h.

Rendimiento

El rendimiento de la extracción de almidón de maíz cacahuacintle var. ARR-11 se determinó por la Ecuación 1, descrita por Silva et al., (2020).

$$\text{Rendimiento (\%)} = \frac{\text{Almidón de maíz cacahuacintle (g)}}{\text{Masa inicial de los granos de maíz (g)}} \times 100 \quad \text{Ecuación 1}$$

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



inifap



Cabe señalar que el almidón de maíz y los granos de maíz cacahuacintle fueron expresados en base seca.

Humedad

Se determinó con un analizador de humedad (Ohaus, MB23, Parsippany, NJ, EE. UU.) secando la muestra a 105 ° C hasta un peso constante (Committee on Chemicals Codex, 1981).

Contenido de almidón total

El contenido total de almidón de maíz cacahuacintle se analizó mediante el método de Goñi et al. 1997. Se pesaron 50 mg de la muestra de almidón, se dispersaron en 3 mL de agua destilada y 3 mL de KOH 4 M a temperatura ambiente durante 30 min para solubilizar el almidón. A continuación, se añadieron 60 µl de amiloglucosidasa de *Aspergillus niger* (en tampón de acetato de sodio, pH 4.6) y la mezcla se incubó durante 45 min a 60 °C en un baño de agua. Después de la incubación, las muestras de almidón se centrifugaron durante 10 min a 3000 × g. Posteriormente, se recogieron los sobrenadantes y se determinó la concentración de glucosa en cada sobrenadante utilizando un kit de ensayo de glucosa. La cantidad de glucosa liberada se midió a 540 nm usando un espectrofotómetro UV contra el blanco de reactivo.

Contenido de amilosa aparente

El contenido aparente de amilosa se determinó según la metodología ISO, (1987). El almidón de maíz cacahuacintle ARR-11 (0.1g, base seca) se dispersó en 1 mL de etanol (96%) y 10 mL de NaOH (1 M), con agitación constante durante 1 h. La solución se transfirió a un matraz aforado de vidrio (100 mL) y el volumen se completó con agua destilada. Se mezcló una alícuota de 2 mL de esta solución con 2.1 mL de ácido clorhídrico (0.1 M), 2 mL de solución de yoduro (2 g de yoduro de potasio + 0.2 g de yodo + agua (hasta 100 mL)), y el volumen fue completado con agua destilada. Después se reposó 30 min en oscuridad, se leyó la absorbancia a 620 nm y 510 nm.

Tamaño de partícula

El tamaño de los gránulos de almidón se determinó mediante análisis de difracción láser (Mastersizer 3000, Malvern Instruments Ltd., Malvern, Reino Unido). La muestra de almidón (50 mg, peso seco) se suspendió en 5 ml de agua y se agitó suavemente para dispersar el almidón. La suspensión se añadió lentamente a Mastersizer y el oscurecimiento estuvo en el intervalo de 15-20% (Gao et al., 2020).

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



inifap



Calorimetría diferencial de barrido

Las propiedades térmicas del almidón de maíz cacahuacintle se obtuvieron mediante calorimetría diferencial de barrido (DSC, por sus siglas en inglés) (DSC131-EVO, Setaram instrumentation, Cuernavaca México), empleando la metodología descrita por da Silva et al., (2020). Se pesaron muestras de almidón (2.5 mg en base seca) directamente en recipientes de aluminio y se añadió agua destilada para obtener una suspensión acuosa que contenía 75% de agua. La charola se selló herméticamente y se dejó equilibrar durante 1 h antes del análisis. Se utilizó una charola vacía como referencia. A continuación, las bandejas de muestra se calentaron de 30 a 120 ° C a una velocidad de 10 ° C · min⁻¹. Se midieron la temperatura de inicio de gelatinización (T₀), la temperatura máxima (T_p), la temperatura de conclusión (T_c) y la entalpía de gelatinización (ΔH).

Análisis estadístico

Todos los experimentos se realizaron por triplicado usando un diseño experimental completamente al azar. Los datos obtenidos se sometieron a análisis de varianza (ANOVA), y en los casos pertinentes, a pruebas de comparación de medias de Tukey con una significancia de $p \leq 0.05$. Para el análisis de datos se utilizó el paquete estadístico Statgraphics Plus (Statistical Graphics Corp., Manugistics, Inc., Cambridge, MA, EUA).

Resultados y discusión

Rendimiento

El rendimiento obtenido del proceso de extracción de almidón de maíz cacahuacintle var. ARR-11 fue 61.96 % (expresado en base seca), dicho rendimiento se encuentra dentro del rango de 60.0 a 72.0 % reportado por Rausch et al., (2019) en maíces normales. Por su parte, Uriarte-Aceves et al. (2015) obtuvieron recuperaciones de almidón de maíz azul que oscilan entre 58.8 y 71.5 %. Somavat et al. (2016) obtuvieron rendimientos de 61.5 % para almidón de maíz morado, 63.4% en almidón de maíz azul y 70.1% para maíz dentado amarillo, al utilizar molienda húmeda. Sin embargo, el rendimiento fue menor a los reportados por Uriarte-Aceves, Sopade y Rangel-Peraza (2019), en maíz blanco que oscilaron entre 70.0 y 73.1%.

Esta variación en los rendimientos de almidón está dada por diversos factores dentro los que se encuentran: el genotipo de maíz, las condiciones ambientales, de manipulación (como el proceso de secado de los granos de maíz) y almacenamientos posteriores a la cosecha (Uriarte-Aceves, Sopade y Rangel-Peraza, 2019; da Silva-Timm et al., 2020).

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



Humedad

El contenido de humedad obtenido en el almidón de maíz cacahuacintle fue de 7.30 ± 0.85 % (en base húmeda), pero fue menor a lo reportado por Uriarte-Aceves et al. (2019) cuyo contenido de humedad en muestras de almidón de maíz blanco oscilaban entre 11.04 a 12.12 %. De acuerdo con Malumba et al. (2009), la humedad en las muestras de almidón es un parámetro que debe ser controlado cuidadosamente para no afectar el rendimiento.

Contenido de almidón total

El contenido de almidón total se realizó con la finalidad de verificar la pureza del almidón aislado del maíz cacahuacintle, cuyo valor fue 97.61 ± 0.53 %, lo que indica una alta pureza, además este parámetro es importante ya que las propiedades y funcionalidad del almidón pueden verse afectadas.

Contenido de amilosa

El contenido de amilosa en almidón de maíz cacahuacintle fue de 19.27 ± 0.02 %, valor muy cercano a lo reportado por Ziegler et al. (2020) cuyo contenido de amilosa varió de 21.32 a 23.03 % en almidón de maíz palomero rojo. Da Silva-Timm et al. (2020) reportaron que los niveles de amilosa se encontraron dentro del rango de 22.64 y 24.89 % en almidones de maíz amarillo harinoso, maíz blanco harinoso y maíz amarillo silex. El contenido de amilosa afecta las propiedades de gelatinización y retrogradación, un efecto benéfico de la retrogradación es la formación de estructuras retrogradadas que son resistentes al ataque enzimático (es decir, se forma una fracción de almidón resistente), lo cual está asociado con la prevención de enfermedades como el cáncer de colon, disminución de colesterol y glucosa en sangre, ya que actúa como prebiótico (Agama-Acevedo et al. 2005).

Tamaño de partícula

El tamaño de partícula de los gránulos de almidón de maíz cacahuacintle fue de 14.5 ± 0.05 μm , el cual se encuentra dentro del rango entre 2.3 y 19.5 μm reportado para almidones obtenidos de diferentes cultivares de maíz procedentes de la región templada del Himalaya (Mir et al., 2017). El tamaño de los gránulos de almidón depende de la variedad de maíz, el clima o entorno y también por el método de extracción utilizado (Agama-Acevedo et al., 2005; Mir et al., 2017), por otro lado, el tamaño de los gránulos influye en la determinación de las propiedades físicas del almidón, tales como la gelatinización, cristalinidad y solubilidad (Wijaya et al., 2019).

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



Índice de solubilidad y poder de hinchamiento

El almidón de maíz cacahuacintle presentó un índice de solubilidad de 13.08 (%) y poder de hinchamiento 14.86 (g/g). El poder de hinchamiento y la solubilización de los almidones se ve influenciado por diversos factores, como, el contenido de amilosa, las interacciones amilosa-amilopectina y amilosa-amilosa, la capacidad de retención de agua de las moléculas de almidón, el tamaño del gránulo, el grado de cristalinidad y la presencia de otros componentes menores (Jiang et al., 2012; Li & Zhu, 2017).

Calorimetría diferencial de barrido

El análisis DSC se realizó con la finalidad de conocer las propiedades térmicas del almidón de maíz cacahuacintle. Los parámetros de DSC (temperatura de inicio, T_o ; temperatura máxima, T_p ; temperatura de conclusión, T_c ; y entalpía de gelatinización, ΔH_{gel}) se muestran en el Cuadro 1.

Cuadro 1. Propiedades térmicas de almidón de maíz cacahuacintle.

Muestra	T_o (°C)	T_p (°C)	T_c (°C)	ΔH_{gel} (J g ⁻¹)
Almidón de maíz cacahuacintle	60.6 ± 0.5	66.9 ± 0.6	72.8 ± 0.7	4.5 ± 0.2

La estabilidad estructural del almidón comenzó a romperse a la temperatura de inicio $T_o= 60.6$ °C, a medida que se alcanzó la temperatura máxima ($T_p= 66.9$ °C), algunas partes cristalinas se vuelven amorfas debido a la hinchazón de la región, propiciando la disociación y desdoblamiento de las dobles hélices (Wijaya et al., 2019).

La entalpía de gelatinización (ΔH_{gel}) puede ser utilizado como indicador en el consumo de energía del almidón durante el proceso de gelatinización (Gao et al., 2020). Además, el ΔH_{gel} refleja la pérdida de orden molecular, asociado con una transición de un estado ordenado a uno desordenado o fusión de cristalitas de almidón (Morales-Trejo, Trujillo-Ramírez, Aguirre-Mandujano, Lobato-Calleros, Vernon-Carter y Alvarez-Ramirez, 2021). El valor de la ΔH_{gel} del almidón de maíz cacahuacintle fue de 4.5 ± 0.2 J g⁻¹, el cual fue similar a los valores de ΔH_{gel} de almidón de maíz normal (3.93 J g⁻¹, Gao et al., 2020). Los bajos valores de entalpía pueden ser asociados con una menor cantidad de dobles hélices en las moléculas de amilopectina (Hoyos-Leyva et al., 2015). Por otro lado, las propiedades de gelatinización del almidón se ven afectadas por diversos factores,

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



iniqap



tales como: el tamaño de los gránulos, el contenido de amilosa, proporción y tipo de organización cristalina y ultraestructura de los gránulos de almidón (Morales-Trejo et al., 2021).

Conclusiones

La extracción de almidón de maíz cacahuacintle de la var. ARR-11 representa una buena fuente de obtención, con buenas propiedades fisicoquímicas. Por lo tanto, el almidón de maíz cacahuacintle tiene potencial para ser utilizado como agente espesante y estabilizador en sistemas alimentarios, así como ingrediente para películas comestibles, además de un mayor uso y diversificación de este cultivo.

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



inifap



Bibliografía

- Agama-Acevedo, E., Ottenhof, M. A., Farhat, I. A., Paredes-López, O., Ortíz-Cereceres, J., & Bello-Pérez, L. A. (2005). Aislamiento y caracterización del almidón de maíces pigmentados. *Agrociencia*, 39(4), 419-429.
- Chi, C., Li, X., Huang, S., Chen, L., Zhang, Y., Li, L., & Miao, S. (2021). Basic principles in starch multi-scale structuration to mitigate digestibility: A review. *Trends in Food Science & Technology*.
- da Silva Timm, N., Ramos, A. H., Ferreira, C. D., Biduski, B., Eicholz, E. D., & de Oliveira, M. (2020). Effects of drying temperature and genotype on morphology and technological, thermal, and pasting properties of corn starch. *International Journal of Biological Macromolecules*, 165, 354-364.
- Gao, W., Liu, P., Zhu, J., Hou, H., Li, X., & Cui, B. (2020). *Physicochemical properties of corn starch affected by the separation of granule shells*.
- Han, K. T., Kim, H. R., Moon, T. W., & Choi, S. J. (2021). Isothermal and temperature-cycling retrogradation of high-amylose corn starch: Impact of sonication on its structural and retrogradation properties. *Ultrasonics Sonochemistry*, 105650 (6)1-8.
- Miñon-Hernández, D., Villalobos-Espinosa, J., Santiago-Roque, I., González-Herrera, S. L., Herrera-Meza, S., Meza-Alvarado, E., ... & Guzmán-Gerónimo, R. I. (2018). Biofunctionality of native and nano-structured blue corn starch in prediabetic Wistar rats. *CyTA-Journal of Food*, 16(1), 477-483.
- Mir, S. A., Bosco, S. J. D., Bashir, M., Shah, M. A., & Mir, M. M. (2017). Physicochemical and structural properties of starches isolated from corn cultivars grown in Indian temperate climate. *International Journal of Food Properties*, 20(4), 821-832.
- Morales-Trejo, F., Trujillo-Ramírez, D., Aguirre-Mandujano, E., Lobato-Calleros, C., Vernon-Carter, E. J., & Alvarez-Ramirez, J. Ultrasound-Assisted Extraction of Lychee (*Litchi chinensis* Sonn.) Seed Starch: Physicochemical and Functional Properties. *Starch-Stärke*, 2100092.

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



inifap



- Rausch, K. D., Hummel, D., Johnson, L. A., & May, J. B. (2019). Wet milling: The basis for corn biorefineries. In *Corn* (pp. 501-535). AACC International Press.
- Somavat, P., Li, Q., Gonzalez De Mejia, E., Liu, W., & Singh, V. (2016). Coproduct yield comparisons of purple, blue and yellow dent corn for various milling processes. *Industrial Crops and Products*, 87, 266–272.
- Uriarte-Aceves, P. M., Sopade, P. A., & Rangel-Peraza, J. G. (2019). Physical, chemical and wet-milling properties of commercial white maize hybrids cultivated in México. *Journal of Food Processing and Preservation*, 43(7), e13998.
- Wijaya, C., Do, Q. D., Ju, Y. H., Santoso, S. P., Putro, J. N., Laysandra, L., ... & Ismadji, S. (2019). Isolation and characterization of starch from *Limnophila aromatica*. *Heliyon*, 5(5), e01622.
- Ziegler, V., Timm, N. da S., Ferreira, C. D., Goebel, J. T., Pohndorf, R. S., & Oliveira, M. de. (2020). Effects of drying temperature of red popcorn grains on the morphology, technological, and digestibility properties of starch. *International Journal of Biological Macromolecules*, 145, 568–574.

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



Análisis por Resonancia Magnética Nuclear del extracto activo de acetato de etilo de semillas de *Annona purpurea* sobre la larva del mosquito vector del dengue (*Aedes aegypti*)

⁶Benito Reyes-Trejo, Holber Zuleta Prada, ⁷Lino Reyes-Trejo, ⁸Hussein Sánchez-Arroyo

RESUMEN

Se analizó por Resonancia Magnética Nuclear las fracciones obtenidas por percolación del extracto de AcOEt que resultó con actividad larvicida en bioensayo biodirigido de semillas de *Annona purpurea* en *Aedes aegypti* L. Se estimó el porcentaje de mortalidad de fracciones obtenidas por cromatografía en columna a las 24 y 48 horas de exposición a las larvas, usando las concentraciones 1000, 100, 10 y 1 $\mu\text{g/mL}$. Dicho extracto fue sometido a una percolación por cromatografía en columna empacada con silicagel y eluida con hexano (F1), mezclas de hexano-AcOEt (9:1 (F2), Hexano-AcOEt 7:3 (F3), hexano-AcOEt 1:1 (F4), AcOEt al 100 % (F5) y metanol al 100 % (F6). En este análisis la fracción F1 correspondió a una mezcla de grasas, en tanto que la fracción F2, correspondió a una mezcla de triglicéridos, el resto de las fracciones F3 a F6, aportó información que la composición química de estas debe corresponder a la estructura de acetogeninas α,β -insaturadas en el anillo de una γ -lactona. En especial la fracción F5 indicó la presencia de una acetogenina conteniendo un grupo carbonilo de cetona, lo cual constituye una nueva aportación a la composición de esta planta

Palabras clave: *Annona purpurea*, Acetogeninas, Insecticida, recurso fitogenético

ABSTRACT

Nuclear Magnetic Resonance (NMR) was used to analyze the chemical structure of the components contained in fractions obtained by percolation of the EtOAc extract of that resulted with larvicide activity by means a bio-guided study of the extracts of seeds of *Annona purpurea* in *Aedes aegypti* L. The percentage of mortality of fractions obtained by column chromatography at 24 and 48 hours

⁶ Laboratorio de Productos Naturales, Área de Química, Departamento de Preparatoria Agrícola, Universidad Autónoma Chapingo. Km 38.5 Carretera México-Texcoco. 56230, Texcoco, Edo. de México, México. Tel. 01 (55) 5133-1108 Ext 5760. hozuleta_13@hotmail.com, *Autor principal: benijovi@yahoo.com.mx

⁷ Departamento de Química Orgánica, Facultad de Química, UNAM, Ciudad Universitaria, Delegación Coyoacán. 04510, D.F. México. Linoj23@yahoo.com.mx

⁸ Colegio de Postgraduados, Campus Montecillo, Instituto de Fitosanidad. Km 36.5 Carretera México-Texcoco. 56230, Montecillo, Texcoco, Edo. de México, México. hussein@colpos.mx

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



inifap



of exposure to the larvae was estimated, using concentrations of 1000, 100, 10 and 1 $\mu\text{g}/\text{mL}$. This extract was subjected to percolation by column chromatography packed with silicagel and eluted with hexane (F1), mixtures of hexane-EtOAc (9:1 (F2), Hexane-EtOAc 7:3 (F3), hexane-EtOAc 1:1 (F4), EtOAc 100% (F5) and 100% methanol (F6). In this analysis the fraction F1 corresponded to a mixture of unknown fats, while the fraction F2, corresponded to a mixture of triglycerides, the rest of the fractions F3 to F6, provided information that the chemical composition of these fractions must correspond to the structure of acetogenins α,β -unsaturated in the ring of a γ -lactone. In special, fraction F5 exhibited the presence of an acetogenin containing a carbonyl group of ketone, this result contribute to a new finding in the composition of this plant

Key words: *Annona purpurea*, Acetogenins, Insecticide, Phylogenetic Resources.

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



INTRODUCCIÓN

Las estimaciones mundiales actuales indican que cada año pueden producirse entre cincuenta y cien millones de infecciones por el virus del dengue (WHO, 2017). De acuerdo con la Organización Mundial de la Salud (OMS), dos quintas partes de la población mundial vive en riesgo de ser infectada por dengue y más de 100 países han sido afectados por epidemias de dengue o dengue hemorrágico. La OMS estima que anualmente ocurren más de 500,000 casos hospitalizados y alrededor de 20,000 defunciones. El 95% de los casos son niños. En México, según datos de la Dirección General Epidemiológica, en los últimos siete años se han registrado 291 305 casos y alrededor de 500 defunciones por este virus.

Por otro lado, la Organización Panamericana de la Salud recomienda que para el control del mosquito vector del dengue (*Aedes aegypti*) se lleven a cabo acciones de manejo ambiental, control biológico y el control químico (OPS, 2019). Siendo el más utilizado el control químico, sin embargo, el uso inadecuado de insecticidas ha conducido a la aparición de poblaciones resistentes. Y esta resistencia se ha detectado en todas las clases de insecticidas, lo que beneficia, directamente el resurgimiento de las enfermedades (Braga y Valle, 2007). Por lo que, una alternativa en el control de este vector es el uso de extractos vegetales, debido a su compleja cantidad de moléculas que muestran diversas bioactividades. Los niveles de toxicidad son elevados en relación a la acción de compuestos individuales químicamente puros y sin el riesgo de generar resistencia (Bobadilla *et al.*, 2005).

Muchas especies vegetales, especialmente las de la familia Annonaceae, han mostrado tener bioactividades insecticidas (De Mendonça *et al.*, 2005). Dicha actividad se produce gracias a un grupo de metabolitos secundarios distribuidos principalmente en la familia annonaceae llamadas acetogeninas (Zafra *et al.*, 1998). Sin embargo, no se han terminado de explorar todas las especies de la familia, como, por ejemplo, la chincuya (*Annona purpurea* L.) que es un frutal originario sureste de México, Centroamérica y el norte de Suramérica. Un caso particular ha sido publicado del estudio de extractos alcohólicos de las semillas de pimienta negra (*Piper nigrum*) y de semillas de guanábana (*Annona muricata*) para controlar larvas del mosquito causante del dengue (*Aedes aegypti*) y concluyó en que la actividad biológica se debió a la piperina y las acetogeninas de las semillas de guanábana (Grzybowski *et al.*, 2012). Por este motivo y con el propósito de incorporar un recurso alternativo para el control del mosquito *A. aegypti*, dentro de un manejo racional y sostenible de nuestro medio ambiente, la presente investigación tiene como objetivo evaluar la toxicidad de extractos de las semillas de *Annona purpurea* L. (chincuya) sobre larvas de *Aedes aegypti* L. (Díptera: Culicidae), para evitar la proliferación del principal vector del virus del dengue y finalmente elucidar la estructura molecular de los metabolitos secundarios de los que se presume

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



inifap



radica la actividad larvicida, para aportar un nueva alternativa natural y sustentable para controlar al dengue.

Antecedentes

El fruto de *Annona purpurea* está ubicado en la familia de las anonáceas que cuenta con un gran número de especies frutales y productoras de aceites esenciales (León, 1969). Las cuales también se conocen porque contienen acetogeninas. Debido a que no forma parte de la dieta habitual, el uso de las semillas no representa un problema ético. En México los frutos de esta anonacea se utilizan principalmente como alimento: su pulpa se consume cruda o en jugo como bebida refrescante, también se emplea como remedio para la fiebre y la gripe, el extracto de la semilla se llega a utilizar como insecticida, sin embargo, la mayoría de las semillas se desechan. Diversas partes de la planta de esta especie han sido objeto de investigaciones previas, por ejemplo se ha descrito el contenido de alcaloides en las hojas y ramas de *A. purpurea* recolectadas en Puerto Rico (Sonnet y Jacobs, 1971), En otros estudios sobre anonáceas Wu *et al*, 2000, reportan los alcaloides: promucosina, romucosina F, y romucosina G, obtenidos de las ramas y de las semillas se ha obtenido el perfil de lípidos y flavonoides (Pérez *et al*, 1997), a partir de las semillas de frutos de la *A. purpurea* procedentes de México (Chávez y Mata, 1998), se obtuvieron las nuevas acetogeninas nombradas como Purpurediolina y Purpurenina además de otras conocidas como purpuracena, bulatacena, esquamacina, motrilina, anoglaucina, xilomatenina y anonacina. A. recientemente de las raíces de este mismo espécimen se aislaron e identificaron nuevas acetogeninas nombradas como annopurpuricinas A, B, C, D y E, (Hernández-Fuentes *et al*, 2019)

MATERIALES Y MÉTODOS

Material vegetal

Una muestra de frutos de *Annona purpurea* aportó las semillas previamente colectadas en el mes de septiembre del año 2019, en Cintalapa, poblado de Chicomuselo, del Estado de Chiapas.

Obtención de las semillas

Los frutos se despulparon y se obtuvieron las semillas, las cuales, se secaron a temperatura ambiente bajo sombra durante quince días. Posteriormente, con ayuda de un cascanueces se extrajeron las almendras de dichas semillas para continuar con el estudio.

Molienda de las semillas

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



inifap



Considerando un lote de 1.0 Kg de almendras de chuncuya, se procedió con el molido de las mismas empleando una licuadora doméstica tipo nutri-bullet, y se mantuvieron bajo refrigeración y abrigadas de la luz hasta el momento de su uso.

Obtención de extractos

A partir de 1.0 kg de almendras molidas de *A. purpurea*, se prepararon extractos de menor a mayor polaridad y por maceración, empezando con la adición de 5 L de hexano al material vegetal, manteniéndose durante 3 días, pasado este tiempo se separó el hexano por filtración y se recupera este disolvente por evaporación al vacío utilizando un rotavapor marca Buchi, el disolvente recuperado se reincorporó a las semillas molidas y se mantuvo así durante otros tres días, pasado el tiempo se filtró y evaporó el disolvente, esta operación se repitió por tercera ocasión para dar un extracto hexánico aceitoso y un residuo vegetal. A dicho residuo se le adicionaron 5 L de cloruro de metileno y se extrajo durante tres días (3 veces), al filtrar y evaporar el disolvente se obtuvo un extracto de cloruro de metileno, y un segundo residuo vegetal. Este último residuo fue sometido a una extracción por maceración (3 veces por tres días cada una) empleando 5 L de acetato de etilo (AcOEt) al evaporar el disolvente se obtuvo un extracto de AcOEt y otro residuo vegetal, enseguida se efectuaron otras extracciones empleando el mismo procedimiento anterior con 5l de acetona, después con 5 L de etanol, enseguida con 5 L de etanol y al final con 5L de una mezcla de etanol-agua (1:1) acidulada con ácido acético al 1%.

Percolación del extracto de acetato de etilo

Se pesó 15 g del extracto de acetato de etilo por desarrollar la segunda mayor actividad larvívica, y se sometió a una separación por cromatografía de columna o percolación. Para lo cual se empleó una columna de vidrio con 800 g de Silica gel 60 Merck (0.063-0.200 mm) (70-230 mesh ASTM) cuyo volumen de cambio fue estimado en 900 mL. A la columna cromatográfica se le hizo pasar los disolventes hexano y acetato de etilo de manera individual y en combinación en un orden creciente de polaridad terminando con metanol; F1 Hex, F2. Hex/AcOEt (9:1), F3 Hex/AcOEt (7:3), F4 Hex/AcOEt (1:1), F5 AcOEt y F6 metanol. Al evaporar los disolventes se obtuvieron las fracciones de percolación F1, F2, F3, F4, F5 y F6, El seguimiento de la cromatografía se efectuó usando placas cromatográficas de gel de sílice, una lámpara de luz UV como revelador físico no-destructivo y por medio de la aspersión de los reveladores vainillina-ácido sulfúrico y ácido fosfomolibdico, desarrollándose coloración o aparición de manchas en las cromatoplasmas analíticas, por medio de un calentamiento a 120 °C por 30 segundos.

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



Detección de metabolitos secundarios por RMN de ^1H y ^{13}C

Las fracciones obtenidas (F1 a F6) de la percolación del extracto de AcOEt obtenidos, fueron sometidos a un análisis por Resonancia Magnética Nuclear de ^1H (RMN de ^1H) y de RMN de ^{13}C , así mismo fueron sometidos a estudios de RMN bidimensional Heteronuclear de tipo HSQC y HMBC, entonces se pesaron 50 mg de cada extracto y se disolvieron en 0.75 mL de CDCl_3 , y transferidos a un tubo de RMN (5 mm de diámetro x 150 mm de largo) y se determinaron sus espectros de RMN.

Bioensayo de la actividad insecticida-larvicida contra *Aedes aegypti*. Proliferación del insecto

Para este trabajo se utilizó la cepa susceptible Nueva Orleans de *Aedes aegypti* L, obtenidas del Insectario del Programa de Fitosanidad: Entomología y Acaralogía del Colegio de Posgraduados, Texcoco, Edo de México. El ciclo de vida del mosquito se desarrolló en el laboratorio de Productos Naturales del Área de Química del Departamento de Preparatoria Agrícola de la Universidad Autónoma Chapingo.

Preparación de disoluciones por evaluar

Se prepararon las soluciones madre a una concentración del 1000 ppm utilizando 500 mg de extractos y se suspendieron en dimetil sulfoxido (DMSO) al 5% y 500 mL de agua potable, para tener sistemas homogéneos en lo posible se empleó un sonicador Cole-Palmer 8890®.

Bioensayo

Para los bioensayos de actividad larvicida se siguieron las recomendaciones del protocolo de la Organización Mundial de la Salud (WHO, 2005). A vasos de precipitados de 250 mL, se les adicionaron los extractos en concentraciones de 1000, 100, 10 y 1 $\mu\text{g/mL}$, con tres repeticiones por concentración. Preparados de la manera siguiente:

Suspensión madre de concentración a 1000 $\mu\text{g/mL}$.- Se pesaron 500 mg de cada fracción (F1 a F6) en un vaso de precipitados de 250 mL, se adicionaron 5 mL de Dimetil sulfoxido (DMSO) y se agitó vigorosamente utilizando una varilla de vidrio, enseguida se agregaron porciones de 5 mL de agua potable y se siguió agitando hasta tener aprox 50 mL de suspensión, seguidamente se sometió a un proceso de sonicación por 5 min o hasta obtener una mejor suspensión. El contenido del vaso se colocó en el interior de un matraz aforado de 500 mL, y se aforó a 500 mL con agua potable, se agitó finalmente de manera muy vigorosa.

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



iniqap



Suspensión de concentración a 100 µg/mL.- Se tomó una alícuota de 50 mL de la solución madre (1000 µg/mL) y se colocó en el interior de un matraz aforado de 500 mL, se completó a la marca con agua potable y se agitó vigorosamente.

Suspensión de concentración a 10 µg/mL.- Se tomó una alícuota de 50 mL de la solución (100 µg/mL) y se colocó en el interior de un matraz aforado de 500 mL, se completó a la marca con agua potable y se agitó vigorosamente.

Una vez preparadas las suspensiones se repartieron 100 mL de las suspensiones de 1000, 100 y 10 µg/mL en vasos desechables de 250 mL (Del número 8) y se colocaron a cada vaso y con ayuda de una pipeta Pasteur, 20 larvas de *Aedes aegypti* de los estadíos tercero tardío y cuarto temprano. Se registró la mortalidad después de 24 y 48 horas de exposición a los extractos. Se consideró como muertas a las larvas que no llegaron a la superficie de la solución y las que puparon fueron descartadas para el análisis. Se incluyó una preparación como blanco que contuvo solamente una disolución de 5 mL de DMSO y 500 mL de agua potable a la que se le adicionaran 20 larvas de *Aedes aegypti*. todas las evaluaciones se ensayaron por triplicado

Resultados y discusión

Como se mencionó, un ensayo preliminar de la actividad larvicida de los seis extractos preparados a partir de las semillas de chincuya o *Annona purpurea*, fueron evaluados en el bioensayo de la actividad larvicida empleando larvas de *Aedes aegypti*, (Figura 1, la numeración de 1 a 20 corresponde a los tratamientos evaluados, los números que no ubican barras corresponden solo a una separación de tratamientos), observándose que los extractos de diclorometano (CH_2Cl_2 a las 24 y 48 hrs), y de acetato de etilo (AcOEt a las 24 y 48 hrs) provocaron los mayores porcentajes de mortalidad de dichas larvas tanto a las 24 como a las 48 hrs. específicamente al segundo día de observación los porcentajes de mortalidad fueron de 90 y 51.66 % a la concentración de 10 µg/mL, respectivamente (Tercer bloque de barras 7 y 8, en color gris de izquierda a derecha), como se muestra en la figura 1 (De Mendoza et al., 2005).

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



iniqap

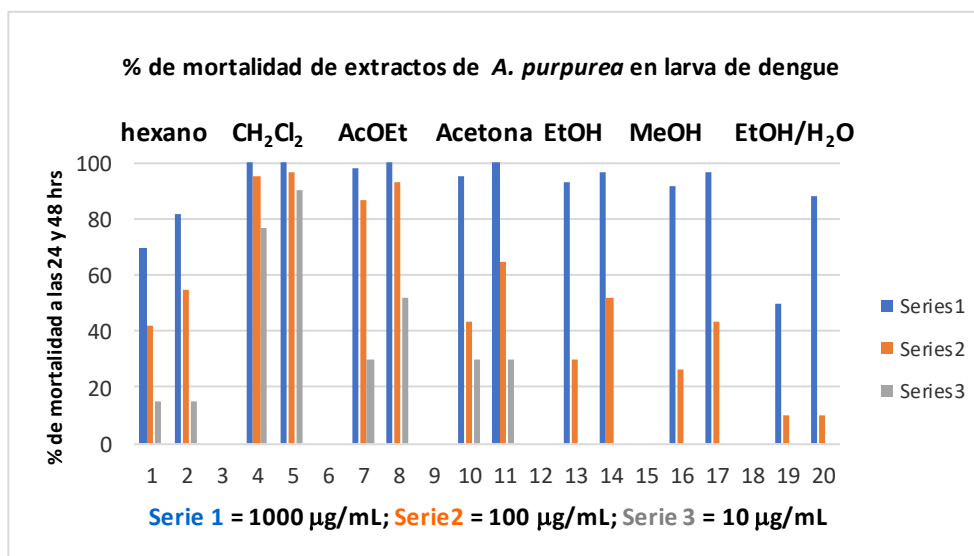


Figura 1. Gráfica de mortalidad de extractos de semillas de *A. purpurea* sobre las larvas de *Aedes aegypti* a las 24 y 48 horas. *Las evaluaciones corresponden al promedio de tres repeticiones, empleando DMSO como control negativo

Se analizaron las fracciones obtenidas de la partición de AcOEt obtenidas por cromatografía en columna, etiquetadas como: hexano (F1) y las mezclas de hexano/acetato de etilo 9:1 (F2), 7:3 (F3), 1:1 (F4), acetato de etilo puro (F5) y metanol puro (F6). Estas seis fracciones, fueron analizadas por espectrometría de Resonancia Magnética Nuclear a 400 MHz (Figura 2).

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021

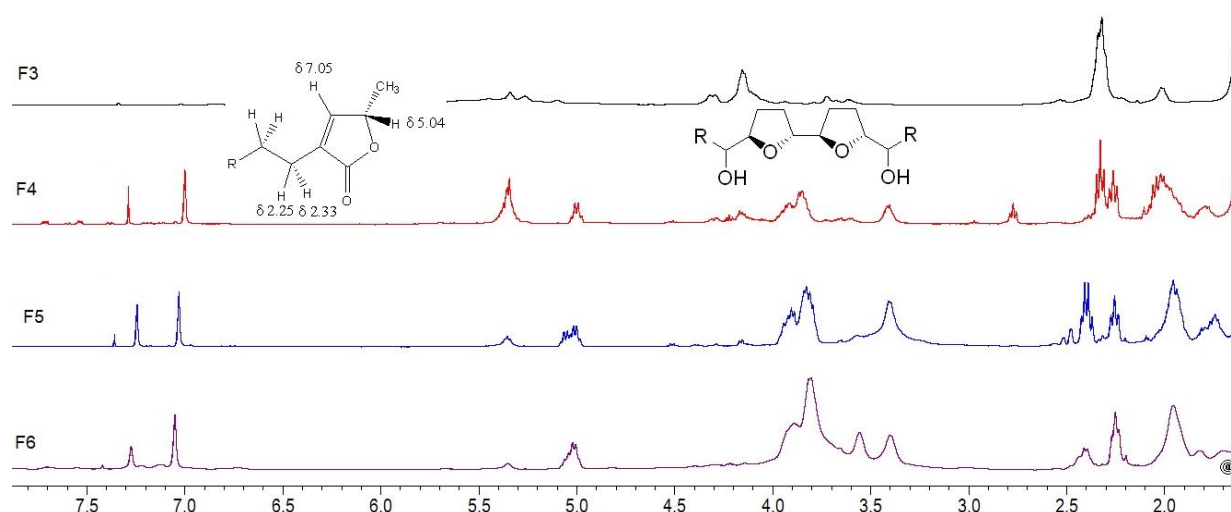


Figura 2.- Expansiones de los espectros de Resonancia Magnética Nuclear de Hidrógeno (RMN-¹H, CDCl₃, TMS) a 400 MHz de las fracciones F3-F6, obtenidas de la partición del extracto de AcOEt de semillas de frutos de chincuya (*Annona purpurea*)

Las fracciones F1 y F2, mostraron la presencia de una grasa (F1) y de un triglicérido o mezcla de triésteres de ácidos grasos (F2) por otro lado, los espectros de RMN de ¹H mostrados en la figura 2, indican que la fracción F3 contiene una cantidad muy pequeña acetogeninas (señales débiles en $\delta 7.05$ y $\delta 7.24$), pero a partir de la señal diagnóstica en $\delta 5.04$ exhiben que la fracción F4 tiene un alto grado de pureza, ya que dicha señal corresponde a un acoplamiento cuádruple de constante de $J = 7$ Hz, asociada a una γ -lactona, α, β -insaturada. En tanto que las fracciones F5 y F6, muestran al menos dos señales cuádruples sobrepuestas, sugiriendo que contienen una mezcla de dos o más acetogeninas. En este sentido, se discutió la posible estructura de las acetogeninas de la Fracción F4. En el espectro de RMN de ¹H de esta fracción determinado a 400 MHz en cloroformo deuterado, se observan dos señales, una en $\delta 7.24$ y otra a $\delta 7.05$, de un hidrógeno vinílico de una γ -lactona, α, β -insaturada, otra señal que ya se había descrito como diagnóstica en $\delta 5.04$ se asoció a un hidrógeno base de oxígeno del éster de la lactona ya mencionada, por otro lado, entre 3.0 y 4.4 ppm se localizaron señales múltiples de los protones base de anillos de THF (Éteres cíclicos de cinco miembros) de hidrógenos base de alcohol (R-CH-OH), así mismo se observa una señal doble en 1.41 ppm de un grupo metilo (CH₃-) insertado en la lactona que se menciona. Finalmente, en 5.34 ppm, se aprecia un conjunto de señales típicas de protones de alqueno (H-C=C-H), sugiriendo

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



inifap



que dentro de la cadena de estas acetogeninas de 35 o 37 átomos de carbono existe uno o dos enlaces dobles.

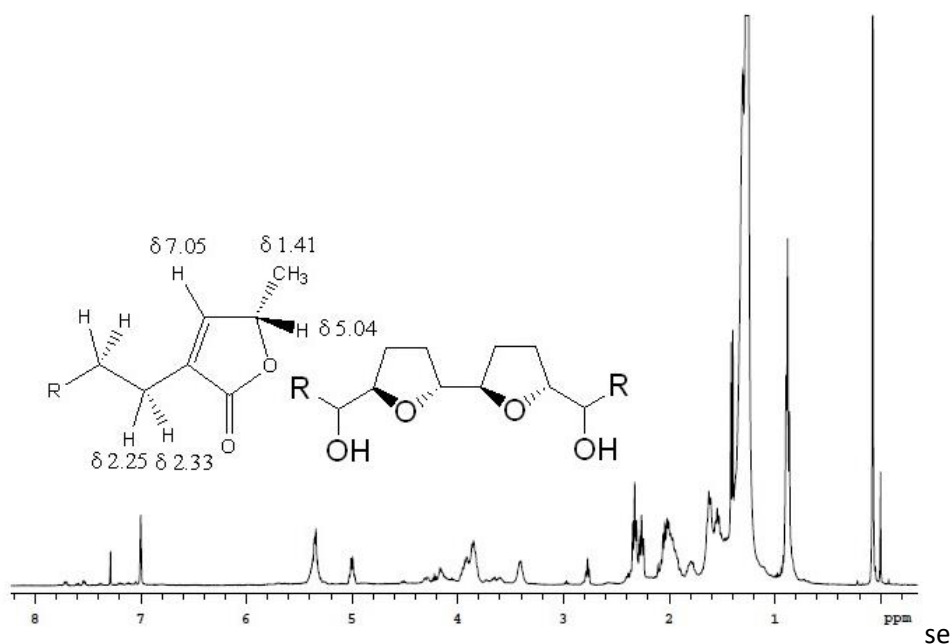


Figura 3.- Espectro de RMN de ^1H (400 MHz, CDCl_3 , TMS) de la partición F4 del extracto de AcOEt de semillas de *A. purpurea*

Por otro lado, el espectro de RMN de ^{13}C a 100 MHz (Figura 4), aporta información que en realidad se trata de una mezcla de al menos dos acetogeninas, ya que muestra dos señales a $\delta 174.0$ y $\delta 178.3$ para grupos carbonilo de éster (R-O-C=O) de dos γ -lactonas, y en el intervalo de 125 y 150 ppm se corrobora la presencia de carbonos con hibridación sp^2 , de insaturaciones a lo largo de la cadena tipo H-C=C-H , así mismo entre 70 y 85 ppm, también se observan señales de resonancia que corroboran o ratifican la presencia de anillos de éteres cíclicos conocidos como THF.

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021

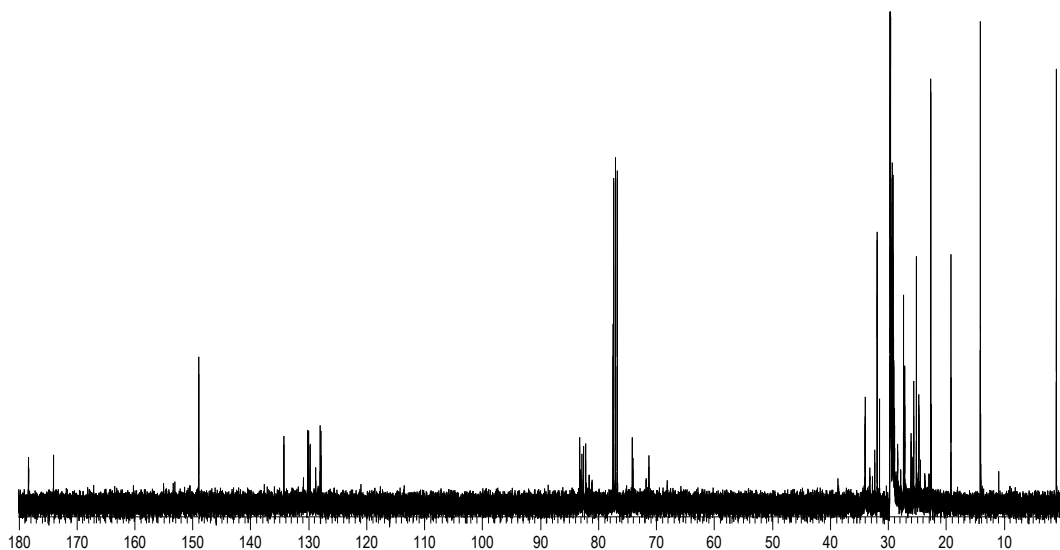


Figura 4.- Espectro de RMN de ^{13}C (100 MHz, CDCl_3 , TMS) de la partición F4 del extracto de AcOEt de semillas de *A. purpurea*

Una clase especial de experimentos de RMN que aporta información de la conectividad a un enlace (R-C-H), es conocido como espectro bidimensional de acoplamiento heteronuclear, HSQC, donde en el eje horizontal se grafica el espectro de hidrógeno y en el eje vertical se ubica su espectro de RMN de ^{13}C , mismo que en esta discusión se muestra una expansión de este espectro en la figura 5, observándose aquí que existen correlaciones de conectividad de las señales de RMN de ^{13}C del intervalo de 70 a 85 ppm, con los hidrógenos situados en la zona de 3.3 a 4.4 ppm, así como la conectividad directa de la señal cuádruple aislada (De un hidrógeno base de grupo CH_3 -) en 5.04 ppm con su carbono en 77.5 ppm

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



inifap

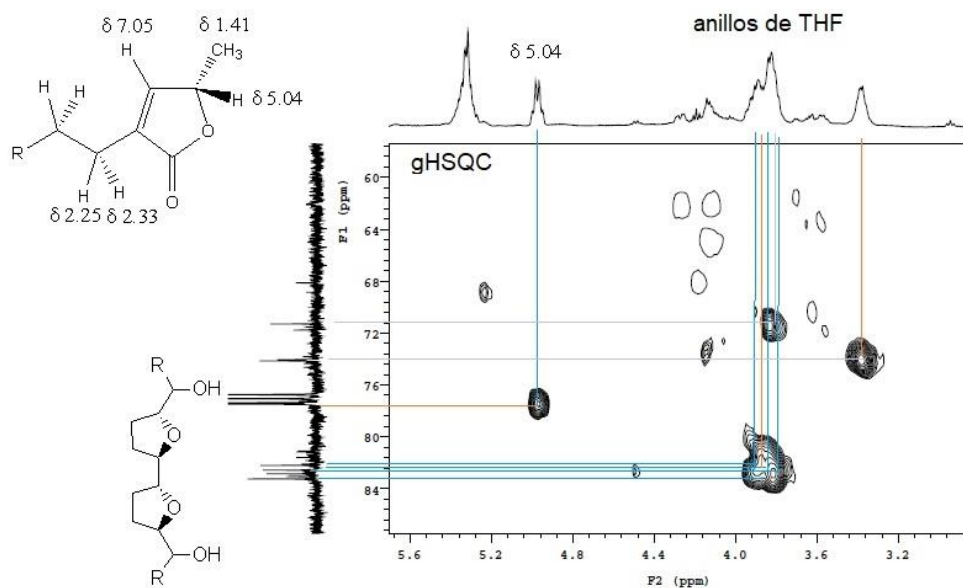


Figura 5- Expansión del espectro HSQC (100 MHz, CDCl_3 , TMS) de la partición F4 del extracto de AcOEt de semillas de *A. purpurea*

Explorando una cantidad importante de experimentos unidimensionales y bidimensionales, el experimento especial unidimensional de RMN de ^{13}C , conocido como APT (Attached Proton Test), aporta información rápida e importante del tipo de carbonos que contiene una sustancia orgánica, así en la figura 6, se muestra una sección del espectro APT, donde se indica una expansión grande de 70 a 145 ppm, apreciándose y corroborándose la presencia de carbonos de enlace doble (H-C=C-H), donde las líneas que están hacia abajo corresponden a grupos CH o CH_3 , y entonces entre 125 y 145 ppm se aprecian carbonos de este tipo (En esta zona son CH de alqueno). En tanto que también se ratifica la presencia de anillos heterocíclicos de THF entre 70 y 84 ppm

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021

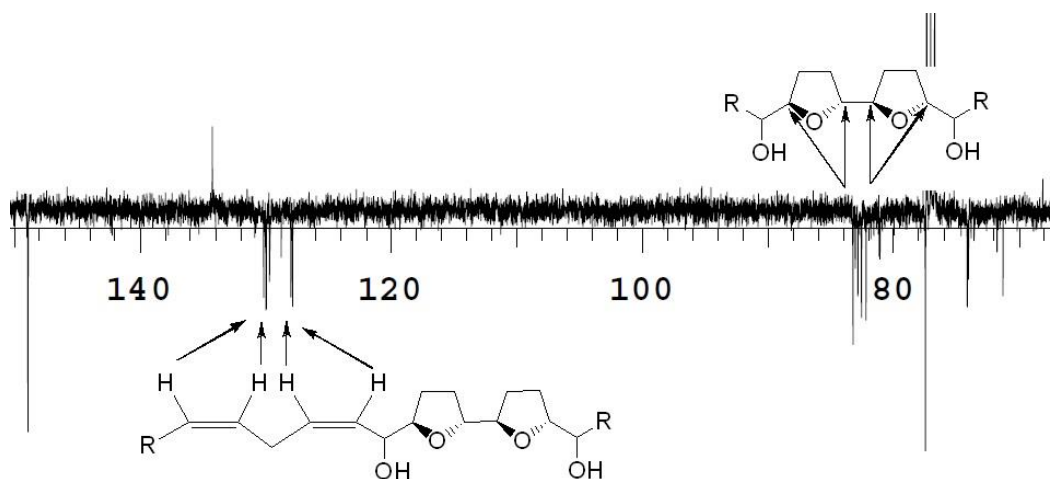
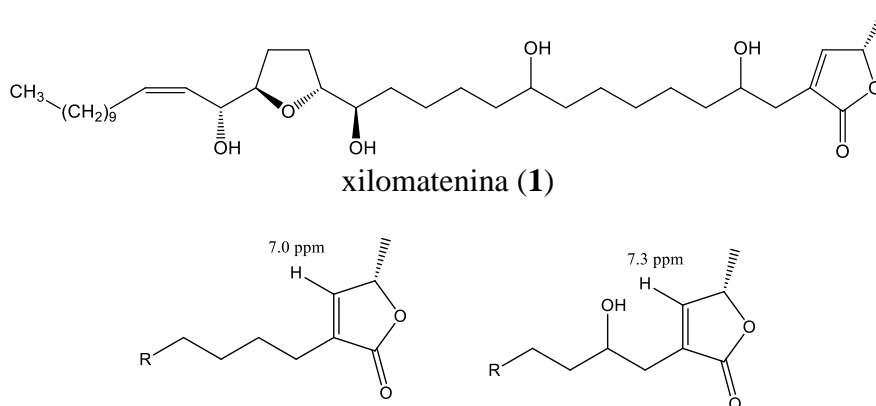


Figura 6- Expansión del espectro de RMN de ^{13}C (APT) (100 MHz, CDCl_3 , TMS) de la partición F4 del extracto de AcOEt de semillas de *A. purpurea*

La información proporcionada hasta este momento, indica que en la fracción F4 existen al menos dos acetogeninas que contienen dos o más carbonos con enlace doble $\text{H}-\text{C}=\text{C}-\text{H}$ y de acuerdo a lo reportado por Chávez y Mata (1998), únicamente se ha descrito en este espécimen, una molécula con estas características cuya estructura corresponde a la xilomatenina (**1**), sin embargo, las acetogeninas contenidas en la fracción F4, no contienen grupo hidroxilo ($-\text{OH}$) cercano a la γ -lactona, ya que no se observa señal en 7.3 ppm (Zafra et al., 1998), en su espectro de RMN de ^1H (Figura 7.)



10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



Figura 7. Fórmula de la xilomatenina (**1**) y estructura parcial de acetogeninas que se deducen por RMN de ^1H del extracto de AcOEt de *Annona purpurea*

Otro de los hallazgos encontrados en esta investigación, consiste en el análisis de la fracción F5 del extracto de partición de AcOEt, donde se detectaron acetogeninas, ya que en su espectro de RMN de ^1H (Figura 8), se observan las señales diagnósticas a $\delta 7.05$, de un hidrógeno vinílico de una γ -lactona, α , β -insaturada y otras dos señales en $\delta 5.04$ de los hidrógenos base de oxígeno de estas mismas lactonas. En tanto que en su espectro de RMN de ^{13}C (Figura 9), se observa una señal asignada a un grupo carbonilo de cetona ($\text{R}-\text{C}=\text{O}$) en 211.5 ppm, además de señales de resonancia en 174.63 y 173.9 ppm, que indican la presencia de dos grupos carbonilo de γ -lactonas de acetogeninas a lo largo de la cadena C35 o C37. Por otro lado, en la zona de carbonos vinílicos, se aprecian cuatro señales de los dos enlaces dobles ($\text{C}=\text{CH}-$) de dos grupos de γ -lactona α , β -insaturada en 130.9, 133.9, 149.1 y 151.9 ppm.

Figura 8. Espectro de RMN de ^1H (400 MHz, CDCl_3 , TMS) de la partición F5 del extracto de AcOEt de semillas de *A. purpurea*

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



inifap

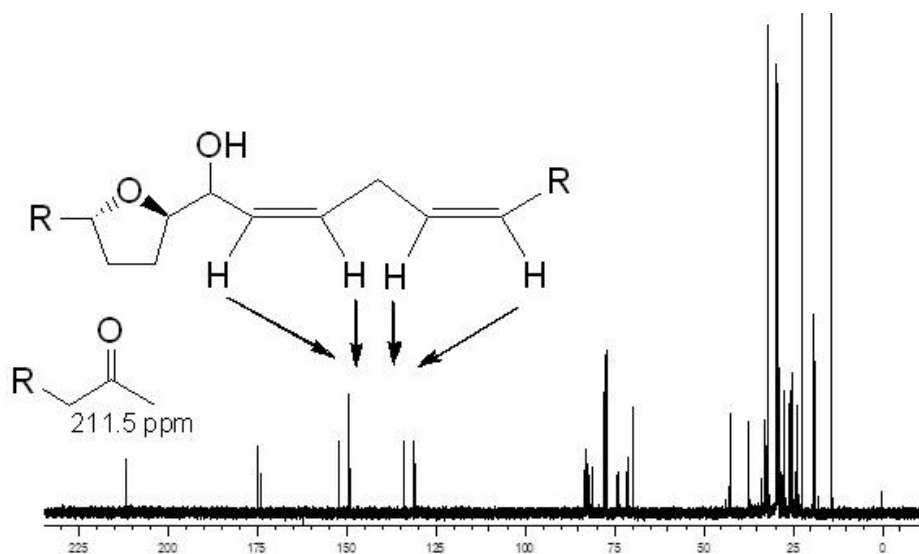
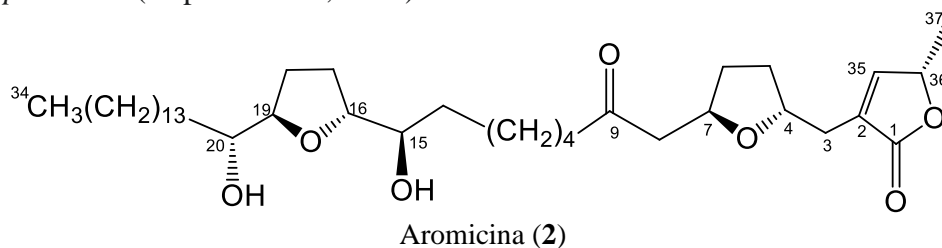


Figura 9. Espectro de RMN de ^{13}C (100 MHz, CDCl_3 , TMS) de la partición F5 del extracto de AcOEt de semillas de *A. purpurea* donde se muestra la señal de cetona en 211.5 ppm

Es de suponerse que esta muestra (F5) contiene únicamente dos acetogeninas, una de estas es la que muestra un grupo carbonilo de cetona y la otra acetogenina contiene dos anillos de THF, una lactona y también un enlace doble ($\text{H}-\text{C}=\text{C}-\text{H}$). Esta acetogenina con grupo cetona tampoco ha sido aislada ni identificada plenamente de *A. purpurea*. Ejemplos de acetogeninas conteniendo dos anillos no-adyacentes de THF y un grupo carbonilo de cetona ($\text{C}=\text{O}$) son, la aromicina (**2**), aislado de la corteza de *Xilopia aromática* (Zeng et al, 1996) y la Rollinona (**3**) aislada de las raíces de *Rollinea papilionelia* (Ruprecht et al, 1990)



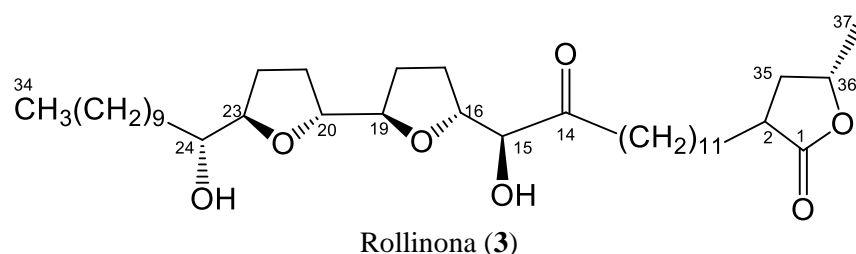
10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



inifap



Rollinona (3)

Figura 10. Fórmula de la aromicina (2) aislada de *Annona purpurea* y la rollinona (3) aislada de raíces de *Rollinea papilionelia*

Para corroborar lo anterior, en su espectro bidimensional heteronuclear HMBC se aprecia una correlación a tres enlaces de la señal del carbono carbonílico a 211.5 ppm con la señal múltiple de un grupo metileno (-CH₂-) en 2.25 y 2.33 ppm, asignables a los hidrógenos contiguos a una γ -lactona, como se muestra en una expansión de este espectro en la figura 11, indicando con esto además que el grupo carbonilo se encuentra situado en el carbono C-5 de esta molécula, lo que deberá ser demostrado mediante espectrometría de masas

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021

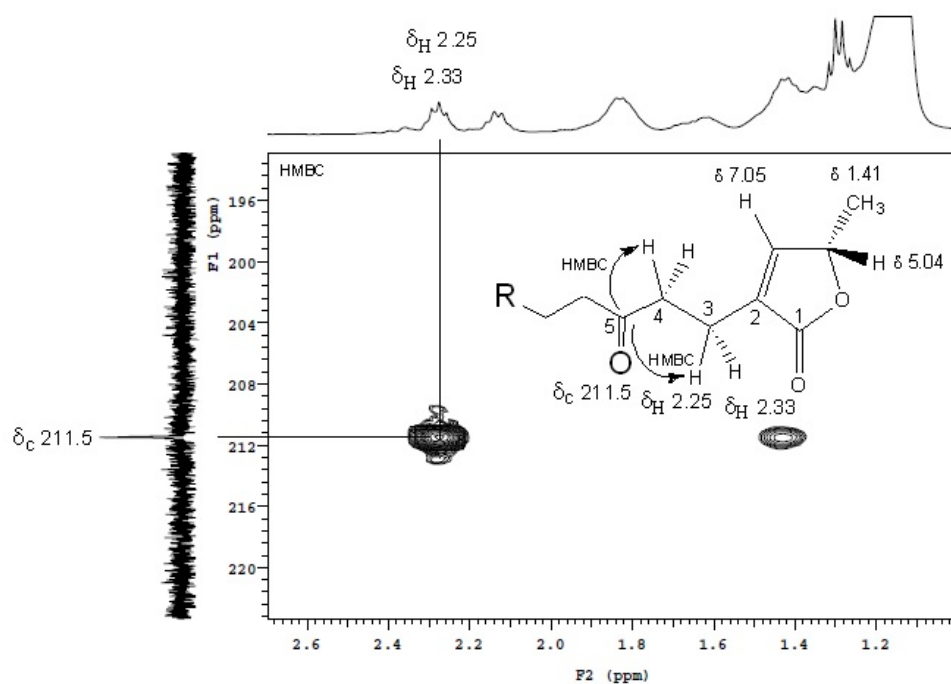


Figura 11- Expansión del espectro HMBC (100 MHz, CDCl_3 , TMS) de la partición F5 del extracto de AcOEt de semillas de *A. purpurea*

Ejemplos de este tipo de acetogeninas con grupo carbonilo de cetona en C-5 han sido aisladas de las raíces de *Uvaria tonquinensis* (Chen et al, 1996, Neske et al, 2020) y fueron nombradas como tonquininas A, B y C, una de ellas se muestra en la figura 12.

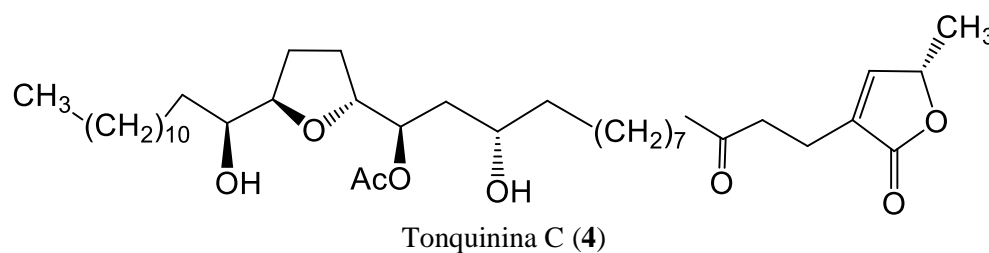


Figura 12. Fórmula de la tonquinina C (4) aislada de raíces de *Uvaria tonquinensis*

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



inifap



Conclusiones

Se analizó la composición de los metabolitos secundarios de las fracciones obtenidas de la partición de AcOET del extracto de AcOEt de semillas de *Annona purpurea* empleando la espectrometría de Resonancia Magnética Nuclear. Después de establecer estructuras probables de acetogeninas en la fracción F4, la fracción F5 resultó muy interesante porque contiene una acetogenina que muestra un grupo carbonilo de cetona a lo largo de la cadena de este tipo de metabolitos secundarios, esta clase de acetogeninas no ha sido aislado previamente de *A. purpurea*. Resta por efectuar una separación por cromatografía en columna y de HPLC de las acetogeninas activas presentes en la fracción F5 este extracto, y entonces proponer una alternativa natural de salud para controlar al mosquito vector del dengue.

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



inifap



Literatura citada

- Bobadilla, M., Zavala, F., Sisniegas, M., Zavaleta, G., Mostacero, J., Taramona, L., (2005). Evaluación larvicida de suspensiones acuosas de *Annona muricata* Linnaeus «guanábana» sobre *Aedes aegypti* Linnaeus (Diptera, Culicidae). *Rev. Peru. Biol.* 12, 145–152.
- Braga, I.A., Valle, D., 2007. *Aedes aegypti*: insecticidas , mecanismos de ação e resistência. *Epidemiol. e Serviços Saúde* 16, 279–293.
- Chávez, D., Mata R. (1998) Purpurediolin and Purpurenin, Two New Cytotoxic Adjacent Bis-tetrahydrofuran Annonaceous from the seeds of *Annona purpurea*. *Journal of Natural Products.*, 61,580.
- Chen, Y.; Yun-Chen, R.; Quan-Yu, D. (1996). Six acetogenins from *Uvaria tonkinensis*. *Phytochemistry*, 43(4), 793–801.
- De Mendonça, F.A.C., Da Silva, K.F.S., Dos Santos, K.K., Ribeiro Júnior, K.A.L., Santa Ana, A.E.G., (2005). Activities of some Brazilian plants against larvae of the mosquito *Aedes aegypti*. *Fitoterapia* 76, 629–36.
- Grzybowski, A.: Tiboni, M.: Da Silva, M.A.N.: Chitolina, R.F.: Passos, M.: Fontana, J.D. (2012). The combined action of phytolarvicides for the control of dengue fever vector, *Aedes aegypti*. *Brazilian Journal of Pharmacognosy.* 22(3), 549-557
- Hernandez-Fuentes, G.A., Garcia-Argaez, A.N., Peraza Campos, A.L., Delgado-Enciso, I.,Muniz-Valencia, R., Martinez-Martinez, F.J., Toninello, A., Gomez-Sandoval, Z.,Mojica-Sanchez, J.P., Dalla Via, L., Parra-Delgado, H., Hernandez-Fuentes, G.A.,Garcia-Argaez, A.N., Peraza Campos, A.L., Delgado-Enciso, I., Muniz-Valencia, R.,Martinez-Martinez, F.J., Toninello, A., Gomez-Sandoval, Z., Mojica-Sanchez, J.P.,Dalla Via, L., Parra-Delgado, H., (2019). Cytotoxic acetogenins from the roots of *Annona purpurea*. *Int. J. Mol. Sci.* 20, 1870.
- León, J. (1969). *Fundamentos Botánicos de Los Cultivos Tropicales*. Bogotá: IICA.OPS, 2019. Manual de Vigilancia y control de *Aedes aegypti*.
- Neske, A.; Ruiz, H. J.; Cabedo, N.; Cortes, D. (2020). Acetogenins from Annonaceae family. Their potential biological applications. *Phytochemistry* 174, 112332.
- OPS, 2019. Manual de Vigilancia y control de *Aedes aegypti*
- Perez, M. C.; González, A.; Garcia, A.; Bratoeff, E.; Labastida, C. (1997) Oil composition and flavonoid profiles of the seeds of three *Annona* species. *Phyton* (Buenos Aires). 61(1-2): 77-80
- Ruprecht, J.K.; Hui, Y.H.; McLaughlin, J.L. (1990). Annonaceous acetogenins: A review. *Journal of Natural Products.* 53, 2, 237-278
- Sonnet, P.E. y Jacobson, M. (1971). Tumor inhibitors II: Cytotoxic alkaloids from *Annona purpurea*. *Journal of Pharmaceutical Sciences*, 60, 1254-1256
- WHO, 2017. Estadísticas sanitarias mundiales. Ginebra, Suiza.
- Wu, Y. C.; Chang F.R.; Chen, C.Y.; Wu, P. H.; Kuo R. Y.; Chang Y. C. (2000). New Alkaloids from *Annona purpurea*. *Journal of Natural Products.* t., 63, 746-748.

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



inifap



- Zafra, P.M.C., Figadère, B., Gallardo, T., Tormo, J.R., Cortes, D., (1998). Natural acetogenins from annonaceae, synthesis and mechanisms of action. *Phytochemistry* 48, 1087–1117.
- Zeng, L.; Ye, Q.; Oberlies, N.H.; Shi, G.; Gu, Z, M.; He, K.; McLaughlin, J.L. (1996). Recent Advances in Annonaceous Acetogenins. *Natural Product Reports*, 275-306

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



inifap



Comparación de actividad antioxidante de aceite esencial de laurel aromático (*Litsea glaucescens*) de varias accesiones

*Benito Reyes Trejo*⁹, *Diana Guerra Ramirez*¹, *Felipe Reyes Fuentes*¹, *Verónica Virginia
Tepixtle Colohua*^{1,10*}

Resumen

El laurel aromático (*Litsea glaucescens* Kunth), es una especie forestal no maderable (PFNM) aprovechada ampliamente en México, se encuentra en 14 estados, asociada en vegetación de encino-pino, encinares o encino-oyamel y bosques mesófilo de montaña (Hernández y Vargas,2020). Actualmente se encuentra registrado en la Norma Oficial Mexicana la NOM-059-SEMARNAT- 2019, con la categoría de P (en peligro de extinción), esto principalmente a la falta de un manejo forestal establecido para la recuperación de la especie ya que en México su uso es muy variado, principalmente como planta condimentaria, uso medicinal y ornamental. Sin embargo, debido a sus antecedentes y propiedades se le podría atribuir gran utilidad en la industria de alimentos, perfumería y medicamentos. En este estudio se realiza una comparación de la actividad antioxidante del aceite esencial obtenido de muestras de hojas de laurel colectadas en el 2020-2021 en el ejido El Nopalillo, Epazoyucan, Hidalgo con Aceite esencial de muestras de laurel obtenidas en diferentes accesiones, para lo cual se utilizó el método Ensayo ABTS y Ensayo FRAP.

Palabras clave: Capacidad antioxidante, Ensayo ABTS, Ensayo FRAP, *Litsea glaucescens*, Trolox

Abstract

The aromatic laurel (*Litsea glaucescens* Kunth), is a non-timber forest species (NTFP) widely used in Mexico, it is found in 14 states, associated with oak-pine, holm oak or oak-oyamel vegetation and mountain mesophilic forests. Currently, the NOM-059- SEMARNAT- 2019 is registered in the Official Mexican Standard, with the category of P (in danger of extinction), this mainly due to the lack of an established forest management for the recovery of the species since in Mexico its use is very varied, mainly as a condiment plant, medicinal and ornamental use.

⁹ Laboratorio de Productos Naturales, Área de Química, Departamento de Preparatoria Agrícola, Universidad Autónoma Chapingo. Km 38.5 Carretera México- Texcoco. 56230, Texcoco, Edo. De México, México. Tel. 01 (55) 5133-1108 Ext 5760. benijovi@yahoo.com.mx , dg_bonita33@yahoo.com.mx , ololiuhqui@hotmail.com

¹⁰ Posgrado en Ciencias en Ciencias Forestales, Departamento de Ciencias Forestales, Universidad Autónoma Chapingo. Km 38.5 Carretera México- Texcoco. 56230, Texcoco, Edo. De México, México. Tel. 01 (55) 5133-1108 Ext 5760. *Autor principal: tepixtle.colohua@gmail.com

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



inifap



However, due to its antecedents and properties, it could be attributed great utility in the food, perfumery and medicine industry. In this study, a comparison is made of the antioxidant activity of the essential oil obtained from samples of bay leaves collected in 2020-2021 in the ejido El Nopalillo, Epazoyucan, Hidalgo with essential oil of laurel simples obtained in different accessions, for which was used the ABTS Test and FRAP Test.

Keywords: Antioxidant capacity, ABTS test, FRAP test, *Litsea glaucescens*, Trolox

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



Introducción

El laurel aromático (*Litsea glaucescens* Kunth) es una especie de la familia de las lauráceas, misma que cuenta con aproximadamente 50 géneros y 2500 a 3000 especies, con una distribución tropical y subtropical de todo el mundo (van der Werff et al., 1997). Actualmente en México se encuentran 10 géneros y 13 especies de esta familia, el aguacate (*Persea americana* Mill.) y la canela (*Cinnamomum verum* Presl) son algunos considerados de gran importancia comercial (Lorea-Hernández, 2002). *L. glaucescens* se encuentra distribuida desde el norte de México hasta Costa Rica, en México se encuentra presente en 14 de las 32 entidades federativas, Aguascalientes, Chiapas, Durango, Estado de México, Guerrero, Hidalgo, Jalisco, Morelos, Nayarit, Oaxaca, Puebla, Querétaro, Tamaulipas, Veracruz y Quintana Roo (Hernández-Flores y Vargas-Licona, 2020). El laurel aromático es una especie que se desarrolla bajo el dosel de diferentes tipos de vegetación, dentro de los que destaca Encino-Pino, encinares o encino-oyamel y bosques mesófilo de montaña llegando incluso a estar presente en áreas menos húmedas y más expuestas, como matorrales semiáridos, siempre entre los 800 y los 2830 msnm (Dávila-Figueroa, 2011). Los suelos en donde se desarrollan presentan un pH que varía de 5.7 a 7.0, con buenas concentraciones de nitrógeno, fósforo, potasio y materia orgánica (Dávila-Figueroa, 2011). En condiciones naturales el laurel aromático crece bajo la interacción de diferentes especies según el tipo de vegetación donde se desarrolla, como se muestra en la tabla 1.

Tabla 1. Especies asociadas a laurel aromático (*L. glaucescens*) según el tipo de vegetación donde se desarrolla.

Tipo de vegetación	Altitud msnm	Especies
Selva baja caducifolia	0 a 1 500 hasta 1 900	<i>Lysiloma watsonii</i> , <i>Bursera inopinata</i> , <i>Cochlospermum vitifolium</i> , <i>Jatropha cordata</i> , <i>Tabebuia palmeri</i> , <i>Bombax palmeri</i> , <i>Ceiba parvifolia</i> , <i>Pithecellobium recordii</i> , <i>Pithecellobium dulce</i> , <i>Guazuma ulmifolia</i>
Bosque de <i>Abies</i>	Mayores a los 2400	<i>Heuchera</i> , <i>Symphoricarpos</i> , <i>Lonicera</i> , <i>Arstostaphylos</i> , <i>Salix</i> , <i>Alnus</i> , <i>Cupressus</i> , <i>Arbutus</i> , <i>Penstemon</i> , <i>Cirsium</i> , <i>Garrya</i> , <i>Delphinium</i> , <i>Juniperus</i>
Bosque mesófilo de montaña	800 a 2700	Asociado con <i>Quercus spp.</i> , <i>Clethra mexicana</i> , <i>Liquidambar macrophylla</i> , <i>Magnolia spp.</i> <i>Alnus</i>

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



inifap



Tipo de vegetación	Altitud msnm	Especies
		<i>zorulensis</i> , <i>Ostrya virginiana</i> , <i>Carpinus sp</i> , <i>Cornus</i> , <i>Cupressus lusitanica</i> .
Bosque de Pino	800 a 3500	<i>Pinus rudis</i> , <i>P. montezumae</i> , <i>P. teocote</i> , <i>P. greggii</i> , <i>P. oocarpa</i> , <i>P. pringlei</i> , <i>P. patula</i> , <i>P. ayacuhuite</i> , <i>Abies pseudopsuga</i> ,
Bosque de Encino	1200 a 2800	<i>Qercus eugeniifolia</i> , <i>Q. affinis</i> , <i>Q. sartorii</i> , <i>Q. xalapensis</i> y <i>Q. crassipes</i> .

Fuente: Luna-Vega, 2003.

Usos medicinales

Antiguamente, en la época prehispánica el laurel aromático se usaba para el tratamiento de enfermedades como epilepsia y la parálisis, los cuales están relacionados con problemas del sistema nervioso (Guzmán-Gutiérrez et al., 2012). Desde el siglo XVI se hace mención de esta planta, también llamada “ecapatli” para el tratamiento de varios padecimientos (Valdés y Flores, 1985), esto también lo confirma Juan de Esteyneffer en 1712 en el libro “Florilegio Medicinal” donde hace mención del uso del laurelillo para curar enfermedades frías, dolores de cabeza y también la parálisis, haciendo uso de los vapores de las hojas de laurel, además para el tratamiento de otras enfermedades con diversas recetas donde el principal ingrediente son las hojas de laurel (Esteyneffer, 1978; Jiménez-Pérez et al., 2011). Actualmente el laurel aromático se usa ampliamente en varios lugares del país, principalmente con fines alimenticios, sin embargo, se puede usar para el tratamiento de varios problemas de salud relacionados en la tabla 2.

Tabla 2. Usos medicinales de laurel aromático (*Litsea glaucescens*) en México.

Lugar	Parte usada	Uso medicinal	Modo de preparación
Chiapas	Hojas	Dolor de estómago	En té
Oaxaca	Hojas	Dolor de estómago	infusión de las hojas diluida en licor de caña.
Morelos	Ramas, Flores y Hojas	Problemas ginecológicos y esterilidad Femenina	Infusión de las ramas, baños corporales (Hervir laurel con <i>Potentilla candicans</i> , <i>P. rubra</i> , <i>P.</i>

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



			<i>staminea, Silene laciniata, Buddleja cordata</i>)
Chiapas	Ramas y hojas	Espirituales, aires fríos y el empacho	Vaporizaciones e infusiones
Chihuahua, Durango y Sonora	Hojas y ramas	Cólicos menstruales	Té de hojas de laurel, vapores y baños.
...	Ramas, Flores y Hojas	Tos y Tosferina	Té de hojas de laurel con hojas de <i>Ruta graveolens</i> , <i>Lantana cámara</i> , <i>Sambucus mexicana</i> , <i>hinojo y clavo</i> .
...	Ramas y Hojas	Reumas por enfriamiento	Hervir ramas con <i>Buddleja cordata</i> y hediondilla, usar el vapor en la zona de dolor.
...	Hojas, flores y ramas	Trastornos estomacales, anginas, infecciones, calentura, escalofríos	Té de hojas de laurel, infusiones, vapores y baños.

Fuente: Biblioteca Digital de la Medicina Tradicional Mexicana, 2009.

Importancia de la especie

Actualmente esta especie es utilizada ampliamente en México como condimento para la elaboración de platillos, y debido a sus antecedentes y propiedades se le podría atribuir gran utilidad en la industria de alimentos, perfume y medicamentos (Montañez-Armenta, 2006). El aceite esencial de *L. glaucescens* contiene 1,8-cineol (22%), sabineno (13%), terpineno-4-ol (10%), α -terpineno (9%), acetato de α -terpinilo (7%), acetato de nerilo (7%), β -pineno (5%), sabineno y α -pineno (4%). El extracto etanólico de la corteza contiene flavanonas (pinostrobin, pinocembrina y dihidrochalconas) (López et al., 1995). Estudios actuales se han enfocado a conocer sus propiedades fitoquímicas, con el fin de lograr la identificación y posterior aislamiento de sus componentes químicos para así lograr evaluar su actividad como antibacteriana, antifúngica, antiinflamatoria, antiespasmódica y antioxidante y conocer el potencial de la especie (Osuna et al., 2005; Coy y Cuca 2007; Jiménez-Pérez et al., 2011). Por toda la importancia que representa el laurel aromático y a los pocos estudios realizados sobre la especie en México, el objetivo del presente trabajo es contribuir al conocimiento en las diferencias sobre las propiedades antioxidantes de la especie según las condiciones ambientales en los que se desarrolla, para lo cual se realizó un

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



inifap



estudio utilizando los métodos ABTS (2,2'-azino-bis- (3-etil benzotiazolin-6-sulfonato de amonio) con persulfato de potasio y el método FRAP: buffer ácido acético-acetato de sodio (pH 3,6), TPTZ (2,4,6-tri(2-piridil)-s-triazina) y $FeCl_3$, en aceite esencial de laurel aromático. El área de estudio se sitúa en el ejido El Nopalillo, municipio de Epazoyucan, Hidalgo, y la comparación con diferentes accesiones del laurel aromático desde áreas de colecta asta muestras obtenidas de tiendas naturistas y centros comerciales.

Materiales y Métodos

Colecta de la planta: Durante el año 2020 y 2021 se recolectaron hojas de laurel aromático (*Litsea glaucescens*), se procesó una parte en fresco y otra en seco a temperatura ambiente, se procesó el material vegetal en fresco y seco para la extracción de aceites esenciales mediante equipo de destilación tipo Clevenger

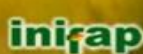
Aceite esencial de laurel aromático: El aceite esencial fue obtenido por hidrodestilación, se colocó en un matraz bola de fondo plano de 1 L la cantidad de 100 g de hojas secas ó frescas y trituradas de Laurel aromático, se agregaron aproximadamente 500 mL de agua para macerarlos. Los matraces fueron conectados a un destilador de aceite esencial tipo Clevenger, en seguida se inició un calentamiento suave y se aumentó gradualmente la temperatura de la parrilla eléctrica hasta lograr una ebullición constante y controlada, previamente se activó la recirculación de agua fría a través del refrigerante de rosario integrado al destilador mencionado de tal manera que se logró una condensación del vapor y el aceite se acumuló en la parte superior del líquido condensado, dicha destilación se mantuvo de 60 a 90 min y hasta que ya no se observó la presencia de gotas del aceite separado (Domínguez, 1982; Domínguez, 1985). Finalmente, el aceite fue colectado y se guardó en frasco ámbar y bajo refrigeración a 4 °C hasta su uso.

La obtención de los aceites esenciales de distintas accesiones se repitió con todas las muestras adquiridas de varios sitios: Chignahuapan, Puebla, El Nopalillo Hgo. (Pino-Encino), El Nopalillo Hgo. (Oyamel), El Nopalillo Hgo. (Bosque Mixto), Zongolica, Veracruz, Tienda Naturista " Los cedros”, Mercado Soriana, Mercado Centro Texcoco Méx., San Andrés Metla Edo., Mercado Soriana, San Andrés Metla Edo., Mercado Salitreria, Tex. Méx., Tienda Naturista " Yerbero antigüita y Zongolica, Veracruz (Hoja con semilla).

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



Actividad antioxidante

Para el análisis de la actividad antioxidante existen diferentes ensayos de evaluación, en este trabajo se utilizó el método ABTS (2,2'-azino-bis- (3-etil benzotiazolin-6-sulfonato de amonio) con persulfato de potasio y el método FRAP: buffer ácido acético-acetato de sodio (pH 3,6), TPTZ (2,4,6-tri(2-piridil)-s-triazina) y FeCl_3 .

Método ABTS: En el análisis se utilizaron diferentes cantidades de μL de la muestra en disolución con propanol, en los pozos de la microplaca se mezclaron de esta disolución $20 \mu\text{L} + 180 \mu\text{L}$ de la solución del radical ABTS^+ , Como blanco se usó la disolución ABTS^+ ($180 \mu\text{L}$). La microplaca con la mezcla de reacción se dejó reposar durante 10 min protegida de la luz las mediciones se realizaron a una longitud de onda de 734 nm, en un lector de microplacas de 96 pozos marca Synergy II, finalmente los resultados se expresaron mediante la construcción de una curva patrón usando como antioxidante Trolox.

Método FRAP: Para el ensayo FRAP descrito por Benzie y Strain (1996) adaptado a microplacas se prepararon las siguientes disoluciones: buffer pH 3.6 (4.624 g de $\text{C}_2\text{H}_3\text{NaO}_2 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$ y 18.2 mL $\text{C}_2\text{H}_4\text{O}_2$), TPTZ (2, 4, 6 Tripiridil-s-triazina) 10 mM en HCl 40 mM y disolución $\text{FeCl}_3 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$ 20 mM. La disolución FRAP fue preparada al momento de su uso mezclando la solución buffer, solución TPTZ y $\text{FeCl}_3 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$.

Para la lectura de las muestras se utilizó una microplaca de 96 pozos donde se colocó $20 \mu\text{L}$ de la muestra + $180 \mu\text{L}$ de la solución FRAP, después de 10 min se determinó la absorbancia a una longitud de onda de 593 nm en un lector de microplacas de 96 pozos marca Synergy II, y la absorbancia final de las muestras se comparó con la curva estándar de Trolox,

Resultados y discusión

Para el análisis de antioxidantes en aceite esencial de laurel aromático (*Litsea glaucescens*), se colectaron 12 muestras diferentes de hoja de laurel obtenido de distintos sitios naturales, así como establecimientos comerciales y mercados de la zona de Texcoco de Mora. En la tabla 3, se muestra la información de fechas de colecta de cada muestra, así como su rendimiento en porcentaje, considerando la cantidad en gramos de cada muestra utilizada y la cantidad de aceite esencial en mL obtenida en el proceso por hidrodestilación, empleando un equipo tipo Clevenger

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



Para calcular el rendimiento se utilizó la ecuación 1:

$$\% \text{ Rendimiento} = \left(\frac{\text{Masa del aceite}}{\text{masa de las hojas}} \right) \times 100 \quad \dots\dots\dots \text{ecuación 1}$$

Tabla 3. Rendimiento en porcentaje del aceite esencial de laurel aromático
(*Litsea glauscecens*)

ID	Lugar de colecta	Fecha de colecta	Fecha de proceso	Cantidad en gramos (g)	Fresco o seco	Cantidad (ml)	% en peso
<i>Muestras obtenidas en campo</i>							
1	Chignahuapan, Puebla	01/10/2020	02/12/2020	100	Seco	1.017±0.225	1.017
2	El Nopalillo Hgo. Pino-Encino	10/10/2020	11/12/2020	100	Seco	1.367±0.289	1.367
3	El Nopalillo Hgo. Oyamel	10/10/2020	11/12/2020	100	Seco	1.433±0.404	1.433
4	El Nopalillo Hgo. Bosque Mixto	10/10/2020	11/12/2020	100	Seco	1.317±0.161	1.317
5	Zongolica, Veracruz.	11/01/2021	02/02/2021	100	Seco	0.633±0.153	0.633
6	Zongolica, Veracruz (Hoja-Semilla).	25/04/2021	28/05/2021	100	Seco	0.267±0.029	0.267
7	San Andrés Metla Edo. Méx	05/02/2021	05/02/2021	100	Fresco	0.967±0.252	0.967
<i>Muestras obtenidas en tiendas y centros comerciales</i>							
8	Tienda Naturista "Los Cedros"	04/02/2021	05/02/2021	100	Seco	0.783±0.029	0.783

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



inifap



9	Centro comercial "Soriana"	10/12/2020	11/12/2020	100	Seco	1.317±0.355	1.317
10	Mercado "Texcoco Centro"	02/11/2020	03/11/2020	100	Seco	1.2±0.2	1.2
11	Mercado "Salitreria, Texcoco "	10/12/2020	11/12/2020	100	Fresco	1.167±0.153	1.167
12	Tienda Naturista "La Antiguita"	04/02/2021	05/02/2021	100	Seco	1.133±0.153	1.133

El rendimiento obtenido de aceite esencial de las muestras de laurel oscila entre 0.267% a 1.433%, se observó que el más bajo se observó en las muestras de hoja de laurel obtenidas en la región de Zongolica Veracruz y los rendimientos más alto lo presentan las muestras del ejido "El Nopalillo Hgo.", con 1.433%, 1.367% y 1.317%.

Las muestras con mayor capacidad antioxidante fueron obtenidas en un medio natural con una altitud de 2954msnm a 3031 msnm, cuenta con un clima templado subhúmedo con lluvias en verano, temperatura entre los 12°C a 18°C y precipitación de 500 mm a 1100 mm (INEGI, 2009). Mientras que las muestras obtenidas en la zona de Zongolica presentan unas condiciones de 2000 msnm, con un clima semicálido húmedo con lluvias todo el año, temperatura entre los 14°C a 26°C y una precipitación de 2400 mm a 3100mm (SEFIPLAN, 2016). Stashenko et al., (1998), mencionan que existen factores que influyen en el rendimiento y composición de los aceites esenciales estos son las condiciones diferentes geobotánicas (altitud, clima, suelo, temperatura, precipitación, época de recolección y etapas fenológicas de la planta) y las condiciones de manejo en cosecha y postcosecha (técnicas de cultivo y métodos de extracción de los aceites. Otro de los factores que también afecta al rendimiento del aceite esencial es el manejo durante el corte de las

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



hojas y el secado de las mismas ya que durante el corte se rompe tejidos celulares que contienen los aceites esenciales y durante el secado se pierde por la alta volatilidad (Vásquez et al., 2001).

Capacidad Antioxidante de laurel aromático (*Litsea glaucescens*)

Como se puede observar en la tabla 4, el aceite esencial analizado con el método ABTS+ con mayor capacidad antioxidante es para la muestra de Zongolica, Ver (Hoja-Semilla) con 12.885 $\mu\text{mol ET}/\mu\text{L}$. El aceite de eucalipto dólar (*Eucalyptus cinérea*) exhibió la más baja capacidad antioxidante, mismo que contiene 1,8-cineol como componente mayoritario, y se infiere que este metabolito no es el responsable de la actividad antioxidante en las muestras de laurel que lo contienen.

Tabla 4. Capacidad antioxidante del aceite esencial de laurel aromático (*Litsea glauscegens*)

ID	Nombre de la muestra	Ensayo ABTS+ CA ($\mu\text{mol ET}/\mu\text{L}$)	Ensayo FRAP CA ($\mu\text{mol ET}/\text{mL}$)
<i>Muestras obtenidas en campo</i>			
1	Zongolica, Veracruz (Hoja-Semilla).	12.885 \pm 0.273	0.03089 \pm 0.0016
2	Chignahuapan, Puebla	10.107 \pm 0.015	0.01031 \pm 0.0004
3	Zongolica, Veracruz.	10.715 \pm 0.373	0.10323 \pm 0.0062
4	San Andrés Metla Edo. Méx	9.156 \pm 0.523	0.06407 \pm 0.0034
5	El Nopalillo Hgo. (Oyamel)	3.722 \pm 0.186	0.00682 \pm 0.0009
6	El Nopalillo Hgo. (Bosque Mixto)	3.584 \pm 0.067	0.01312 \pm 0.0006
7	El Nopalillo Hgo. (Pino-Encino)	3.454 \pm 0.220	0.02616 \pm 0.0003
8	Eucalipto (Campus Univ Aut Chapingo)	1.526 \pm 0.019	-----
<i>Muestras obtenidas en tiendas y centros comerciales</i>			
9	Centro comercial "Soriana"	10.948 \pm 0.229	0.17149 \pm 0.0035
10	Tienda Naturista "Los Cedros"	10.667 \pm 0.351	0.05976 \pm 0.0003
11	Mercado "Salitrería, Texcoco "	8.013 \pm 0.042	0.05143 \pm 0.0031
12	Mercado "Texcoco Centro"	7.579 \pm 0.096	0.04504 \pm 0.0017
13	Tienda Naturista "La Antigüita"	4.992 \pm 0.031	0.01777 \pm 0.0011

La capacidad antioxidante del laurel aromático medida con el método FRAP oscila entre los 0.00682 a 0.17149 $\mu\text{mol ET}/\text{mL}$, siendo la muestra de El Nopalillo Hgo.(Oyamel) la capacidad más baja comparada con el Centro comercial "Soriana", Politeo et al, (2006), mencionan que la actividad antioxidante en aceite de laurel se encuentra entre 2 a 22 mmol/L.

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



inifap



Las muestras analizadas del ejido “El Nopalillo” presentan valores similares con el ensayo ABTS+, ya que los valores se encuentran entre 3.454 a 3.722 $\mu\text{mol ET}/\mu\text{L}$, sin embargo, estas muestras se colectaron en diferentes estratos de vegetación (Pino-encino, Oyamel y Bosque Mixto), en donde los factores de intensidad de luz, densidad de vegetación y niveles altitudinales marcan una ligera diferencia en los valores de capacidad antioxidante.

Se ha publicado que dentro de los principales componentes del laurel aromático se encuentran 1,8-cineol (22%), sabineno (13%), terpinen-4-ol (10%), α -terpineno (9%), acetato de α -terpinilo (7%), acetato de nerilo (7%), β -pineno (5%), sabineno y α -pineno (4%) (López et al., 1995). Lee et al, (2005) indican que el 1,8-cineol no se distingue como principales antioxidantes, por lo que se puede explicar que la muestra del aceite esencial de eucalipto tiene capacidad antioxidante muy baja. Los resultados indican que 12 de los 13 aceites evaluados presentan capacidad antioxidante, independientemente de la técnica utilizada para medir la capacidad antioxidante. Algunos autores asocian esta actividad biológica al contenido de fenoles presentes en los aceites esenciales (Arango et al., 2012), Sánchez et al. (2020), mencionan que también los componentes terpenoides pueden influir en esta actividad. En un estudio realizado por Politeo et al, (2006), sugieren que la capacidad antioxidante en aceites esenciales de albahacar y laurel se debe al contenido alto en eugenol con 11.6% y metil-eugenol con 4.1% para el caso de albahacar y metil-eugenol con 13.5% para laurel.

Conclusiones

En este trabajo se analizó el rendimiento del aceite esencial y la capacidad antioxidante del aceite esencial obtenida de laurel aromático (*Litsea glaucescens*) recolectado de varias accesiones. Existe una variación de rendimiento de 0.267% a 1.433%, donde el rendimiento más bajo lo presenta el sitio de Zongolica, Veracruz (Hoja- Semilla), sin embargo, esta muestra es la que presenta un valor alto de capacidad antioxidante con el método ABTS+ con 12.885 $\mu\text{mol ET}/\mu\text{L}$.

Todos los aceites esenciales de laurel presentan actividad antioxidante de 3.454 a 12.885 $\mu\text{mol ET}/\mu\text{L}$ analizado con el método ABTS+, por lo que esta especie forestal no maderable proporciona una opción de aprovechamiento en el ámbito industrial. La capacidad antioxidante de las muestras presenta diferencias significativas, por lo que se debe de realizar estudios de comparación entre factores geobotánicas, técnicas de cultivo y manejo postcosecha.

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



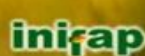
Literatura Citada

- Arango, O. A., Pantoja, D., Santacruz, L, Hurtado A. (2012). Actividad antioxidante del aceite esencial de orégano (*Lippia origanoides* HBK) del Alto Patía, Biotecnología en el Sector Agropecuario y Agroindustrial, 10 (2), 79-86.
- Benzie, I. F. F.; Strain, J. J. (1996). The ferric reducing ability of plasma (FRAP) as a measure of “antioxidant power”: The FRAP assay. *Analytical Biochemistry*, 239(1), 70–76. doi: 10.1006/abio.1996.0292
- Biblioteca Digital de la Medicina Tradicional Mexicana, (2009). *Litsea glaucescens*. Laurel silvestre. Página electrónica UNAM. <http://www.medicinatradicionalmexicana.unam.mx/>
- Coy, E.; Cuca, L. (2007). Metabolitos con actividad biológica aislados de especies pertenecientes a la familia Lauraceae. *Scientia et Technica XIII* (33) 3:363-364.
- Dávila-Figueroa, C.A. (2011). Estatus poblacional y niveles de aprovechamiento del laurel silvestre (*Litsea glaucescens* Kunth) en Aguascalientes. *Revista Mexicana de Ciencias Forestales* 2(4):47-60.
- Domínguez, X. A.; Domínguez X. A. (Jr.), (1982). *Química Orgánica Experimental*, Editorial Limusa, pág. 97-112, México.
- Domínguez, X. A., (1985). *Métodos de Investigación Fitoquímica*, Editorial limusa, México.
- Esteyneffe, J. (1978). *Florilegio Medicinal*. M. C. Anzures, ed. México City: Academia Nacional de Medicina.
- Guzmán- Gutiérrez, S. L., Gómez- Cansino, R., Gracia- Zebadúa, J. C., Jiménez- Pere, N. C., y Reyes- Chilpa, R. (2012). Atidepressant activity and Linalool as active principales. *Journal of ethnopharmacology*, 143(2), 673- 679.
- Hernández-Flores, S. D.; Vargas-Licon, G. (2020). El laurel silvestre (*Litsea glaucescens*) especie en peligro de extinción con alto valor de uso. *Uno Sapiens Boletín Científico De La Escuela Preparatoria No. 1, 2(4), 25-29*. Recuperado a partir de [://repository.uaeh.edu.mx/revistas/index.php/prepa1/article/view/5125](http://repository.uaeh.edu.mx/revistas/index.php/prepa1/article/view/5125)
- INEGI. 2009. *Metepc, Hidalgo (PDF)*. Prontuario de información geográfica municipal de los Estados Unidos Mexicanos. Instituto Nacional de Estadística y Geografía. Disponible en:

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



http://www3.inegi.org.mx/contenidos/app/mexicocifras/datos_geograficos/13/13035.pdf
Consultado: 17 de enero de 2021

- Jiménez-Pérez, N.C., Lorea-Hernández, F.G.; Jankowski, C.; Reyes-Chilpa, R. (2011). Essential Oils in Mexican Bays (*Litsea* spp., Lauraceae): Taxonomic Assortment and Ethnobotanical Implications. *Economic Botany* 65:178–189. DOI:10.1007/s12231-011-9160-5.
- Lee, S. J., Umamo, K., Shibamoto, T., & Lee, K. G. (2005). Identification of volatile components in basil (*Ocimum basilicum* L.) and thyme leaves (*Thymus vulgaris* L.) and their antioxidant properties. *Food Chemistry*, 91(1), 131-137
- López, J., Barillas, W.; Gómez, J.; Lin, F.; A. Sharaf, A. A. M.; Schiff, P. (1995). Flavonoids of *Litsea glaucescens*. *Planta Médica* 61(2):198
- Lorea-Hernández, F. G. (2002). La familia Lauraceae en el sur de México: diversidad, distribución y estado de conservación. *Boletín de la Sociedad Botánica de México*, (71), [Consulta: 06/05/2021]. ISSN: 0366-2128. Disponible en: <http://www.redalyc.org/articulo.oa?id=577/57707104>.
- Luna-Vega, M. I. (2003). *Litsea glaucescens*. Taxones del bosque mesófilo de montaña de la Sierra Madre Oriental incluidos en la norma oficial mexicana. Herbario FCME, Departamento de Biología, Facultad de Ciencias, Universidad Nacional Autónoma de México. Bases de datos SNIB-CONABIO. Proyecto W025. México. D.F. México. pp. 1-5.
- Montañez-Armenta, M. P., (2006). Proceso de organización social para el aprovechamiento del Laurel silvestre (*Litsea glaucescens*) en la Sierra del Laurel, Aguascalientes. Tesis Maestría en Ciencias. Instituto en Socioeconomía, Estadística e Informática, Desarrollo Rural. Colegio de Postgraduados. Montecillo, Texcoco, Edo. de México. México. 110 p
- NORMA Oficial Mexicana NOM-059-SEMARNAT-2019, Protección ambiental-Especies nativas de México de flora y fauna silvestres-de riesgo y especificaciones para su inclusión, exclusión o cambio-Lista de especies en riesgo.
- Osuna, L.; Tapia, M.E.; Aguilar, A. (2005). Plantas medicinales de la medicina tradicional mexicana para tratar afecciones gastrointestinales. Estudio 33 etnobotánico, fitoquímico y farmacológico. España. Universidad de Barcelona. 173p.
- Politeo, O., Jukić, M.; Miloš, M. (2006). Chemical composition and antioxidant activity of essential oils of twelve spice plants. *Croatica Chemica Acta*, 79(4), 545-552
- Sánchez, Y.; Rojas, M.T.; Wong, M.; Muñoz, M.. (2020). Estudio del potencial antioxidante de aceites esenciales de laurel, orégano y damiana pretratados con ultrasonido. Disponible en:

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



<https://www.eumed.net/uploads/articulos/7a516d7405cea7cc357e57b8602ae597.pdf>
Consultado: 11/07/2021

SEFIPLAN, 2016. Sistema de información municipal cuadernillos municipales, 2016: Zongolica.
Disponible en: <http://ceieg.veracruz.gob.mx/wp-content/uploads/sites/21/2016/05/Zongolica.pdf> Consultado: 02/08/2021

Stashenko, E.; Combariza, J.; Puertas, M. (1998). Aceites esenciales: técnicas de extracción y análisis. Laboratorio de Cromatografía, Universidad Industrial de Santander

Valdés, J.; Flores, H. (1985). Comentarios a la historia de las plantas de la nueva España. In: Obras completas de Francisco Hernández, Tomo VII, 179. Universidad Nacional Autónoma de México, México.

Van der Werff, H.; Lorea, F. (1997). Flora del Bajío y de Regiones adyacentes: Familia Laurácea. Instituto de Ecología A.C., Xalapa, Ver. México. Fascículo 56. pp. 25-31.

Vásquez, O.; Alva, A.; Marreros, J. (2001). Extracción y caracterización del aceite esencial de jengibre (*Zingiber officinale*). *Rev Amazon Inv Alim.* 1(1): 38-42.

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



Exploración del Modelado de la Influencia de la Sobrealimentación en la Digestión Anaeróbica Semicontinua de Pollinaza

*Gerson Esteban Vera Perez¹¹, Teodoro Espinosa Solares¹², Ricardo Domínguez Puerto¹³,
Artemio Pérez López¹⁴*

Resumen

La utilización de modelos matemáticos para describir y predecir el comportamiento de sistemas biológicos en diferentes condiciones resulta una herramienta importante que permite por un lado la reducción de costos y tiempo en el diseño de experimentos y por otro la optimización y control de procesos en la industria comercial. Por ello en el presente trabajo se implementó el ADM1 (Anaerobic Digestion Model No. 1) para describir el proceso de perturbación por sobrecarga orgánica en la digestión anaeróbica semicontinua de pollinaza, y se comparó con resultados experimentales. Los resultados mostraron que el ADM1 tiene el potencial de simular procesos en estado semicontinuo con sobre carga en la alimentación. El modelo predijo el comportamiento en la producción tanto de ácidos grasos volátiles como la producción de metano. Para poder obtener un mejor ajuste es importante optimizar los parámetros cinéticos del modelo.

Palabras Clave: Sobre Carga de Orgánica; Ácidos Grasos Volátiles; ADM1; Producción de Metano

Abstract:

The use of mathematical models to describe and predict the behavior of biological systems under different conditions is an important tool that allows, on the one hand, the reduction of costs and time in the design of experiments and, on the other, the optimization and control of processes in the commercial industry. In that sense in the present work, ADM1 was implemented to study overloading disturbance in a semi-continuous chicken litter digestion, and it was compared with experimental results, which showed that ADM1 has the potential to simulate processes in a semi-

¹¹ Licenciatura en Ingeniería Agroindustrial, Universidad Autónoma Chapingo, g.esteban.ev@gmail.com

¹² Doctor en Ciencias Químicas, Universidad Autónoma Chapingo, t.espinosa.s@taurus.chapingo.mx

¹³ Doctor en Ingeniería Agrícola y Uso Integral del Agua, Universidad Autónoma Chapingo, rdominguezp@chapingo.mx

¹⁴ Doctor en Ciencias, Universidad Autónoma Chapingo

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



inifap



continuous state with overloading. The model predicted both the production of volatile fatty acids and methane, so it is essential to estimate the kinetic parameters of the model to obtain a better fit, and it can be used for subsequent evaluations.

Keywords: Organic Overloading; Volatile Fatty Acids; ADM1; Methane Production

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



Introducción

En el mundo se generan 2.01 billones de toneladas de residuos sólidos urbanos anualmente, alrededor de 44% corresponde a desechos alimentarios (Kaza et al., 2018), aunado a esto los residuos de estiércol y el manejo de estos generan el 28% de los gases con efecto invernadero en el sector agropecuario (FAOSTAT, 2014), esto ocasiona un problema grave de contaminación ambiental. Una alternativa de tratamiento de estos residuos es la Digestión Anaeróbica (DA). Que se puede definir como la degradación de materia orgánica a través de procesos bioquímicos y reacciones fisicoquímicas llevados a cabo principalmente para producir bioenergía (Koch et al., 2014; Pavlovasthis & Giraldo-Gomez, 1991); Los procesos bioquímicos son mediados por el metabolismo de consorcios microbianos que coexisten en simbiosis. Podemos dividirlos en cinco procesos principales: i) desintegración de la materia orgánica, ii) hidrólisis de macromoléculas, iii) fermentación de azúcares, aminoácidos y proteínas, iv) acetogénesis y v) metanogénesis (acetoclástica, hidrogenotrófica y metiltrófica) (Raza et al., 2021). Por otro lado, las reacciones fisicoquímicas no son mediados por microorganismos son reacciones de asociación/disociación de iones, transferencia líquido-gas y precipitación, ambos procesos bioquímicos y fisicoquímicos hacen posible la DA (Batstone et al. 2002), que según Kumar & Samadder, (2020), tiene el potencial de convertirse en una alternativa de energía renovable que eventualmente reemplace a los combustibles fósiles. Sin embargo, es indispensable mejorar el rendimiento en la producción de metano que se ve afectado por varios estresores uno de los más importantes es el tipo y la cantidad de sustrato que se utiliza en la alimentación (Rocamora et al., 2020; Zhou et al., 2020). En el caso de digestores en estado continuo o semicontinuo la carga orgánica se puede incrementar de dos maneras, disminuyendo el tiempo de retención hidráulica o incrementando la carga orgánica en el flujo de alimentación (Regueiro, Lema, & Carballa, 2015). Esta operación suele ser riesgosa debido a que ocasiona acumulación de ácidos grasos volátiles, provocando falla en la producción de metano debido a la acidificación del sistema (Braz et al. 2019; Xi, Li y Peng, 2017). Una alternativa viable para realizar exploraciones teóricas para sistemas perturbados es utilizar modelos matemáticos. La ventaja que ofrece esta herramienta es que permite la reducción de costos, tiempo y material experimental (Donoso-Bravo et al., 2011). En la DA ha sido propuesto el modelo ADM1 que describe tanto los procesos bioquímicos como los fisicoquímicos (Batstone et al. 2002). El modelo es lo suficientemente robusto para simular sistemas en diferentes escenarios y protocolos de alimentación (Parker, 2004). En el caso de la variación en la carga orgánica Blumensaat & Keller, (2005) sugiere realizar más estudios para describir la capacidad del modelo en la simulación

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



de sistemas con sobrecarga con diferentes tipos de sustrato. Al respecto Fatolahi, Arab, y Razaviarani, (2020) mostraron que el ADM1 fue capaz de simular la producción de metano en condiciones de sobrecarga utilizando residuos sólidos urbanos. En ese sentido, para seguir esclareciendo y proponiendo alternativas en el manejo de digestores perturbados se implementó ADM1 para explorar la influencia de la sobrecarga en digestores en estado semicontinuo alimentados con pollinaza y se comparó con resultados experimentales.

Materiales y Métodos:

Procedimiento Experimental

Se configuraron dos digestores encamisados, a temperatura mesofílica (37 ± 2 °C), con un volumen de trabajo de 10 L y aproximadamente 3 L de espacio de cabeza, se pusieron en marcha con 20 % de inóculo y 80 % de solución de pollinaza y agua al 3 % de sólidos totales (ST), el tamaño de partícula de la pollinaza utilizado para la solución fue de 1 mm de acuerdo con (Meneses-Reyes et al. 2017). las características fisicoquímicas se muestran en el Cuadro 2. El tiempo de retención hidráulica (TRH) establecido para cada digestor fue de 30 d, la recirculación se realizó de manera intermitente cada 3 h durante 15 min con un flujo de 620 mL min^{-1} usando una bomba dosificadora de membrana (Modelo BL20 Black Stone, Hanna Instruments, Romania), la tasa de carga orgánica fue de $6.97 \pm 0.65 \text{ gsv d}^{-1}$ hasta alcanzar el estado estacionario.

El experimento se dividió en 5 periodos de acuerdo con la variación en la carga orgánica (ver Cuadro 1). El periodo I abarca del tiempo -65 al -1 se toma en cuenta a partir de haber alcanzado la fase estacionaria. En el periodo II del tiempo 0 al 11 se realiza la primera sobrecarga de alimentación. En el periodo III del tiempo 12 al 299 se regula la alimentación hasta alcanzar nuevamente la fase estacionaria. En el periodo IV del tiempo 300 al 311 se realiza la segunda sobrecarga de alimentación, en el periodo V del tiempo 312 al 362 se vuelven a estabilizar los digestores regulando la carga orgánica en la alimentación.

Cuadro 3. Configuración experimental de acuerdo con la tasa de carga orgánica

Características de la alimentación	Periodo I (Inicio)	Periodo II (Sobre carga)	Periodo III (Estabilización)	Periodo IV (Sobre carga)	Periodos V (Estabilización)
ST [%]	3.03 ± 0.28	20.10 ± 0.37	2.79 ± 0.50	17.69 ± 0.60	2.89 ± 0.24

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



inifap



TCO [g_{SV} d⁻¹] 6.97 ± 0.65 46.17 ± 0.84 6.42 ± 1.15 46.3 ± 1.38 6.64 ± 0.55

TCO: Tasa de carga orgánica ST: Sólidos totales; SV: Sólidos volátiles

Cuadro 4. Características fisicoquímicas de la pollinaza, reportado previamente por nuestro equipo de investigación (Meneses-Reyes et al. 2017).

Parámetros	Unidades	Pollinaza
ST	[%]	66.28 ± 1.16
SV/ST	[%]	69.61 ± 0.71
Proteína	[% BS]	24.70 ± 2.13
Extracto Etéreo	[% BS]	1.81 ± 0.15
Cenizas	[% BS]	20.13 ± 0.12
Carbohidratos	[% BS]	19.65 ± 3.52
Fibra Cruda	[% BS]	16.25 ± 0.37

BS: Base seca

Método Analíticos

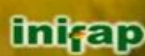
Se determinó el perfil de ácidos grasos volátiles (AGV) para acetato, propionato, butirato, isobutirato, valerato, iso-valerato, caproato, iso-caproato, y heptanoato, usando un cromatógrafo de gases (CG) (Claurus 500, Perkin Elmer, USA) equipado con un detector de ionización de llama y un tubo capilar Elite-FFAP de 30 m de longitud y 0.33 mm de diámetro (Perkin Elmer, USA). La muestra para el análisis se preparó tomando 2 mL de efluente, que fue acidificado a pH 3 con HCl y posteriormente centrifugado a 14500 rpm durante 10 minutos (MiniSpin Plus model microcentrifuge Eppendorf, Germany), se inyectaron 5 µL de sobrenadante usando un inyector automático, las condiciones de operación fueron las siguientes: flujo de gas 5 mL min⁻¹ a 10.6 psi, puerto de inyección a 150 °C, horno a 100 °C durante 8 min con una rampa de 160 °C por 8.5 min, el detector a 250 °C y el tiempo de retención fue de 16.5 min. Se utilizó helio como gas portador y una mezcla de ácidos grasos volátiles grado analítico (46975-U, Brand Sigma-Aldrich, USA) como estándar.

La producción de biogás se cuantificó mediante el volumen de desplazamiento en un sistema equipado con un contador digital (LA8N-BN, Autonics, Korea). El contenido de metano en el biogás se evaluó usando el CG (Claurus 500, Perkin Elmer, USA), se inyectó 10 µL de biogás

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



obtenido de cada digestor. Las condiciones de operación fueron las siguientes: flujo de gas 14 ml min⁻¹ a 14 psi, puerto de inyección a 100 °C, horno a 70 °C y 100 °C en el detector y el tiempo de retención fue de 4 min, se utilizó helio como gas portador. El porcentaje de metano fue obtenido usando una curva calibración realizado con metano puro (HDSP No. P-4618-F, Praxair, México), el porcentaje de metano se reportó a presión y temperatura ambiente.

Descripción e Implementación del Modelo

El ADM 1 fue implementado en Matlab/Simulink con 36 variables de estado dinámico de acuerdo con (Rosen y Jeppsson, 2004). Para resolver 19 procesos bioquímicos, 6 procesos de reacción ácido-base, y 3 procesos de transferencia líquido-gas. Se utilizó el algoritmo de solución ode15s con una tolerancia relativa de 1e⁻⁸ de acuerdo con lo recomendado por los mismos autores. Los cambios en la carga orgánica (Cuadro 1) y la información obtenida del análisis proximal (Cuadro 2), fueron utilizados para estimar el contenido de carbohidratos, proteínas y grasas, contenido en el flujo de alimentación mediante las ecuaciones 1, 2 y 3. Solamente se tomó en cuenta los azúcares, se descartó la utilización de la fibra cruda, debido a que los principales componentes de esta son celulosa, hemicelulosa y lignina (García, Infante, & Rivera, 2008) que son considerados compuestos recalcitrantes que necesitan un pretratamiento para poder ser aprovechados en la DA (Muhammad & Kiaer, 2021).

$$X_{az} = \frac{S_{in1} \cdot X_{in1}}{q} \cdot FC \quad (1)$$

$$X_{Pr} = \frac{S_{in1} \cdot X_{in2}}{q} \cdot FC \quad (2)$$

$$X_{gr} = \frac{S_{in1} \cdot X_{in3}}{q} \cdot FC \quad (3)$$

Donde X_{az} , X_{Pr} y X_{gr} son la cantidad (g_{DQO} L⁻¹ d⁻¹ ≡ kg_{DQO} m⁻³ d⁻¹) de azúcares, proteínas y grasas respectivamente contenidas en el flujo de alimentación, S_{in1} es la tasa carga orgánica (g_{SV} d⁻¹), X_{in1} , X_{in2} y X_{in3} son las fracciones masa de carbohidratos, proteínas y grasas en función de los SV del sustrato, q es el flujo de alimentación y FC es el factor de conversión que tiene valores de 1.0667, 1.5521, y 2.8784 (g_{DQO} g⁻¹) para carbohidratos, proteínas y grasas respectivamente. Los parámetros cinéticos, estequiométricos y fisicoquímicos del ADM1 se tomaron de Batstone et al. (2002) y

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



Rosen y Jeppsson, (2004), así como los valores iniciales de las variables de estado dinámico para iniciar el modelo, como se muestran en el Cuadro 3, Cuadro 4 y Cuadro 5 respectivamente.

Cuadro 5. Parámetros cinéticos y estequiométricos

Parámetros cinéticos			Parámetros estequiométricos		
Parámetro	Unidad	Valor ^a	Parámetro	Unidad	Valor ^a
Kdis	kgDQO kgDQO ⁻¹ d ⁻¹	0.500	Ysu	kgDQO kgDQO ⁻¹	0.100
khyd,ch	kgDQO kgDQO ⁻¹ d ⁻¹	0.280	Yaa	kgDQO kgDQO ⁻¹	0.150
khyd,pr	kgDQO kgDQO ⁻¹ d ⁻¹	0.680	Yfa	kgDQO kgDQO ⁻¹	0.021
khyd,li	kgDQO kgDQO ⁻¹ d ⁻¹	0.120	Yc4	kgDQO kgDQO ⁻¹	0.060
km,su	kgDQO kgDQO ⁻¹ d ⁻¹	30.000	Ypro	kgDQO kgDQO ⁻¹	0.055
KS,su	kg DQO m ⁻³	0.053	Yac	kgDQO kgDQO ⁻¹	0.050
km,aa	kgDQO kgDQO ⁻¹ d ⁻¹	53.000	Yh2	kgDQO kgDQO ⁻¹	0.060
KS,aa	kg DQO/m ⁻³	0.120			
km,fa	kgDQO kgDQO ⁻¹ d ⁻¹	12.000			
KS,fa	kg DQO m ⁻³	0.400			
km,c4	kgDQO kgDQO ⁻¹ d ⁻¹	11.000			
KS,c4	kg DQO m ⁻³	0.300			
km,pro	kgDQO kgDQO ⁻¹ d ⁻¹	13.000			
KS,pro	kg DQO m ⁻³	0.100			
km,h2	kgDQO kgDQO ⁻¹ d ⁻¹	35.000			
KS,h2	kg DQO m ³	8.8 x 10 ⁻⁵			
km,ac	kgDQO kgDQO ⁻¹ d ⁻¹	8.000			
KS,ac	kg DQO m ⁻³	0.150			

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



iniap



^a Tomados de Batstone et al. (2002) y Rosen y Jeppsson, (2004)

Cuadro 6. Parámetros fisicoquímicos

Parámetro	Unidad	Valor ^b
R	bar M ⁻¹ K ⁻¹	0.08314
T _{base}	K	298.15
T _{op}	K	310.15
k _w	M	$10^{-14} \exp \left(\frac{55900}{R * 100} * \left(\frac{1}{T_{base}} - \frac{1}{T_{op}} \right) \right)$
k _{a,va}	M	10 ⁻¹⁴
k _{a,bu}	M	10 ⁻¹⁴
k _{a,pro}	M	10 ⁻¹⁴
k _{a,ac}	M	10 ⁻¹⁴
k _{a,co2}	M	$10^{-6.35} \exp \left(\frac{7646}{R * 100} * \left(\frac{1}{T_{base}} - \frac{1}{T_{op}} \right) \right)$
k _{a,IN}	M	$10^{-9.25} \exp \left(\frac{51965}{R * 100} * \left(\frac{1}{T_{base}} - \frac{1}{T_{op}} \right) \right)$
k _{A,Bva}	M ⁻¹ d ⁻¹	1e8
k _{A,Bbu}	M ⁻¹ d ⁻¹	1e8
k _{A,Bpro}	M ⁻¹ d ⁻¹	1e8
k _{A,Bac}	M ⁻¹ d ⁻¹	1e8
k _{A,Bco2}	M ⁻¹ d ⁻¹	1e8
k _{A,BIN}	M ⁻¹ d ⁻¹	1e8
P _{atm}	bar	1.013
P _{gas,h2o}	bar	$0.0313 \exp \left(5290 * \left(\frac{1}{T_{base}} - \frac{1}{T_{op}} \right) \right)$
k _{La}	d ⁻¹	200
k _{H,co2}	M _{liq} bar ⁻¹	$0.035 \exp \left(\frac{-19410}{R * 100} * \left(\frac{1}{T_{base}} - \frac{1}{T_{op}} \right) \right)$
k _{H,ch4}	M _{liq} bar ⁻¹	$0.0014 \exp \left(\frac{-14240}{R * 100} * \left(\frac{1}{T_{base}} - \frac{1}{T_{op}} \right) \right)$

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



inifap



$$k_{H,h2} \quad M_{liq} \text{ bar}^{-1} \quad 7.8 e - 14 \exp \left(\frac{-4180}{R * 100} * \left(\frac{1}{T_{base}} - \frac{1}{T_{op}} \right) \right)$$

^b Tomado de Rosen y Jeppsson, (2004)

Cuadro 7. Descripción y valores de las variables de estado para iniciar el modelo.

Variable de Estado	Descripción	Unidad	Valor ^c
S _{su}	Concentración de azúcares en la fase líquida.	kg DQO m ⁻³	0.011951
S _{aa}	Concentración de aminoácidos en la fase líquida.	kg DQO m ⁻³	0.0053459
S _{fa}	Concentración de ácidos grasos de cadena larga en la fase líquida.	kg DQO m ⁻³	0.10246
S _{va}	Concentración de ácido valérico y valerato en la fase líquida.	kg DQO m ⁻³	0.010808
S _{bu}	Concentración de ácido butírico y butirato en la fase líquida	kg DQO m ⁻³	0.014189
S _{pro}	Concentración de ácido propiónico y propionato en la fase líquida.	kg DQO m ⁻³	0.016818
S _{ac}	Concentración de ácido acético y acetato en la fase líquida.	kg DQO m ⁻³	0.18128
S _{h2}	Concentración de hidrógeno disuelto en la fase líquida.	M	2.41E-07
S _{ch4}	Concentración de metano disuelto en la fase líquida.	Kg DQO m ⁻³	0
S _{TC}	Concentración de carbono inorgánico en la fase líquida.	M m ⁻³	0.094672
S _{IN}	Concentración de nitrógeno inorgánico en la fase líquida.	M m ⁻³	0.22993
S _I	Concentración de compuestos inertes en la fase líquida	Kg DQO m ⁻³	5.5383
X _{xc}	Concentración de la fuente de carbono en la fase líquida.	Kg DQO m ⁻³	5.5083
X _{ch}	Concentración de carbohidratos en la fase líquida.	Kg DQO m ⁻³	0.055307
X _{pr}	Concentración de proteínas en la fase líquida.	Kg DQO m ⁻³	0.055307
X _{li}	Concentración de lípidos en la fase líquida	Kg DQO m ⁻³	0.082712
X _{su}	Concentración de biomasa de microorganismos degradadores de azúcar.	Kg DQO m ⁻³	0.85547
X _{aa}	Concentración de biomasa de microorganismos degradadores de aminoácidos.	Kg DQO m ⁻³	0.63749
S _{fa}	Concentración de biomasa de microorganismos degradadores de ácidos grasos de cadena larga.	Kg DQO m ⁻³	0.6734
X _{c4}	Concentración de biomasa de microorganismos degradadores de valerato y butirato.	Kg DQO m ⁻³	0.28309
X _{pro}	Concentración de biomasa de microorganismos degradadores de propionato.	Kg DQO m ⁻³	0.13572
X _{ac}	Concentración de biomasa de metanógenos acetoclásticos.	Kg DQO m ⁻³	0.90074
X _{h2}	Concentración de biomasa de metanógenos hidrogenotróficos.	Kg DQO m ⁻³	0.43638

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



inifap



X_I	Concentración de biomasa de microorganismos degradadores de compuestos inertes.	Kg DQO m ⁻³	45.298
S_{cat}	Concentración de cationes.	M	0.039126
S_{an}	Concentración de aniones.	M	0.17846
S_{va}^-	Concentración de iones valerato.	Kg DQO m ⁻³	0.010757
S_{bu}^-	Concentración de iones butirato.	Kg DQO m ⁻³	0.014128
S_{pro}^-	Concentración de iones propionato.	Kg DQO m ⁻³	0.016735
S_{ac}^-	Concentración de iones acetato.	Kg DQO m ⁻³	0.1806
S_{hco3}^-	Concentración de iones bicarbonato.	M	0.083654
S_{nh3}	Concentración de amoníaco.	M	0.003826
S_{H^+}	Concentración de protones de hidrógeno.	M	6.56E-08
$S_{gas,h2}$	Concentración de hidrógeno en la fase gas.	Kg DQO m ⁻³	0
$S_{gas,ch4}$	Concentración de metano en la fase gas.	Kg DQO m ⁻³	0
$S_{gas,co2}$	Concentración de CO2 en la fase gas.	Kg DQO m ⁻³	0

^c Tomado de Rosen y Jeppsson, (2004)

Cuadro 8. Matriz de alimentación del modelo.

Variable de Estado	Periodo 1	Periodo 2	Periodo 3	Periodo 4	Periodo 5
S_{su}	1.66 ± 0.16	10.99 ± 0.20	1.53 ± 0.27	9.67 ± 0.33	1.58 ± 0.13
S_{aa}	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
S_{fa}	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
S_{va}	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
S_{bu}	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
S_{pro}	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
S_{ac}	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
S_{h2}	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
S_{ch4}	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
S_{IC}	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
S_{IN}	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
S_I	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
X_{xc}	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
X_{ch}	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
X_{pr}	17.53 ± 1.65	116.19 ± 2.11	16.15 ± 2.88	102.25 ± 3.47	16.72 ± 1.39
X_{li}	2.38 ± 0.22	15.79 ± 0.29	2.20 ± 0.39	13.90 ± 0.47	2.27 ± 0.19

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



iniqap



X_{su}	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
X_{aa}	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
S_{fa}	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
X_{c4}	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
X_{pro}	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
X_{ac}	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
X_{h2}	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
X_I	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
S_{cat}	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
S_{an}	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
q_{in}	0.00033	0.00033	0.00033	0.00033	0.00033

Resultados y Discusión

Resultados experimentales y simulados

En la Figura 1 se muestra los resultados experimentales de los AGV y metano, se puede observar que durante los periodos de sobrecarga en la alimentación (0-11 días y 300-311 días) aparece un incremento tanto en la producción de los ácidos grasos volátiles como en la producción de metano, sin embargo, este último no incrementa en la misma proporción que los AGV incluso se observa una ligera caída en la producción de metano entre el inicio y el final de cada uno de los periodos de perturbación. Al respecto Meegoda et al. (2018) menciona que los microorganismos acidógenos tienen un tiempo de duplicación menor (aproximadamente 36 h) en comparación con los metanógenos (3-5 días), lo que indica que los microorganismos fermentativos consumen más rápidamente los metabolitos procedentes de la hidrólisis enzimática, como resultado hay una acumulación de AGV producto de su metabolismo que no es degradado en la misma velocidad. Sun et al., (2020) y Uhlenthut et al., (2018) señalan que los microorganismos metanogénicos son sensibles a los ambientes ácidos, se inhiben y mueren provocando la caída en la producción de metano. Si se compara el periodo II con el periodo IV se observa que la producción de metano en la segunda perturbación fue mayor que en la primera, probablemente debido a que en la primera hay mayor acumulación AGV.

En la Figura 2 se muestran los AGV y metano resultados de la simulación, de manera general se observa un comportamiento muy similar a los resultados experimentales. Sin embargo, la acumulación de propionato butirato y valerato durante los procesos de perturbación son muy bajos en comparación con el acetato que se ajusta más al resultado experimental, punto que se analizará

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



en la siguiente sección. En la Figura 3 se muestra el comportamiento del pH durante la simulación, se observa que durante ambos periodos de perturbación hay una ligera caída del pH debido al incremento de los AGV. La caída del pH no afecta la producción de metano simulado, debido a que la inhibición por pH bajo en el ADM1 se activa en valores de 6.0 y 5.0 en la ruta acetotrófica e hidrogenotrófica respectivamente. Contrario a lo que maneja la literatura para inhibición por pH bajo que es de 6.5 (Rocamora et al., 2020; Kumar & Samadder, 2020). Generalmente esto se considera cuando ocurre la falla en los digestores y la producción de metano es menor al 50% (He, Li, & Peng, 2017) sin embargo el ADM1 considera una inhibición total en la producción de metano (Batstone et al. 2002). Por otro lado, los metanógenos hidrogenotróficos son más resistentes a los ambientes extremos (Pasalari et al., 2020). Además de que el H^+ es el sustrato de estos microorganismos.

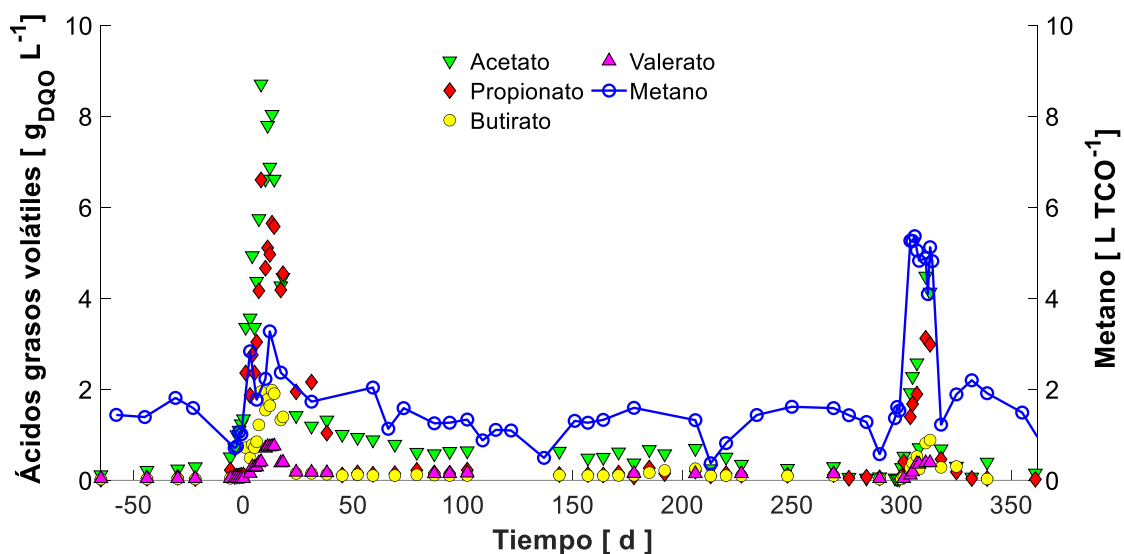


Figura 1. Ácidos grasos volátiles y metano experimental

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021

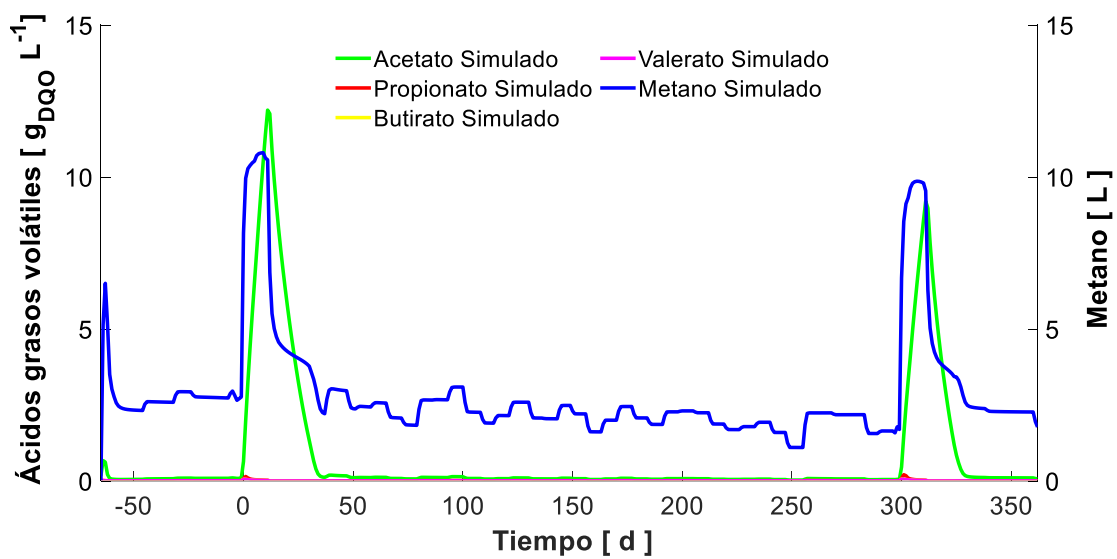


Figura 2. Ácidos grasos volátiles y metano simulado.

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021

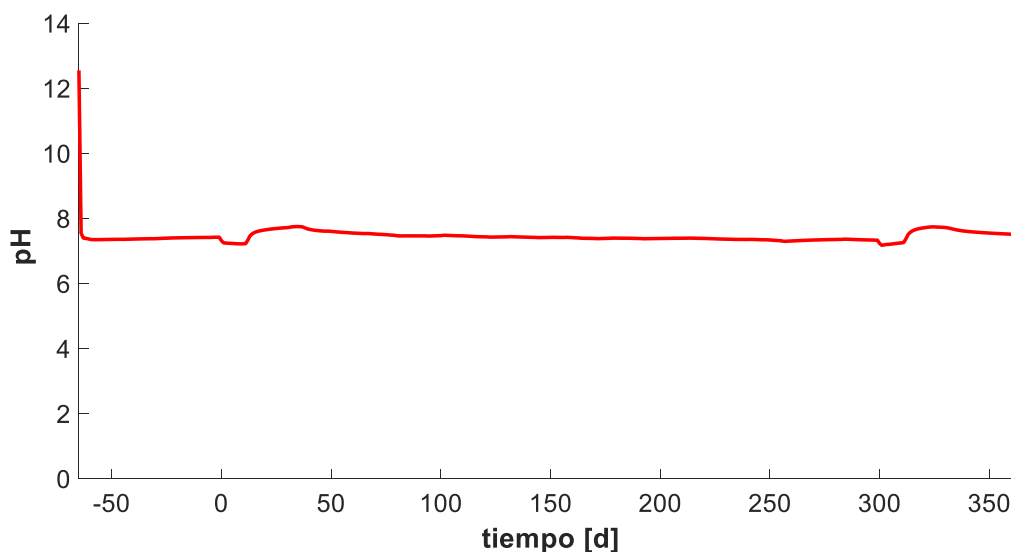


Figura 3. Comportamiento del pH simulado.

Resultados experimentales vs resultados de la simulación

En la Figura 3 se muestra la comparación entre los AGV experimentales y los simulados. Se observa que el acetato es el que más se asemeja a los resultados experimentales. mientras que el propionato, butirato y valerato se asemejan únicamente en los periodos de baja carga orgánica. Es importante mencionar que durante los procesos de sobrecarga se inducen cambios significativos en la estructura y composición de los microbiomas (Braz et al., 2019). Esto debido a los cambios en las condiciones del ambiente en el digestor (incremento de la acidez, y caída de pH) que impone criterios de selección (Bikram et al., 2021). Esto ocasiona incremento o disminución de consorcios microbianos selectos que a su vez afectan las velocidades de degradación de los sustratos, por ejemplo, Yang et al., (2020) comparó la degradación del acetato tradicional, con la oxidación sintrófica, y encontró que a mayor presencia de microorganismos de oxidación sintrófica se daba también un incremento en la velocidad de degradación (km) de esta vía. Si se observan las velocidades de degradación de valerato, butirato y propionato son mayores a los del acetato (km,

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



iniqap



$c_4 = 11$; km, pro = 13, km, ac = 8)., es decir se está acumulando acetato por las altas velocidades de degradación de propionato, butirato y valerato que son metabolitos precursores de acetato. En biorreactores alimentados con pollinaza Rivera salvador et al., (2014) calibró los parámetros cinéticos del modelo mediante mínimos cuadrados no lineales y algoritmos de evolución diferencial obteniendo un buen ajuste de los AGV (Index = 0.9494) en comparación con los parámetros estándar (Index = 0.4797). Con lo anterior se puede especular que optimizar los parámetros cinéticos del modelo es imprescindible durante variaciones en la alimentación, ya que afectan el ambiente en los digestores y a su vez las cinéticas de degradación cambian.

La comparación entre el metano experimental y simulado se muestra en la Figura 4 se observa una acumulación de metano durante los periodos de perturbación además de una ligera sobreestimación. Analizando la calidad de la simulación Wallach, Makowski, y Jones, (2006) mencionan que el parámetro bias puede indicar subestimación y sobreestimación, $bias > 0$ indica subestimación mientras que $bias < 0$ indica sobreestimación. De los resultados de la simulación se observa una ligera sobreestimación de acetato y metano y subestimación de propionato, butirato y valerato (ver Cuadro 7 y Figura 3 y 4 respectivamente), Por otro lado el resultado del metano concuerda con lo reportado Fatolahi, Arab, y Razaviarani, (2020) quienes encontraron que no calibrar los parámetros del ADM1 sobrestima la producción de metano en los procesos de simulación. Por otro lado, la eficiencia del modelado (EF) es un parámetro que se utiliza generalmente para evaluar diferentes datos o diferentes modelos si el modelo es perfecto entonces $EF = 1$ pero si $EF < 0$ el modelo no predice adecuadamente (Wallach, Makowski, y Jones, 2006), los mismos autores también recomiendan el coeficiente de correlación ($-1 \leq r \leq 1$) que indica una correlación lineal positiva o negativa pero que no necesariamente significa una buena predicción. El ajuste del modelo a los datos experimentales se puede medir mediante el índice de ajuste (Index) basado en la distancia que hay entre el valor medido y el valor simulado muy parecido al parámetro EF. Si se observa el Cuadro 7 y se comparan los resultados entre los AGV el acetato es el que tuvo mejores parámetros de calidad (bias = -0.7362, EF = 0.2115, $r = 0.9264$, Index = 0.8881). sin embargo si analizamos solamente los valores del Index para acetato, propionato, butirato y valerato (0.8881, 0.6445, 0.9582, 0.9928) así como para el metano (0.6429) puede notarse que el modelo se ajusta a los resultados experimentales, es decir el ADM1 predice procesos perturbados con sobrecarga orgánica. Sabiendo que el modelo predice el proceso de sobrecarga plantear la optimización de los parámetros es el siguiente paso para lograr un mejor ajuste del modelo.

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021

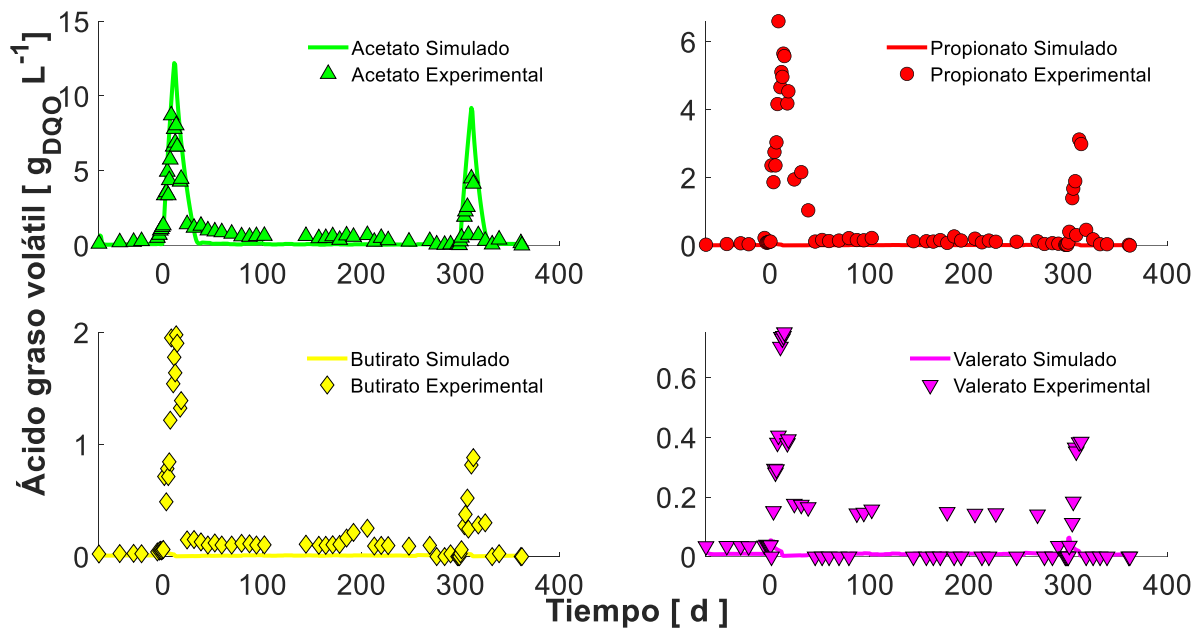


Figura 4. Comparación entre los AGV experimentales y simulados.

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021

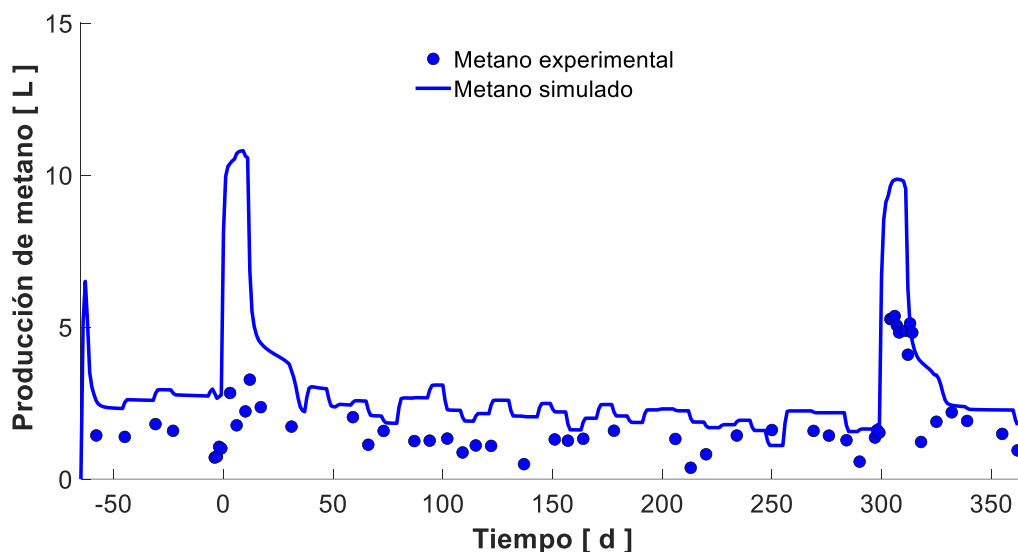


Figura 5. Comparación entre el metano experimental y el metano simulado.

Cuadro 9. Pruebas de bondad de ajuste entre los datos simulados y los experimentales

Variable de análisis	Medida de ajuste	Simulación con los parámetros de Batstone et al. (2002) y Rosen y Jeppsson, (2004)			
		Acetato	Propionato	Butirato	Valerato
Ácidos grasos volátiles	Bias (kgDQO m ⁻³)	-0.7362	1.1495	0.3687	0.2066
	EF	0.2115	-0.4258	-0.4615	-1.2369
	r	0.9264	0.0740	0.0257	-0.1927
	Índex	0.8881	0.6445	0.9582	0.9928
Metano	Bias (m ³)	-1.8389			
	EF	-2.8185			
	r	0.7743			
	Índex	0.6429			

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



inifap



Conclusiones

El ADM1 tiene el potencial de simular las perturbaciones de un sistema anaeróbico sobrealimentado, ya que se obtuvieron índices de ajuste cercanos a 1, para metano (index = 0.6429), acetato (Index = 0.8881), propionato (Index = 0.6445), butirato (Index = 0.9582) y valerato (Index = 0.9928). sin embargo, se requiere implementar la calibración de parámetros debido a los cambios que ocurren en los microbiomas de los digestores que afectan las velocidades de degradación (km)

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



Literatura citada

- Batstone, D., Keller, J., Angelidaski, I., Kalyuzhnyi, S., Pavlovastis, S., Rozzi, A., . . . Vavilin, V. (2002). The IWA Anaerobic Digestion Model No 1 (ADM1). *Water Science and Technology*, 65-73. doi:<https://doi.org/10.2166/wst.2002.0292>
- Bikram, B., M, S., Shouvik, S., Mayur, B., Geon-Soo, H., Sanjay, P., . . . Byong-Hun, J. (2021). Rapid recovery of methane yield in organic overloaded-failed anaerobic digesters through bioaugmentation with acclimatized microbial consortium. *Science of The Total Environment*, 144-219. doi:<https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2020.144219>
- Blumensaat, F., & Keller, J. (2005). Modelling of two-stage anaerobic digestion using the IWA Anaerobic Digestion Model No. 1 (ADM1). *Water Research*, 39(1), 171-183. doi:10.1016/j.watres.2004.07.024
- Braz, G., Fernandez-Gonzalez, N., Lema, J., & Carballa, M. (2019). Organic overloading affects the microbial interactions during anaerobic digestion in sewage sludge reactors. *Chemosphere*, 222, 323-332. doi:10.1016/j.chemosphere.2019.01.124
- Donoso-Bravo, A., Mailier, J., Martin, C., & Rodríguez, J. (2011). Model selection, identification and validation in anaerobic digestion: A review. *Water Research*, 45, 5347-5364. doi:<https://doi.org/10.1016/j.watres.2011.08.059>
- Fatolahi, Z., Arab, G., & Razaviarani, V. (2020). Calibration of the Anaerobic Digestion Model No. 1 for anaerobic digestion of organic fraction of municipal solid waste under mesophilic condition. *Biomass and Bioenergy*, 105661. doi:<https://doi.org/10.1016/j.biombioe.2020.105661>
- García, O. E., Infante, R. B., & Rivera, C. (2008). Hacia una definición de fibra alimentaria. *Anales Venezolanos de Nutrición*, 25-30. Obtenido de http://ve.scielo.org/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S0798-07522008000100005
- He, Q., Li, L., & Peng, X. (2017). Early Warning Indicators and Microbial Mechanisms for Process Failure due to Organic Overloading in Food Waste Digesters. *Journal of Environmental Engineering*, 143(12), 1943-7870. Obtenido de <https://ascelibrary.org/doi/abs/10.1061/%28ASCE%29EE.1943-7870.0001280>

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



inifap



Kaza, S., Yao, L. C., Bhada-Tata, P., & Van Woerden, F. (2018). What a Waste 2.0 : A Global Snapshot of Solid Waste Management to 2050. *Urban Development*; Washington, DC: World Bank. Obtenido de <http://hdl.handle.net/10986/30317>

Koch, C., Müller, S., Harms, H., & Harnisch, F. (2014). Microbimes in bioenergy production: From analysis to management. *Current Opinion in Biotechnology*, 27, 65-72. doi:<http://dx.doi.org/10.1016/j.copbio.2013.11.006>

Kumar, A., & Samadder, S. (2020). Performance evaluation of anaerobic digestion technology for energy recovery from organic fraction of municipal solid waste: A review. *Energy*, 197, 117253. doi:<https://doi.org/10.1016/j.energy.2020.117253>

Maleki, E., Bokhary, A., & Liao, B. (2018). A review of anaerobic digestion bio-kinetics. *Reviews in Environmental Science and Bio/Technology volume*, 17, 691-705. doi:[https://doi.org/10.1007/s11157-018-9484-z\(0123456789\(\).,-volV\(0123456789\(\).,-volV](https://doi.org/10.1007/s11157-018-9484-z(0123456789().,-volV(0123456789().,-volV)

Meneses-Reyes, J. C., Hernández-Eugenio, G., Huber, D. H., Balagurusamy, N., & Espinosa-Solares, T. (2017). Biochemical methane potential of oil-extracted microalgae and glycerol in co-digestion with chicken litter. *Bioresource Technology*, 373-379. doi:<https://doi.org/10.1016/j.biortech.2016.11.012>

Muhammad, U., & Kiaer, B. (2021). Improving the biogas yield of manure: Effect of pretreatment on anaerobic digestion of the recalcitrant fraction of manure. *Bioresource Technology*, 321, 124427. doi:<https://doi.org/10.1016/j.biortech.2020.124427>

Organización de la Naciones Unidas para la Alimentación y la Agricultura- División de Estadística-(FAOSTAT). (2014). Emisiones de gases de efecto invernadero de la agricultura, silvicultura y otros usos de la tierra America Latina y el Caribe. Obtenido de <http://www.fao.org/resources/infographics/infographics-details/es/c/238841/>

Parker, W. j. (2004). Application of the ADM1 model to advanced anaerobic digestion. *Bioresource Technology*, 1832-1842. doi:<https://doi.org/10.1016/j.wasman.2019.12.021>

Pasalari, H., Gholami, M., Rezaee, A., Esrafil, A., & Farzadkia, M. (2020). Perspectives on microbial community in anaerobic digestion with emphasis on environmental parameters: A systematic review. *Chemosphere*, 270, 128618. doi:<https://doi.org/10.1016/j.chemosphere.2020.128618>

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



Pavlovasthis, S., & Giraldo-Gomez, E. (1991). Kinetics of anaerobic treatment: A critical review. *Critical Reviews in Environmental Control*, 21, 411-490.
doi:<http://dx.doi.org/10.1080/10643389109388424>

Raza, F., Khalid, H., Hamed, M. E.-M., Chen, C., Liu, G., & Zhang, R. (2021). Functions of bacteria and archaea participating in the bioconversion of organic waste for methane production. *Science of the Total Environment*, 763, 143007.
doi:<https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2020.143007>

Regueiro, L., Lema, J., & Carballa, M. (2015). Key microbial communities steering the functioning of anaerobic digesters during hydraulic and organic overloading shocks. *Bioresource Technology*, 197, 208-216. doi:10.1016/j.biortech.2015.08.076

Rocamora, I., Wagland, S. T., Villa, R., Simpson, E., Fernández, O., & Bajón-Fernández, Y. (2020). Dry anaerobic digestion of organic waste: A review of operational parameters and their impact on process performance. *Bioresource Technology*, 299, 122681.
doi:<https://doi.org/10.1016/j.biortech.2019.122681>

Rosen, C., & Jeppsson, U. (2004). ANAEROBIC COST BENCHMARK MODEL DESCRIPTION Version 1.2.5. *Department of Industrial Electrical Engineering and Automation Lund University*.

Sun, M., Liu, B., Yanagawa, K., Thi Ha, N., & Goel, R. (2020). Effects of low pH conditions on decay of methanogenic biomass. *Water Research*, 179, 115883.
doi:<https://doi.org/10.1016/j.watres.2020.115883>

Uhlenhut, F., Schlüter, K., & Gallert, C. (2018). Wet biowaste digestion: ADM1 model improvement by implementation of known genera and activity of propionate oxidizing bacteria. *Water Research*, 129, 384-393. doi:<https://doi.org/10.1016/j.watres.2017.11.012>

Wallach, D., Makowski, D., & Jones, J. W. (2006). *Working with Dynamic Crop Models Evaluation, Analysis, Parameterization, and Applications*. Amsterdam, The Netherlands : El Sevier. doi:<https://doi.org/10.1016/j.agry.2007.08.006>

Yang, Z., Sun, H., Qing, Z., Kurbonova, M., Zhang, R., Liu, G., & Wang, W. (2020). Long-term evaluation of bioaugmentation to alleviate ammonia inhibition during anaerobic digestion: Process monitoring, microbial community response, and methanogenic pathway

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



inifap



modeling. *Chemical Engineering Journal*, 125765.
doi:<https://doi.org/10.1016/j.cej.2020.125765>

Zhou, H., Ying, Z., Cao, Z., Liu, Z., Zhang, Z., & Liu, W. (2020). Feeding control of anaerobic co-digestion of waste activated sludge and corn silage performed by rule-based PID control with ADM1. *Waste Management*, 103, 22-31.
doi:<https://doi.org/10.1016/j.wasman.2019.12.02>

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



Efecto del cambio de pH y ultrasonido en la modificación de las propiedades tecnofuncionales de la proteína de amaranto

*Juan José Figueroa-González¹⁵, Consuelo Lobato-Calleros¹⁶, Eduardo Jaime Vernon-Carter¹⁷,
Eleazar Aguirre-Mandujano¹⁸*

Resumen

La proteína de amaranto (*Amaranthus hypochondriacus*) es ampliamente utilizada en diferentes alimentos proporcionando propiedades funcionales y nutricionales adecuadas. El objetivo de este trabajo fue determinar el efecto del tratamiento combinado de cambio de pH y ultrasonido sobre las propiedades fisicoquímicas del aislado de proteína de amaranto. Se aisló la proteína de amaranto, se modificó a pH 2 y a pH 12 combinados con ultrasonificación. Los valores de d_h de PA_N (1167.0 ± 15.6 nm), cuando se tratan a pH 2, ya sea ultrasonificado o no, aumentaron a 2268.7 ± 54.9 nm (PA_{pH2US}) y 2490.0 ± 5.3 nm (PA_{pH2}). El potencial ζ osciló entre 19.6 ± 1.6 mV a pH 2 y -37.5 ± 1.5 mV a pH 10. Los valores de solubilidad fluctuaron entre 26.1 ± 0.8 a $68.6 \pm 2.1\%$ (pH 5), de 33.3 ± 1.2 a $74.7 \pm 0.7\%$ (pH 7) y de 55.7 ± 1.5 a $97.1 \pm 0.4\%$ (pH 9). Los SH_e de PA tratada presentó valores entre 3.3 ± 0.1 a 7.0 ± 0.2 $\mu\text{mol/g}$ de proteína, los cuales fueron menores que los de PA_N (9.0 ± 0.2 $\mu\text{mol/g}$ de proteína). Asimismo, los SH_t presentaron valores entre 43.7 ± 0.1 a 45.3 ± 0.1 $\mu\text{mol/g}$ de proteína. Los enlaces disulfuro presentaron valores de 19.5 ± 0.1 a 20.9 ± 0.9 $\mu\text{mol/g}$ de proteína en comparación con PA_N (17.4 ± 0.1 $\mu\text{mol/g}$). Por lo tanto, las propiedades fisicoquímicas de la proteína de amaranto resultan favorables al ser modificadas con cambios de pH y combinado con ultrasonificación.

Palabras clave: cambio-pH, ultrasonificación, proteína-amaranto

¹⁵ Maestro en Ciencias, Posgrado en Ciencia y Tecnología Agroalimentaria, Universidad Autónoma Chapingo, figueroa.juanjos@gmail.com

¹⁶ Doctor en Ciencias Biológicas, Departamento de Preparatoria Agrícola, Universidad Autónoma Chapingo, consuelobato@yahoo.com

¹⁷ Doctor en Tecnología de Alimentos, Ingeniería de Procesos e Hidráulica, Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa, jvermoncarter@gmail.com

¹⁸ Doctor, Departamento de Preparatoria Agrícola, Universidad Autónoma Chapingo, eleagman@yahoo.com

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



inifap



Abstract

Amaranth protein (*Amaranthus hypochondriacus*) is widely used in different foods providing adequate structural and nutritional properties. The objective of this work was to determine the effect of the combined treatment of pH shift and ultrasound on the physicochemical properties of the amaranth protein isolate. Amaranth protein was isolated, modified at pH 2 and pH 12 combined with ultrasonication. PA_N dh values (1167.0 ± 15.6 nm), when treated at pH 2, whether ultrasonicated or not, increased to 2268.7 ± 54.9 nm (PA_{pH2US}) and 2490.0 ± 5.3 nm (PA_{pH2}). The potential ζ ranged between 19.6 ± 1.6 mV at pH 2 and -37.5 ± 1.5 mV at pH 10. The solubility values fluctuated between 26.1 ± 0.8 to $68.6 \pm 2.1\%$ (pH 5), from 33.3 ± 1.2 to $74.7 \pm 0.7\%$ (pH 7) and from 55.7 ± 1.5 to $97.1 \pm 0.4\%$. (pH 9) The SH_e of treated PA presented values between 3.3 ± 0.1 to 7.0 ± 0.2 $\mu\text{mol/g}$ of protein, which was lower than those of PA_N (9.0 ± 0.2 $\mu\text{mol/g}$ of protein). Likewise, the SH_t presented values between 43.7 ± 0.1 to 45.3 ± 0.1 $\mu\text{mol/g}$ of protein. The disulfide bonds presented values of 19.5 ± 0.1 to 20.9 ± 0.9 $\mu\text{mol/g}$ of protein compared to PA_N (17.4 ± 0.1 $\mu\text{mol/g}$). Therefore, the physicochemical properties of amaranth protein are favorable when modified with pH shift and combined with ultrasonication.

Keywords: pH-shift, ultrasonication, protein-amaranth

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



inifap



Introducción

En los últimos años ha existido un interés creciente de los consumidores y de la industria alimentaria por las proteínas vegetales como sustitutos de las proteínas animales. Las fuentes de proteínas de origen vegetal tienen ventajas sobre las proteínas de origen animal, por ejemplo, menor costo de producción (Timilsena, Adhikari, Barrow, & Adhikari 2016), beneficios potenciales para la salud de los consumidores, sostenibilidad climática (Kristensen, Bendtsen, Christensen, Astrup y Raben, 2016; Fasolin *et al.*, 2019), renovables (Pojić, Mišan y Tiwari., 2018) y alta disponibilidad en la naturaleza. El amaranto (*Amaranthus spp.*) es un pseudocereal, considerado una fuente vegetal no convencional de proteína, y tiene un contenido proteico relativamente alto (15-17%) (López, Galante, Robson, Boeris y Spelzini, 2018) con un saludable equilibrio de aminoácidos esenciales (Lado, Burini, Rinaldi, Añón, & Tironi, 2015). La proteína de amaranto es ampliamente utilizada como ingrediente de alimentos complementarios (Bolontrade, Scilingo, & Añón, 2013) y podría usarse en la preparación de alimentos para proporcionar propiedades estructurales y nutricionales adecuadas, siempre que tengan las propiedades estructurales y nutricionales adecuadas. Estas propiedades están relacionadas con las características estructurales de las proteínas, las cuales están influenciadas por variables ambientales como la temperatura, el pH y la fuerza iónica (Avanza & Añón, 2007). En la actualidad se han preparado emulsiones con proteína de amaranto (0.1, 0.4, 0.8 y 1.7% p / v) a pH 2 y pH 6.3 fueron estables a la formación de crema y coalescencia, excepto aquellas preparadas con 0.1% de proteína (Suárez & Añón, 2018). Las emulsiones hechas con proteína de amaranto fueron más estables que las emulsiones hechas con proteína de quinoa, pero ambas fueron menos estables que las emulsiones hechas con Tween® 20 (Gürbüz, Kauntola, Diaz, Jouppila y Heinonen, 2018). La capacidad de formación de espuma y la estabilidad del aislado de globulina de amaranto (pH 3-9) fueron más altas que las del aislado de soya. La capacidad máxima de formación de espuma de la globulina de amaranto se produjo alrededor de su punto isoeléctrico (Marccone y Kakuda, 1999). Sin embargo, las propiedades funcionales de las proteínas vegetales no siempre son óptimas y necesitan mejorarse para determinadas aplicaciones. En este sentido, mejorar las propiedades funcionales de las proteínas vegetales mediante la aplicación de métodos de costo relativamente bajo y respetuosos con el medio ambiente es fundamental para ampliar su aplicación en la industria alimentaria.

Se ha demostrado que el cambio de pH es una técnica simple y adaptable y puede usarse para convertir proteínas vegetales poco solubles de un estado agregado en monómeros y tensioactivos fuertemente hidrófilos que son adecuados para aplicaciones comerciales (Jiang, Wang y Xiong, 2018). Varios autores han mostrado mejoras en las propiedades funcionales de la proteína y sus fracciones. Por ejemplo, el cambio de pH en soluciones ácidas (1.5-3) y alcalinas (pH 10-12) de aislado de proteína de soya, seguido de replegamiento (1 h) a pH 7.0, resultó en una actividad emulsionante mejorada, excepto para muestras tratadas a pH 3.5. La actividad emulsionante

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



aumentó a medida que el pH disminuyó de 3.5 a 1.5, y en el lado alcalino a medida que aumentaba el pH. Además, la estabilidad de las emulsiones se mejoró mediante el cambio de pH (Jiang, Chen y Xiong, 2009). El uso de cambios de pH (pH 2, 7 y 12) con la fracción de β -conglucina (7S) de la soya afectó sus propiedades funcionales. La solubilidad mejoró a pH 12 (de 98 a 104%) y a pH 2 disminuyó (de 98 a 91%) (Tian *et al.*, 2020). Wen y col. (2019) informaron que el ultrasonido (US) disminuyó el tamaño de las partículas, aumentó la adsorción de proteínas en la interfaz aceite-agua y mejoró la solubilidad de las proteínas de las fuentes de proteínas renovables derivadas de plantas. La proteína de quinoa sometida a US mostró una reducción en el tamaño de partícula, mayor solubilidad, comportamiento gelificante más fuerte, mejor capacidad de formación de espuma y estabilidad de la espuma (Mir, Riar y Singh, 2019a, 2019b). La combinación de cambios de pH y ultrasonido puede ser un medio útil para mejorar las propiedades funcionales de las proteínas (Jiang *et al.*, 2017). El aislado de proteína de soya expuesto a ultrasonido (5 min) y pH cambiando el pH a 12, redujo su tamaño de partícula y aumentó su hidrofobicidad superficial (Fang *et al.*, 2021). Constantino y García-Rojas (2020) aplicaron US al aislado de proteína de amaranto utilizando diferentes amplitudes (30, 60 y 90%) y tiempos (15 y 30 min) el US aumentó significativamente los grupos sulfhidrilo libres en la superficie, cambió la hidrofobicidad de la superficie, redujo el tamaño de partícula y tendió a aumentar la solubilidad. Hasta donde sabemos, aún no se han reportado los efectos combinados del tratamiento con ultrasonidos y el cambio de pH en el aislado de proteína de amaranto, y dada la creciente importancia económica de este pseudocereal, el desentrañar sus propiedades tecno-funcionales es fundamental para determinar sus posibles aplicaciones industriales. Por lo tanto, el objetivo de este trabajo fue determinar el efecto del tratamiento combinado de cambio de pH y ultrasonidos sobre las propiedades fisicoquímicas del aislado de proteína de amaranto.

Materiales y métodos

Materiales

Las semillas de amaranto (*Amaranthus* spp.) variedad Nutrisol fue proporcionado por el Instituto Nacional de Investigaciones Forestales, Agrícolas y Pecuarias (INIFAP), Campo Experimental Valle de México, Texcoco, Estado de México, México. Con coordenadas de 19° 26' 51.12" N y 98° 53' 48.76 O y con una altitud de 2, 261 msnm. Las enzimas utilizadas en la técnica de digestibilidad *in vitro* fueron pancreatina (P7545) y pepsina (P7000) se adquirieron en Sigma-Aldrich México (Toluca, Estado de México, México). Para el ensayo electroforético se utilizaron reactivos adquiridos en Bio-Rad (Laboratorios Bio-Rad, Inc. Hércules, CA, USA). El hidróxido de sodio, ácido clorhídrico, etanol y hexano fueron comprados en J.T. Baker (Xalostoc, Estado de México, México). En todos los ensayos se utilizó agua destilada (AD).

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



inifap



Obtención de la proteína de amaranto

La harina de amaranto (HA) se obtuvo por la molienda de los granos de amaranto en un procesador de alimentos (Nutribullet™, NB-101B, Hong King, Ltd., Guandong, China) y se tamizó por un tamiz de malla No. 80 (Manufacturers of Industrial and Comercial Supplies, St. Louis, MI, USA). La HA se desengrasó con hexano en un aparato de Soxhlet durante 5 h (Martínez-Velasco *et al.*, 2018). La HA se dispersó en AD (1:8 p/v) y se realizó la solubilización de la proteína ajustando el pH a 11.0 (2.5 N de NaOH) en agitación constante por 2 h, posteriormente, se centrifugó a 8000 rpm (133.33 Hz) por 15 min a 20 °C. El sobrenadante se filtró y se almacenó por 16 h a 4 °C. Posteriormente, se agitó la muestra por 10 min y se precipitó la proteína ajustando el pH a 4.5 (2.5 N de HCl) y se mantuvo en agitación constante por 2 h. La muestra se centrifugó (Centrifuge 5810 R, Eppendorf, AG, Hamburg, Germany) a 8000 rpm (133.33 Hz) por 15 min a 20 °C. El precipitado obtenido se lavó con agua destilada (1:5 p/v) en tres tiempos y se centrifugó a las mismas condiciones anteriores. Se neutralizó el precipitado de proteína a pH 7 y se secó a 35 °C por 45 h en una estufa con circulación de aire (Riossa Digital HCF-62, Ciudad de México, México). La muestra se trituro finamente con ayuda de un mortero y se almacenó a temperatura ambiente (22 ± 2 °C) en frascos de color ámbar.

Proceso de cambio de pH y ultrasonificación

La dispersión de la proteína de amaranto se realizó de acuerdo al método de Jiang *et al.* (2017). La proteína (30 mg/mL) se dispersó en agua destilada, se dejó en agitación constante por 1 h a temperatura ambiente (22 ± 2 °C). Posteriormente, el aislado de proteína nativa de amaranto (PA_N) se modificó mediante cambios de pH, los cambios de pH se realizaron en condiciones ácidas a pH 2.0 (tratamiento pH2) con 2.5 N de HCl. En condiciones alcalinas a pH 12.0 (tratamiento pH12) con 2.5 N de NaOH, se siguió el procedimiento de la modificación con ultrasonido (Ultrasonic processor, Model VCX 130 PB 500/750 W, con una probeta de acero inoxidable de 8 mm de diámetro, Sonics and Materials, Inc., Newton, CT, USA). Inmediatamente, que se realizó el cambio de pH en condiciones ácidas y alcalinas, se aplicó el ultrasonido (5 min de ultrasonido, reposo de 5 min y 5 min más de ultrasonido) con 50 % de amplitud, con este proceso se obtiene los tratamientos PA_{pH2US} y PA_{pH12US} respectivamente. Inmediatamente, se dejó en agitación por 1 hora a temperatura ambiente (22 ± 2 °C), con estos cambios se produce el desplegamiento estructural de la proteína. Después, se ajustó el pH a 7.0 para el replegamiento estructural de la proteína y se dejó en agitación por 1 hora. Además, se obtuvo otro tratamiento sin cambio de pH solamente con ultrasonido (US). Finalmente, la dispersión se secó a 35 °C por 45 h. La muestra seca se trituro hasta obtener un polvo fino y se almacenó en recipientes de color ámbar. La muestra control fue el aislado de proteína nativa de amaranto (PA_N) sin ninguna modificación. Los tratamientos que se utilizaron fueron PA_N, PA_{pH2}, PA_{pH12}, PA_{pH2US}, PA_{pH12US} y PA_{US}.

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



inifap



Tamaño de partícula y potencial- ζ

Las dispersiones de proteína de amaranto fueron diluidas en una proporción 1:2. Se utilizó una muestra de un mL para la medición del tamaño de partícula como diámetro hidrodinámico (d_h), se determinó con Zetasizer Nano ZS90 (Malvern Instruments, Worcestershire, UK). Se utilizó un índice de refracción de 1.3351 y un índice de absorción de 0.001. Por otro lado, el potencial- ζ de cada dispersión de proteína se midió con el Zetasizer Nano ZS90, se colocó la muestra en una celda capilar durante el análisis (Martínez-Velasco *et al.*, 2018).

Contenido de proteína soluble

Se dispersaron 100 mg de proteína de amaranto en 10 mL de solución de buffer de fosfatos (0.01 mol/L, pH 5, pH 7 o pH 9). La solución fue agitada a 500 rpm por 30 minutos a temperatura ambiente (22 ± 2 °C). Después, la solución se centrifugó a 5000 rpm (83.33 Hz) a 20 °C por 15 min (Martínez-Velasco *et al.*, (2018). Posteriormente, el sobrenadante resultante se utilizó para la medición del contenido de proteína soluble, utilizando el método de Lowry *et al.* (1951) y la albumina de suero de bovino (Sigma Aldrich, A2153) fue utilizada para la formación de la curva estándar. La medición del sobrenadante se realizó en un espectrofotómetro Genesys 10S UV-VIS (Thermo Fisher Scientific, Waltham, MA, USA) a 750 nm de absorbancia. La solubilidad de la proteína se calculó como el porcentaje del contenido de la proteína soluble en el sobrenadante en relación a la proteína total agregada en la solución.

Grupos sulfhidrilos (SH) y enlaces disulfuro (SS)

Los grupos sulfhidrilo expuestos (SH_e) de cada variación de PA se determinaron como sigue: se disolvieron 4 mg de reactivo de Ellman (DTNB) en 1 ml de tampón (fosfato de sodio 0.05 M y cloruro de sodio 0.1 M, pH = 7). Se disolvieron quince mg de PA en 10 ml de urea 8 M y 50 μ L de solución de DTNB. Posteriormente, la muestra se mantuvo en agitación durante 1 ha temperatura ambiente y luego se centrifugó a $7168 \times g$ a 15 °C durante 15 min. La absorbancia del sobrenadante se midió a 412 nm (Cabrera-Chávez *et al.*, 2012). El contenido de grupos sulfhidrilo totales (SH_t) se determinó disolviendo la PA en 10 mL de urea 8 M, 50 μ L de mercaptoetanol y 50 μ L de solución de DTNB. El contenido de SH se calculó utilizando el coeficiente de extinción DTNB ($13,600 M^{-1} cm^{-1}$) y los valores se expresaron como μ mol/g de proteína. El contenido de enlaces disulfuro (SS) es la diferencia entre $(SH_t - SH_e)/2$ (Valenzuela, Abugoch, Tapia y Gamboa, 2013).

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



Análisis estadístico

Los experimentos se condujeron por triplicado en un diseño experimental completamente al azar. Los resultados fueron reportados como la media y la desviación estándar. Las diferencias fueron analizadas usando el ANOVA con el programa estadístico SAS. Las diferencias significativas entre medias fueron identificadas por la prueba de Tukey ($P < 0.05$). El análisis de los datos se realizó con el paquete estadístico SAS versión 9.4 (SAS Institute Inc., NC, USA).

Resultados

Tamaño de partícula

El tamaño de partícula, expresado como diámetro hidrodinámico (dh), se muestra en la Figura 1. Los valores de dh de PA_N (1167.0 ± 15.6 nm), cuando se tratan a pH 2, ya sea ultrasonificado o no, aumentaron a 2268.7 ± 54.9 nm (PA_{pH2US}) y 2490.0 ± 5.3 nm (PA_{pH2}). Este resultado se puede atribuir al tiempo prolongado de ultrasonido, que promovió una desnaturalización extensa de proteínas y favoreció la formación de agregados, a través de enlaces no covalentes, como interacciones hidrofóbicas de regiones expuestas durante el proceso (Constantino & García-Rojas, 2020). Gao *et al.*, (2020) encontraron que la glicinina de soya tratada en condiciones extremas de ácido (pH 1) produjo un aumento en el tamaño de la fracción de soya 11S debido al despliegue completo de la proteína en estas condiciones. En contraste, las variaciones de PA tratadas en condiciones alcalinas (PA_{pH12}), ultrasonido (PA_{US}) o en combinación alcalina/US (PA_{pH12US}) mostraron valores de dh más pequeños que PA_N. Esta tendencia se ha encontrado con otros aislados de proteínas vegetales. Li y col. (2020) informaron que los aislados de proteína de maní sujetos a cambios de pH (pH 10) mostraron disminuciones en el tamaño de las partículas. Este comportamiento se atribuyó a que el espacio de contacto entre las proteínas y las moléculas de agua era mayor y, por tanto, la interacción entre ellas era más fuerte. Los aislados de proteína de soya con cambio de pH (pH 12) y ultrasonido (5 min) mostraron una partícula significativamente más baja que cuando el cambio de pH se realizó a pH 7, en las mismas condiciones de US. Este resultado puede introducirse en las repulsiones electrostáticas más fuertes que surgen entre los restos de proteínas a pH 12 (más lejos del punto isoeléctrico) que a pH 7, lo que dificulta la formación de agregados de proteínas. En el caso del PA tratado con US, la cavitación y la fuerza de cizallamiento inducen la ruptura de enlaces no covalentes en los agregados de proteínas y el tamaño de las partículas disminuye. Cuando el cambio de pH y el ultrasonido ocurren simultáneamente, ambos fenómenos conducen a una reducción en el tamaño de las partículas (Fang *et al.*, 2021).

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



inifap

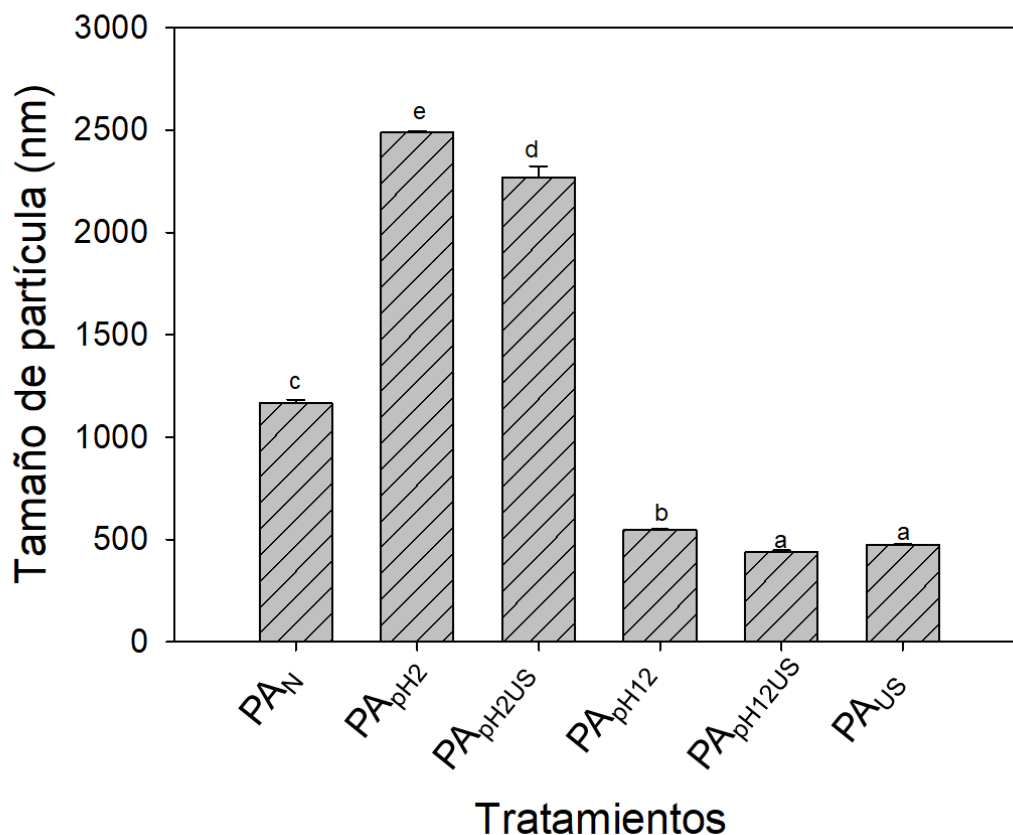


Figura 1. Tamaño de partícula (nm) de PA. Las barras verticales indican la desviación estándar. Diferentes letras minúsculas indican diferencias significativas $p < 0.05$.

Potencial ζ

El potencial ζ o carga superficial es una de las características más importantes de las proteínas, debido a su influencia en la solubilidad y propiedades funcionales como sus propiedades emulsionantes y espumantes (Shevkani, Singh, Rana, & Kaur, 2014). La Figura 2 muestra los valores de potencial ζ de las variaciones de la proteína de amaranto. Los valores de potencial ζ positivos se presentaron a un pH por debajo de 4 para PA_N, PA_{pH2US} y PA_{US}, y a un pH por debajo de 4.5 para PA_{pH2}, PA_{pH12}, PA_{pH12US}. El potencial ζ de la proteína de amaranto osciló entre $19.6 \pm$

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



inifap



1.6 mV a pH 2 y -37.5 ± 1.5 mV a pH 10. Se han informado cargas positivas para la proteína de amaranto a valores de pH inferiores a 4.7 y cargas negativas por encima de pH 4.7, con potencial ζ valores que van desde 30 mV a pH 3 a -30 mV a pH 10 (Constantino & García-Rojas, 2020) y desde 25 mV a pH 2 a -30 mV a pH 8 (Ventureira, Martínez, & Añón, 2012). El punto isoeléctrico (pI) de las variaciones de PA fue de 3.5 (PA_{US}), 4.0 (PA_N, PA_{pH2} y PA_{pH2US}), 4.2 (PA_{pH12}) y 4.5 (PA_{pH12US}). Constantino y García-Rojas (2020) informaron pI de 4.6 para la proteína de amaranto nativa y de 4.8 para la proteína de amaranto tratada con ultrasonido. Ventureira, Martínez y Añón, (2012) informaron que el pI para varios aislados de proteína de amaranto se ubicaron en el rango de 4.5 a 6.5. Se ha informado que el tratamiento con ultrasonido promueve cambios en el pI hacia pH alcalino o ácido según el tiempo del tratamiento, y esto puede estar relacionado con cambios estructurales de la proteína (Zhao *et al.*, 2021). Con respecto al cambio de pH, el pH 12 está más lejos del pI de PA_N que el pH 2 y, por lo tanto, podría causar repulsiones electrostáticas intramoleculares más fuertes que podrían resultar en un despliegue más extenso de la estructura de la proteína y los grupos expuestos (Chen *et al.*, 2019).

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021

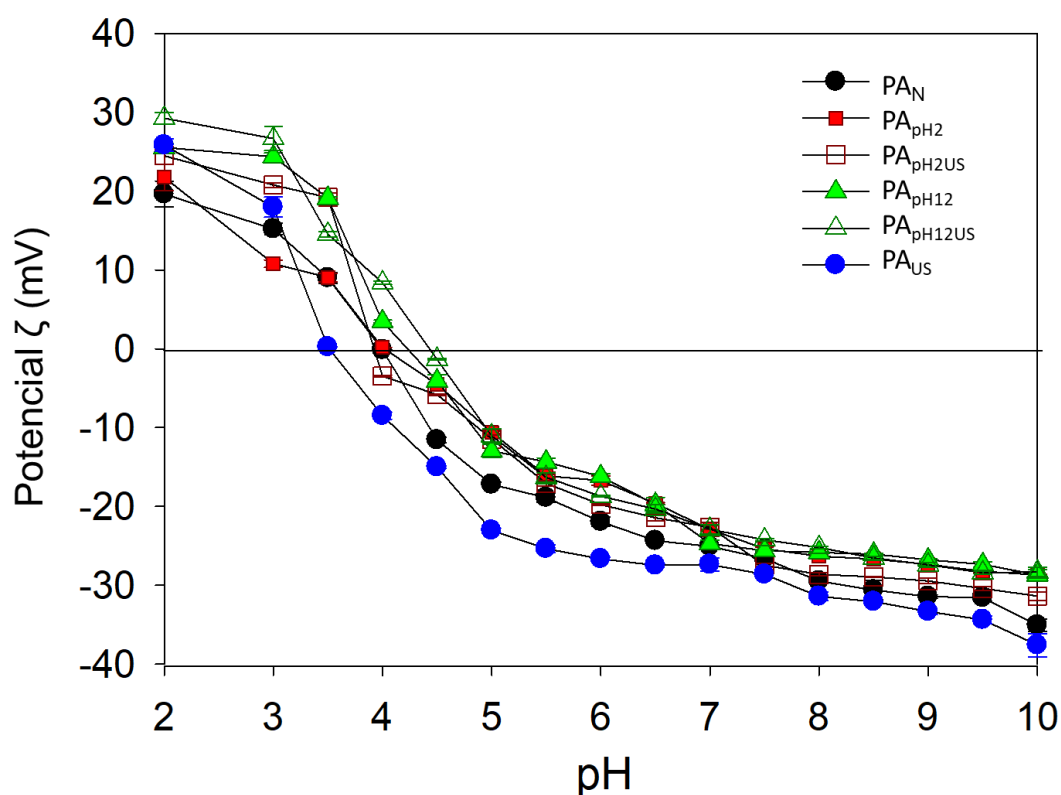


Figura 2. Potencial ζ (mV) de la PA. Las barras verticales indican la desviación estándar. Diferentes letras minúsculas indican diferencias significativas $p < 0.05$.

Solubilidad proteica

La solubilidad de las proteínas es una propiedad funcional tecnológica importante en diferentes aplicaciones alimentarias (Xiong *et al.*, 2018), es decir, influye en la actividad superficial y las propiedades emulsionantes (Gao *et al.*, 2020). La Figura 3 muestra la solubilidad de las variaciones de PA. Como se esperaba, la solubilidad de las variaciones de PA a pH 5 (cerca del pI) fue significativamente menor que a pH 7 y pH 9. Los valores de solubilidad a pH 5 fluctuaron entre 26.1 ± 0.8 a $68.6 \pm 2.1\%$, mientras que a pH 7 osciló entre 33.3 ± 1.2 a $74.7 \pm 0.7\%$ ya pH 9 entre 55.7 ± 1.5 a $97.1 \pm 0.4\%$. La solubilidad de PA_N mejoró significativamente en PA_{pH12US}, PA_{pH12} y

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



inifap



PA_{US}, y PA_{pH12US} mostró la mejor solubilidad. Un aumento de la solubilidad proteica se ha relacionado con cambios conformacionales y la formación de agregados proteicos solubles (Jiang *et al.*, 2017), la reducción del tamaño de partícula y el consecuente aumento del área de contacto entre las moléculas de proteína y el agua (Constantino & García -Rojas, 2020). Por lo tanto, el aumento de la solubilidad puede estar relacionado con un aumento en las interacciones iónicas de proteínas cargadas y agua (Jiang *et al.*, 2009; Jiang *et al.*, 2017). Por otro lado, la solubilidad fue significativamente menor para PA_{pH2US} y PA_{pH2} en comparación con PA_N. Se encontró una tendencia similar para la proteína de soya. Este comportamiento se atribuyó a la desnaturalización de las proteínas inducida por las condiciones ácidas. A medida que las proteínas se desnaturalizan, más aminoácidos hidrófobos quedarán libres para interactuar con las diferentes proteínas, que se agregarán y provocarán una disminución de la solubilidad (Jiang *et al.*, 2009).

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



inifap

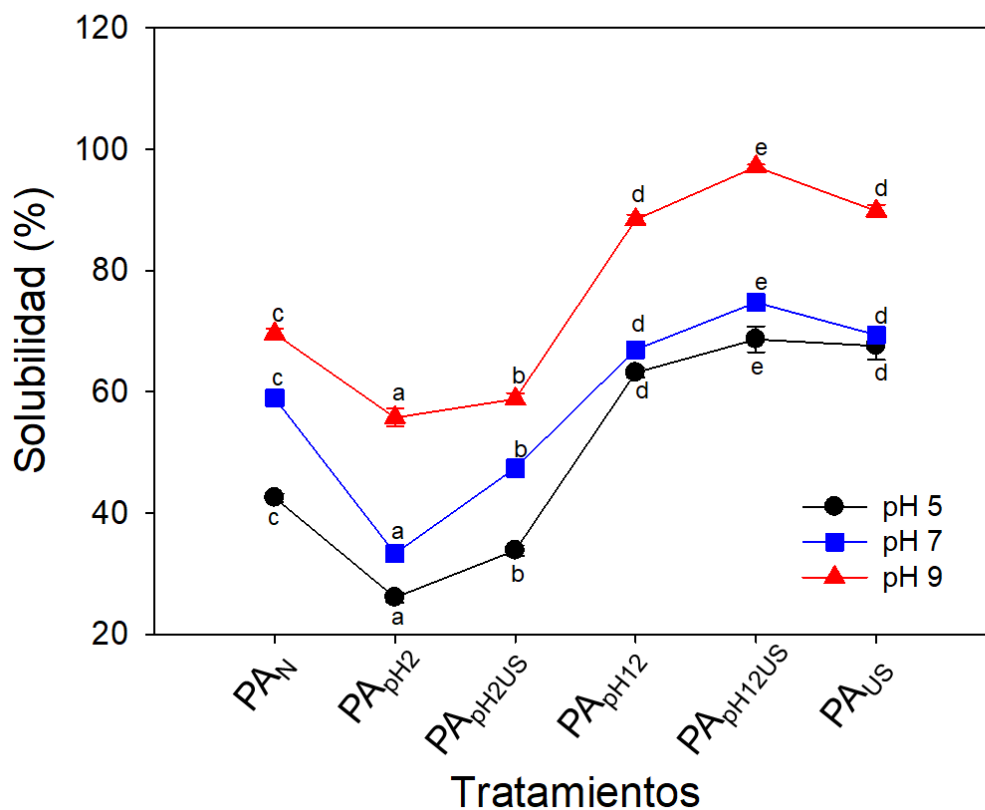


Figura 3. Solubilidad de PA (%). Las barras verticales indican la desviación estándar. Diferentes letras minúsculas indican diferencias significativas $p < 0.05$.

Grupos sulfhidrido (SH) y enlaces disulfuro (SS)

La cuantificación de enlaces disulfuro es una forma indirecta de verificar la adecuada conformación espacial durante la fabricación de una proteína de interés biofarmacéutico, así como de determinar posibles cambios estructurales que pueden ocurrir durante la vida útil (Guillen-García *et al.*, 2016). Los efectos del cambio de pH y la ultrasonificación sobre el contenido de grupos sulfhidrido y enlaces disulfuro de PA mostraron diferencias significativas (Figura 4). El grupo de sulfhidrido expuesto (SH_e) de PA tratado presentó valores entre 3.3 ± 0.1 a 7.0 ± 0.2 $\mu\text{mol/g}$ de proteína, los cuales

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



inifap



fueron menores que los de PA_N ($9.0 \pm 0.2 \mu\text{mol/g}$ de proteína), y nuevamente se puede atribuir la disminución a la oxidación de estos grupos y la formación de nuevos enlaces disulfuro intra o intermolecularmente (Hu, Wang y Li, 2017). Asimismo, el sulfhidrilo total (SH_t) presentó valores entre 43.7 ± 0.1 a $45.3 \pm 0.1 \mu\text{mol/g}$ de proteína. Se han informado valores de SH_e de 9.0 a 19.2 $\mu\text{mol/g}$ para la proteína de quinoa (Valenzuela, Abugoch, Tapia y Gamboa, 2013). El contenido del grupo SH_t puede afectar seriamente el desempeño funcional de la proteína y juega un papel clave en la producción de una estructura relativamente rígida. Además, el aumento de SH_t se puede atribuir a un cierto grado de despliegue de moléculas, lo que promueve la exposición de grupos SH enterrados o grupos tiol enterrados (Zou *et al.*, 2019). Los enlaces disulfuro presentaron valores de 19.5 ± 0.1 a $20.9 \pm 0.9 \mu\text{mol/g}$ de proteína en comparación con PA_N ($17.4 \pm 0.1 \mu\text{mol/g}$). Los enlaces SS en el aislado de proteína de soya sometido a pH 12 aumentaron entre 15.6 y 21.4 $\mu\text{mol/g}$ a medida que aumentaba el tiempo de ultrasonido (1 a 5 min) en comparación con el control (14.7 $\mu\text{mol/g}$) (Lee *et al.*, 2016). La mano-termosonicación combinada con el cambio de pH 12 tuvo el mismo efecto en los enlaces SS de la proteína de soya, variando desde 14.8 ± 0.1 hasta 21.97 $\mu\text{mol/g}$ (Yildiz, Andrade, Engeseth y Feng, 2017). El aumento de los enlaces SS puede deberse a reacciones de intercambio SH/SS, a la oxidación de SH y a la susceptibilidad de los grupos tiol para formar especies de iones mercaptídicos (S⁻). La velocidad a la que se producen estos fenómenos aumenta con mayor alcalinidad (Chen *et al.*, 2019).

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



inifap

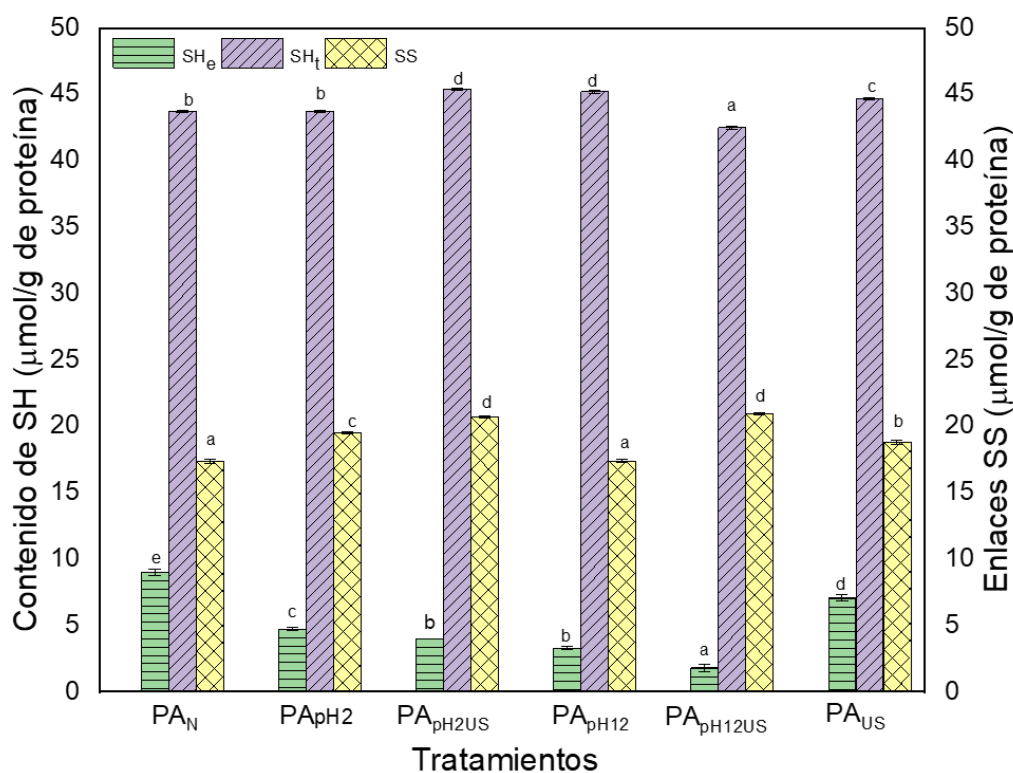


Figura 4. Grupos sulfhidrido expuestos (SH_e) y totales (SH_t) y enlaces disulfuro (SS). Las barras verticales indican la desviación estándar. Diferentes letras minúsculas indican diferencias significativas $p < 0.05$.

Conclusiones

En los tratamientos PA_{pH12}, PA_{pH12US} y PA_{US}, el tamaño de partícula disminuyó y se mejoró el potencial ζ . La solubilidad aumentaba conforme se incrementaba el pH de 5 a pH 9 en las diferentes muestras de la PA. Sin embargo, los tratamientos PA_{pH12}, PA_{pH12US} y PA_{US} presentaron mejor y mayor solubilidad. El cambio de pH en condiciones alcalinas (pH 12) y ácidas (pH 2) y combinado con ultrasonido (10 min) disminuyó el contenido de grupos SH_e y aumentó los grupos de SH_t, mientras que los enlaces SS fueron mayores en la mayoría de los tratamientos en comparación con

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



inifap



la PA_N y PA_{pH12} . Por lo tanto, las propiedades fisicoquímicas de la proteína de amaranto resultan favorables al ser modificadas con cambios de pH y combinado con ultrasonificación.

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



Literatura citada

Avanza, M. V. & Añón, M. C. (2017). Effect of thermal treatment on the proteins of amaranth isolates. *Journal of the Science of Food and Agriculture* 87(4), 616-623.

Bolontrade, A. J., Scilingo, A. A., & Añón, M. C. (2013). Amaranth proteins foaming properties: adsorption kinetics and foam formation—part 1. *Colloids and Surfaces B: Biointerfaces*, 105, 319-327.

Chen, W., Wang, W., Ma, X., Lv, R., Watharkar, R. B., Ding, T., & Liu, D. (2019). Effect of pH-shifting treatment on structural and functional properties of whey protein isolate and its interaction with (–)-epigallocatechin-3-gallate. *Food Chemistry*, 274, 234-241.

Constantino, A. B. T., & Garcia-Rojas, E. E. (2020). Modifications of physicochemical and functional properties of amaranth protein isolate (*Amaranthus cruentus* BRS Alegria) treated with high-intensity ultrasound. *Journal of Cereal Science*, 95, 103076.

Fang, Z., Cai, X., Wu, J., Zhang, L., Fang, Y., & Wang, S. (2021). Effect of simultaneous treatment combining ultrasonication and pH-shifting on SPI in the formation of nanoparticles and encapsulating resveratrol. *Food Hydrocolloids*, 111, 106250.

Fasolin, L. H., Pereira, R. N., Pinheiro, A. C., Martins, J. T., Andrade, C. C. P., Ramos, O. L., & Vicente, A. A. (2019). Emergent food proteins—Towards sustainability, health and innovation. *Food Research International*, 125, 108586.

Gao, J., Li, X. M., Chen, F. L., Piekoszewski, W., Yang, Y., Wang, B., & Zhang, N. (2020). The effect of extreme acid-induced soybean glycinin molten globules state on foaming ability. *Food Hydrocolloids*, 105, 105819.

Gürbüz, G., Kauntola, V., Diaz, J. M. R., Jouppila, K., & Heinonen, M. (2018). Oxidative and physical stability of oil-in-water emulsions prepared with quinoa and amaranth proteins. *European Food Research and Technology*, 244(3), 469-479.

Hu, Y., Wang, L., & Li, Z. (2017). Modification of protein structure and dough rheological properties of wheat flour through superheated steam treatment. *Journal of Cereal Science*, 76, 222-228.

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



Jiang, J., Chen, J., & Xiong, Y. L. (2009). Structural and emulsifying properties of soy protein isolate subjected to acid and alkaline pH-shifting processes. *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, 57, 7576-7583.

Jiang, J., Wang, Q., & Xiong, Y. L. (2018). A pH shift approach to the improvement of interfacial properties of plant seed proteins. *Current Opinion in Food Science*, 19, 50-56.

Kristensen, M. D., Bendsen, N. T., Christensen, S. M., Astrup, A., & Raben, A. (2016). Meals based on vegetable protein sources (beans and peas) are more satiating than meals based on animal protein sources (veal and pork)—a randomized cross-over meal test study. *Food & Nutrition Research*, 60(1), 32634.

Lado, M. B., Burini, J., Rinaldi, G., Añón, M. C., & Tironi, V. A. (2015). Effects of the dietary addition of Amaranth (*Amaranthus mantegazzianus*) protein isolate on antioxidant status, lipid profiles and blood pressure of rats. *Plant Foods for Human Nutrition*, 70(4), 371-379.

López, D. N., Galante, M., Robson, M., Boeris, V., & Spelzini, D. (2018). Amaranth, quinoa and chia protein isolates: Physicochemical and structural properties. *International Journal of Biological Macromolecules*, 109, 152-159.

Marcone, M. F., & Kakuda, Y. (1999). A comparative study of the functional properties of amaranth and soybean globulin isolates. *Food/Nahrung*, 43(6), 368-373.

Martínez-Velasco, A., Lobato-Calleros, C., Hernández-Rodríguez, B. E., Román-Guerrero, A., Alvarez-Ramirez, J., & Vernon-Carter, E. J. (2018). High intensity ultrasound treatment of faba bean (*Vicia faba* L.) protein: Effect on surface properties, foaming ability and structural changes. *Ultrasonics Sonochemistry*, 44, 97-105.

Mir, N. A., Riar, C. S., & Singh, S. (2019a). Structural modification of quinoa seed protein isolates (QPIs) by variable time sonification for improving its physicochemical and functional characteristics. *Ultrasonics Sonochemistry*, 58, 104700.

Mir, N. A., Riar, C. S., & Singh, S. (2019b). Physicochemical, molecular and thermal properties of high-intensity ultrasound (HIUS) treated protein isolates from album (*Chenopodium album*) seed. *Food Hydrocolloids*, 96, 433-441.

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



inifap



Pojić, M., Mišan, A., & Tiwari, B. (2018). Eco-innovative technologies for extraction of proteins for human consumption from renewable protein sources of plant origin. *Trends in Food Science & Technology*, 75, 93-104.

Shevkani, K., Singh, N., Rana, J. C., & Kaur, A. (2014). Relationship between physicochemical and functional properties of amaranth (*Amaranthus hypochondriacus*) protein isolates. *International Journal of Food Science & Technology*, 49(2), 541-550.

Tian, Y., Zhang, Z., Zhang, P., Taha, A., Hu, H., & Pan, S. (2020). The role of conformational state of pH-shifted β -conglycinin on the oil/water interfacial properties and emulsifying capacities. *Food Hydrocolloids*, 108, 105990.

Timilsena, Y. P., Adhikari, R., Barrow, C. J., & Adhikari, B. (2016). Physicochemical and functional properties of protein isolate produced from Australian chia seeds. *Food Chemistry*, 212, 648-656.

Valenzuela, C., Abugoch, L., Tapia, C., & Gamboa, A. (2013). Effect of alkaline extraction on the structure of the protein of quinoa (*Chenopodium quinoa* Willd.) and its influence on film formation. *International Journal of Food Science & Technology*, 48(4), 843-849.

Ventureira, J. L., Martínez, E. N., & Añon, M. C. (2012). Effect of acid treatment on structural and foaming properties of soy amaranth protein mixtures. *Food Hydrocolloids*, 29(2), 272-279.

Xiong, T., Xiong, W., Ge, M., Xia, J., Li, B., & Chen, Y. (2018). Effect of high intensity ultrasound on structure and foaming properties of pea protein isolate. *Food Research International*, 109, 260-267.

Yildiz, G., Andrade, J., Engeseth, N. E., & Feng, H. (2017). Functionalizing soy protein nano-aggregates with pH-shifting and mano-thermo-sonication. *Journal of Colloid and Interface Science*, 505, 836-846.

Zhao, Ch., Yin, H., Yan, J., Niu, X., Qi, B., & Liu, J. (2021). Structure and acid-induced gelation properties of soy protein isolate–maltodextrin glycation conjugates with ultrasonic pretreatment. *Food Hydrocolloids*, 112, 106278.

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



inifap



Zou, Y., Yang, H., Li, P. P., Zhang, M. H., Zhang, X. X., Xu, W. M., & Wang, D. Y. (2019). Effect of different time of ultrasound treatment on physicochemical, thermal, and antioxidant properties of chicken plasma protein. *Poultry Science*, 98(4), 1925-1933.

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



Triterpenos pentacíclicos e iridoides en *Calatola mollis*

Gabriela Salazar-Cervantes¹⁹, Benito Reyes Trejo²⁰ y Enrique Guízar Nolasco²¹

Resumen

Calatola mollis es una planta que pertenece a la familia de las Icacinaceas. La información botánica acerca del género es escasa, se reportan 8 especies, de las cuales cuatro son endémicas de México y *C. mollis* es una de ellas. Los conocimientos etnobotánicos indican algunos usos medicinales y como pigmentos, entre otros. Previo a este documento, la información acerca de los constituyentes químicos consta de un solo estudio fitoquímico. En este trabajo se planteó el análisis fitoquímico del extracto diclorometánico de las hojas secas de *Calatola mollis*, este permitió abundar en el conocimiento acerca de los constituyentes químicos. El estudio químico en su etapa inicial se basó, principalmente, en diferentes técnicas cromatográficas, el análisis por resonancia magnética nuclear (RMN) de los compuestos aislados permitió elucidar su identidad, identificando fitoesteroles, triterpenos pentacíclicos, iridoides y ácidos grasos.

Palabras clave: Triterpenos, iridoides, metaboilitos secundarios, RMN, cromatografía.

Abstract

Calatola mollis is a plant belonging to the Icacinaceae family. Botanical information about the genus is scarce, only eight species are reported, of which four are endemic of Mexico. *C. mollis* is one of them. Ethnobotanical knowledge indicates some medicinal and pigment uses, among others. Prior to this paper, the information about the chemical constituents consists of a single phytochemical study. In this work, the phytochemical analysis of the dichloromethanolic extract of the dried leaves of *Calatola mollis* was proposed, which allowed to deepen the knowledge about

¹⁹ M. en C. Quím. Gabriela Salazar-Cervantes. Departamento de Preparatoria Agrícola, Universidad Autónoma Chapingo, Km 38.5 Carretera México-Texcoco. 56230, Texcoco, Edo. de México, México. gsalazarc@chapingo.mx

²⁰ Dr. Benito Reyes Trejo, Laboratorio de Productos Naturales, Preparatoria Agrícola, Universidad Autónoma Chapingo, Km 38.5 Carretera México-Texcoco. 56230, Texcoco, Edo. de México, México. benijovi@yahoo.com.mx

²¹ Dr. Enrique Guízar Nolasco, Herbario de la División de Ciencias Forestales, Universidad Autónoma Chapingo, Km 38.5 Carretera México-Texcoco. 56230, Texcoco, Edo. de México, México. tropsec@hotmail.com

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



inifap



the chemical constituents. The chemical study in its initial stage was mainly based on different chromatographic techniques, the analysis by nuclear magnetic resonance (NMR) of the isolated compounds allowed elucidating the identity of the compounds, identifying phytosterols, pentacyclic triterpenes, iridoids and fatty acids.

Keywords: Triterpenes, iridoids, secondary metabolites, NMR, chromatography

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



Introducción

Pocas zonas en el mundo concentran alta diversidad biológica. La República Mexicana es una de esas zonas es uno de los siete países que albergan entre el 60 y 70 % de la diversidad biológica, El país posee 24600 especies de plantas con flores, que representan el 11% de las diversas especies florísticas del mundo. Los bosques presentan gran diversidad, en México existen 55 especies de pino, lo cual coloca al país como el de mayor riqueza en el mundo, respecto a estas especies, además, 85 % de estas son endémicas. Se calcula que aproximadamente el 52 % de las especies vasculares presentes en el país son endémicas. (Villaseñor & Magaña, 2002). Sin embargo, en los últimos años el deterioro del medio ambiente, la sobreexplotación de los recursos naturales, el uso excesivo de plaguicidas, entre otras actividades antropogénicas aceleran la extinción de diversas especies amenazando la riqueza biológica del planeta (Gómez et al, 2009).

Actualmente muchas especies se han perdido en el territorio nacional, sin embargo, los datos específicos sobre estas especies desaparecidas no se tienen, pues no se cuenta con un inventario de los recursos florísticos del país.

Calatola mollis (Icacinaceas)

En México se registran cuatro especies de las ocho que se han encontrado, la clasificación y variación de estas especies han sido poco estudiadas y la información referente a estas es escasa (Vera & Wendt, 2001). En los últimos años las poblaciones de estos árboles, que crecen en las zonas húmedas de Veracruz y Puebla, se han detectado reducidas. En las localidades donde crece esta especie se hace uso de las diferentes partes de la planta. La semilla cruda de *Calatola mollis* (*C. mollis*) es utilizada como purgante. La madera, que resulta inmune a insectos, se usa para la fabricación de muebles; frutos, semillas y hojas se consumen como alimento, también se ha reportado su uso como pigmento.

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



Estudios fitoquímicos de la especie

A este respecto en la especie los primeros y únicos estudios químicos de *Calatolla mollis* se publican en 2015, en los cuales se reporta el hallazgo de un compuesto nuevo, un *nor*-iridoide, sin antecedentes en la literatura química, el cual fue nombrado Chapingólida (Villa-Garcia et al, 2015). Es bajo este contexto que se emprende el estudio fitoquímico de la especie, se pretende aportar conocimiento sobre la constitución química y profundizar en el entendimiento de los usos tradicionales registrados. A partir de estos se espera encontrar moléculas de alta actividad biológica. Con cada especie que se pierde se termina el beneficio que el hombre obtiene de esta, además del material químico y genético que enriquece las interacciones de los procesos biológicos, que mantienen los frágiles equilibrios en los ecosistemas, procesos microscópicos de los que poco se conoce. Resulta, entonces, tarea esencial del hombre velar por el uso racional, conocimiento, mantenimiento, respeto y conservación de la biodiversidad.

Materiales y Métodos

De manera previa, se obtuvieron 30 g de extracto diclorometánico, partir del material vegetal (2000 g de hojas secas de *Calatola mollis*, colectada en Rancho Cuatemingo, Puebla-Tlaxcala). Se efectuó un Fraccionamiento Cromatográfico Primario (FCP). En este proceso se utilizó como eluyente mezclas de diclorometano/ metanol ($\text{CH}_2\text{Cl}_2/\text{CH}_3\text{OH}$), cada una con gradientes de polaridad creciente lo que arrojó 876 fracciones, que se reagruparon en 63 nuevos grupos

Para procesar a las fracciones para su purificación se llevó a cabo el análisis cromatográfico de los subgrupos (cromatografía en capa fina, CCF). Se utilizaron cromatoplasmas analíticas Merck® de sílice 60 F₂₅₄, soportadas en aluminio. Se utilizaron como revelador lámpara de UV (longitud de onda de 254 y 365 nm), y por aspersion con una solución de sulfato cérico amoniacal, anisaldehído o vainillina con posterior calentamiento. Como fase móvil se utilizan mezclas de disolventes de polaridad creciente. La purificación de compuestos fue a través de cromatografías sucesivas, en columnas de diámetro pequeño o cromatofolios analíticos y procesos de cristalización y recristalización. En algunos subgrupos se realizó análisis de la fracción mediante Resonancia Magnética Nuclear RMN, para continuar o no su purificación. Los compuestos obtenidos se sometieron a análisis de sus espectros de RMN, de ¹³C (100 MHz) y ¹H (400 MHz), en un equipo Agilent 400 MR DD2.

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



iniqap



Resultados y discusión

Los compuestos obtenidos fueron nombrados inicialmente con el nombre de la fracción de la que obtuvieron, hasta su elucidación, según la información proporcionada por sus espectros de RMN. Se omiten los resultados de cada proceso cromatográfico, se discuten brevemente los resultados obtenidos por RMN.

Compuesto A-15

Del perfil cromatográfico de 20 se separó la fracción 15 y se analizó con RMN ^1H . El espectro permite identificar señales características de hidrógenos de ácidos grasos.

A campo alto, en δ_{H} 0.86-0.89 se observan señales triples superpuestas, propias de metilos terminales de cadenas alifáticas, entre δ_{H} 1.27 y δ_{H} 1.75 aparecen señales simples, anchas, características de hidrógenos metilénicos, en δ_{H} 2.0 se observa una señal que puede atribuirse a hidrógenos alílicos presentes en ácidos grasos insaturados y que es congruente con el multiplete centrado en δ_{H} 2.8, el cual podría asignarse a hidrógenos bisalílicos de ácidos grasos diinsaturados. Consistentes con lo anterior, las señales entre δ_{H} 4.5 y 5.38, pueden corresponder a hidrógenos vinílicos y/o vecinales con hidrógenos unidos a esteres. El análisis de esta información determina que se tiene una mezcla de ácidos grasos la cual no se continúa purificando.

Compuesto B-10

Se obtuvieron 13,4 mg de pequeñas agujas. El sólido se sometió a análisis por RMN, el espectro de hidrógeno ^1H . El espectro muestra un patrón característico de un esqueleto esteroidal, a campo alto sobresalen 6 señales intensas, entre 0-7 y 1.01 ppm, atribuibles a grupos metilos. La integración de estas corrobora que pertenecen a este grupo de Productos Naturales, pues cada una integra para 3 protones. En δ_{H} 3.51 es visible una señal múltiple, que permite distinguir un doble de doble de doble, y que integra para una unidad, característica del hidrógeno germinal a un grupo hidroxilo (posición 3). En δ_{H} 5.38 resuena un hidrógeno manifestando una señal doble, propia de un hidrógeno vinílico (posición 6). El análisis de los datos espectroscópicos y la revisión en la literatura (De-Eknamkul & Potduang, 2003) evidencia la identidad del compuesto **B-10** como β -sitosterol.

Compuesto D-8

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



inifap



Se obtuvo un sólido blanco, soluble en acetato de etilo y diclorometano, se reunieron 3.9 mg del compuesto al que se le determinó punto de fusión encontrándose este en un rango de 210-217 °C. El compuesto se analizó con RMN, su espectro de ^1H (Espectro 2) muestra señales atribuibles a un triterpeno. Resalta la señal de un triplete angosto centrado en δ_{H} 5.13, el desplazamiento es propio del hidrógeno vinílico en posición 12, entre δ_{H} 3.18 y 3.23 se distingue una señal doble superpuesta con la característica señal doble de doble de doble del hidrógeno en posición 3, la presencia de otra señal doble en δ_{H} 3.53 indica la presencia de un metileno unido a oxígeno o a un grupo hidroxilo. Se verifican los desplazamientos de las señales intensas que resuenan a campo bajo atribuibles a metilos. Datos espectroscópicos encontrados en la sustancia **D-8**: (^1H RMN) δ_{H} 5.13(1H, t H-12), 3.53 (1H, d, H-28), 3.20(1H,d,H-28), 3.23(1H,ddd,H-3), 1.01(3H, s, CH_3), 0.98(3H, s, CH_3), 0.98(3H, s, CH_3), 0.95(3H, s, CH_3), 0.93(3H, s, CH_3), 0.81(3H, s, CH_3), 0.79(3H, s, CH_3). Al cotejar los datos con los reportados en la literatura se identifica esta sustancia como el triterpeno **uvaol** (Luna-Vázquez et al., 2016)

Compuesto E

Se separó el material poco soluble. El material mostro solubilidad en agua y poca solubilidad en metanol y cloroformo. Finalmente se obtuvo un sólido cristalino incoloro con temperatura de fusión de 160- 164 °C, el cual se sometió a análisis con Resonancia Magnética Nuclear de ^1H (400 MHz, D_2O), de ^{13}C (100 MHz, D_2O) y el experimento de Correlación Heteronuclear Cuántica sencilla, *Heteronuclear Single Quantum Correlation* HSQC, (400 MHz, D_2O). En el espectro de RMN de ^1H a 400 MHz en D_2O , se observó una señal simple a δ_{H} 7.44 la cual se asignó a un hidrógeno vinílico en un sistema α,β -insaturado, conjugado con un grupo carbonilo ($\text{C}=\text{O}$) de ácido carboxílico, esta información fue corroborada en su espectro de RMN de ^{13}C donde se distinguió una señal de resonancia a δ_{C} 170.60, característica de este tipo de carbonos.

El conjunto de esta información permite proponer que el producto natural guarda una muy cercana semejanza con la estructura de la molécula Chapingólida (**1**), iridoide aislado previamente de esta planta (Vill-García et al., 2015). Continuando con la elucidación estructural del producto natural presente en el subgrupo 48, se observó un conjunto de señales entre 3.0 y 4.0 ppm en el espectro de RMN de ^1H , características de una porción de un monosacárido unido a esta sustancia. La integración total del área bajo la curva del espectro de protón permite contabilizar un total de 15 hidrógenos. El espectro de ^{13}C muestra 16 señales, los datos de RMN de ^1H y de ^{13}C permiten proponer que corresponden a una molécula de glucosa.

Las observaciones anteriores se complementaron con los datos que se observan en el experimento heteronuclear de RMN en 2 dimensiones 2D, conocido como HSQC, donde se observan las correlaciones directas carbono- hidrógeno. El análisis de los datos obtenidos por estos experimentos, y de los experimentos DEPT, HMBC, COSY y NOESY permitió deducir la

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



iniqap



estructura de **E**, los datos espectroscópicos se verificaron en la literatura y se encontró coincidencia con la molécula llamada **monotropeína**, un iridoide descrito con anterioridad (Davini et al., 1981) (Iavarone et al., 1983).

Compuesto G-2

Luego de cromatografías sucesivas se obtiene un polvo blanco, insoluble en acetato de etilo y hexano, poco soluble en acetona y soluble en metanol, los 9.5 mg obtenidos se sometieron a análisis con RMN. El espectro de RMN de ^1H , muestra señales características de un esqueleto triterpénico. A campo alto, entre δ_{H} 0.7 y δ_{H} 1.45 pueden verse 6 señales intensas, atribuidas a los hidrógenos homotópicos de metilos, lo que se comprueba con la integración, que indica 3 unidades para cada una de ellas.

Por otro lado, se observa un triplete δ_{H} 5.25, característico de un hidrógeno vinílico, probablemente en posición 12, acoplado con los hidrógenos vecinales de C-11, la presencia del doble enlace se comprueba con dos señales con desplazamientos característicos de carbonos olefinicos: δ_{C} 122.95 y δ_{C} 145.04 en el espectro de ^{13}C (CD_3COCD_3 , 100 MHz), el cual permite contabilizar 30 carbonos. Resaltan cuatro señales entre δ_{H} 3.1 y δ_{H} 3.8 que integran para un hidrógeno cada una, el desplazamiento es propio de hidrógenos germinales a grupos hidroxilo; entre ellas destaca un par de señales dobles que comparten el valor de la constante de acoplamiento ($J = 10.6$ Hz), una centrada en δ_{H} 3.29 y otra en δ_{H} 3.55, estas pueden atribuirse a hidrógenos de un metileno unido a un grupo OH, lo que indica la presencia de solo tres grupos OH, el espectro de carbono verifica este supuesto con la presencia de 3 señales de carbonos base de oxígeno: δ_{C} 78.49, δ_{C} 68.96 y δ_{C} 67.13. A una tercera señal doble centrada en δ_{H} 3.39 ($J = 9.4$ Hz) se asigna a la posición 3 y la cuarta señal ddd, δ_{H} 3.67 ($J = 10.32, 9.6, 4.39$ Hz) se asocia a la posición 2, el valor de las constantes de acoplamiento de 2 indican que este hidrógeno se encuentra en posición beta, contrario al hidrógeno de 3, y que acopla con los dos hidrógenos en posición 1 del anillo A de un triterpeno. El experimento NOESY muestra escasa correlación entre H-3 y H-2, lo que confirma la falta de proximidad espacial de los hidrógenos de 2 y 3.

El espectro de RMN de ^{13}C comprueba la presencia de un ácido carboxílico al manifestar una señal en δ_{C} 179.3, propia de este tipo carbonos. Con la información del experimento APT (*Attached Proton Test*) se diferenciaron los carbonos presentes en la sustancia, se observaron 18 carbonos en fase positiva, entre los que se localizaron el carbono carboxílico y un carbono olefinico que se asignó a la posición 12 de ácido triterpénico. Con la información del experimento bidimensional heteronuclear: HSQC, se obtuvieron las correlaciones a un enlace de distancia carbono hidrógeno. Las correlaciones observadas en el experimento heteronuclear HMBC, así como en los experimentos homonucleares COSY y NOESY confirmaron las asignaciones propuestas e

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



inifap



indicaron la posición del resto de los carbonos e hidrógenos presentes. La revisión en la literatura y la evidencia de los datos espectroscópicos permiten confirmar que la molécula aislada es el **triterpeno ácido arjunólico** (Kundu & Mahato, 1993), (Bisoli et al., 2008), (Sai-Ramesh et al., 2011).

Los subgrupos 56 y 60 se continúan procesando para la purificación de otros compuestos.

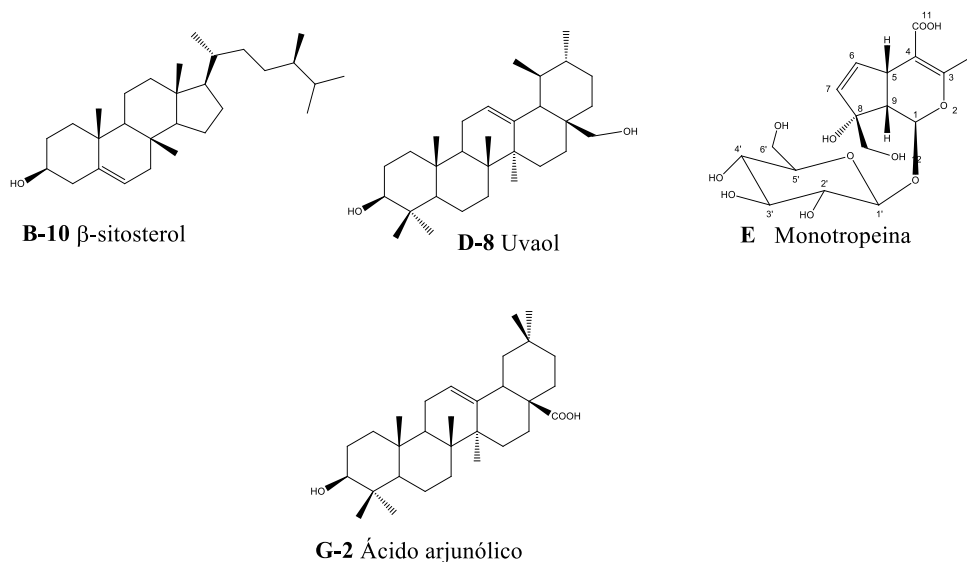


Figura 1. Compuestos aislados e identificados del extracto de diclorometano de hojas de *Calatola mollis*

Conclusiones.

- Los compuestos aislados en la planta muestran variedad estructural, con relevante actividad biológica previamente reportada para estos
- Se genera conocimiento del contenido químico de *Calatola mollis*, al reportar por vez primera la presencia de los compuestos aislados, en esta especie vegetal

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



inifap



- El reporte previó de iridoide Chapingolida y el hallazgo de la monotropeina en este estudio permiten afirmar que *Calatolla mollis* biosintetiza iridoideas
- Es importante continuar el estudio fitoquímico de la planta y realizar pruebas de actividad biológica a los compuestos obtenidos

Bibliografía

Bisoli, E., Garcez, W. S., Hamerski, L., Tieppo, C., & Garcez, F. R. (2008). Bioactive pentacyclic triterpenes from the stems of *Combretum laxum*. *Molecules*, *13*(11), 2717–2728.

<https://doi.org/10.3390/molecules13112717>

Davini, E., Esposito, P., Iavarone, C., Moro, P. A., R. C. N., & Chimica, I. (1981). Structure and configuration of unedide, an iridoid glucoside from *Arbutus unedo*. *Phytochemistry*, *20*(7), 1583–1585.

De-Eknamkul, W., & Potduang, B. (2003). Biosynthesis of β -sitosterol and stigmasterol in *Croton sublyratus* proceeds via a mixed origin of isoprene units. *Phytochemistry*, *62*(3), 389–398.

[https://doi.org/10.1016/S0031-9422\(02\)00555-1](https://doi.org/10.1016/S0031-9422(02)00555-1)

Iavarone, C., Sen, A., Trogolo, C., & Villa, S. (1983). Mollugoside, an iridoid glucoside from *Galium mollugo*. *Phytochemistry*, *22*(1), 175–178. [https://doi.org/10.1016/S0031-9422\(00\)80082-5](https://doi.org/10.1016/S0031-9422(00)80082-5)

Kundu, A. P., & Mahato, S. B. (1993). Triterpenoids and their glycosides from *Terminalia chebula*. *Phytochemistry*, *32*(4), 999–1002. [https://doi.org/10.1016/0031-9422\(93\)85243-K](https://doi.org/10.1016/0031-9422(93)85243-K)

Luna-Vázquez, F. J., Ibarra-Alvarado, C., Rojas-Molina, A., Romo-Mancillas, A., López-Vallejo, F. H., Solís-Gutiérrez, M., Rojas-Molina, J. I., & Rivero-Cruz, F. (2016). Role of nitric oxide and hydrogen sulfide in the vasodilator effect of ursolic acid and uvaol from black cherry *Prunus serotina* fruits.

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



iniqap



Molecules, 21(1). <https://doi.org/10.3390/molecules21010078>

Mexicana, C. del E. de V. para la C. de la I. N. y la R. (Ed.). (2009). *Atlas de la Flora de Veracruz*

Villa-García, M., Borja-De-La-Rosa, M.A., Zuleta-Prada, H., Toscano, R.A., Reyes-Trejo, B (2015). Structure and Absolute Configuration of the 11-Noriridoid “Chapingolide.” *Heterocycles*, 91(July), 1417–1422. <https://doi.org/10.3987/COM-15-13216>

Sai-Ramesh, A., Godwin, C., Radhika, R., Vaidyanathan, V., & Setty, C. R. (2011). Isolation , characterisation and cytotoxicity study of arjunolic acid from *Terminalia arjuna*. *Natural Product Research*, 26(16), 1549–1552. <https://doi.org/10.1080/14786419.2011.566870>

Vera C. P., & Wendt T. (2001). Una nueva especie de *Calatola* (Icacinaceae) de México y Centroamérica. *Acta Botanica Mexicana*, 54.

Villaseñor, J. L., & Magaña, P. (2002). la flora en México. ¿ se podra conocer completamente?.pdf. *Ciencias*, abril-junio, 24.26. <http://www.redalyc.org/pdf/644/64406604.pdf>

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



Análisis QSAR con Machine Learning de una biblioteca virtual de derivados del O-etil-glucósido de semillas de randia aculeata

Luis Germán López-Valdez²², Guillermo Martínez-Blanco²³ y Holber Zuleta-Prada¹

Resumen

En este trabajo se montaron tres modelos QSAR con Machine Learning (ML), con el propósito de caracterizar la biblioteca virtual de derivados del O-etil-glucósido de semillas de randia aculeata y así proponer la posible actividad de estos derivados obtenidos del fruto de crucetillo. Se obtuvieron los compuestos más activos de acuerdo a los modelos ML, los cuales nos permite conocer la estructura de las moléculas activas, con las que se harán estudios de Acoplamiento Molecular (Molecular Docking) para saber que parte de su estructura se puede modificar para incrementar su actividad.

Introducción

Entender las relaciones que existen entre la estructura de las moléculas y sus propiedades fisicoquímicas (descriptores moleculares) o morfológicas (fingerprints), es importante en los trabajos de investigación actuales, en las áreas químicas, biológicas y de la salud (López-Lopez, *et al.* 2021). Dicho entendimiento nos lo proporciona la ciencia de datos, a través de la quimioinformática (Lewis *et al.* 2019). Así, actualmente se supone e inclusive se afirma que es casi imposible realizar investigación sin ayuda de las herramientas informáticas que facilitan el quehacer diario del investigador (López-Lopez, *et al.* 2021). De esta manera, los métodos de relaciones cuantitativas estructura actividad, QSAR (Quantitative Structure–Activity Relationship), que han sido común y extensivamente usados desde hace más de 100 años (Meyer 1899 y Overton 1901), para encontrar la relación entre la estructura química de las moléculas y sus propiedades (descriptores moleculares), ha sido usados para predecir alguna propiedad asociada con ellas. Actualmente, estos métodos QSAR, se han perfeccionado para tal propósito y se pueden

²² Departamento de Preparatoria Agrícola, Universidad Autónoma Chapingo. Km. 38.5 carretera México-Texcoco, Chapingo Edo. de México. CP 56230. Tel +595-21500 ext 1619. Fax +595 -9521617. E-mail addresses: lgermanlv@taurus.chapingo.mx, lgermanlv@gmail.com (L.G. López-Valdez). hozuleta_13@hotmail.com (H. Zuleta-Prada)

²³ Departamento de Ingeniería Mecánica Agrícola, Universidad Autónoma Chapingo, Km 38.5 Carretera México-Texcoco. Texcoco, Edo. de México. Tel. y Fax 01 (595) 95 2-16-78, 2-16-80. E-mail address: jeetcor@hotmail.com (G. Martínez-Blanco)

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



inifap



predecir con una alta precisión propiedades de moléculas nuevas, inclusive de moléculas que aún no existen (bibliotecas virtuales), utilizando las nuevas tecnologías para este propósito. Así, actualmente con el crecimiento acelerado de las herramientas informáticas, la ciencia de datos, las múltiples bases de datos existentes y el aprendizaje automatizado (ML), se pueden migrar los métodos QSAR al ML aplicando algún lenguaje de programación (R, Python, MATLAB, C++, Java), entre otros, de los cuales los más extensamente usados son Python y R, para hacer predicciones con modelos de ML de una manera más rápida y comprensible en una sola plataforma de manera automática, todo esto debido a que el modelado QSAR requiere procedimientos iterativos para obtener un modelo óptimo y trabajar con varios paquetes de software dificulta la automatización del proceso (Kim y Cho 2018).

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



Descripción de la metodología.

En este trabajo se usó el lenguaje de programación Python, y sus diferentes librerías como: Pandas y Numpy para la descarga, manipulación y análisis de los datos. RDKit para el cálculo de descriptores moleculares, PaDEL para el cálculo de los fingerprints, SciKit-Learn para la construcción de modelo de ML y las predicciones de las nuevas propiedades (IC_{50}) de los compuestos de la biblioteca virtual de indazoles y dihidro-indazoles (3,3-disustituidos). Todo esto con el propósito de saber cuál o cuáles de los compuestos son los más activos frente al padecimiento (enfermedad) en que se analiza su actividad.

Así, el siguiente procedimiento se siguió.

1. Descarga de la base de datos.

Con la plataforma de Google Colab que usa Jupyter Notebook de Python, se descargó de la base de datos ChEMBL compuesto con actividad en el receptor de la ROS1 tirosina kinasa, responsable de la aparición de tumores ROS1 (quinasa de linfoma anaplásico) (*Menichcheri et al. 2016*). Los datos fueron filtrados para obtener exclusivanete actividad IC_{50} en unidades nM. Después del tratamiento de los datos y eliminación de las filas que no tenían datos suficientes, se obtuvo una base de datos con 238 compuestos con actividad IC_{50} .

También se descargó una base de datos con actividad en hogo fusarium, un microorganismo que provoca devastación de cultivos a nivel mundial, esta base de datos después de tratarla y eliminar información no necesaria, arrojó 781 compuestos con actividad MIC.

También se descargó una base de datos con actividad en hogo Candida, un microorganismo que provoca también devastación de cultivos a nivel mundial, esta base de datos después de tratarla y eliminar información no necesaria, arrojó 871 compuestos con actividad MIC.

2. Calculo de los descriptores de importancia farmacéutica.

A las dos primeras bases de datos con actividad ROS1 238 compuestos, y fusarium 781 compuesto, se le calcularon con la herramienta quimioinformática RDKit los descriptores moleculares de importancia farmacológica: coeficiente de partición octanol-agua (LogP), número de átomos donadores de hidrógeno (NumHDonors), número de átomos aceptores de hidrógeno (NumHAcceptors), área de superficie topológica polar (TPSA), número de enlaces rotables ($n\text{RotB}$), peso molar (MW). Estos, describen la polaridad (LogP , NumHDonors , NumHAcceptors), la flexibilidad (TPSA, $n\text{RotB}$) y el tamaño (MW) de las moléculas.

A la base de datos con actividad en Candida se le calcularon 333 descriptores moleculares con la herramienta quimioinformática MOE.

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



3. Construcción del modelo de Machine Learning.

En esta parte, se asignó al modelo de regresión usando un algoritmo de Random Forest, de SciKit-Learn, para construir el modelo de cada una de las tres bases de datos. Donde las variables predictoras **X** fueron los descriptores moleculares de importancia farmacológica para las dos primeras bases de datos y la variable a predecir **Y** fue el pIC₅₀ o pMIC, en la tercera base de datos **X** fueron los 333 descriptores moleculares calculados con MOE.

Así se obtuvo un desempeño para cada modelo de la siguiente manera:

ROS1:	Mean squared error (MSE): 0.62 Coefficient of determination (R^2): 0.78
Fusarium:	Mean squared error (MSE): 0.13 Coefficient of determination (R^2): 0.85
Candida:	Mean squared error (MSE): 0.08 Coefficient of determination (R^2): 0.91

4. Haciendo predicciones.

Se aplicó cada modelo a la biblioteca virtual de 76 compuestos derivado del O-etilglucósido para hacer las predicciones del pIC₅₀ o el pMIC de estos compuestos en función de cada modelo.

Resultados.

Visualización de datos.

Gráfico de dispersión de valores pIC₅₀ experimentales frente a los predichos. Y desempeño del modelo para ROS1.

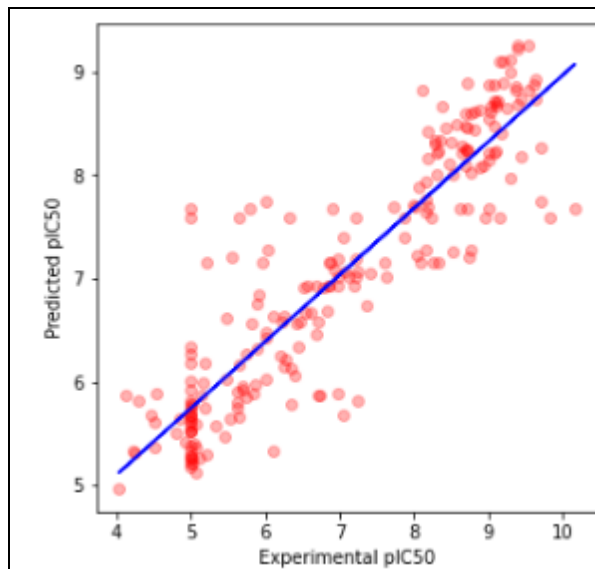
10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



iniqap



Mean squared error (MSE): **0.62**
Coefficient of determination (R²): **0.78**

Gráfico de dispersión de valores pMIC experimentales frente a los predichos. Y desempeño del modelo para Fusarium.

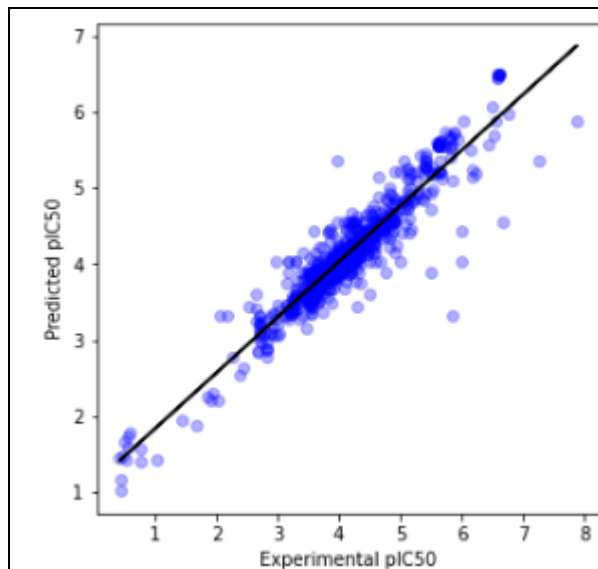
10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021

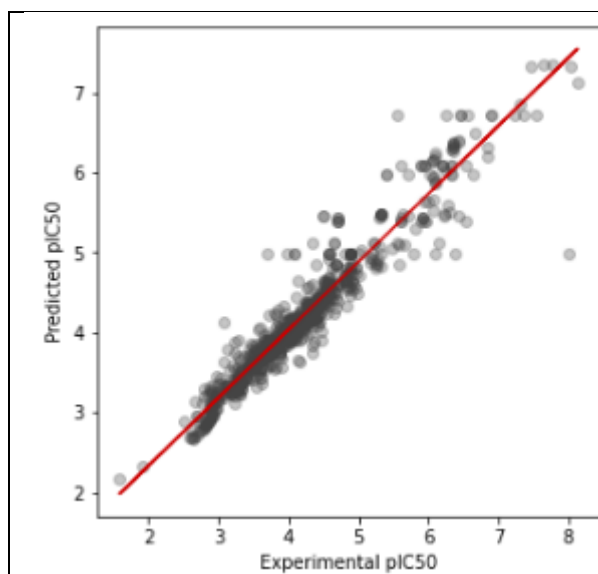


inifap



Mean squared error (MSE): **0.13**
Coefficient of determination (R^2): **0.85**

Gráfico de dispersión de valores pMIC experimentales frente a los predichos. Y desempeño del modelo para Candida.



Mean squared error (MSE): **0.08**
Coefficient of determination (R^2): **0.91**

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



inifap



De acuerdo con el desempeño de los modelos, el de mayor confiabilidad es el de Candida, por lo que se presenta las predicciones para Candida y las moléculas que se presumen más activas para este microorganismo.

Aplicación del modelo ML para hacer predicciones en la biblioteca virtual de derivados de O-etilglucosidos de Randia Aculeata .

Los 5 derivados de O-etilglucosidos que resultaron más activos de la biblioteca virtual de 76 compuestos.

ID	pIC50_pred	SMILES
128	4.57806789	<chem>CCOC1OC(CO)C(O)C(O)C1OC(=O)Nc1cc(ccc1)C#N</chem>
61	4.57613756	<chem>CCOC1OC(COC(=O)Nc2cc(ccc2)C#N)C(O)C(O)C1O</chem>
60	4.55330643	<chem>CCOC1OC(COC(=O)Nc2c(C)oc[n]c2C)C(O)C(O)C1O</chem>
96	4.53421747	<chem>CCOC1OC(CO)C(O)C(OC(=O)Nc2cc(ccc2)C#N)C1O</chem>
64	4.522749616	<chem>CCOC1OC(COC(=O)Cc2c[nH]c3ccccc23)C(O)C(O)C1O</chem>

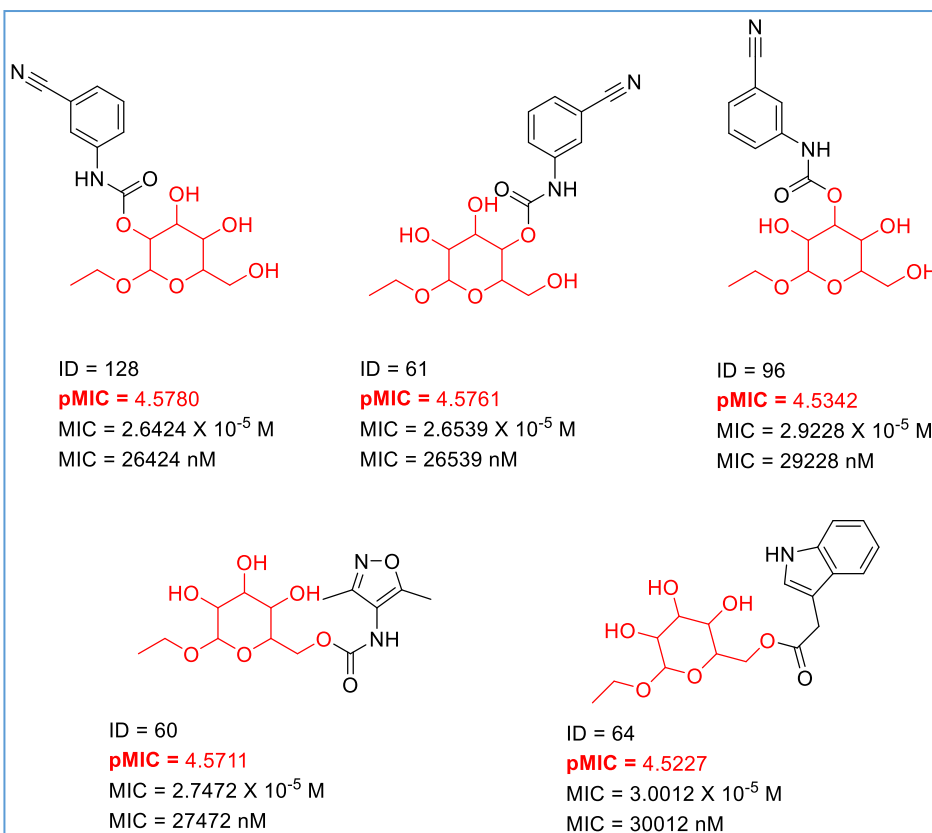
10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



inifap



Conclusión

El modelo QSAR adaptado Machine Learning basado en una regresión usando un algoritmo de Random Forest, nos ha permitido discernir entre tres bases de datos para caracterizar la actividad biológica probable de nuestra biblioteca virtual de derivados de O-etilglucosido provenientes de frutos de la planta *Randia Aculeata*. Así, el desempeño del modelo nos permite hacer predicciones más precisas con respecto a la actividad en *Candida*. Comparado con *Fusarium* o ROS1. El siguiente paso de este proyecto es mejorar el desempeño de los modelos de ML para predecir de mejor manera la probable actividad de esa biblioteca virtual. Y así, poder realizar estudios de

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



inifap



Acoplamiento Molecular (Molecular Docking), para saber qué parte de la molécula es la activa y que parte se puede modificar para aumentar la actividad de estos compuestos.

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



inifap



Bibliografía

Lewis, R. A.; Ertl, P.; Schneider, N.; Stiefl N. (2019). Reducing the Concepts of Data Science and Machine Learning to Tools for the Bench Chemist. Artificial Intelligence in Swiss Chemical Research. *CHIMIA* 73, 1001-1005. <https://doi.org/10.2533/chimia.2019.1001>

López-López, E.; Bajorath J.; Medina-Franco, J. L. (2021). Informatics for Chemistry, Biology, and Biomedical Sciences. *J. Chem. Inf. Model.*, 61, 26–35. <https://doi.org/10.1021/acs.jcim.0c01301>

Menichincheri, M.; Ardini, E.; Magnaghi, P.; Avanzi, N.; Banfi, P.; Bossi, R.; Buffa, L.; Canevari, G.; Ceriani, L.; Colombo, M.; Corti, L.; Donati, D.; Fasolini, M.; Felder, E.; Fiorelli, C.; Fiorentini, F.; Galvani, A.; Isacchi, A.; Borgia, A. L.; Marchionni, C.; Nesi, M.; Orrenius, C.; Panzeri, A.; Pesenti, E.; Rusconi, L.; Saccardo, M. B.; Vanotti, E.; Perrone, E.; Orsini, P. (2016). Discovery of Entrectinib: A New 3-Aminoindazole As a Potent Anaplastic Lymphoma Kinase (ALK), c-ros Oncogene 1 Kinase (ROS1), and Pan-Tropomyosin Receptor Kinases (Pan-TRKs) inhibitor. *J. Med. Chem.*, 59, 3392–3408. <https://doi.org/10.1021/acs.jmedchem.6b00064>

Meyer, H. (1899). *Arch. exp. pathol. pharmacol.* naunyn-schmiedebergs, 42, 109-118.

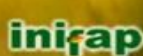
Overton, E. (1901). *Studien uber die narkose : zugleich ein beitrag zur allgemeinen pharmakologie.* Germany: Jena.

Kim, S.; Cho, K.-H. (2018). PyQSAR: A Fast QSAR Modeling Platform Using Machine Learning and Jupyter Notebook. *BULLETIN OF THE KOREAN CHEMICAL SOCIETY*, 40, 39-44. <https://doi.org/10.1002/bkcs.11638>

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



Prediciendo la actividad biológica de bibliotecas virtuales de indazoles y dihidro-indazoles (3,3-disustituidos) a través de análisis QSAR basado en Machine Learning

Luis Germán López-Valdez²⁴, y Holber Zuleta-Prada¹

Resumen

En este trabajo se realizaron predicciones de actividad IC_{50} en el receptor de la ALK tirosina kinasa, responsable del linfoma neoplásico, de las bibliotecas virtuales de indazoles y dihidro-indazoles (3,3-disustituidos), con un modelo QSAR adaptado a un algoritmo de Machine Learning (ML). Se obtuvieron los compuestos más activos de acuerdo al modelo ML, los cual nos permite conocer la estructura de las moléculas activas, con las que se harán estudios de Acoplamiento Molecular (Molecular Docking) para saber que parte de su estructura se puede modificar para incrementar su actividad.

Introducción

Entender las relaciones que existen entre la estructura de las moléculas y sus propiedades fisicoquímicas (descriptores moleculares) o morfológicas (fingerprints), es importante en los trabajos de investigación actuales, en las áreas químicas, biológicas y de la salud (López-Lopez, *et al.* 2021). Dicho entendimiento nos lo proporciona la ciencia de datos, a través de la quimioinformática (Lewis *et al.* 2019). Así, actualmente se supone e inclusive se afirma que es casi imposible realizar investigación sin ayuda de las herramientas informáticas que facilitan el quehacer diario del investigador (López-Lopez, *et al.* 2021). De esta manera, los métodos de relaciones cuantitativas estructura actividad, QSAR (Quantitative Structure–Activity Relationship), que han sido común y extensivamente usados desde hace más de 100 años (Meyer 1899 y Overton 1901), para encontrar la relación entre la estructura química de las moléculas y sus propiedades (descriptores moleculares), ha sido usados para predecir alguna propiedad asociada con ellas. Actualmente, estos métodos QSAR, se han perfeccionado para tal propósito y se pueden

²⁴ Departamento de Preparatoria Agrícola, Universidad Autónoma Chapingo. Km. 38.5 carretera México-Texcoco, Chapingo Edo. de México. CP 56230. Tel +595-21500 ext 1619. Fax +595 -9521617 E-mail addresses: lgermanlv@taurus.chapingo.mx, lgermanlv@gmail.com (L.G. López-Valdez). honzuleta_13@hotmail.com (H. Zuleta-Prada)

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



iniqap



predecir con una alta precisión propiedades de moléculas nuevas, inclusive de moléculas que aún no existen (bibliotecas virtuales), utilizando las nuevas tecnologías para este propósito. Así, actualmente con el crecimiento acelerado de las herramientas informáticas, la ciencia de datos, las múltiples bases de datos existentes y el aprendizaje automatizado (ML), se pueden migrar los métodos QSAR al ML aplicando algún lenguaje de programación (R, Python, MATLAB, C++, Java), entre otros, de los cuales los más extensamente usados son Python y R, para hacer predicciones con modelos de ML de una manera más rápida y comprensible en una sola plataforma de manera automática, todo esto debido a que el modelado QSAR requiere procedimientos iterativos para obtener un modelo óptimo y trabajar con varios paquetes de software dificulta la automatización del proceso (Kim y Cho 2018).

Descripción de la metodología

En este trabajo se usó el lenguaje de programación Python, y sus diferentes librerías como: Pandas y Numpy para la descarga, manipulación y análisis de los datos. RDKit para el cálculo de descriptores moleculares, PaDEL para el cálculo de los fingerprints, SciKit-Learn para la construcción de modelo de ML y las predicciones de las nuevas propiedades (IC_{50}) de los compuestos de la biblioteca virtual de indazoles y dihidro-indazoles (3,3-disustituidos). Todo esto con el propósito de saber cuál o cuáles de los compuestos son los más activos frente al padecimiento (enfermedad) en que se analiza su actividad.

Así, el siguiente procedimiento se siguió.

5. Descarga de la base de datos.

Con la plataforma de Google Colab que usa Jupyter Notebook de Python, se descargó de la base de datos ChEMBL 2837 compuesto con actividad en el receptor de la ALK tirosina kinasa, responsable de la aparición de tumores ALK (quinasa de linfoma anaplásico) (Menichincheri et al. 2016). Los datos fueron filtrados para obtener exclusivamente actividad IC_{50} en unidades nM. Después del tratamiento de los datos y eliminación de las filas que no tenían datos suficientes, se obtuvo una base de datos con 2703 compuestos con actividad IC_{50} donde, se calificaron los compuestos de la siguiente manera. Si el IC_{50} nM $>$ 10000 se le consideró inactivo, si IC_{50} nM $<$ 1000 se le consideró activo.

6. Cálculo de los descriptores de importancia farmacéutica.

A esta base de datos pre-procesada de 2703 compuestos con actividad (IC_{50}) nM, se le calcularon con la herramienta quimioinformática RDKit los descriptores moleculares de importancia

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



iniqap



farmacológica: coeficiente de partición octanol-agua (LogP), número de átomos donadores de hidrógeno (NumHDonors), número de átomos aceptores de hidrógeno (NumHAcceptors), área de superficie topológica polar (TPSA), número de enlaces rotables (nRotB), peso molar (MW). Estos, describen la polaridad (LogP, NumHDonors, NumHAcceptors), la flexibilidad (TPSA, nRotB) y el tamaño (MW) de las moléculas. Con estos datos en manos (descriptores de importancia farmacológica), se realizó el análisis exploratorio (análisis del espacio químico) y pruebas paramétricas.

7. Cálculo de fingerprints.

En esta parte se calculan los descriptores moleculares, que son esencialmente los descriptores cuantitativos de las moléculas, en la base de datos. Así, con PaDEL se realizaron los cálculos de las huellas digitales (fingerprints) y con esta base de datos de 881 fingerprints, ya se puede realizar el modelo predictivo de Machine Learning con SciKit-Learn.

8. Construcción del modelo de Machine Learning.

En esta parte, se asignó al modelo de regresión usando un algoritmo de Random Forest, de SciKit-Learn. Donde las variables predictoras **X** fueron los fingerprint y la variable a predecir **Y** fue el pIC_{50} , así se obtuvo un desempeño del modelo igual a: Mean squared error (MSE): 0.28 y Coefficient of determination (R^2): 0.84.

9. Haciendo predicciones.

Se aplicó el modelo a la biblioteca virtual de 122 indazoles para hacer las predicciones del pIC_{50} de estos compuestos. De igual forma se aplicó el modelo para predecir la actividad de los 141 dihidro-indazoles.

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



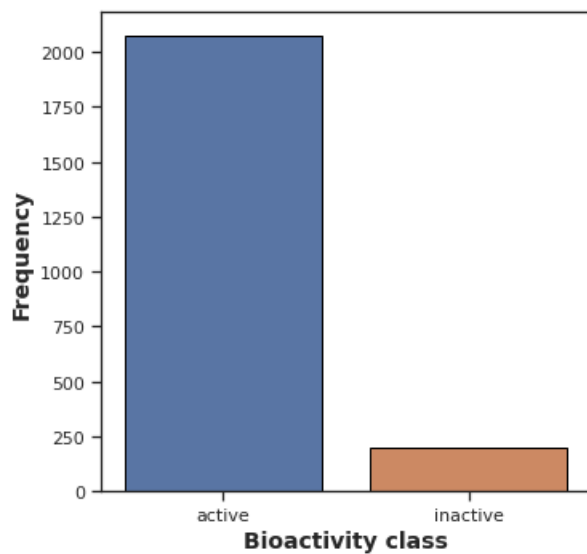
inifap



Resultados.

Análisis de datos de los compuestos con actividad en el receptor de la ALK tirosina kinasa.

Tabla de frecuencia de los compuestos activos e inactivos.



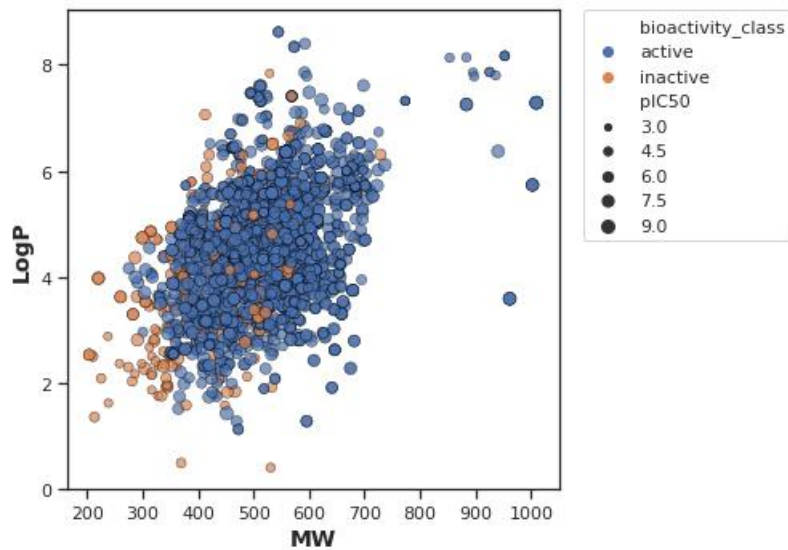
Espacio químico de los de los compuestos con actividad en el receptor de la ALK tirosina kinasa.

Gráfico de dispersión de MW versus LogP.

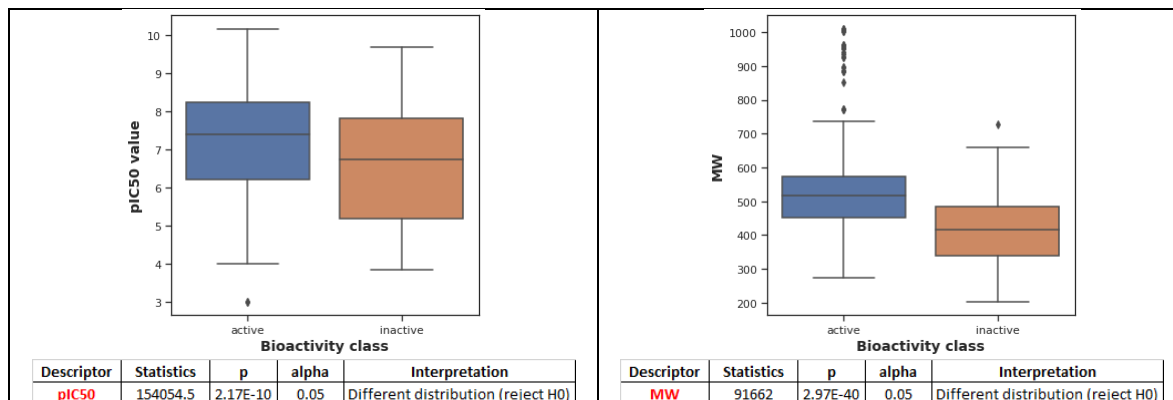
10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



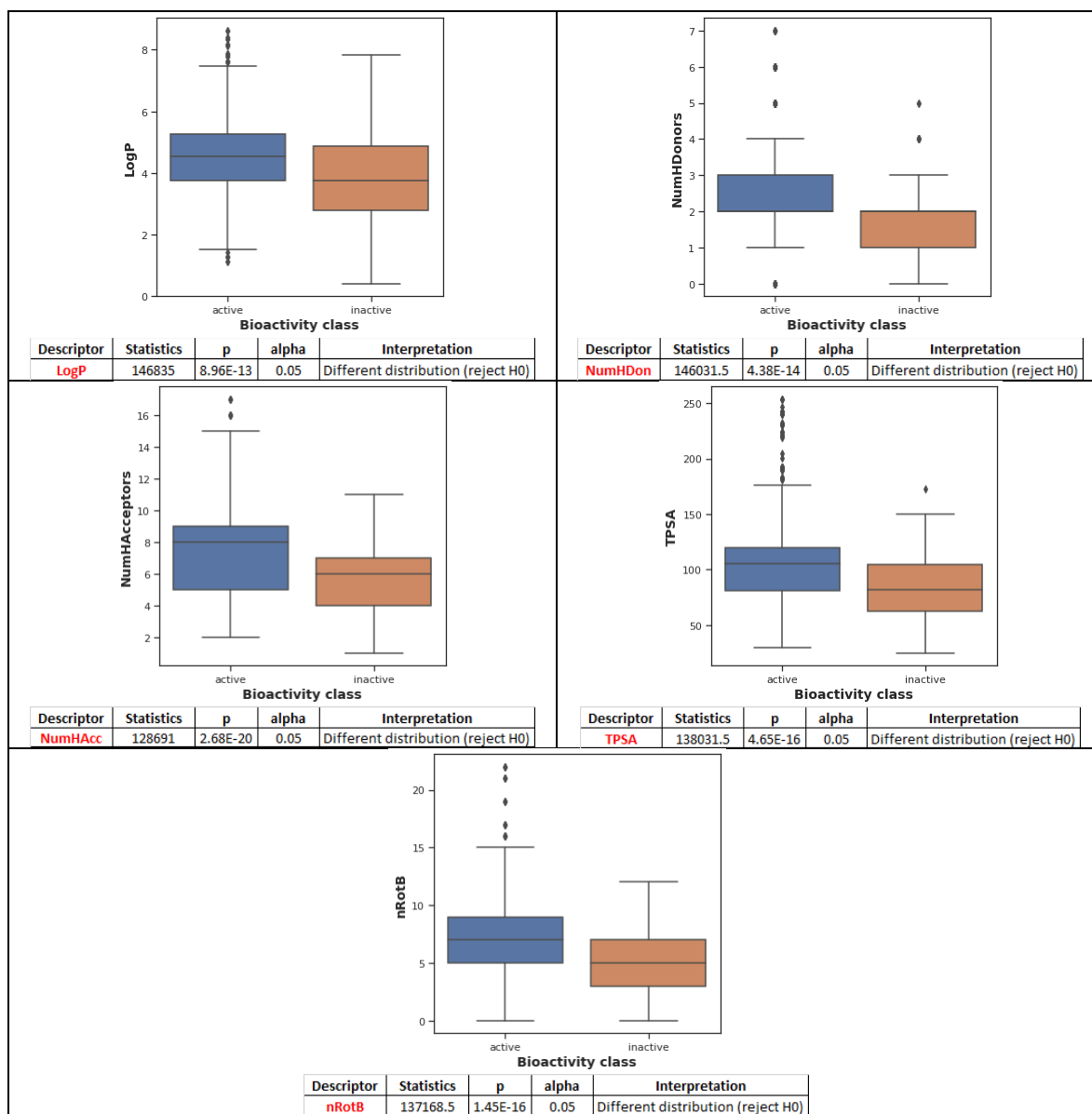
Graficas de caja y pruebas no paramétricas entre compuestos activo e inactivos.



10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



Visualización de datos.

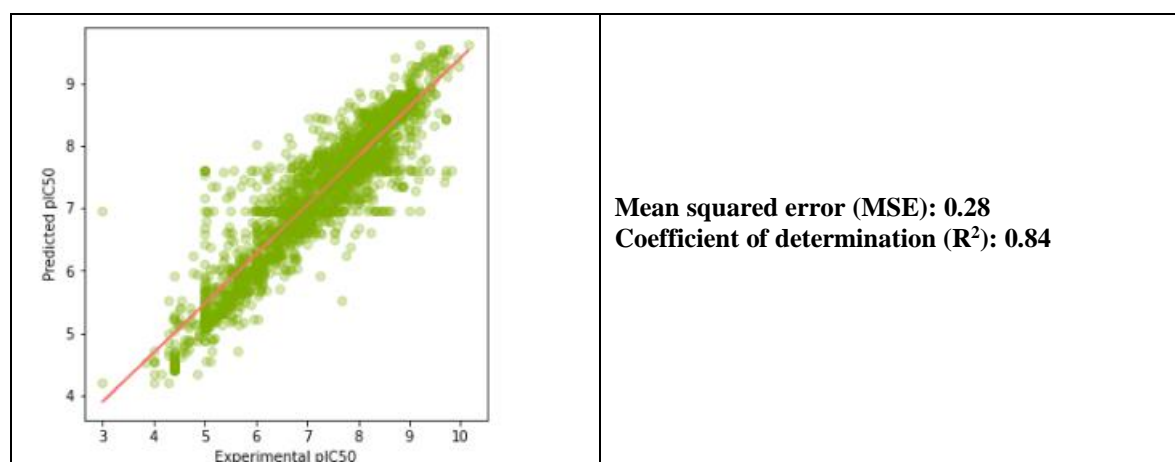
10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



Gráfico de dispersión de valores pIC50 experimentales frente a los predichos. Y desempeño del modelo.



Aplicación del modelo ML para hacer predicciones en indazoles.

Los 5 indazoles que resultaron más activos de la biblioteca virtual de 121 compuestos.

ID	pIC50_pred	SMILE
150	7.03078088	<chem>NC(=O)CC(NC1CCC2(CC1)N=Nc1cccc21)C(O)=O</chem>
121	7.00482831	<chem>C[C@]12CC[C@H]3[C@@H](CCC4=CC5(CC[C@]43C)N=Nc3cccc53)[C@@H]1CCC2NC(C(N)=O)C(O)=O</chem>
161	6.96292882	<chem>OC(=O)C(Cc1c[n]c[nH]1)NC1CCC2(CC1)N=Nc1cccc21</chem>
83	6.86827605	<chem>NC(=O)CC(NC1CC2(CC1)N=Nc1cccc21)C(O)=O</chem>
130	6.86175062	<chem>NC(=O)CC(NC1CCCC2(CC1)N=Nc1cccc21)C(O)=O</chem>

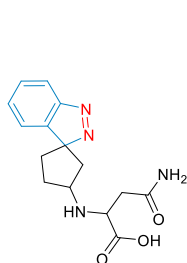
10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

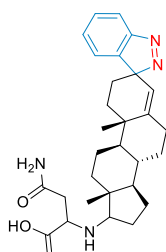
21 y 22 de octubre de 2021



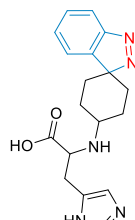
inifap



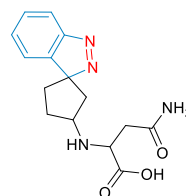
ID = 150
pIC₅₀ = 7.03
IC₅₀ = 9.33 X 10⁻⁸ M
IC₅₀ = 93.3 nM



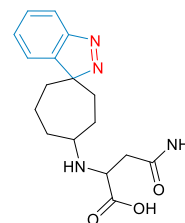
ID = 121
pIC₅₀ = 7.00
IC₅₀ = 1 X 10⁻⁷ M
IC₅₀ = 100 nM



ID = 161
pIC₅₀ = 6.96
IC₅₀ = 1.09 X 10⁻⁷ M
IC₅₀ = 109 nM



ID = 83
pIC₅₀ = 6.96
IC₅₀ = 1.09 X 10⁻⁷ M
IC₅₀ = 109 nM

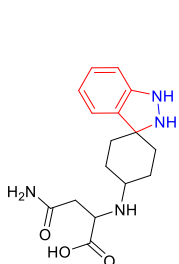


ID = 130
pIC₅₀ = 6.86
IC₅₀ = 1.38 X 10⁻⁷ M
IC₅₀ = 138 nM

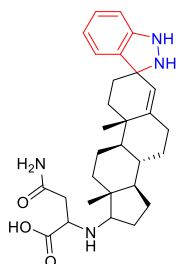
Aplicación del modelo ML para hacer predicciones en dihidro-indazoles.

Los 5 dihidro-indazoles que resultaron más activos de la biblioteca virtual de 141 compuestos.

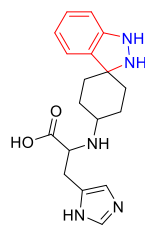
ID	pIC ₅₀ _pred	SMILES
94	7.04663491	NC(=O)CC(NC1CC2(CC1)NNc1cccc21)C(O)=O
151	7.0210131	C[C@]12CC[C@H]3[C@H](CCC4=CC5(CC[C@@]43)NNc3ccccc53)[C@H]1CCC2NC(CC(N)=O)C(O)=O
82	6.9927114	OC(=O)C(Cc1c[nH]1)NC1CCC2(CC1)NNc1cccc21
251	6.92468001	C[C@]12CC[C@H]3[C@H](CCC4=CC5(CC[C@@]43)NNc3ccccc53)C1CCC2OC(=O)C(N)CC(N)=O
116	6.89803343	NC(=O)CC(NC1CC2(CC1)NNc1cccc21)C(O)=O



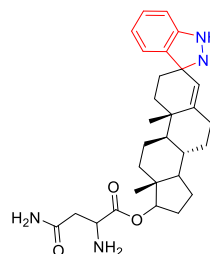
ID = 94
pIC₅₀ = 7.05
IC₅₀ = 8.91 X 10⁻⁸ M
IC₅₀ = 89.1 nM



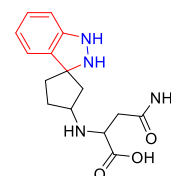
ID = 151
pIC₅₀ = 7.02
IC₅₀ = 9.54 X 10⁻⁸ M
IC₅₀ = 95.4 nM



ID = 82
pIC₅₀ = 6.99
IC₅₀ = 1.02 X 10⁻⁷ M
IC₅₀ = 102 nM



ID = 251
pIC₅₀ = 6.92
IC₅₀ = 1.20 X 10⁻⁷ M
IC₅₀ = 120 nM



ID = 116
pIC₅₀ = 6.89
IC₅₀ = 1.28 X 10⁻⁷ M
IC₅₀ = 128 nM

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



inifap



Conclusión

El modelo QSAR adaptado Machine Learning basado en una regresión usando un algoritmo de Random Forest, nos ha permitido ver cuáles son las moléculas con una mayor posibilidad de tener una alta actividad en el receptor de la ALK tirosina kinasa, responsable de la aparición de tumores ALK (quinasa de linfoma anaplásico). De esta manera la síntesis de los indazoles y dihidro-indazoles no parece tan aleatoria ya que el modelo predictivo nos permite concentrarnos en aquellos que el modelo predictivo nos indica. El siguiente paso de este proyecto es realizar estudios de Acoplamiento Molecular (Molecular Docking), para saber qué parte de la molécula es la activa y que parte se puede modificar para aumentar la actividad de estos compuestos.

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



inifap



Bibliografía

Lewis, R. A.; Ertl, P.; Schneider, N.; Stiefl N. (2019). Reducing the Concepts of Data Science and Machine Learning to Tools for the Bench Chemist. *Artificial Intelligence in Swiss Chemical Research. CHIMIA* 73, 1001-1005. <https://doi.org/10.2533/chimia.2019.1001>

López-López, E.; Bajorath J.; Medina-Franco, J. L. (2021). Informatics for Chemistry, Biology, and Biomedical Sciences. *J. Chem. Inf. Model.*, 61, 26–35. <https://doi.org/10.1021/acs.jcim.0c01301>

Menichincheri, M.; Ardini, E.; Magnaghi, P.; Avanzi, N.; Banfi, P.; Bossi, R.; Buffa, L.; Canevari, G.; Ceriani, L.; Colombo, M.; Corti, L.; Donati, D.; Fasolini, M.; Felder, E.; Fiorelli, C.; Fiorentini, F.; Galvani, A.; Isacchi, A.; Borgia, A. L.; Marchionni, C.; Nesi, M.; Orrenius, C.; Panzeri, A.; Pesenti, E.; Rusconi, L.; Saccardo, M. B.; Vanotti, E.; Perrone, E.; Orsini, P. (2016). Discovery of Entrectinib: A New 3-Aminoindazole As a Potent Anaplastic Lymphoma Kinase (ALK), c-ros Oncogene 1 Kinase (ROS1), and Pan-Tropomyosin Receptor Kinases (Pan-TRKs) inhibitor. *J. Med. Chem.*, 59, 3392–3408. <https://doi.org/10.1021/acs.jmedchem.6b00064>

Meyer, H. (1899). *Arch. exp. pathol. pharmacol. naunyn-schmiedebergs*, 42, 109-118.

Overton, E. (1901). *Studien uber die narkose : zugleich ein beitrag zur allgemeinen pharmakologie*. Germany: Jena.

Kim, S.; Cho, K.-H. (2018). PyQSAR: A Fast QSAR Modeling Platform Using Machine Learning and Jupyter Notebook. *BULLETIN OF THE KOREAN CHEMICAL SOCIETY*, 40, 39-44. <https://doi.org/10.1002/bkcs.11638>

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



Efecto de la temperatura en la extracción y actividad antioxidante de β -glucanos obtenidos de *Pleurotus ostreatus* PoB

*Lizbeth León Avendaño*²⁵, *Landy Hernández Rodríguez*²⁶, *Consuelo Lobato Calleros*²⁷,
*Angélica Román Guerrero*²⁸

Resumen

Un extracto enriquecido en polisacáridos obtenido de *Pleurotus ostreatus* PoB se sometió a diferentes temperaturas de extracción (91, 70 y 50 °C) y diferentes técnicas de purificación (tratamiento alcalino NaOH 0.01 M y diálisis en membrana >12,400 Da) con el objetivo de obtener la mayor cantidad de β -glucanos presentes en la muestra. Se analizó la capacidad antioxidante obteniendo que los β -glucanos extraídos a una temperatura de 50 °C presentó mejor respuesta en actividad antioxidante del radical DPPH con un coeficiente de inhibición (IC50) de 7.5 mg · mL⁻¹ con respecto a los tratamientos de 70 y 91°C (11.2 ± 0.3 y 12.4 ± 0.2 mg · mL⁻¹ respectivamente).

Este estudio señalo que los β -glucanos extraídos de *P. ostreatus* PoB pueden ser un ingrediente funcional y antioxidante eficaz al incorporarse en formulaciones de alimentos.

Palabras clave: *Pleurotus ostreatus* PoB, β -glucanos, capacidad antioxidante.

Abstract

An extract enriched in polysaccharides obtained from *Pleurotus ostreatus* PoB was subjected to different extraction temperatures (91, 70 and 50 °C) and different purification techniques (alkaline treatment NaOH 0.01 M and dialysis in membrane > 12,400 Da) with the objective of obtain the highest amount of β -glucans present in the sample. The antioxidant capacity was analyzed, obtaining that β -glucans extracted at a temperature of 50 °C presented a better response in

²⁵ Ingeniero Agroindustrial, Posgrado en Ciencia y Tecnología Agroalimentaria (UACH), leobeth1509@gmail.com

²⁶ Doctora en Biotecnología, Universidad Autónoma Chapingo, landy14hr@yahoo.com.mx

²⁷ Doctora en Biotecnología, Universidad Autónoma Chapingo, consuelobato@yahoo.com

²⁸ Doctora en Biotecnología, Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa, aromangro@gmail.com

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



inifap



antioxidant activity of the radical DPPH with an inhibition coefficient (IC₅₀) of 7.5 mg · mL⁻¹ with respect to the treatments of 70 and 91 °C (11.2 ± 0.3 and 12.4 ± 0.2 mg · mL⁻¹ respectively). This study pointed out that β-glucans extracted from *P. ostreatus* PoB can be an effective functional ingredient and antioxidant when incorporated into food formulations.

Keywords: *Pleurotus ostreatus* PoB, β-glucans, antioxidant capacity.

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



Introducción

El desarrollo en las innovaciones de alimentos funcionales dio paso al estudio de los hongos superiores comestibles como propuesta de alimentos que brindan efectos beneficiosos a los humanos en términos de promoción de la salud. Los hongos han sido apreciados y consumidos por sus características sensoriales y propiedades nutricionales, primordialmente por su contenido proteico y de polisacáridos, fuente de vitaminas incluyendo a tiamina, riboflavina, ácido ascórbico, ergosterol y niacina, escaso contenido de grasa y otros nutrientes como fósforo y hierro (Kumar et al., 2015). Las propiedades funcionales se deben principalmente a la presencia de fibra dietética en particular a la quitina y β -glucanos que son los dos polisacáridos que se encuentran en su pared celular. Estas propiedades de los hongos están ligadas con su origen, peso molecular y características estructurales de los β -glucanos (Perera y Li, 2011). El seta de ostra blanca (*P. ostreatus*) es el segundo saprofito más producido con fines alimenticios a nivel mundial, por tanto, es una especie que no representa rechazo por el consumidor. El método más común para el aislamiento de estos polisacáridos es extracción en agua caliente debido a que es económico, práctico y reduce el requerimiento de equipo sofisticado, sin embargo, se utilizan temperaturas elevadas entre 90 a 100 °C ya que se obtienen mejores rendimientos (Gong et al., 2020). Este estudio tiene por objetivo evaluar el efecto de tres temperaturas de extracción de β -glucanos aislados de *P. ostreatus* PoB una cepa poco estudiada con fines nutraceuticos sobre sus principales propiedades funcionales y antioxidantes, con el fin de proponer el método de extracción que afecte menos las características funcionales al incluirlo en un sistema alimenticio sin limitar sus propiedades antioxidantes.

Materiales y Métodos

Ubicación del trabajo

La producción de *Pleurotus ostreatus* PoB se llevó a cabo en el Laboratorio de Biología Vegetal del Departamento de Preparatoria Agrícola de la Universidad Autónoma Chapingo. La obtención de los β -glucanos, así como la caracterización de estos, se efectuó en el Laboratorio de Tecnología de Alimentos, ubicado en el Departamento de Preparatoria Agrícola de la Universidad Autónoma Chapingo.

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



Materiales

Grano de sorgo invadido por la cepa de *Pleurotus ostreatus* PoB fue adquirido en el Laboratorio de Biología Vegetal del Departamento de Preparatoria Agrícola de la Universidad Autónoma Chapingo. Los reactivos usados fueron grado analítico: etanol al 95 % (v/v), hidróxido de sodio, ácido acético fueron adquiridos en Química Laitz S.A. de C.V. (Ciudad de México, México), reactivo de Folin-Ciocalteu (FRC), radical libre 1,1- Difenil-2-picrilhidrazilo (DPPH) y el radical del ácido 2,2 azinobis-(-3-etilbenzotiazolina)-6-sulfónico (ABTS), fueron surtidos por Sigma-Aldrich Química, S.A. de C.V. (Ciudad de México, México). El agua usada en todos los experimentos fue destilada.

Cultivo de *Pleurotus ostreatus* PoB

El sustrato para el desarrollo de *Pleurotus ostreatus* PoB, constó de una mezcla de materiales lignocelulósicos basada en rastrojo de maíz y paja de avena, con la relación en peso 10:1 respectivamente. Para la preparación se disminuyó el tamaño de los materiales lignocelulósicos, se ajustó el pH en 8.5 ± 0.2 adicionando hidróxido de calcio (90 % m/m) y se retiraron focos de contaminación como material de suelo y hierbas adventicias, que podrían expresarse durante el periodo de incubación.

Finalmente, el sustrato fue sometido a un proceso térmico durante 3 h a una temperatura de 78 ± 2 °C. La siembra de *P. ostreatus* PoB consistió en inocular grano de sorgo invadido por la cepa en bolsas de sustrato previamente descrito (300 g de sorgo/12 kg de sustrato). El periodo de incubación comprendió 14 días después de la inoculación, controlando la temperatura que osciló entre 16 a 22 °C y una baja luminosidad. La etapa de fructificación inició 25 días después de realizar la inoculación, con condiciones de temperaturas entre 20 a 25 °C y humedades relativas entre 60 a 80 %. La cosecha de los cuerpos fructíferos se realizó en dos momentos día 27 y 37 después de la inoculación.

Acondicionamiento del material fúngico

Los cuerpos fructíferos de *P. ostreatus* PoB fueron recolectados y sometidos a secado a 45 °C durante 22 h en un horno de aire caliente HCF-62 (Riossa Digital, Ciudad de México, México), hasta alcanzar una humedad del 8 %. La extrusión de los cuerpos fructíferos se realizó en una licuadora (Osterizer, 465-42, EUA) operada a 7000 rpm. La harina fue envasada en bolsas de

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



inifap



polietileno por lotes de 50 g y almacenada a -20 °C hasta su análisis (Chirapongsatunkul et al., 2019).

Extracción de polisacáridos crudos

Los polisacáridos crudos se extrajeron de la harina de *P. ostreatus* PoB empleando tres tratamientos de agua caliente; 91, 70 y 50 °C durante 1.5 h. Fueron colocados 30 g de harina en matraces Erlenmeyer de 1 L y se adicionaron 900 mL de agua destilada. La mezcla se elevó a la temperatura de extracción correspondiente y se mantuvo en agitación constante durante 1.5 h. Los polisacáridos fueron recuperados al precipitarlos con etanol (95 %) (1:1, v/v), la mezcla se almacenó a 4 °C durante toda la noche y fueron centrifugados a 8 000 rpm durante 20 min a 10 °C (Centrifugadora 5810 R, Eppendorf, AG, Hamburgo, Alemania) (Morales et al., 2020).

Extracción y purificación de los β-glucanos

En la extracción de β-glucanos, los polisacáridos crudos fueron sometidos a un tratamiento alcalino (NaOH, 0.01 M) durante 1 h. Transcurrido este periodo, la solución fue enfriada a 4 °C y centrifugada a 8000 rpm durante 20 min a 10 °C (Centrifugadora 5810 R, Eppendorf, AG, Hamburgo, Alemania). Los polisacáridos solubles se neutralizaron con ácido acético (20 % p/v) y se dializaron por 24 h mediante una membrana de celulosa (D9402-100FT, Sigma-Aldrich, mw>12,400 Da) usando agua destilada como líquido dializado (Maity et al., 2017, Morales et al., 2020). Los β-glucanos fueron lavados 2 veces con agua destilada, secados a 40 °C durante 2 h, posteriormente macerados y almacenados en refrigeración hasta su análisis. Los rendimientos de extracción se calcularon mediante la siguiente ecuación (Morales et al., 2020).

$$\% RE = \left(\frac{m_G}{m_H} \right) \times 100$$

Ecuación 1

Donde: % RE = Rendimiento de la extracción; m_G = Peso de β-glucanos en base seca; m_H = Peso total de la harina utilizada en base seca.

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



Actividad antioxidante

Se determinó la actividad antioxidante de las muestras sobre el radical libre DPPH empleando el método descrito por Cheison et al., (2007) con algunas modificaciones. Se añadió 1.5 mL de DPPH (0.08 mM en metanol al 80 % v/v) a 0.5 mL de cada extracto (2.5, 5, 7.5 y 10 mg · mL⁻¹). Las soluciones fueron agitadas durante 2 min y conservadas en condiciones de oscuridad durante 1 h. El blanco se preparó utilizando la misma cantidad de muestra que se utilizó para cada ensayo y 1.5 mL de metanol al 80 % (v/v).

A continuación, se midió absorbancia de las soluciones a una longitud de onda de 515 nm en un espectrofotómetro Genesys 10S UV-VIS (Thermo Fisher Scientific, Waltham, MA, EUA). La siguiente ecuación muestra el cálculo de eliminación de radicales DPPH.

$$\% \text{ Inhibición} = \left(\frac{A_{\text{Blanco}} - A_{\text{Muestra}}}{A_{\text{Blanco}}} \right) * 100 \quad \text{Ecuación 2}$$

Donde: A_{Blanco} = Absorbancia del Blanco; A_{Muestra} = Absorbancia de la solución preparada con muestra.

Análisis estadístico

Todas las pruebas se ensayaron por triplicado para cada tratamiento. Los resultados fueron analizados en Statistical Analysis Software (SAS 9.4) mediante un análisis de varianza (ANOVA) seguido de la prueba de Tukey para la comparación de medias que mostraban diferencia estadística ($p \leq 0.05$).

Resultados

Los β -betaglucanos al ser compuestos covalentes con alta polaridad fueron extraídos de la harina de hongo *P. ostreatus* PoB por el método de agua caliente a diferentes temperaturas y al no ser solubles en disolventes orgánicos se precipitaron al adicionar etanol al 95 % (Gong et al., 2020). Considerando que estos polisacáridos podrían estar asociados con otros compuestos, se purificaron con la combinación de diferentes técnicas (tratamiento alcalino NaOH 0.01 M y diálisis en membrana corte >12,400 Da). Los rendimientos para cada tratamiento se muestran en el Cuadro 1.

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



inifap



El incremento de la temperatura en el disolvente polar evidencio diferencia significativa ($p \leq 0.05$) entre los tratamientos al incrementar la lixiviación de los polisacáridos y directamente el rendimiento de β glucanos (Gründemann et al., 2015). Con la misma tendencia se comportó el rendimiento de polisacáridos crudos a una temperatura de 91 °C se obtuvo el máximo rendimiento 59.12 ± 1.24 % dato comparable con los obtenidos por Morales et al., (2020) quienes reportan 58 % al evaluar una temperatura de extracción de 98 °C durante 1 h y realizar adicionalmente la purificación con tratamiento alcalino y diálisis por 24 h.

Cuadro 1. Rendimientos de extracción

Tratamiento	Polisacáridos crudos (%)	β -glucanos (%)
50 °C	47.2 ± 3.3^a	3.1 ± 0.2^a
70 °C	54.8 ± 1.6^b	4.7 ± 0.0^b
91 °C	59.1 ± 1.2^b	5.0 ± 0.0^c

Diferente letra (a-c) denotan medias con diferencias significativas ($p \leq 0.05$) entre las muestras.

Actividad antioxidante

El incremento de temperatura en el proceso de extracción afecto significativamente la capacidad antioxidante de los aislados. El mayor porcentaje de inhibición lo presentó los β -glucanos extraídos a una temperatura de 50 °C (Figura 1) con un coeficiente de inhibición (IC50) de $7.5 \text{ mg} \cdot \text{mL}^{-1}$ resultado mayor a los obtenidos por Zhang et al., (2012) al estudiar una cepa de *Pleurotus* y obtener un IC50 de $1.43 \text{ mg} \cdot \text{mL}^{-1}$. Otros autores al trabajar con *Coprinus attrimentarius* reportaron un IC50 de $5 \text{ mg} \cdot \text{mL}^{-1}$ (Khan et al., 2017). Los resultados obtenidos probablemente se deban que al utilizar una temperatura de extracción de 50°C los β -glucanos se ven menos afectados estructuralmente así como las proteínas fueron desnaturalizadas en una baja proporción respondiendo con mejores resultados de actividad antioxidante que al utilizar una temperatura de 91 y 70 °C, posiblemente estas temperaturas afectaron los enlaces β -(1→6) y β -(1→3) que son los que confieren propiedades antioxidantes a este tipo de polisacáridos extraídos de hongos superiores (Morales et al., 2019).

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



iniqap

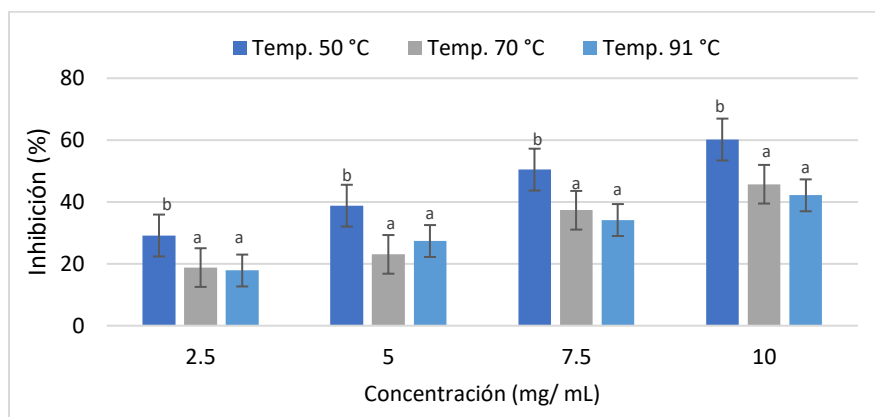


Figura 1. Efecto antioxidante de los β -glucanos sobre el radical DPPH. Diferente letra ^(a-b) denotan diferencia significativa entre las muestras.

Conclusiones

Las diferencias significativas en los efectos biológicos ejercidos por los tres tratamientos de glucanos se observaron en la actividad antioxidante, al observar que los aislados a una temperatura menor (50°C) tuvieron mayor capacidad de eliminar el radical DPPH que el utilizar temperaturas de extracción mayores (70 y 91°C), por lo que se deben realizar estudios con mayor profundidad para confirmar si esta diferencia puede estar relacionada con la estructura química o la conformación física del aislado.

Agradecimientos

Agradecemos el apoyo al Posgrado en Ciencia y Tecnología Agroalimentaria, perteneciente al Departamento de Ingeniería Agroindustrial de la Universidad Autónoma Chapingo, así como al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACyT).

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



inifap



Literatura citada

Cheison, S. C., Wang, Z., & Xu, S. Y. (2007). Preparation of whey protein hydrolysates using a single-and two-stage enzymatic membrane reactor and their immunological and antioxidant properties: characterization by multivariate data analysis. *Journal of agricultural and food chemistry*, 55(10), 3896-3904.

Chirapongsatonkul, N., Mueangkan, N., Wattitum, S., & Kittichon, U. (2019). Comparative evaluation of the immune responses and disease resistance of Nile tilapia (*Oreochromis niloticus*) induced by yeast β -glucan and crude glucan derived from mycelium in the spent mushroom substrate of *Schizophyllum commune*. *Aquaculture Reports*, 15, 100205.

Gong, P., Wang, S., Liu, M., Chen, F., Yang, W., Chang, X., ... & Chen, X. (2020). Extraction methods, chemical characterizations and biological activities of mushroom polysaccharides: A mini-review. *Carbohydrate Research*, 494, 108037.

Gründemann, C., Garcia-Käufer, M., Sauer, B., Scheer, R., Merdivan, S., Bettin, P., & Lindequist, U. (2015). Comparative chemical and biological investigations of β -glucan-containing products from shiitake mushrooms. *Journal of functional foods*, 18, 692-702.

Khan, A. A., Gani, A., Masoodi, F. A., Mushtaq, U., & Naik, A. S. (2017). Structural, rheological, antioxidant, and functional properties of β -glucan extracted from edible mushrooms *Agaricus bisporus*, *Pleurotus ostreatus* and *Coprinus atrimentarius*. *Bioactive carbohydrates and dietary fibre*, 11, 67-74.

Kumar, K. (2015). Role of edible mushrooms as functional foods-A review. *South Asian Journal of Food Technology and Environment*, 1(3&4), 211-218.

Morales, D., Rutckeviski, R., Villalva, M., Abreu, H., Soler-Rivas, C., Santoyo, S., ... & Smiderle, F. R. (2020). Isolation and comparison of α - and β -D-glucans from shiitake mushrooms (*Lentinula edodes*) with different biological activities. *Carbohydrate Polymers*, 229, 115521.

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



inifap

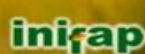


Perera, P. K., & Li, Y. (2011). Mushrooms as a functional food mediator in preventing and ameliorating diabetes. *Functional foods in health and disease*, 1(4), 161-171.

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



Propiedades mecánicas de los frutos: Una revisión sistemática de literatura con análisis bibliométrico

Yesenia Manilla Téllez²⁹, Artemio Pérez López³⁰, Cynthia Serna Abascal³¹

Resumen

Los frutos están sujetos a daños mecánicos de diferentes tipos durante la cosecha y manipulación, que pueden causar pérdidas significativas. Sobre la temática de las propiedades mecánicas del tejido de frutos continuamente se generan documentos científicos en todo el mundo, pero no existe un informe detallado de la cantidad de estos que se generan a través de los años. De esta manera se analizó cualitativa y cuantitativamente la información científica en torno a las propiedades mecánicas en frutos mediante una revisión sistemática de literatura empleando la metodología PRISMA, complementando con metaanálisis. Los resultados muestran que la producción de información científica en torno al tema es muy escasa y de poco interés en el ámbito científico internacional. Observamos que en promedio se publica un artículo científico por año lo que resulta ser muy bajo en el ámbito de la investigación y es notorio observar el poco conocimiento que se tiene acerca de este tema. La revisión sistemática de literatura con análisis bibliométrico es una metodología confiable y eficiente para realizar el análisis de la información científica que se genera a nivel mundial sobre un tema en específico.

Palabras clave: Propiedades mecánicas; postcosecha de frutos; análisis bibliométrico; PRISMA.

Introducción

El daño mecánico por compresión provoca ablandamiento en el tejido del fruto, presentando oscurecimiento vascular y pudrición basal. Esto genera una serie de eventos genéticos caracterizados por procesos bioquímicos y fisiológicos que alteran su firmeza, color, sabor y textura (Herrera González et al., 2017; Nishiyama et al., 2007). La calidad de los frutos en madurez de consumo se reduce si no se aplica un adecuado manejo en cosecha y postcosecha (Everett et al., 2008; Herrera González et al., 2017). Del mismo modo, la alta incidencia de magulladuras por

²⁹ Licenciatura, Universidad Autónoma Chapingo, yes.matez456@gmail.com

³⁰ Doctorado, Universidad Autónoma Chapingo, aperezl@chapingo.mx (Autor de correspondencia)

³¹ Maestría, Universidad Autónoma Chapingo, cynthia_serna_abascal@hotmail.com

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



inifap



daños mecánicos en frutos continúa siendo un problema económico para productores y comercializadores de la industria frutícola en todo el mundo (Opara & Pathare, 2014).

Las propiedades mecánicas del tejido de frutos ha sido objeto de estudio en diferentes áreas de la ciencia (biológicas, ingenieriles, ciencia de materiales, etc.) a través de los años y desde varios enfoques. Continuamente, se han venido generando documentos científicos en todo el mundo, algunos de ellos sobre la composición y las propiedades mecánicas del tejido de frutos y su relación con el metabolismo ante la acción de fuerzas externas en diversas especies frutales para diferentes aplicaciones. Actualmente no existe un informe detallado en relación con la cantidad de informes científicos generados, enfoque del estudio, tendencia de generación de la información a través de los años, países que más aportan en el estudio sobre la temática, autores más prolíficos en el tema, número de citas etc.; razón por la cual, es importante se realice dicho estudio con una metodología validada. Esta metodología se conoce en la literatura científica como revisión sistemática de literatura complementado con análisis bibliométrico. Estos estudios comprenden un análisis exhaustivo, sistemático y explícito de la literatura que surge a partir de una pregunta clara de investigación, una metodología, un análisis crítico de acuerdo con las diferentes herramientas y un resumen cualitativo (García-Perdomo, 2015), para que los nuevos trabajos de investigación puedan ser orientados con objetivos más específicos y con las herramientas adecuadas evitando duplicidad de información. Para ello se emplea Scopus® y/o Web of Science en la búsqueda de artículos científicos, mientras que para el análisis bibliométrico son empleados los softwares VOSviewer y R-package “Biblioshiny”.

Los resultados de este trabajo de investigación servirán como base para plantear el panorama actual de la investigación científica en la temática de las propiedades mecánicas en frutos y servir de sustento para la orientación de los investigadores en el planteamiento de nuevas líneas de investigación.

Materiales y Métodos

Revisión sistemática de literatura con metodología PRISMA

Declaración PRISMA: Es una nueva técnica derivada de la actualización y ampliación de la declaración QUOROM. PRISMA incorpora aspectos conceptuales y metodológicos de revisiones sistemáticas utilizada para describir un metaanálisis, que consiste en un flujo de información a través de diferentes fases, como se muestra en la figura 1 (Urrútia & Bonfill, 2010).

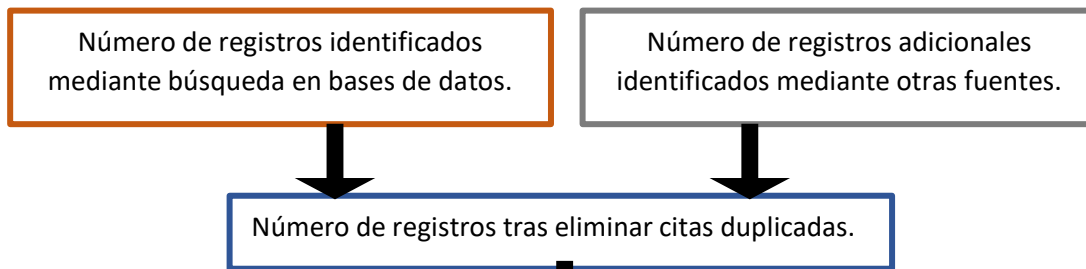
10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



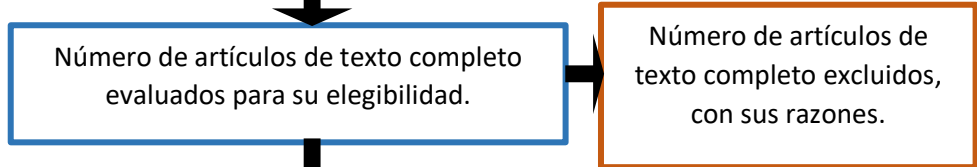
IDENTIFICACIÓN



CRIBADO



IDONEIDAD



INCLUSIÓN

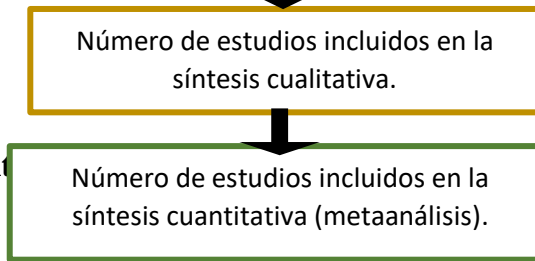


Figura 1. Procedimiento de búsqueda de literatura para el análisis (Urrútia & Bonfill, 2005).

Se comienza por un enfoque bien estructurado con respecto al tema de investigación, en este caso es una revisión sistemática de literatura con análisis bibliométrico de las propiedades mecánicas en

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



frutos que dará paso a la recopilación de artículos relacionados con dicho tema, empleando las bases de datos Scopus® y Web of Science© 2021 Clarivate, utilizadas en varios estudios bibliométricos publicados anteriormente; siguiendo las directrices de los elementos de Información Preferidos para Revisiones Sistemáticas y Metaanálisis (PRISMA), que ilustra los resultados de las búsquedas bibliográficas y el proceso de selección de artículos. Para después proceder con la organización de la información recopilada que facilite su interpretación y análisis de datos haciendo uso de gráficos diseñados con el programa R Bibliometrix 3.0 software: Biblioshiny.

Las palabras clave utilizadas derivaron de sinónimos relacionados con las propiedades mecánicas en frutos y su respuesta fisiológica bajo compresión mecánica, cada palabra clave fue avalada en la página web de la biblioteca de ScienceDirect, la cual proporciona definiciones de conceptos y descripciones generales para temas de investigación.

Debido a que el tema de estudio en esta investigación ha sido poco indagado, para la búsqueda de artículos, no se usó el filtro “fecha de publicación”, logrando así recopilar artículos publicados hasta abril 2021. Los criterios de búsqueda con sus respectivos separadores booleanos fueron: "Mechanical damage" OR "Mechanical properties" OR "Physicochemical properties" OR "Metabolism") AND ("Anisotropy" OR "Compression load") AND ("Fruit" OR "Maturity stage" OR "Respiratory rate. Dicho criterio de búsqueda fue utilizado para la recuperación de artículos en Scopus® y Web of Science© 2021 Clarivate, obteniendo resultados poco variables.

Resultados

El resultado de la búsqueda de información a través de las diferentes fases de la revisión sistemática inicialmente identificó 29 artículos en Scopus® y 10 en Web of Science, teniendo un total de 39 resultados que al identificarlos por repetición dieron lugar a 29 artículos elegibles, de los cuales sólo 7 se incluyeron en los análisis cuantitativos.

Cuadro 1. Información general de los documentos incluidos en el análisis

Descripción	Resultados
Línea de tiempo	2013:2019
Fuentes (revistas)	7
Documentos	7

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



inifap



Promedio de años de publicación	4.71
Promedio de citas por documentos	8.714
Autores	32
Autores por documento	4.57

Fuente: Elaboración propia con datos de los documentos recuperados.

En el cuadro 1 se observa que los artículos científicos publicados sobre el tema abarcan desde 2013 hasta 2019, los siete documentos que se incluyeron en este análisis se publicaron en siete diferentes revistas científicas indizadas en Scopus. Es importante resaltar que un artículo científico referente a este tema se publica en promedio cada 5 años y a su vez estos son distribuidos en un total de 32 investigadores, resultando que por cada artículo científico participan en promedio 4 autores. Estos artículos mostraron una citación media por documento de aproximadamente 9 citas comprendidas en el periodo 2013-2019.

El mapa de la figura 2 muestra mediante colores la distribución de los países en donde se han publicado documentos de esta índole, y a manera de resaltar los países con respecto al mayor número de citas y documentos publicados, son representados de color más oscuro con relación a los que tienen menos citas o han publicado menor cantidad de documentos coloreándolos con franjas más tenues según su impacto (Van Eck & Waltman, 2020).

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021

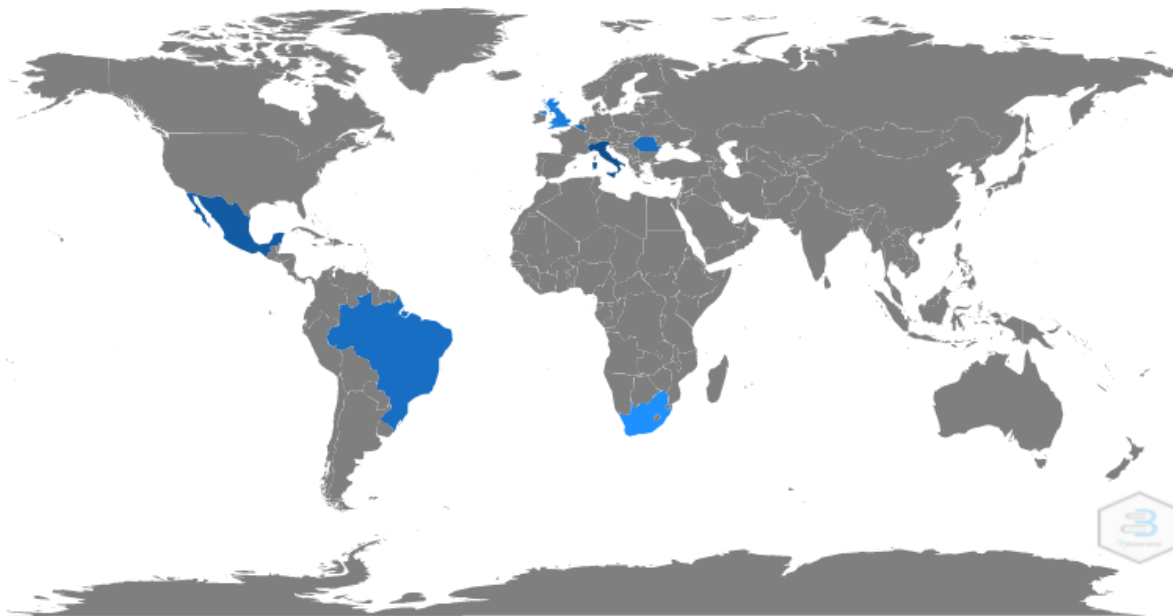


Figura 2. Mapa de la producción científica por país en el tema de las propiedades mecánicas en frutos (Herramienta de R, Bibliometrix: Biblioshiny, 2021).

El rango de citas obtenidas a partir de los 10 autores fue de 9 a 21, que han contribuido en este tema, ordenados de acuerdo con su índice H y el número de citas que han recibido. Con base en esta medición se observa que los autores principales en la investigación relacionada con la temática de las propiedades mecánicas del tejido de frutos en pruebas de compresión axial y la relación que estas guardan o no con el metabolismo son: Pérez López, A. y colaboradores con un índice H de 1 y 21 citas en total ligados a una publicación realizada en 2014 en Journal of Food Engineering (Cuadro 2). Este artículo habla de la anisotropía en frutos que son sometidos a fuerzas de compresión y hace hincapié a la importancia de conocer las propiedades físicas, fisiológicas y mecánicas de los frutos, para mejorar las prácticas postcosecha.

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



Cuadro 2. Principales autores y coautores relacionados con el índice H

Autores	H índice	Número de publicaciones	Número de citas	Año de Publicación
Pérez López A.	1	1	21	2014
Villaseñor Perea C.A.	1	1	21	2014
Espinosa Solares T.	1	1	21	2014
Hernández Gámez L.H.	1	1	21	2014
Lobato Calleros C.	1	1	21	2014
Chávez Franco S.H.	1	1	21	2014
Fadiji T.	1	1	16	2018
Opara U.L.	1	1	16	2018
Gaiotti F.	1	1	9	2013
Giacosa S.	1	1	9	2013

Fuente: Elaboración propia con datos de los documentos recuperados.

Conclusiones

La revisión sistemática de literatura con análisis bibliométrico es una metodología confiable y eficiente para realizar el análisis de la información científica que se genera a nivel mundial sobre una temática en específico. Además, la metodología PRISMA puede ser muy valiosa si se aplica de manera correcta y se establecen claramente las premisas de la investigación o revisión y análisis bibliográfico. Como se realizó en este estudio en donde existe una producción de artículos científicos, a nivel mundial, muy pobre con relación a la temática de las propiedades mecánicas en pruebas de compresión axial en frutos. La información encontrada da pauta para realizar un análisis más profundo para conocer el factor que está ocasionando esta baja producción científica en torno al tema.

Agradecimientos

Agradecemos al comité de proyectos convencionales de la DGIP (Dirección General de Investigación y Posgrado), de la Universidad Autónoma Chapingo por las subvenciones financieras de este estudio.

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



inifap



Literatura citada

- Everett, K. R., Hallett, I. C., Rees-George, J., Chynoweth, R. W., & Pak, H. A. (2008). Avocado lenticel damage: The cause and the effect on fruit quality. *Postharvest Biology and Technology*, 48(3), 383–390. <https://doi.org/10.1016/j.postharvbio.2007.09.008>
- García-Perdomo, H. A. (2015). Conceptos fundamentales de las revisiones sistemáticas/metaanálisis. *Urología Colombiana*, 24(1), 28–34. <https://doi.org/10.1016/j.uroco.2015.03.005>
- Herrera González, J. A., Venegas González, E., & Madrigal Huendo, L. (2017). Proporciones de daños mecánicos y su efecto en calidad poscosecha de aguacate ‘Hass.’ *Revista Mexicana de Ciencias Agrícolas*, 9, 3897–3909. <http://www.redalyc.org/articulo.oa?id=263153823005>
- Nishiyama, K., Guis, M., Rose, J. K. C., Kubo, Y., Bennett, K. A., Wangjin, L., Kato, K., Ushijima, K., Nakano, R., Inaba, A., Bouzayen, M., Latche, A., Pech, J. C., & Bennett, A. B. (2007). Ethylene regulation of fruit softening and cell wall disassembly in Charentais melon. *Journal of Experimental Botany*, 58(6), 1281–1290. <https://doi.org/10.1093/jxb/erl283>
- Opara, U. L., & Pathare, P. B. (2014). Bruise damage measurement and analysis of fresh horticultural produce-A review. *Postharvest Biology and Technology*, 91, 9–24. <https://doi.org/10.1016/j.postharvbio.2013.12.009>
- Urrútia, G., & Bonfill, X. (2010). Declaración PRISMA: una propuesta para mejorar la publicación de revisiones sistemáticas y metaanálisis. *Medicina Clínica*, 135(11), 507–511. <https://doi.org/10.1016/j.medcli.2010.01.015>
- Van Eck, N. J., & Waltman, L. (2020). VOSviewer Manual version 1.6.16. *Univeristeit Leiden, November*, 1–52. <https://www.vosviewer.com/download/f-33t2.pdf>

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



iniqap



Metodología para el cálculo de transferencia de energía térmica en un alambique de producción de mezcal tipo artesanal

Regina Marín-Cabrera³², Artemio Pérez-López³³, Carlos Alberto Villaseñor-Perea³², Arturo López Mancera³⁴

Resumen

Se elaboró el cálculo de transferencia de energía térmica en un alambique de cobre en el proceso de elaboración de mezcal tipo artesanal, con el objetivo de encontrar la energía necesaria para obtener la temperatura de saturación del fluido y la pérdida de calor en la etapa de condensación. Para la obtención de los parámetros de entrada se tomaron mediciones de temperatura en un equipo de destilación simple en el Sitio de Xitlapehua, Miahuatlán, Oaxaca. Se tomaron datos de temperatura en la montera del destilador, en la entrada del serpentín de enfriamiento, y en el estanque contenedor del agua de enfriamiento. Se obtuvo como resultado una temperatura superficial necesaria de 557.4 K para lograr un flujo pico de calor de 1,171.6 kW·m⁻². En el proceso de destilado se obtuvo una pérdida energética de 370.66 J·s⁻¹. En la condensación se obtuvo una pérdida energética de 95 207 J·s⁻¹ considerando una temperatura superficial del serpentín de 322.5 K. Durante la destilación se observó un mayor porcentaje de alcohol en el destilado inicial y ésta disminuyó gradualmente hasta en el destilado final. Se destaca que la temperatura juega un papel muy importante, ya que cuando se incrementa excesivamente, la concentración de alcohol tiende a bajar a causa de la evaporación de componentes indeseados. Por lo tanto, se recomienda implementar mecanismos de control en el equipo para tener cuidado la temperatura de alimentación.

Palabras clave: transferencia de calor, alambique, mezcal, condensador.

Summary

The calculation of thermal energy transfer in a simple still was elaborated, to find the energy necessary to obtain the saturation temperature of the fluid and the loss necessary for condensation. To obtain the input parameters, temperature measurements were taken in a simple distillation

³² Posgrado en Ingeniería agrícola y Uso Integral de Agua, Universidad Autónoma Chapingo, al20126194@chapingo.mx.

³³ Posgrado en Ciencias y Tecnología Agroalimentaria, Universidad Autónoma Chapingo, aperezl@chapingo.mx

³⁴ Posgrado en Tecnología de Granos y Semillas, Universidad Autónoma Agraria Antonio Narro

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



inifap



equipment at the Xitlapehua Oaxaca Site. The data taken were temperature in the hood of the still, temperature at the inlet of the cooling coil, and temperature in the tank containing the cooling water. The equations used were taken from the Heat and Mass Transfer book, obtaining a necessary surface temperature of 557.4 K to achieve a peak heat flux of $1,171.6 \text{ kW} \cdot \text{m}^{-2}$. In the distillation process, an energy loss of $370.66 \text{ J} \cdot \text{s}^{-1}$ was obtained. In the condensation, an energy loss of $95,207 \text{ J} \cdot \text{s}^{-1}$ was obtained, when taking a surface temperature of the coil of 322.5 K. Throughout the process, a higher percentage of alcohol was found at the beginning, and a poorer concentration at the end. It is highlighted that temperature plays a very important role since when the alcohol concentration is increased excessively it tends to drop due to the evaporation of unwanted components. Therefore, it is advisable to have a control in the feeding temperature.

Keywords: heat transfer, alembic, mezcal, condenser.

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



Introducción

La destilación es un proceso que consiste en separar un fluido, elevando la temperatura hasta su punto de ebullición, para después condensarlo (Spaho, 2017; Treybal, n.d.). El punto de ebullición varía según el fluido, y esto va en función de la densidad, ya que fluidos menos densos tienen a evaporarse más fácilmente, aunque cuando se encuentran acompañados de otros componentes se pueden comportar de una manera distinta (Prado-Ramírez et al., 2005). La destilación se ha convertido en un proceso muy importante debido a que hace posible la obtención de diversos fluidos como bebidas embriagantes (coñac, tequila, vino, mezcal, etc.), combustibles, tratamiento de aguas y obtención de esencias (Cerón-Salazar, 2009; Padro-Ramírez et al., 2014; Sacher et al., 2013).

Los métodos de destilación son distintos según la bebida que se desea obtener ya que cada mezcla tiene requisitos únicos para el correcto destilado (Spaho, 2017). Para bebidas con un grado de alcohol mayor y de mayor pureza, se emplean equipos más sofisticados, pero de mayor costo, como destiladores de torre. Darıcı et al. (2018) implementaron triple destilación de torre para obtener alcohol al 75%, a partir de uvas. El proceso de obtención tardó un periodo de 26 a 36 horas. Un dato interesante que encontraron estos autores fue la disminución de la cantidad de ésteres, terpenos y aldehídos y fenoles volátiles de las fracciones intermedias, con el aumento de destilaciones.

Dentro de las bebidas embriagantes de México resalta el tequila y el mezcal por su denominación de origen (Carrillo-Trueba, 2007). Destacando por sus procesos artesanales la bebida virtuosa del mezcal (Durán-García, et al., 2007). Incluso la destilación es un proceso un tanto artesanal, pues la leña empleada para el proceso aporta un mejor aroma y sabor al producto final. Durante el proceso de destilación es significativo tener en cuenta dos procesos: evaporación y condensación, ya que ambos fenómenos juegan papeles muy importantes en el proceso y se debe tenerlos en cuenta por medio de un balance energético para una mejora en el proceso (Sacher et al., 2013), por lo que se propone la elaboración de un análisis de transferencia de calor durante el proceso en un palenque de mezcal. Esperando que los resultados arrojen varios aspectos importantes a tomar en cuenta durante el proceso para la optimización del proceso, dentro de ellos el comportamiento de la temperatura.

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



inifap



Materiales y métodos

Ubicación

El cálculo se realizó para un equipo ubicado en el Sitio de Xitlapehua, Oaxaca, que se encuentra a una latitud de 16° 21' 3" Norte y longitud: 96° 31' 58" Oeste, a una altura de 1570 msnm, y a una presión atmosférica de 83.8405 kPa.

Descripción del modelo

El modelo consta de un destilador simple de cobre en forma cilíndrica de 0.6 m de diámetro por 75 cm de altura, con un cilindro adyacente de 35.5 cm de diámetro, acoplado a un casquete polar de 10 cm de altura donde se forma el flujo de vapor (ver **Figura 7**) que conecta a una tubería de 2 in, con una longitud de 1.5 metros, desembocando el fluido a un plato del que parte un serpentín de 48 centímetros de 5 vueltas (**Figura 8**).

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



inifap

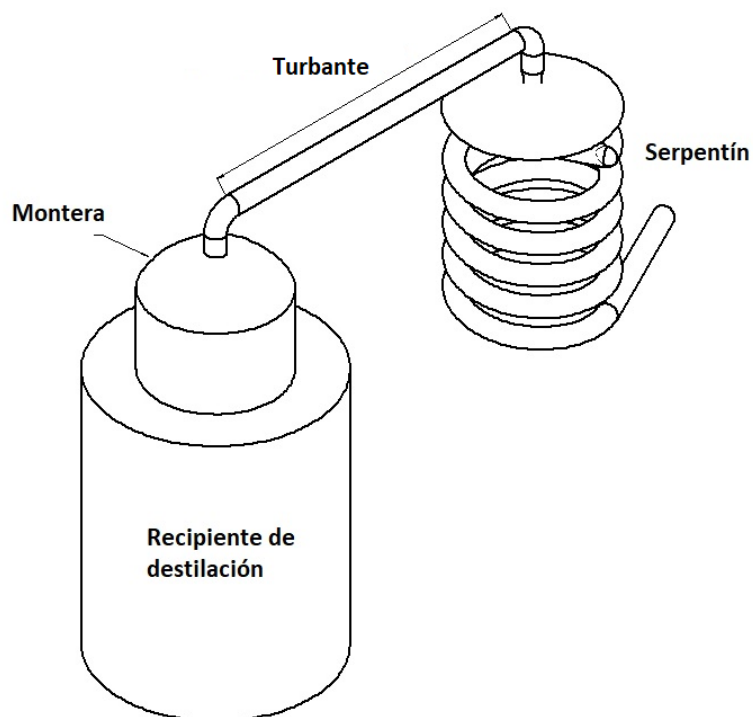


Figura 6. Geometría completa del destilador.

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



iniqap

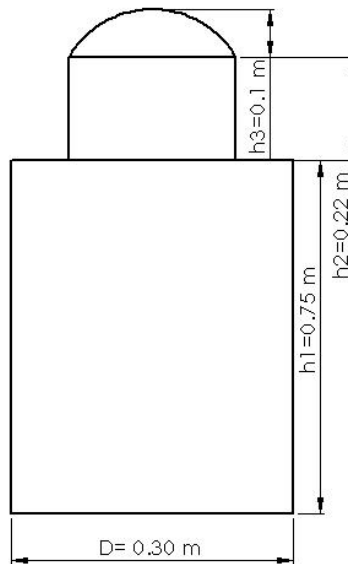


Figura 7. Geometría del destilador.

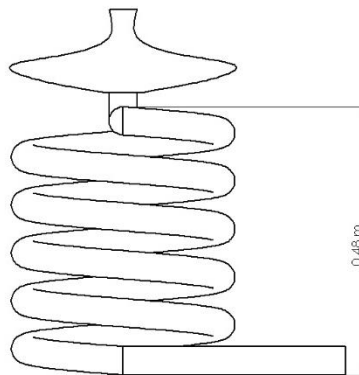


Figura 8. Geometría del sistema de enfriamiento del destilador.

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



iniqap



Instrumentación

Se empleó un sensor infrarrojo Testo 835-H1 para tomar mediciones superficiales de temperatura, un densímetro para alcohol, y para mediciones de temperatura en la entrada del serpentín, se empleó un Data Logger Testo 175T3.

Cálculos matemáticos

El destilador es considerado un sistema donde se cumple el principio de conservación de la energía. Por lo tanto, un balance energético en el sistema se expresa de acuerdo con la ecuación (1):

$$E_{entrada} - E_{salida} = \Delta E_{sistema} \quad (1)$$

De tal forma que la entrada de energía se lleva a cabo durante el proceso de evaporación (ganancia energética) y la salida de energía se lleva a cabo durante la condensación (perdida de energía). A continuación, se analiza el sistema por separado, teniendo en cuenta las propiedades del agua como fluido de interés, con la finalidad de idealizar el modelo y hacerlo menos complejo.

Evaporación

La ebullición es el proceso mediante el cual un fluido líquido pasa a estado gaseoso. Esto sucede cuando el fluido entra en contacto con una temperatura que está por encima de su temperatura a punto de saturación. Este proceso comienza con la formación de burbujas de vapor que tienden a dirigirse hacia la superficie libre de líquido, y en este recorrido las burbujas de vapor transmiten el calor al fluido líquido (Cengel, 1996). Para llegar a este punto, es necesario que la mezcla llegue a su temperatura a punto de saturación y después se mantenga hasta obtener la destilación entera del producto. En este proceso la temperatura tiene que permanecer constante dentro y fuera del recipiente, pudiendo asumir el sistema como estacionario.

De acuerdo con la ecuación 2, se obtiene el flux máximo de calor que existe en el recipiente de destilado:

$$\dot{q}_{m\acute{a}x} = C_{cr} \cdot h_{fg} \cdot [g \cdot \rho_v^2 \cdot (\rho_l - \rho_v)]^{\frac{1}{4}} \quad \left[\frac{W}{m^2}\right] \quad (2)$$

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



Donde: C_{cr} – Constante, adim., h_{fg} – Entalpia de vaporización, $J \cdot kg^{-1}$, g – aceleración gravitacional, $m \cdot s^{-2}$, ρ_l – densidad del líquido, $kg \cdot m^{-3}$, ρ_v – densidad del vapor, $kg \cdot m^{-3}$.

Después de haber obtenido el flujo máximo de calor, se obtiene la temperatura superficial necesaria para obtener dicha energía (Ecuación 5), despejándola de la relación de Rohsenow (Ecuación 3).

$$\dot{q}_{nucleada} = \mu_l h_{fg} \left[\frac{g(\rho_l - \rho_v)}{\sigma} \right]^{\frac{1}{2}} \left[\frac{c_{pl}(T_s - T_{sat})}{C_{sf} h_{fg} Pr_l^n} \right]^3 \left[\frac{W}{m^2} \right] \quad (3)$$

Si

$$\dot{q}_{nucleada} \sim \dot{q}_{m\acute{a}x} \quad (4)$$

$$t_s = \left(\frac{\dot{q}_{m\acute{a}x}}{\mu_l h_{fg} \left[\frac{g(\rho_l - \rho_v)}{\sigma} \right]^{\frac{1}{2}}} \right)^{\frac{1}{3}} \cdot C_{sf} h_{fg} Pr_l^n + t_{sat} \quad \left[\frac{W}{m^2} \right] \quad (5)$$

Donde: μ_l – viscosidad del líquido, $kg \cdot m^{-1} \cdot s^{-1}$, h_{fg} – Entalpia de vaporización, $J \cdot kg^{-1}$, g – aceleración gravitacional, $m \cdot s^{-2}$, ρ_l – densidad del líquido, $kg \cdot m^{-3}$, ρ_v – densidad del vapor, $kg \cdot m^{-3}$, σ – tensión superficial de la interfase liquido-vapor, $N \cdot m^{-1}$, C_{pl} – calor especifico del líquido, $J \cdot kg^{-1} \cdot K^{-1}$, T_s – temperatura superficial del calentador, K , T_{sat} – temperatura de saturación del fluido, K , C_{sf} – constante experimental dependiente de la combinación superficie-fluido, Pr_l – número de Prandtl del líquido, n – constante experimental que depende del fluido.

Tabla 1. Propiedades termo-físicas del agua en condiciones de saturación.

$\mu_l = 0.297 \times 10^{-3} \text{ kg} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$	$\rho_v = 0.5045 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$	$T_{sat} = 368.15 \text{ K}$
$h_{fg} = 2270000 \text{ J} \cdot \text{kg}^{-1}$	$\sigma = 0.06 \text{ N} \cdot \text{m}^{-1}$	$C_{sf} = 0.130$
$g = 9.81 \text{ m} \cdot \text{s}^{-2}$	$C_{pl} = 4212 \text{ J} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$	$Pr_l = 1.85$
$\rho_l = 961.5 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$		$n = 1$

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



inifap



Tomado de: Tabla A-9 (Cengel, 1996).

Durante la evaporación es necesario que la energía suministrada sea equivalente al flujo pico de calor, sin embargo, para que esto suceda el sistema tiene que permanecer estable en cuanto a pérdidas y ganancias energéticas. Se estipula que la pérdida energética en este proceso está dada por medio de la ley de Fourier (ecuación 6), la cual está en función de la resistencia opositora en el transcurso del recorrido de esta.

$$r_t = \frac{\ln\left(\frac{r_2}{r_1}\right)}{2\pi \cdot h \cdot k_{cu}} + \frac{\ln\left(\frac{r_3}{r_2}\right)}{2\pi \cdot h \cdot k_{aislante}} \quad (6)$$

Donde: r_t – sumatoria de las resistencias de transferencia de calor, r_1, r_2, r_3 – radio 1, 2 y 3 (Ver Figura 9), h – altura del recipiente, m , k_{cu} – conductividad térmica del cobre, $W \cdot m^{-1} \cdot K^{-1}$, $k_{aislante}$ - conductividad térmica del ladrillo, $W \cdot m^{-1} \cdot K^{-1}$.

Y la pérdida energética está dada por la ecuación 7. (7)

$$Q = \frac{T_i - T_a}{r_t}$$

Donde: Q – calor transferido por el recipiente, W , T_i – temperatura del interior del recipiente, K , T_a – temperatura del ambiente, K .

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



inifap

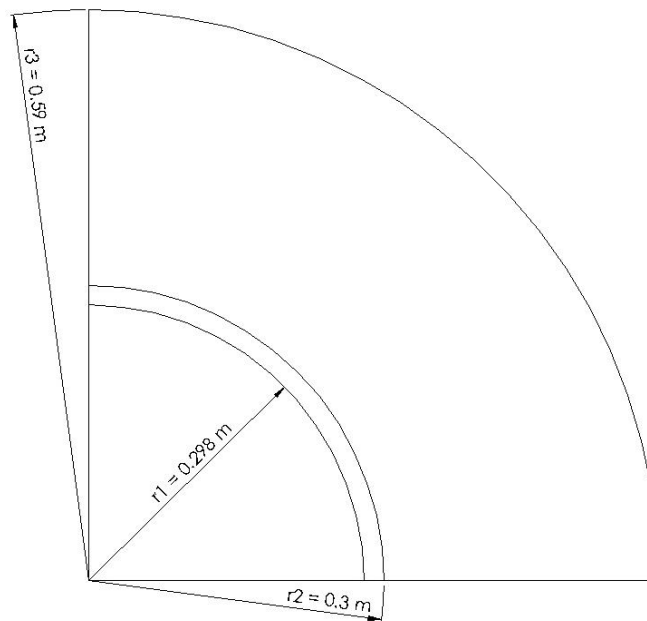


Figura 9. Sección del recipiente de destilado.

Condensación

La condensación se estudia el intercambio de calor en el serpentín. Anteriormente ya se ha descrito esta parte del sistema así que no se retomará de nuevo, aunque es importante recordar la geometría, así como sus medidas y materiales de construcción pues de ello dependerá la transferencia de calor. Cabe recalcar que la transferencia de energía circula del medio que tiene la temperatura mayor hacia el cuerpo de menor temperatura y la transferencia se detendrá cuando ambos cuerpos lleguen a un equilibrio (Cengel, 1996).

Al obtener la evaporación, el vapor obtenido es conducido por medio de un ducto hacia el sistema de enfriamiento. El vapor tenderá a condensarse gracias a la formación de una película sobre la superficie (serpentín), donde se realizará la transferencia de calor hasta llegar a una temperatura por debajo de la temperatura a punto de saturación del vapor. En este punto comenzará la formación

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



inifap



de película en la parte superior del serpentín y a medida que transcurra el tiempo, el fluido tenderá a bajar gracias a la gravedad. En el proceso de la condensación, el fluido tiene una pérdida de energía, también conocido como calor latente de vaporización h_{fg} , y este es transferido hacia la superficie más próxima, la cual será absorbida por el agua de enfriamiento, la cual tiene que estar a una temperatura menor para que el proceso pueda realizarse.

La transferencia de energía se calcula con la ecuación 8.

$$\dot{Q} = h \cdot (2 \cdot \pi \cdot r \cdot l) \cdot (T_{sat} - T_s) \quad (8)$$

Donde: \dot{Q} – razón de transferencia de calor, W, h – coeficiente de transferencia, $W \cdot m^{-2} \cdot K^{-1}$, r – radio, m, l – longitud de la tubería, m, T_{sat} – temperatura a punto de saturación, K, T_s – temperatura de la superficie.

Donde el coeficiente de transferencia de calor se calcula se puede estimar con la ecuación 9.

$$h = 0.555 \left[\frac{g \cdot \rho_l (\rho_l - \rho_v) k_l^3}{\mu_l (T_{sat} - T_s)} \left(h_{fg} + \frac{3}{8} Cpl (T_{sat} - T_s) \right) \right]^{\frac{1}{4}} \quad (9)$$

Donde: g – gravedad, $m \cdot s^{-2}$, ρ_l – densidad del fluido líquido, $kg \cdot m^{-3}$, ρ_v – densidad del fluido vapor, $kg \cdot m^{-3}$, μ_l – viscosidad cinemática del fluido líquido, $kg \cdot m^{-1} \cdot s^{-1}$, T_{sat} – temperatura a punto de saturación, K, T_s – temperatura de la superficie, K, h_{fg} – entalpía de vaporización, $kJ \cdot kg^{-1}$, Cpl – calor específico, $J \cdot kg^{-1} \cdot K^{-1}$.

Resultados y discusión

Para la obtención del resultado de las ecuaciones, fue necesario realizar una primera etapa de mediciones de tres repeticiones, en la que se monitoreo la temperatura de la montera, así como el interior del serpentín (al inicio), y la temperatura del agua del sistema de enfriamiento. En la Figura 10 se plasma el comportamiento de la temperatura en la montera a lo largo de la destilación en cada proceso de destilación medido.

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



inifap

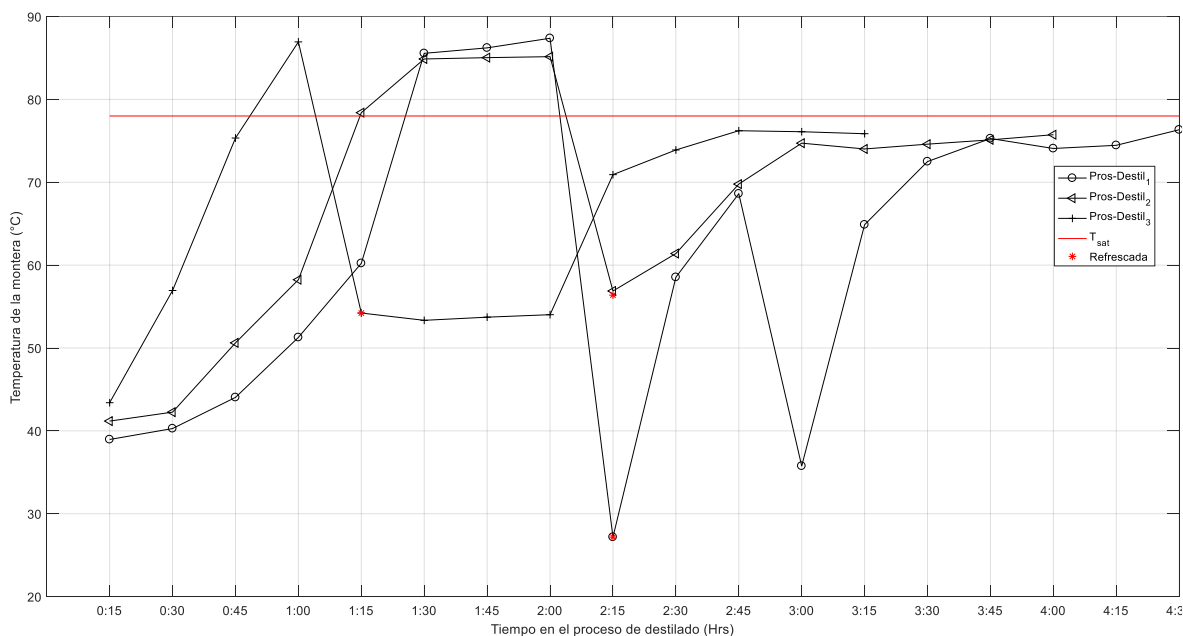


Figura 10. Comportamiento de la temperatura en la montera.

Como se puede observar en la Figura 10, la temperatura inicial parte alrededor de los 40 °C, ya que se ha guardado temperatura del anterior proceso. Después se nota un incremento en la temperatura hasta oscilar entre 80 °C y 90 °C (inicia la destilación) y se mantiene constante por un breve lapso. Después se observa una caída de temperatura debido a que cuando la temperatura supera el punto de saturación del fluido de interés, otros fluidos comienzan a destilarse, lo que disminuye la concentración de alcohol. Por ello se realiza un proceso llamado “refrescada” que consiste en enfriar la montera, de tal forma que los fluidos de mayor densidad tenderán a bajar y los fluidos más ligeros (alcohol etílico) seguirán evaporándose. Aunque puede dejar de hacerlo, si la temperatura baja del punto de saturación del fluido a destilar.

Y en la Figura 11 se plasma el comportamiento de los 3 tipos de mediciones del sistema durante la destilación.

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



inifap

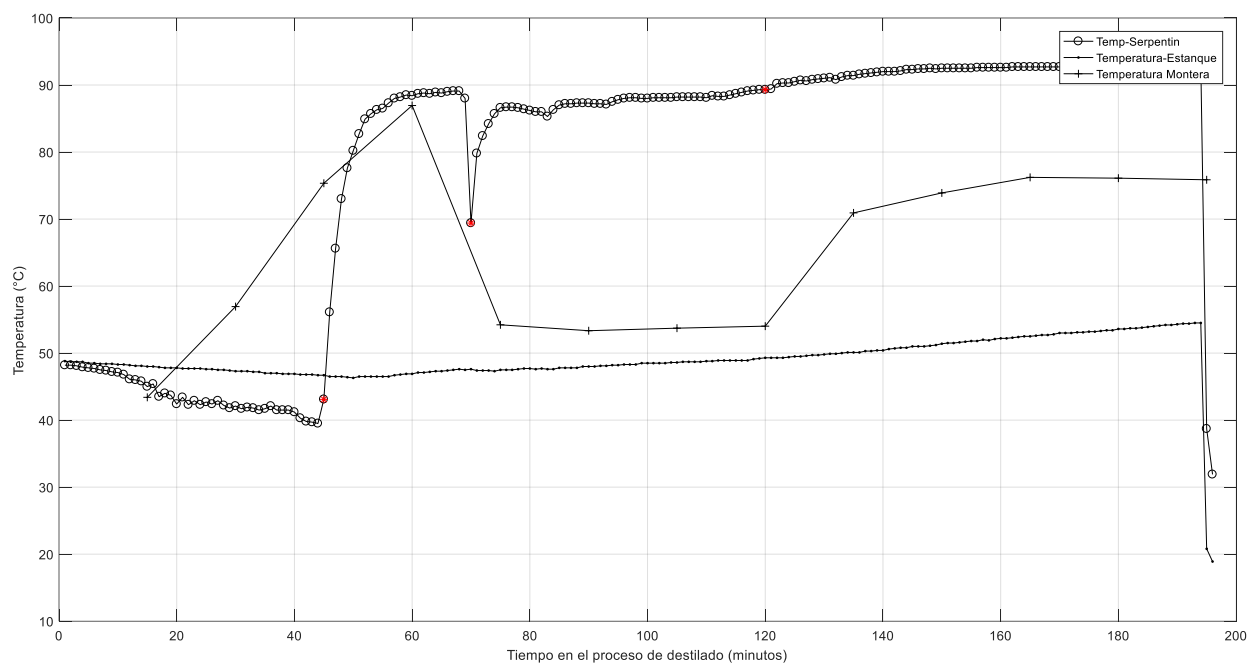


Figura 11. Comportamiento de la temperatura en los tres puntos de mediciones (montera, serpentín y estanque de enfriamiento).

En la Figura 11 se puede observar que la temperatura dentro del serpentín ronda de 85 °C a 95 °C, y la temperatura del agua de enfriamiento va de 47 °C a 55°C.

Porcentaje de alcohol

El porcentaje de alcohol del mezcal vario a lo largo del proceso, siendo más alto al inicio de la destilación. La toma de mediciones fue al azar y se presentan en la **Tabla 2**.

Tabla 2. Comportamiento del alcohol a lo largo del tiempo en cada proceso.

Primera destilación		Segunda destilación		Tercera destilación	
Tiempo (min)	Cont. alcohol (%)	Tiempo (min)	Cont. alcohol (%)	Tiempo (min)	Cont. alcohol (%)
00	60	00	59	00	52.5
15	45	30	46	15	41
30	38	45	41.5	30	57
45	47	60	46	45	50

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



inifap



60	38	80	37.5	60	44
120	18	120	19.5	75	37.5
150	13	150	13	90	19.3
175	8			105	12.5
				120	12
				135	8.5
				150	7.5
<input type="checkbox"/> Mezcal			<input type="checkbox"/> Colas		

Como se puede observar en la **Tabla 2**, el tiempo promedio del proceso es de 2.5 horas, sin embargo, no todo el fluido es aprovechable. Una medida de separación entre el mezcal y las colas es el contenido de alcohol, aunque también interfiere el contenido de otras sustancias.

Evaporación

Se resolvieron las ecuaciones correspondientes y se obtuvo un flujo pico de calor de $1,171.6 \text{ kW}\cdot\text{m}^{-2}$ necesario para alcanzar la temperatura a punto de saturación del fluido y comenzar a destilar. Fijando la temperatura a punto de saturación del fluido en 368.15 K, la temperatura de superficie necesaria para alcanzar dicha temperatura interna resultó en 557.4 K. Sin embargo, durante este proceso la pérdida energética que tiene el recipiente es de 370.66 W.

Condensación

Para la condensación se empleó algo distinto, ya que involucra un fluido en continuo movimiento (vapor). Para el cálculo de la transferencia de energía, es necesario obtener el número de Reynolds, para determinar el tipo de fluido. El fluido interno se caracterizó como flujo laminar con un coeficiente de 1.93. Con dicho dato, se eligió la ecuación 9, para condensación en película dentro de tubos horizontales. El coeficiente de transferencia obtenido fue de $2\ 638.5 \text{ W}$ y la transferencia de energía dio como resultado $95\ 207 \text{ W}$.

Conclusiones

Se obtuvieron mediciones de temperatura dentro del serpentín, así como en la montera y en el agua de enfriamiento. Gracias a dichas mediciones se realizó el cálculo de transferencia de energía en un destilador simple de aproximadamente 200 litros de capacidad, obteniendo una temperatura superficial necesaria de 557.4 K para lograr un flujo pico de calor de $1,171.6 \text{ kW}\cdot\text{m}^{-2}$. En el proceso de destilado se obtuvo una pérdida energética de $370.66 \text{ J}\cdot\text{s}^{-1}$ en el recipiente que almacena el tepache, dicha energía tiene que ser suministrada por la fuente de calor para que el proceso no se

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



inifap



vea interrumpido, sin embargo, no se debe exceder pues resultaría contraproducente, en el sentido de que se comenzarían a destilar fluidos indeseados.

Gracias a las mediciones de los grados de alcohol a lo largo del proceso se encontró un mayor porcentaje al inicio, y una concentración más pobre al final, cabe destacar que la temperatura juega un papel muy importante ya que cuando se incrementa exageradamente, la concentración de alcohol tiende a bajar por la razón de que se evapora una gran cantidad de agua y otros componentes, lo que aminora su contenido. Por lo que se aconseja tener un control en la temperatura de alimentación.

Por otra parte, el sistema de enfriamiento tiene una pérdida de energía de $95\ 207\ \text{J}\cdot\text{s}^{-1}$, cuando el agua de enfriamiento tiene una temperatura de $49\ ^\circ\text{C}$, sin embargo, la transferencia de energía cambia cuando esta se modifica.

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



inifap



Referencias

- Carrillo-Trueba, L.-A. (2007). Los destilados de agave en México y su denominación de origen. *Ciencias*, 87, 41–49.
- Cengel, Y. A. (1996). *Transferencia de calor y masa. Un enfoque practico*. (M. G. Hill, Ed.), *Biotechnology Letters* (Tercera ed, Vol. 18). 2007. <https://doi.org/10.1007/BF00129346>
- Cerón-Salazar, I.-X. (2009). Separación De Metabolitos De Los Aceites Esenciales De Eucalipto Y Cidrón Por Destilación Molecular, 1–133. Retrieved from <http://www.bdigital.unal.edu.co/2869/>
- Darıcı, M., Bergama, D., & Cabaroğlu, T. (2018). Effect of triple pot still distillation on the volatile compositions during the Rakı production. *Journal of Food Processing and Preservation*, 43(6), 1–11. <https://doi.org/10.1111/jfpp.13864>
- Durán-García, H. M., González-Galván, E. J., & Matadamas-Ortíz, P. (2007). Mechanization process in the production of mezcal. *Journal of Food, Agriculture and Environment*, 5(3–4), 32–35.
- Padro-Ramírez, R. (2014). Tequila and mezcal distillation technology : Similarities and differences. *Sustainable and Integral Exploitation of Agave*.
- Prado-Ramírez, R., Gonzáles-Alvarez, V., Pelayo-Ortiz, C., Norberto Casillas, Estarrón, M., & Gómez-Hernández, H.-E. (2005). The role of distillation on the quality of tequila. *International Journal of Food Science and Technology*, 40(7), 701–708. <https://doi.org/10.1111/j.1365-2621.2005.00983.x>
- Sacher, J., García-Llobodanin, L., López, F., Segura, H., & Pérez-Correa, J. R. (2013). Dynamic modeling and simulation of an alembic pear wine distillation. *Food and Bioproducts Processing*, 91(4), 447–456. <https://doi.org/10.1016/j.fbp.2013.04.001>
- Spaho, N. (2017). Distillation Techniques in the Friu. In *Destillation Innovative Applications and Modeling* (Vol. Chapter 6, p. 24).
- Treybal, R. E. (n.d.). Operaciones de transferencia de masa.

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



inifap



El aislado de proteína de huitlacoche (*Ustilago maydis* D.C. Corda) desde una perspectiva fisicoquímica

*Kassandra Bonnet*³⁵, *Consuelo Lobato Calleros*³⁶, *Blanca Elizabeth Hernández Rodríguez*³⁶,
*Landy Hernández Rodríguez*³⁶

Resumen

Las proteínas de origen fúngico constituyen un tema de gran interés tanto para los consumidores como para la industria de los alimentos, por sus cualidades nutraceuticas y su sistema de producción sostenible. Con base en lo anterior, el objetivo de este trabajo fue aislar la proteína del huitlacoche para su caracterización fisicoquímica en condiciones específicas, con un pH de mayor solubilidad 10 y de menor solubilidad 3.5. El análisis de potencial zeta (ζ) de dicha proteína mostró un punto isoeléctrico de 2.8. La digestibilidad *in vitro* de aislados de proteína de huitlacoche crudo (APH), cocido (APHC) y frito (APHF) fue de 70.67 ± 0.79 %, 75.23 ± 0.16 % y 83.0 ± 0.2 % respectivamente. Se obtuvo un alto contenido de compuestos fenólicos totales (CFT) y una alta actividad antioxidante por DPPH y ABTS, los cuales fueron afectados por la hidrólisis enzimática y el tratamiento térmico. Dichos resultados demostraron las cualidades del aislado de proteína de huitlacoche que podrían ser aprovechadas en el diseño de alimentos nutraceuticos.

Palabras clave

Huitlacoche, aislado de proteína, actividad antioxidante

Abstract

Fungal proteins are a subject of great interest for both consumers and the food industry, due to their nutraceutical qualities and their sustainable production system. Based on the above, the objective of this work was to isolate huitlacoche protein for its physicochemical characterization under

³⁵ Maestría, bonnetkassandra@gmail.com

³⁶ Doctorado, Departamento de Preparatoria Agrícola, Universidad Autónoma Chapingo, km. 38.5, Carretera México-Texcoco, 56230 Texcoco, Méxic. ac2392@chapingo.mx, blancaeli_hr@yahoo.com.mx, landy14hr@yahoo.com.mx

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



inifap



specific conditions, with a pH of higher solubility 10 and lower solubility 3.5. Zeta potential analysis (ζ) of this protein showed an isoelectric point of 2.8. The *in vitro* digestibility of raw (APH), cooked (APHC) and fried (APHF) huitlacoche protein isolates was $70.67 \pm 0.79 \%$, $75.23 \pm 0.16 \%$ and $83.0 \pm 0.2 \%$, respectively. A high content of total phenolic compounds (CFT) and high antioxidant activity were obtained by DPPH and ABTS methods and were affected by enzymatic hydrolysis and the heat treatment. These results demonstrated the qualities of huitlacoche protein isolate that could be exploited in the production of nutraceutical foods.

Keywords

Huitlacoche, protein isolate, antioxidant activity

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



inifap



Introducción

En estas últimas décadas se ha incrementado el interés hacia el consumo de proteínas de origen distinto a aquellas de origen animal (González et al., 2021), a pesar de contener todos los aminoácidos esenciales (Kumar et al., 2021). Como fuentes proteicas alternativas se consideran los vegetales como cereales, pseudocereales y semillas (Kumar et al., 2021), así como los hongos (González et al., 2021) que presentan numerosas ventajas de impacto ambiental, económica, nutricional y funcional, en cuanto a la disminución de los riesgos de padecimiento de enfermedades metabólicas severas como diabetes, cáncer y trastornos relacionados con el corazón (Kumar et al., 2021; Kumar et al., 2017), además de la presencia de compuestos bioactivos que les confieren actividad antioxidante (Montesano, Gallo, Blasi, & Cossignani, 2020; Zhou et al., 2020).

Considerando el corto ciclo de producción, el alto valor nutricional y la menor huella ambiental del sistema productivo de los hongos, el aprovechamiento de las proteínas fúngicas se desarrolla como una respuesta frente a amenazas como el crecimiento exorbitante de la población, el cambio climático y el desarrollo agrícola insostenible (Yu et al., 2021).

El *Ustilago maydis* (DC Corda) es un hongo basidiomiceto patógeno biotrófico que causa el carbón de maíz (López García et al., 2017), caracterizado por la formación de agallas o tumores en la mazorca del maíz (*Zea mays ssp. mays*) y teozintle (*Zea mays ssp. parviglumis*) (Aguayo-González, Acosta-Ramos, Pérez-Cabrera, Guevara-Lara, & García Munguía, 2016).

Desde un acercamiento nutricional, el huitlacoche es una buena fuente de proteína con un contenido de 10 - 25 % con base en materia seca. Además, contiene todos los aminoácidos esenciales, destacando a la lisina que se encuentra en una mayor proporción (Juarez-Montiel, Ruiloba de Leon, Chavez-Camarillo, Hernandez-Rodriguez, & Villa-Tanaca, 2011). De igual manera, representa una fuente importante de compuestos fenólicos (Amador-Rodríguez et al., 2015; León-Ramírez, Sánchez-Arreguín, & Ruiz-Herrera, 2014) con propiedades antioxidantes (Aydoğdu & Gölükçü, 2017).

A pesar de las buenas cualidades del huitlacoche, se percata de una carencia informativa respecto a las características de su proteína, las cuales podrían considerarse para su aplicación en el diseño de alimentos nutraceuticos. Con base en lo anterior, el objetivo de este trabajo fue caracterizar las propiedades fisicoquímicas y la digestibilidad del aislado de proteína del huitlacoche, las cuales son determinantes de la calidad de una proteína.

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



inifap



Materiales y métodos

Materiales

Las muestras de huitlacoche, provenientes de la variedad de maíz Asgrow 7573, fueron obtenidas de un productor local en el municipio de Tetecala (18° 43' 39" Norte y 99° 23' 52" Oeste), en el estado de Morelos, México. El ácido clorhídrico, el hidróxido de sodio y el metanol fueron adquiridos de J.T. Baker (Xalostoc, Estado de México, México). Las enzimas utilizadas para determinar la digestibilidad *in vitro*, el ácido 2,2'-azino-bis-(3-etilbenzotiazolin-6-sulfónico) (ABTS) y el 2,2-difenil-1-picrylhydrazyl (DPPH) se obtuvieron de Sigma-Aldrich México (Toluca, Estado de México, México).

Preparación de la muestra

Una vez recolectada la muestra, se lavó, se desinfectó con una disolución de hipoclorito de sodio al 2 % (v/v), se secó a 50 °C hasta lograr un contenido de humedad de 8 % (m/m), se trituyó, se tamizó en una malla No. 80, se desengrasó y se envasó en bolsas de polietileno para su posterior almacenamiento en congelación a -20 °C.

Análisis químico proximal

Se realizó el análisis químico proximal de la harina desengrasada de huitlacoche (HDH) con base en la materia seca. Los lípidos se determinaron por el método de Soxhlet y las proteínas por Kjeldahl (N x 6.25). Los carbohidratos totales y la fibra se calcularon por diferencia {100 - (% proteína + % lípidos + % cenizas)} (AOAC, 2005).

Solubilidad en función del pH

Se determinó la concentración de proteína soluble contenida en la harina desengrasada de huitlacoche (HDH), la cual fue suspendida en agua destilada. Se ajustó el pH a valores de 3 a 6 y 9 a 11. El contenido de proteína soluble se determinó utilizando el método de Lowry modificado por Peterson (1977), para lo cual se construyó una curva estándar de albúmina sérica bovina (BSA) en un rango de concentración de 0.01 – 0.1 mg/mL.

Obtención del aislado de proteínas del huitlacoche (APH)

El aislado de proteína del huitlacoche (APH) se obtuvo con base en la metodología descrita por Chin et al. (2019) con ligeras modificaciones. Después de la solubilización de la proteína a pH 10,

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



inifap



la suspensión de HDH (1:30) fue centrifugada (Centrifuge 5810 R, Eppendorf, AG, Hamburg, Germany) a $8000 \times g$ durante 15 min a temperatura ambiente ($25 - 27 \text{ }^\circ\text{C}$) con el fin de separar las sustancias insolubles (fracción rica en fibra). Se filtró el sobrenadante (Whatman No. 42) y se ajustó su pH a 3.5. Después de la precipitación, la proteína se secó a $35 \text{ }^\circ\text{C}$ durante 24 h, se molió y se almacenó protegida de la luz a $-20 \text{ }^\circ\text{C}$ hasta su análisis posterior.

El rendimiento de APH expresado en base seca de la HDH se calculó utilizando la ecuación 1 reportada por (Sofi, Singh, Muzaffar, Majid, & Dar, 2020).

$$RP (\%) = \frac{A * B}{C * D} * 100 \quad (\text{Ec. 1})$$

Donde A es el peso de APH obtenido (g), B el contenido de proteína en APH (%), C el peso de HDH utilizado (g) y D es el contenido de proteína en HDH (%).

Potencial zeta (ζ) de las suspensiones de APH

Se midió el potencial ζ de las suspensiones hidratadas de APH (0.05 % m/v) ajustadas manualmente a valores de pH que oscilaron entre 2 y 6 a temperatura ambiente, con NaOH 1 M o HCl 1 M. Se utilizó un equipo Zetasizer Nano ZS90 que convierte las medidas de la movilidad electroforética en valores de potencial ζ utilizando el modelo matemático Smoluchowski (Zetasizer Nano ZS90, Malvern Instruments Ltd., Worcestershire, Reino Unido).

Perfil colorimétrico

El color del APH se determinó utilizando un colorímetro Chroma-meter (modelo CR 400/410, Hunter Associates Laboratory, Reston, VA, EE. UU). Los parámetros obtenidos son: L^* = brillo o luminosidad (100 = blanco perfecto a 0 = negro); a^* = verdor / enrojecimiento [negativo (verde) a positivo (rojo)]; b^* = amarillez / azulado [negativo (azul) a positivo (amarillo)] (Amador-Rodríguez et al., 2019).

Aislado de proteína de huitlacoche crudo, cocido y frito

Con la finalidad de evaluar el efecto del tipo de procesamiento térmico del huitlacoche sobre la digestibilidad de la fracción proteica y la actividad antioxidante, se llevó a cabo el procedimiento que se describe a continuación. Se aplicaron los procesos de cocción ($70 \text{ }^\circ\text{C}$, 15 min) y fritura ($150 \text{ }^\circ\text{C}$, 15 min) a diferentes porciones de huitlacoche. Posteriormente, las muestras de huitlacoche

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



iniqap



sometidas a cada uno de los tratamientos térmicos, fueron empleadas para obtener los aislados de proteína correspondientes.

Digestibilidad *in vitro*

La digestibilidad *in vitro* se determinó en aislados de proteína obtenidos a partir de huitlacoche crudo (APH), cocido (APHC) y frito (APHF). Con este objetivo, se utilizó el método multienzimático descrito por Martínez-Velasco et al. (2018) con ligeras modificaciones. A una muestra de APH (63.8 mg) se añadieron 10 mL de agua destilada y se ajustó el pH a 8 con NaOH 1 M. Posteriormente, se añadió 1 mL de disolución acuosa enzimática (1.58 mg de tripsina y 3.65 mg de quimotripsina) y se permitió la digestión durante 10 min a 37 °C. Después de la adición de 1 mL (1,48 mg) de disolución de proteasa bacteriana, la digestión prosiguió durante 9 min a 55 °C. Posteriormente, la reacción se detuvo colocando la suspensión en un baño a 85 °C por 5 min. El valor de pH se registró y fue utilizado para estimar la digestibilidad *in vitro* de las proteínas de acuerdo con la ecuación 2:

$$RPD (\%) = 234.84 - 22.56X \quad (Ec. 2)$$

Donde RPD es la digestibilidad proteica relativa y X es el pH de la suspensión.

Compuestos fenólicos totales

Se determinó la concentración de compuestos fenólicos totales (CFT) del APH e hidrolizados enzimáticos del aislado de proteína de huitlacoche crudo (HAPH) cocido (HAPHC) y frito (HAPHF). Con este objetivo, se utilizó el método descrito por Singleton y Rossi (1965) modificado por Gómez-Maldonado et al. (2020). En primer lugar, se transfirieron 250 μL (0.6 $\text{mg}_{\text{proteína}} \text{mL}^{-1}$ para APH y 0.638 $\text{mg}_{\text{proteína}} \text{mL}^{-1}$ para las otras muestras) de extracto acuoso de la muestra en un tubo que contenía 200 μL de Folin-Ciocalteu y 1250 μL de agua destilada. Tras la agitación de la mezcla, se dejó reposar 3 minutos. Posteriormente, se adicionaron 300 μL de carbonato de sodio (15 % m/v), se dejó incubar a temperatura ambiente por 30 minutos y se leyó la absorbancia a 760 nm. Adicionalmente, se preparó una curva estándar de ácido gálico (0 – 60 mg L^{-1}). El contenido de compuestos fenólicos totales se expresó como mg equivalentes de ácido gálico (EAG) g^{-1} de muestra seca.

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



inifap



Actividad antioxidante por DPPH

La determinación de actividad antioxidante empleando el radical libre DPPH del APH e hidrolizados de aislado de proteína de huitlacoche crudo (HAPH) cocido (HAPHC) y frito (HAPHF), se realizó de acuerdo con el procedimiento descrito por Cheison et al. (2007). Los ensayos se realizaron agregando 1.5 mL de DPPH 0.08 mM en metanol al 80 % (v/v) y posteriormente se adicionaron 0.5 mL de la suspensión proteica ($0.8 \text{ mg}_{\text{proteína}} \text{ mL}^{-1}$). Para preparar el control, se sustituyó la suspensión proteica por agua destilada y para el blanco, la disolución de DPPH se sustituyó por metanol al 80 % (v/v). Se agitaron las mezclas y se dejaron reposar en oscuridad durante 60 min. Transcurrido este periodo, se midió la absorbancia a 515 nm con el espectrofotómetro Genesys 10S UV-VIS (Thermo Fisher Scientific, Waltham, MA, EE. UU.). Se preparó una curva estándar de Trolox (0 - 100 μM) y la actividad antioxidante se expresó como μmol equivalentes de Trolox (ET) g^{-1} de muestra seca.

Actividad antioxidante por ABTS

La determinación de actividad antioxidante empleando el radical libre ABTS, se realizó con el APH e hidrolizados de aislado de proteína de huitlacoche crudo (HAPH) cocido (HAPHC) y frito (HAPHF). Se empleó el procedimiento reportado por Re et al. (1999), con algunas modificaciones. Se mezclaron 5 mL de ABTS 7 mM con 88 μL de persulfato de potasio 140 mM. La mezcla se mantuvo en la oscuridad por 16 h antes de su uso. Al final de este periodo, la disolución se diluyó con etanol, hasta obtener una absorbancia de 0.700 ± 0.002 a 734 nm en un espectrofotómetro Genesys 10S UV-VIS (Thermo Fisher Scientific, Waltham, MA, EE. UU.). Para los ensayos, se mezclaron 960 μL de la disolución del radical ABTS con 40 μL de suspensión proteica (0.8 mg mL^{-1}), se dejó reaccionar durante 6 min y se midió la absorbancia a 734 nm, utilizando el agua destilada como control. Se preparó una curva estándar de Trolox (0 - 500 μM) y la actividad antioxidante se expresó como μmol equivalentes de Trolox (ET) g^{-1} de muestra seca.

Análisis estadísticos

Todos los experimentos se realizaron por triplicado. Los datos se sometieron a un análisis de varianza de clasificación simple y en casos pertinentes, a una comparación de medias por Tukey. La significancia se estableció en $p \leq 0.05$. Los resultados se expresaron como valores medios \pm desviación estándar. Se utilizó el paquete estadístico Minitab® 19.1.1 (Minitab Inc., 2019, Estados Unidos).

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



Resultados y discusiones

Análisis químico proximal de la harina desengrasada de huitlacoche (HDH)

En el cuadro 1, se presenta la composición proximal de la harina desengrasada del huitlacoche (HDH) con base en materia seca. El contenido de proteína se encuentra dentro del rango reportado por otros autores. En este sentido, Aydoğdu & Gölükçü (2017) reportaron 12 ± 0.1 % (m/m) de proteína para muestras de huitlacoche mientras que Garcilazo Rahme et al. (2020) encontraron en huitlacoche producido a partir de diferentes genotipos de maíz, valores de 10.20 ± 0.16 a 15.30 ± 0.30 % (m/m) de proteína cruda y valores similares para carbohidratos totales adicionados con la fibra, encontrándose en un rango de 76.32 ± 0.02 a 83.85 ± 0.02 % (m/m). El contenido de ceniza también se encontró dentro del rango reportado por Valdez-Morales et al. (2010) que fue de 5.3 a 7.7 % (m/m).

Cuadro 1. Composición química proximal de la harina desengrasada de huitlacoche (HDH)

Parámetros	% con base en materia seca
Cenizas	5.83 ± 0.08
Grasas	0.28 ± 0.10
Proteínas totales (N x 6.25)	13.89 ± 0.67
Carbohidratos totales y fibra	79.7 ± 0.41

Solubilidad de proteínas en función del pH

La mayor concentración de proteína soluble se obtuvo a pH 10 y la menor a pH 3.5 (figura 1). Este último, considerándose el pH más cercano al punto isoeléctrico (figura 2), en donde la proteína tiende a formar agregados macromoleculares que resultan en una baja solubilidad (Martínez-Velasco et al., 2018). González et al. (2021) obtuvieron valores cercanos para muestras de harina desengrasada del *Pleurotus ostreatus*, obteniendo una mayor solubilidad a pH 12 y una menor a pH 4.

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021

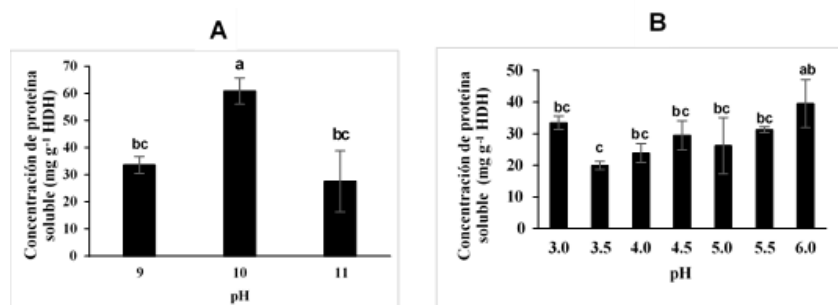


Figura 12. Solubilidad de proteínas de huitlacoche a pH alcalino (A) y pH ácido (B).

^zMedias con superíndices distintos fueron significativamente distintas (P<0.05).

Rendimiento proteico del aislado de proteína del huitlacoche

El rendimiento proteico del aislado de proteína nativa del huitlacoche fue de 7.32 ± 0.76 %. González et al. (2021) reportaron un rendimiento de 17 % para el *Pleurotus ostreatus*, mientras que Hadidi, Khaksar, Pagan & Ibarz (2020) reportaron un rendimiento de 13.9 % para aislado de proteína de alfalfa. Estos valores fueron superiores a los del APH y esto podría deberse a las variaciones en las condiciones del proceso de aislado de proteína para cada una de las muestras mencionadas.

Potencial ζ del APH

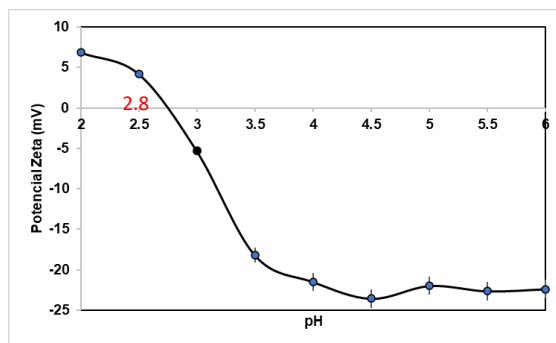


Figura 13. Potencial ζ del aislado de proteína de huitlacoche (APH) en función del pH.

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



En la figura 2 se muestra el cambio en el potencial ζ del aislado de proteína del huitlacoche (APH) en función del pH. De acuerdo con este análisis, se observa que el punto isoeléctrico corresponde a un valor de 2.8. A valores de pH inferiores a 2.8, los grupos amino ($-\text{NH}_2$) de las cadenas laterales se encuentran protonados en ($-\text{NH}_3^+$), así como los grupos carboxílicos de las cadenas laterales ($-\text{COOH}$). A valores de pH superiores al pka de las cadenas laterales del Asp y Glu (3.65 y 4.25 respectivamente), los grupos carboxilos ($-\text{COOH}$) se disocian en forma de carboxilatos ($-\text{COO}^-$), es decir se formaron grupos cargados negativamente (Nelson, Cuchillo Foix, Lehninger, & Cox, 2005). El cambio de potencial ζ del APH osciló entre $+6.87 \pm 0.27$ a $\text{pH} = 2$ y -22.38 ± 0.97 a $\text{pH} = 6$. Yu et al. (2021) reportaron valores similares en un rango de 14.1 mV a $\text{pH} = 3.0$ a -17.6 mV a $\text{pH} = 6.0$ para la glutelina aislada del hongo entomopatógeno *Cordyceps militaris*.

Perfil colorimétrico

Se considera baja la luminosidad de las muestras de HDH y APH (Cuadro 2). Lo anterior, se debió a la presencia de antocianinas, un grupo de polifenoles generados durante la infestación del maíz por *U. maydis*, la cual resulta en una pigmentación roja en los tejidos infectados (Valverde et al., 2012). En la HDH, los tres parámetros de color fueron mayores. Sin embargo, las dos muestras presentaron colores cercanos al negro, rojo y amarillo (Figura 3). Valores cercanos para L^* , a^* y b^* (28.68 ± 2.44 , 1.86 ± 0.15 y 7.00 ± 0.52 respectivamente) fueron reportados para tortillas adicionadas con pasta de huitlacoche al 18 % en base seca (Amador-Rodríguez et al., 2019).

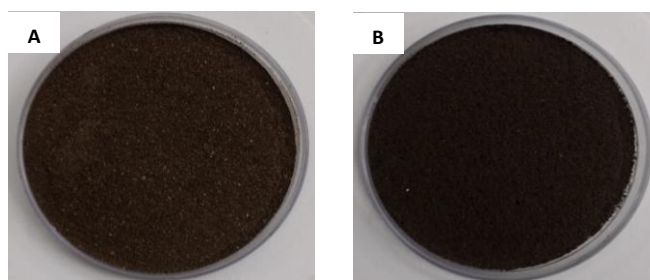


Figura 14. Coloración de la harina desengrasada de huitlacoche (HDH) (A) y aislado de proteína del huitlacoche (APH) (B)

Cuadro 2. Perfil de color de la harina desengrasada (HDH) y el aislado (APH) de proteína de huitlacoche

	L^*	a^*	b^*
HDH	33.30 ± 0.81	3.04 ± 0.04	13.28 ± 0.07

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



inifap



APH	31.50±0.39	2.01±0.36	8.94±0.77
------------	------------	-----------	-----------

Aislado de proteína de huitlacoche crudo, cocido y frito

Digestibilidad *in vitro*

La digestibilidad proteica relativa obtenida (Cuadro 3) fue similar a la reportada para otros aislados de proteínas de origen vegetal, como el haba con $65.98 \pm 0.47\%$ (Martínez-Velasco et al., 2018) y el huauzontle con $83.0 \pm 0.2\%$ (López-Monterrubio et al., 2020). De acuerdo con Adeleye et al. (2020) existe una relación positiva entre el tratamiento térmico y la digestibilidad relativa de las proteínas. El tratamiento térmico contribuyó a un aumento en el área de superficie de las proteínas resultantes del despliegue de sus estructuras secundarias y terciarias, exponiendo los sitios de escisión para la proteólisis que, de otro modo, habrían sido inaccesibles para las proteasas (Adeleye et al., 2020).

Cuadro 3. Digestibilidad relativa de aislado de proteína de huitlacoche crudo (APH), cocido (APHC) y frito (APHF)

	Digestibilidad proteica relativa (%)
APH	70.67±0.79 ^c
APHC	75.23±0.16 ^b
APHF	82.45±0.15 ^a

^z Medias con superíndices distintos fueron significativamente distintas ($P < 0.05$).

Compuestos fenólicos totales (CFT)

El mayor contenido de compuestos fenólicos totales (CFT) se observó en el aislado de proteína de huitlacoche crudo hidrolizado (HAPH) y no hidrolizado (APH), además no existió una diferencia significativa entre ambas muestras. Estos resultados coincidieron con aquellos reportados por González et al. (2021) para aislado de proteína de *Pleurotus ostreatus* que fue de 24.2 ± 0.8 mg EAG g⁻¹ de muestra seca. Cabe mencionar que el tratamiento térmico influyó negativamente en el contenido de CFT de las muestras, al igual que lo reportado por Gąsecka et al. (2019), considerando que estos compuestos son sensibles a la temperatura. Lo anterior explicó los valores menores de CFT obtenidos en el aislado de proteína hidrolizado de huitlacoche cocido (HAPHC) y frito (HAPHF). Sin embargo, en todas las muestras analizadas, el contenido de CFT fue mayor al rango de valores reportado por Valdez-Morales et al. (2016), para harina liofilizada de huitlacoche

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



inifap



producida a partir de diferentes genotipos de maíz (4.34 - 9.22 mg equivalentes de ácido gálico (EAG) g⁻¹ de muestra seca).

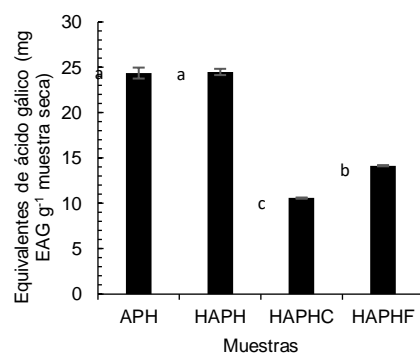


Figura 15. Contenido de compuestos fenólicos totales en aislado de proteína no hidrolizado de huitlacoche crudo (APH) y del aislado de proteína hidrolizado de huitlacoche crudo (HAPH), cocido (HAPHC) y frito (HAPHF).

^zMedias con superíndices distintos fueron significativamente distintas (P<0.05).

Actividad antioxidante (DPPH y ABTS)

La actividad antioxidante evaluada sobre los radicales libres DPPH y ABTS del HAPH fue mayor, seguido del APH. Las muestras HAPHC y HAPHF, presentaron valores menores y no mostraron diferencia significativa entre ellas. Valdez-Morales et al. (2016) reportaron una menor actividad antioxidante en harina liofilizada de huitlacoche, producida a partir de diferentes genotipos de maíz (un promedio de 3.19 μmol equivalentes de trolox (ET) g⁻¹ de muestra seca por DPPH). Gąsecka et al. (2019) reportaron una disminución en la inhibición del radical de DPPH y ABTS por *Leccinum scabrum* y *Hericium erinaceus* previamente sometidos a un tratamiento térmico. Estos mismos autores mencionaron que este comportamiento se debió al calentamiento del micelio de los hongos que interrumpió su capacidad para ceder el hidrógeno. Lo anterior explica la reducida actividad antioxidante del HAHPC y HAPHF. Por otra parte, la hidrólisis enzimática mejoró la actividad antioxidante del APH. Goswami et al. (2021) reportaron un comportamiento similar en hidrolizados de proteínas de *Pleurotus ostreatus*.

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



inifap

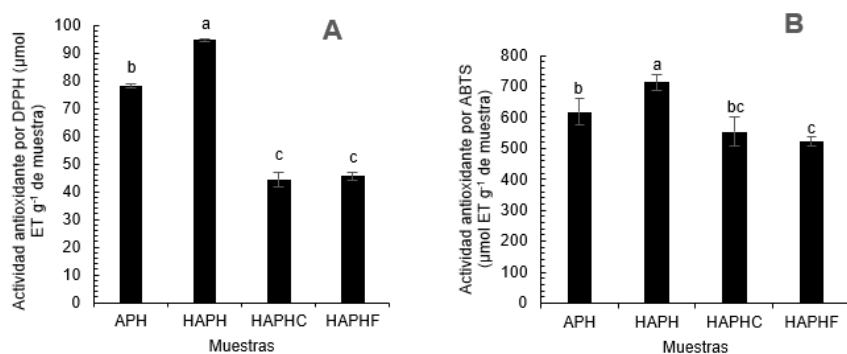


Figura 5. Actividad de inhibición del radical DPPH (A) y ABTS (B) del aislado de proteína de huitlacoche

^z Aislado de proteína no hidrolizado de huitlacoche crudo (APH) y del aislado de proteína hidrolizado de huitlacoche crudo (HAPH), cocido (HAPHC) y frito (HAPHF)

^y Medias con superíndices distintos fueron significativamente distintas ($P < 0.05$).

Conclusiones

El pH de mayor solubilidad del aislado de proteína del huitlacoche (APH) fue 10, mientras que el valor correspondiente a la menor solubilidad fue 3.5. El potencial ζ de las muestras mostró un punto isoeléctrico de 2.8. El color de HDH y APH indicó la presencia de antocianina. Este resultado fue evidenciado por la alta concentración del contenido de compuestos fenólicos totales (CFT) en el APH hidrolizado y no hidrolizado, con valores que superaron aquellos reportados para harina de huitlacoche. La alta actividad antioxidante por DPPH y ABTS obtenida en todas las muestras, estuvo relacionada con el contenido de CFT, además de ser influidos por la hidrólisis enzimática y el tratamiento térmico, obteniendo resultados similares a los del hongo comestible *Pleurotus ostreatus*. La proteína presentó una digestibilidad *in vitro* elevada en las muestras de huitlacoche con todos los tratamientos, destacando al tratamiento de fritura que confirmó una mayor digestibilidad al aislado proteico. Todos estos resultados demostraron la alta calidad del APH como un componente prometedor en el diseño de alimentos nutraceuticos.

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



iniap



Literatura citada

- Adeleye, O. O., Awodiran, S. T., Ajayi, A. O., & Ogunmoyela, T. F. (2020). Effect of high-temperature, short-time cooking conditions on in vitro protein digestibility, enzyme inhibitor activity and amino acid profile of selected legume grains. *Heliyon*, 6(11), e05419. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.heliyon.2020.e05419>
- Aguayo-González, D. J., Acosta-Ramos, M., Pérez-Cabrera, L. E., Guevara-Lara, F., & García Munguía, A. M. (2016). Producción natural de huitlacoche [*Ustilago maydis* (DC) Corda] en el estado de Aguascalientes. *Revista mexicana de ciencias agrícolas*, 7(5), 1043-1050.
- Amador-Rodríguez, K. Y., Martínez-Bustos, F., Pérez-Cabrera, L. E., Posadas-Del-Río, F. A., Chávez-Vela, N. A., Sandoval-Cardoso, M. L., & Guevara-Lara, F. (2015). Effect of huitlacoche (*Ustilago maydis* DC Corda) paste addition on functional, chemical and textural properties of tortilla chips. *Food Science and Technology (Campinas)*, 35(3), 452-459. doi:10.1590/1678-457x.6697
- Amador-Rodríguez, K. Y., Pérez-Cabrera, L. E., Guevara-Lara, F., Chávez-Vela, N. A., Posadas-Del Río, F. A., Silos-Espino, H., & Martínez-Bustos, F. (2019). Physicochemical, thermal, and rheological properties of nixtamalized blue-corn flours and masas added with huitlacoche (*Ustilago maydis*) paste. *Food Chem*, 278, 601-608. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2018.11.008>
- AOAC. (2005). Official methods of analysis (18th ed.). Washington, DC, EUA: Association of Official Analytical Chemist.
- Aydoğdu, M., & Göllükçü, M. (2017). Nutritional value of huitlacoche, maize mushroom caused by *Ustilago maydis*. *Food Science and Technology*, 37(4), 531-535. doi:10.1590/1678-457x.19416
- Cheison, S.C, Wang, Z. & Xu, S.Y. (2007). *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, 55(10), 3894-30904. DOI:10.1021/jf062936i
- Chin, Y. Y., Chew, L. Y., Toh, G. T., Salampessy, J., Azlan, A., & Ismail, A. (2019). Nutritional composition and angiotensin converting enzyme inhibitory activity of blue lupin (*Lupinus angustifolius*). *Food Bioscience*, 31, 100401. doi:<https://doi.org/10.1016/j.fbio.2019.04.002>
- Garcilazo Rahme, O., Tello Salgado, I., Mata, G., Parraguirre Lezama, C., Valencia de Ita, M. d. I. A., & Romero Arenas, O. (2020). Evaluation of Eight Genotypes of Corn for the Commercial Cultivation of Huitlacoche in Nopalucan, Puebla, Mexico. *Agriculture*, 10(11), 535. Retrieved from <https://www.mdpi.com/2077-0472/10/11/535>

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



inifap



- Gąsecka, M., Siwulski, M., Magdziak, Z., Budzyńska, S., Stuper, K., Niedzielski, P., & Mleczek, M. (2019). The effect of drying temperature on bioactive compounds and antioxidant activity of *Leccinum scabrum* (Bull.) Gray and *Hericium erinaceus* (Bull.) Pers. *J Food Sci Technol*, 57. <https://doi.org/10.1007/s13197-019-04081-1>
- Gómez-Maldonado, D., Lobato-Calleros, C., Aguirre-Mandujano, E., Leyva-Mir, S. G., Robles-Yerena, L., & Vernon-Carter, E. J. (2020). Antifungal activity of mango kernel polyphenols on mango fruit infected by anthracnose. *LWT*, 126, 109337. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.lwt.2020.109337>
- González, A., Nobre, C., Simões, L. S., Cruz, M., Loredó, A., Rodríguez-Jasso, R. M., . . . Belmares, R. (2021). Evaluation of functional and nutritional potential of a protein concentrate from *Pleurotus ostreatus* mushroom. *Food Chem*, 346, 128884. doi:<https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2020.128884>
- Goswami, B., Majumdar, S., Das, A., Barui, A., & Bhowal, J. (2021). Evaluation of bioactive properties of *Pleurotus ostreatus* mushroom protein hydrolysate of different degree of hydrolysis. *LWT*, 149, 111768. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.lwt.2021.111768>
- Hadidi, M., Khaksar, F. B., Pagan, J., & Ibarz, A. (2020). Application of Ultrasound-Ultrafiltration-Assisted alkaline isoelectric precipitation (UUAIP) technique for producing alfalfa protein isolate for human consumption: Optimization, comparison, physicochemical, and functional properties. *Food Research International*, 130, 108907. doi:<https://doi.org/10.1016/j.foodres.2019.108907>
- Juarez-Montiel, M., Ruiloba de Leon, S., Chavez-Camarillo, G., Hernandez-Rodriguez, C., & Villa-Tanaca, L. (2011). Huitlacoche (corn smut), caused by the phytopathogenic fungus *Ustilago maydis*, as a functional food. *Rev Iberoam Micol*, 28(2), 69-73. doi:10.1016/j.riam.2011.01.001
- Kumar, M., Tomar, M., Potkule, J., Reetu, Punia, S., Dhakane, J., . . . Kennedy, J. F. (2021). Functional characterization of plant-based protein to determine its quality for food applications. *Food Hydrocolloids*, 106986. doi:<https://doi.org/10.1016/j.foodhyd.2021.106986>
- Kumar, P., Chatli, M. K., Mehta, N., Singh, P., Malav, O. P., & Verma, A. K. (2017). Meat analogues: Health promising sustainable meat substitutes. *Critical Reviews in Food Science and Nutrition*, 57(5), 923-932. doi:10.1080/10408398.2014.939739
- León-Ramírez, C., Sánchez-Arreguín, J., & Ruiz-Herrera, J. (2014). *Ustilago maydis*, a Delicacy of the Aztec Cuisine and a Model for Research. *Natural Resources*, 05, 256-267. doi:10.4236/nr.2014.56024

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



inifap



- López-Monterrubio, D. I., Lobato-Calleros, C., Alvarez-Ramirez, J., & Vernon-Carter, E. J. (2020). Huauzontle (*Chenopodium nuttalliae* Saff.) protein: Composition, structure, physicochemical and functional properties. *Food Hydrocolloids*, *108*, 106043. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.foodhyd.2020.106043>
- López García, E., Pérez López, A., Acosta Ramos, M., Ochoa Rosas, M. a. D. J. s., Rojas Martínez, R. I., & Espinosa Solares, T. (2017). Factores físicos y microbiológicos en el deterioro del huitlacoche en poscosecha. *Revista mexicana de ciencias agrícolas*, *8*(3), 545-558. doi:10.29312/remexca.v8i3.30
- Martínez-Velasco, A., Lobato-Calleros, C., Hernández-Rodríguez, B. E., Román-Guerrero, A., Alvarez-Ramirez, J., & Vernon-Carter, E. J. (2018). High intensity ultrasound treatment of faba bean (*Vicia faba* L.) protein: Effect on surface properties, foaming ability and structural changes. *Ultrasonics Sonochemistry*, *44*, 97-105. doi:<https://doi.org/10.1016/j.ultsonch.2018.02.007>
- Montesano, D., Gallo, M., Blasi, F., & Cossignani, L. (2020). Biopeptides from vegetable proteins: new scientific evidences. *Current Opinion in Food Science*, *31*, 31-37. doi:<https://doi.org/10.1016/j.cofs.2019.10.008>
- [Nelson, D. L., Cuchillo Foix, C. M., Lehninger, A. L., & Cox, M. M. \(2005\). *Lehninger: Principios de bioquímica*. Barcelona, España. Omega. p.78.](#)
- Re, R., Pellegrini, A., Proteggente, A., Pannala, M., Yang, M. & Rice-Evans, C. (1999). Antioxidant activity applying an improved ABTS radical cation decolorization assay. *Free Radic. Biol. Med.*, *26*, 1231-1237.
- Peterson, G. L. (1977). A simplification of the protein assay method of Lowry et al. which is more generally applicable. *Analytical Biochemistry*, *83*(2), 346-356. doi:[https://doi.org/10.1016/0003-2697\(77\)90043-4](https://doi.org/10.1016/0003-2697(77)90043-4)
- Singleton, V. L., & Rossi, J. A. (1965). Colorimetry of Total Phenolics with Phosphomolybdic-Phosphotungstic Acid Reagents. *American Journal of Enology and Viticulture*, *16*(3), 144. <http://www.ajevonline.org/content/16/3/144.abstract>
- Sofi, S. A., Singh, J., Muzaffar, K., Majid, D., & Dar, B. N. (2020). Physicochemical characteristics of protein isolates from native and germinated chickpea cultivars and their noodle quality. *International Journal of Gastronomy and Food Science*, *22*, 100258. doi:<https://doi.org/10.1016/j.ijgfs.2020.100258>
- Valdez-Morales, M., Barry, K., Fahey, G. C., Domínguez, J., de Mejía, E. G., Valverde, M. E., & Paredes-López, O. (2010). Effect of maize genotype, developmental stage, and cooking process on the nutraceutical potential of huitlacoche (*Ustilago maydis*). *Food Chem*, *119*(2), 689-697. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2009.07.015>

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



inifap



- Valdez-Morales, M., Carlos, L. C., Valverde, M. E., Ramírez-Chávez, E., & Paredes-López, O. (2016). Phenolic Compounds, Antioxidant Activity and Lipid Profile of Huitlacoche Mushroom (*Ustilago maydis*) Produced in Several Maize Genotypes at Different Stages of Development. *Plant Foods Hum Nutr*, 71(4), 436-443. <https://doi.org/10.1007/s11130-016-0572-3>
- Valverde, M. E., Hernández-Pérez, T., & Paredes-Lopez, O. (2012). Huitlacoche – A 21st Century Culinary Delight Originated in the Aztec Times. *Hispanic Foods: Chemistry and Bioactive Compounds*, 83–100. doi:10.1021/bk-2012-1109.ch007
- Yu, X.-Y., Zou, Y., Zheng, Q.-W., Lu, F.-X., Li, D.-H., Guo, L.-Q., & Lin, J.-F. (2021). Physicochemical, functional and structural properties of the major protein fractions extracted from *Cordyceps militaris* fruit body. *Food Research International*, 142, 110211. doi:<https://doi.org/10.1016/j.foodres.2021.110211>
- Zhou, J., Chen, M., Wu, S., Liao, X., Wang, J., Wu, Q., . . . Ding, Y. (2020). A review on mushroom-derived bioactive peptides: Preparation and biological activities. *Food Research International*, 134, 109230. doi:<https://doi.org/10.1016/j.foodres.2020.109230>

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



Actividad biológica de péptidos obtenidos a partir de proteína de hormiga chicatana (*Atta mexicana*)

³⁷*Daniela Soto-Felix, Eleazar Aguirre-Mandujano, Consuelo S. O. Lobato-Calleros, Blanca E. Hernández-Rodríguez.*

Resumen

Se obtuvo harina de hormiga chicatana (HHC) desengrasada con un contenido de proteína de 36.51%. En la curva de solubilidad se mostró la mayor cantidad de proteína solubilizada (66.48 mg/mL) a un pH de 12 y el punto isoeléctrico (PI) a pH de 4 (27.35 mg/mL), sin embargo, los datos mostraron valores de proteína solubilizada mayores al contenido total de proteína de la harina, determinando que los resultados se vieron influenciados por la interacción de la quitina con los reactivos del método utilizado. A pesar de esto, se pudo observar que la mayoría de las proteínas de la hormiga presentan gran solubilidad. Las metodologías planeadas buscan poder demostrar que la HHC es una alternativa como fuente de proteínas que al ser ingerida generen péptidos con propiedades biológicas que aporten propiedades beneficiosas al consumidor.

Palabras Clave: Hormiga chicatana, proteína, péptidos, solubilidad.

Abstract

Defatted chicatana ant flour (HHC) was obtained with a protein content of 36.51%. The solubility curve showed the highest amount of solubilized protein (66.48 mg/mL) at pH 12 and the isoelectric point (IP) at pH 4 (27.35 mg/mL); however, the data showed solubilized protein values higher than the total protein content of the flour, determining that the results were influenced by the interaction of chitin with the reagents of the method used. In spite of this, it was observed that most of the ant proteins present high solubility. The planned methodologies seek to demonstrate that HHC is an alternative as a source of proteins that, when ingested, generate peptides with biological properties that provide beneficial properties to the consumer.

Keywords: Chicatana ant, protein, peptides, solubility.

³⁷ Universidad Autónoma Chapingo, Km 38.5 carr. México- Texcoco. CP 56230.

dani_dann@outlook.com; eleagman@yahoo.com; consuelobato@yahoo.com; blancaeli_hr@yahoo.com.mx

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



inifap



Introducción

Los insectos comestibles son un recurso natural renovable que ha sido aprovechado desde la antigüedad con fines alimenticios y medicinales. El interés por el consumo de insectos se ha incrementado en los últimos años debido a su reconocido valor nutricional (alto contenido en micro y macronutrientes), potenciales beneficios para la salud (presencia de sustancias bioactivas) y bajo impacto ambiental (uso de menos recursos y reducidos niveles de contaminación) (Castro-López et al., 2020).

Desde el punto de vista nutricional, los insectos en todas las etapas de la vida son ricas fuentes de proteína, grasa y muchos otros nutrientes importantes (Bovera et al., 2016), presentan un contenido proteico significativo que va del 20 al 75 %; en el caso de la hormiga chicatana (*Atta mexicana*), contiene 42.59% de proteína en base seca (Amarender et al., 2020; Ramos-Elorduy, 1997), es por esto por lo que, considerar este insecto como una fuente alternativa de proteínas puede ayudar a mejorar tanto la nutrición como la seguridad alimentaria.

Se informa que la digestibilidad de las proteínas de los insectos oscila entre el 76 y el 96%; estos valores son solo un poco más pequeños que los valores reportados para la proteína de huevo (95%) o la carne de vacuno (98%) e incluso más altos que en el caso de muchas proteínas vegetales (13% a 60%) (Rumpold y Schlüter, 2013; Kouřimská y Adámková, 2016; Pojić et al., 2018). Aunque existen estudios sobre la composición nutricional, el perfil de aminoácidos y las propiedades funcionales de muchos insectos (van Huis, 2013; Yi et al., 2013), todavía hay especies con propiedades novedosas por descubrir, y la exploración de más especies de insectos puede ayudar encontrar candidatos para desarrollar alimentos nutritivos y funcionales

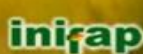
Además, el consumo de insectos también puede enriquecer la dieta humana en componentes bioactivos, por ejemplo, péptidos biológicamente activos (Zielínska et al., 2017). Los péptidos bioactivos liberados durante la digestión gastrointestinal, o por hidrólisis de proteínas in vitro previa, son pequeños compuestos con actividad biológica beneficiosa, por ejemplo, actividad antihipertensiva, antioxidante, antiinflamatoria o hipocolesterolemica (Gobbetti et al., 2002; Saiga, Tanabe y Nishimura, 2003; Zhang, et al., 2012; Kara's et al., 2017).

Con base en lo anterior, en el presente trabajo se busca determinar actividades biológicas en los péptidos obtenidos a partir de una hidrólisis enzimática secuencial en la harina de hormiga chicatana (*Atta mexicana*).

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



Materiales y métodos

Materiales

La hormiga chicatana se obtuvo de Bochil, Chiapas. Las enzimas pepsina, tripsina y quimotripsina, así como los reactivos para los ensayos de actividad antihipertensiva, antioxidante y antidiabética, y para la medición de grado de hidrólisis, se comprarán a Sigma-Aldrich® (EUA). Los reactivos de electroforesis se obtendrán de BioRad® (EUA).

Obtención de harina de hormiga

La hormiga se llevó a deshidratación empleando una estufa (RIOSSA, modelo HCF-S2-D) a 45 °C hasta peso constante. Después se pulverizó empleando un equipo Ultra-Bullet® durante 3 min. Posteriormente, se utilizó el equipo Soxhlet empleando éter de petróleo como disolvente para la extracción.

Análisis químico proximal

La composición proximal de la harina de hormiga chicatana, proteína (método Kjeldahl), humedad (método de secado a la estufa), fibra cruda y grasa (método Soxhlet) se determinará de acuerdo con los procedimientos estándar de la AOAC (2002).

Determinación de solubilidad de proteína en función del pH

Se realizó la determinación de solubilidad de las proteínas, para lo cual, se prepararon amortiguadores de pH 2 a 14, posteriormente se pesaron muestras de 5 g de harina de hormiga desengrasada (HHD) y se mezclaron en 50 mL de cada amortiguador. Se ajustaron valores de pH empleando HCl 3 N o NaOH 3 N. La muestra se agitó a 50 rpm y se mantuvo la temperatura constante (25 °C) por 30 min. Al final de este periodo, se tomaron alícuotas por triplicado para cada nivel de pH, las cuales fueron centrifugadas durante 15 min a 8000 rpm (4 °C). La concentración de proteína soluble a cada valor de pH, se determinó por el método de Lowry modificado (Peterson, 1977).

Hidrólisis enzimática secuencial

Los hidrolizados de péptidos se obtendrán según la metodología descrita por Montiel-Aguilar, et al. (2020). Para simular el procesamiento gastrointestinal, se realizará una digestión secuencial con pepsina y tripsina-quimotripsina (Sigma-Aldrich, St. Louis, MO, EE. UU.). Se preparará una disolución de 200 mg de harina de hormiga en 50 mL de agua desionizada y se ajustará el pH a 2.0 con HCl 1 M para la digestión con pepsina y a pH 8 con NaOH 1 N para la digestión con tripsina-quimotripsina. Las enzimas digestivas se disolverán para obtener una concentración final de (200 mg

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



inifap



/ ml), luego se usarán en una relación 1:10 (p / p) (enzima: sustrato). La digestión se realizará a 37 ° C controlando el pH durante el proceso para evitar variaciones drásticas. La reacción se detendrá calentando las muestras a 80 °C durante 10 min y se centrifugarán a 5.000 xg durante 10 min.

Actividad antioxidante

La actividad de eliminación de radicales DPPH (2,2 difenil-1-picrilhidrazil) de las fracciones de péptidos será analizada de acuerdo con la metodología descrita por Brand-Williams, et al., (1995). La actividad de captación del catión radical ABTS (2,2 'azino-bis (3-etilbenzotiazolina-6-sulfónico)) se determinará de acuerdo con la metodología descrita por Re et al. (1999); ambas metodologías con ligeras modificaciones (Karas et al., 2015) con respecto a las cantidades de solución antioxidante.

Actividad antihipertensiva

La actividad antihipertensiva se determinará por medio de un ensayo de actividad inhibidora de la enzima convertidora de angiotensina (ECA) según el método propuesto por Cushman y Cheung (1971).

Actividad antidiabética

La actividad antidiabética se determinará por un ensayo de la actividad inhibidora de la α -amilasa según la metodología propuesta por Nair et al., (2013). También un ensayo de la actividad inhibidora de α -glucosidasa de acuerdo con la metodología propuesta por Rivero-Pino et al. (2020).

Resultados y discusión

Solubilidad de proteínas

Los resultados muestran que la solubilidad de las proteínas presentes en la hormiga chicatana está en función del pH, como se observa en la figura 1, las proteínas presentaron su punto isoeléctrico a un pH 4, es decir, se presentó la menor solubilidad (27.35 mg/mL); y su mayor solubilidad a pH 12 (66.48 mg/mL). El punto isoeléctrico de la mayoría de las matrices alimentarias se encuentra en pH 4-5, como los valores reportados por Myshina y colaboradores (2018) para proteínas de dos especies de insectos (*Shistocerca gregaria* y *Apis mellifera*) con valores de pH de 4 y 5, respectivamente. Además, otros estudios han reportado la mayor solubilidad de proteína en valores de pH alcalinos, como lo mencionado en Bubler y colaboradores (2016) donde demuestran la solubilidad para harinas de insectos de dos especies (*Tenebrio molitor* y *Hermetia illucens*) con una máxima solubilidad en pH 10 y 12, respectivamente.

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



iniqap

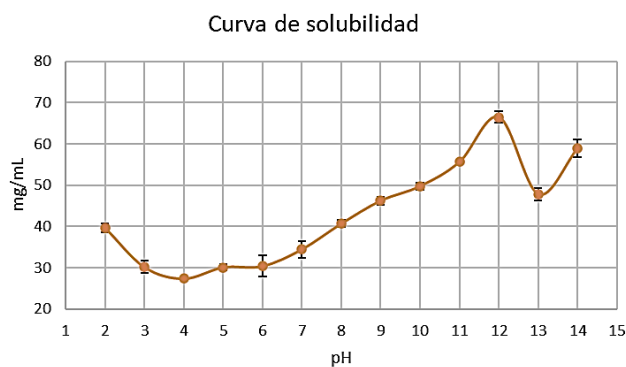


Figura 16. Curva de solubilidad

El principio del método Lowry se basa en una mezcla que contiene molibdato, tungstano y ácido fosfórico (reactivo Folin-Ciocalteu), que sufre una reducción cuando reacciona con las proteínas, en presencia del catalizador cobre (II) y produce un compuesto con una absorción máxima en 750 nm. La presencia de los grupos funcionales hidroxilo y amino en la estructura de la quitina, permite la formación de compuestos de coordinación (complejos) con iones metálicos como el cobre, el zinc y el hierro, entre otros (Cárdenas y Ramírez, 2004). Con esto podría considerarse que la quitina presente en la HHC, a través de sus grupos funcionales, reaccionan en el método de lowry de la misma manera que las proteínas, formando así parte de las lecturas del método y dando resultados de proteína soluble mayores al contenido de proteína total de la harina (36.51 mg/mL).

Conclusiones

Las metodologías planeadas buscan poder demostrar que la HHC es una alternativa como fuente de proteínas que al ser ingerida generen péptidos con propiedades biológicas que aporten propiedades beneficiosas al consumidor.

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



Bibliografía

Amarender, R. V.; Bhargava, K.; Dossey, A.T.; y Gamagedara, S.; (2020). Lipid and protein extraction from edible insects – Crickets (Gryllidae). *LWT - Food Science and Technology* 125: 1-4.

Brand-Williams, W., Cuvelier, M. y Berset, C. (1995). Use of a free radical method to evaluate antioxidant activity. *LWT Food Science*, 28(1), 25–30.

Bovera F., Loponte R., Marono S., Piccolo G., Parisi G., Iaconisi V., Gasco L., Nizza A., (2016). Use of *Tenebrio molitor* larvae meal as protein source in broiler diet: Effect on growth performance, nutrient digestibility, and carcass and meat traits. *J. Anim. Sci.* 94, 639–647,

Cárdenas R, Ramírez M. (2004). Efecto de los derivados de quitina y su combinación con sulfato de cobre en el comportamiento del crecimiento micelial y esporulación de un aislamiento monospórico del hongo *Pyricularia grisea*. *Sacc. Cultiv Tropic*; 25(4):89-93

Castro-López, C., Santiago-López, L., Vallejo-Cordoba, B., González-Cordova, A. F., Liceaga, A., García, H., & Hernández-Mendoza, A. (2020). An insight to fermented edible insects: A global perspective and prospective. *Food Research International*(137):1-11.

Cushman, D. W., & Cheung, H. S. (1971). Spectrophotometric assay and properties of the angiotensin-converting enzyme of rabbit ling. *Biochemical pharmacology*, 20(7): 1637-1648.

Gobbetti, M.; Stepaniak, L.; De Angelis, M.; Corsetti, A.; Di Cagno, R. (2002). Latent bioactive peptides in milk proteins: Proteolytic activation and significance in dairy processing. *Crit. Rev. Food Sci. Nutr.* 42, 223–239

Kara's, M.; Jakubczyk, A.; Szymanowska, U.; Złotek, U.; Zielńska, E. (2017). Digestion and bioavailability of bioactive phytochemicals. *Int. J. Food Sci. Technol.* 52, 291–305

Karas, M., Baraniak, B., Rybcznska, K., Gminski, J., Gawel-Beben, K. y Jakubczyk, A. (2015). The influence of heat treatment of chickpea seeds on antioxidant and fibroblast growth-stimulating activity of peptide fractions obtained from proteins digested under simulated gastrointestinal conditions. *International Journal of Food Science & technology.* 50(9), 2097–2103.

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



Kouřimská, L., Adámková, A., (2016). Nutritional and sensory quality of edible insects. *NFS J.* 4, 22–26.

Montiel-Aguilar, L.J., Torres-Castillo, J.A., Rodríguez-Servin, R., López-Flores, A.B., Aguirre-Arzola, V.E., Méndez-Zamora, G., Sinagawa-García, S.R.; (2020). Nutraceutical effects of bioactive peptides obtained from *Pterophylla beltrani* (Bolivar & Bolivar) protein isolates, *Journal of Asia-Pacific Entomology.* 1-17.

Nair, S.S., Kavrekar, V., Mishra, A., (2013). Evaluation of in vitro antidiabetic activity of selected plant extracts. *Int. J. Pharm. Sci. Invent.* 2, 12–19

Peterson, G. L. (1977). A simplification of the protein assay method of Lowry et. al. which is more generally applicable. *Analytical Biochemistry,* 83, 346-350

Pojić, M., Mišan, A., Tiwari, B., 2018. Eco-innovative technologies for extraction of proteins for human consumption from renewable protein sources of plant origin. *Trends Food Sci. Technol.* 75, 93–104

Ramos-Elorduy, J.; (1997). Insects: a sustainable source of food. *Ecology of Food and Nutrition,* 36: 247-276.

Re, R., Pellegrini, N., Proteggente, A., Pannala, A., Yang, M. y Rice-Evans, C. (1999). Antioxidant activity applying an improved ABTS radical cation decolorization assay. *Free Radical Biology and Medicine,* 26(9-10), 1231–1237

Rivero-Pino, F., Espejo-Carpio, F.J., Pérez-Galvéz, R., Guadix, A., Guadix, E.M., (2020). Effect of ultrasound pretreatment and sequential hydrolysis on the production of *Tenebrio molitor* antidiabetic peptides. *Food and Bioproducts Processing.* 123: 217-224.

Rumpold, B.A. and Schlüter, O.K., (2013). Potential and challenges of insects as an innovative source for food and feed production. *Innovative Food Science and Emerging Technologies* 17: 1-11.

Saiga, A.; Tanabe, S.; Nishimura, T. (2003). Antioxidant activity of peptides obtained from porcine myofibrillar proteins by protease treatment. *J. Agric. Food Chem.* 51, 3661–3667.

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



inifap



Van Huis, A., 2013. Potential of Insects as Food and Feed in Assuring Food Security. *Annu. Rev. Entomol.* 58, 563–583.

Yi, L., Lakemond, C.M.M., Sagis, L.M.C., Eisner-Schadler, V., van Huis, A., van Boekel, M.A.J.S., (2013). Extraction and characterisation of protein fractions from five insect species. *Food Chem.* 141, 3341–3348.

Zhang, M.; Mu, T.H.; Wang, Y.B.; Sun, M.J. (2012). Evaluation of free radical-scavenging activities of sweet potato protein and its hydrolysates as affected by single and combination of enzyme systems. *Int. J. Food Sci. Technol.* 47, 696–702.

Zielinska, E.; Kara´s, M.; Jakubczyk, A. (2017). Antioxidant activity of predigested protein obtained from a range of farmed edible insects. *Int. J. Food Sci. Technol.* 52, 306–312.

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



inifap



Cuantificación del Material Lignocelulósico de la Cascara de Cacao Mexicano

*Sebastián García Fernández³⁸, Holber Zuleta Prada^{*1}, Benito Reyes Trejo¹, Teodoro Espinosa Solarez³⁹*

Resumen

La cascara de cacao, la cual corresponde a un 90% del fruto es un residuo lignocelulósico abundante y subutilizado. Esta materia prima de bajo costo es atractiva para potenciar la obtención y elaboración de diferentes productos y el uso en algunos procesos industriales. Un primer paso para valorar el potencial uso de la cascara de cacao derivada de la producción de cacao en México, consiste el análisis y la determinación de la composición química. En el presente trabajo se dan a conocer los resultados de la obtención y caracterización química de la Cascara de Cacao *Theobroma cacao* L. procedente de la región de cárdenas tabasco, dicha caracterización química de la cascara presento un porcentaje de celulosa 63.07 ± 0.19 , Hemicelulosa 43.62 ± 1.19 , lignina 30.01 ± 0.72 , Cenizas 2.81 ± 0.06 y extraíbles del 20.82%. No se encontraron diferencias notables con datos reportados por otros autores en cascara de cacao de otras partes del mundo, sin embargo, este conocimiento es un aporte para futuros usos de la cascara de cacao.

Palabras claves: Residuos Lignocelulosicos, *Theobroma cacao* L, Cascara de Cacao,

Abstract:

Cocoa Pod Husk (CPH), which corresponds to 90% of the fruit is an abundant and underused lignocellulosic residue. This low-cost raw material is attractive to promote the production and processing of different products and the use in some industrial processes. A first step to assess the

³⁸ Laboratorio de Productos Naturales, AP 74 Oficina de Correos Chapingo, Universidad Autónoma Chapingo. Km. 38.5 Carretera México-Texcoco. Texcoco, Estado de México, 56230. hozuleta_13@hotmail.com

³⁹ Departamento de Ingeniería Agroindustrial, Universidad Autónoma Chapingo, Km. 38.5 Carretera México- Texcoco, 56230 Chapingo, Estado de México, México.

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



inifap



potential use of cocoa derived from cocoa production in Mexico consists of analysis and determination of chemical composition. In the present work, the results of the obtaining and chemical characterization of the CPH (*Theobroma Cacao* L) from the region of Cárdenas Tabasco are reported, this chemical characterization of the CPH presented a percentage of cellulose 63.07 ± 0.19 , Hemicellulose 43.62 ± 1.19 , lignin 30.01 ± 0.72 , ash 2.81 ± 0.06 and 20.82% extractable. No notable differences were found with data reported by other authors in CPH from other parts of the world, however this knowledge is a contribution to future uses of CPH

Keywords: Lignocellulosic residues, *Theobroma cacao* L, Cocoa pod Husk,

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



inifap



Introducción

El cacao (*Theobroma cacao* L) es un importante y económico cultivo en países en desarrollo. La producción de cacao en 2018-2019 fue de 4,784 millones de toneladas en todo el mundo (International Cocoa Organization, 2021). Al retirar los granos de las mazorcas de cacao se generan grandes cantidades de subproductos subexplotados, incluida la cáscara de la mazorca de cacao (Cocoa Pod Husk, CPHPH) y la pulpa. La CPH pesa alrededor del 67-76% de la fruta entera y es el principal subproducto del proceso de obtención del chocolate (Babatope, 2005). La CPH está infraexplotado como recurso renovable rico en fibra dietética, lignina, moléculas plataforma, biocombustibles, antioxidantes bioactivos como los polifenoles (Yapo, Besson, Koubala, & Koffi, 2013). Estos compuestos bioactivos tienen muchas aplicaciones, incluidas, energía renovable, biopolímeros, compuestos plastificados, estos pueden actuar como elemento fertilizante (Djeke, Angui, & Kouadio, 2011). La recuperación de estas fracciones lignocelulósicas y los diversos pretratamientos, además de ofrecer compuestos bioactivos puede conducir al desarrollo de unos productos rentables como: los biocombustibles (metano, etanol, butanol, hidrógeno), azúcares reductores y productos materias primas químicas (furfural, acetato, nanoestructuras de celulosa, xilitol, entre otros). Lo anterior, podría generar ingresos para los agricultores, promoviendo así el desarrollo económico (Vriesmann, Teófilo, & Petkowics, 2011).

Materiales y Métodos

Materiales

Los materiales utilizados son materiales básicos de laboratorio, como equipo de extracción Soxhlet, matraces de bola y Erlenmeyer, vasos de precipitado, cristalizadores, termómetros, dedales de extracción de celulosa, crisoles Gooch, crisoles de cerámica, embudos, desecador, tamices para diferentes tamaños de partícula, placas de calentamiento con agitación, rotavapor y campana de extracción, molino tipo Willey y horno de secado, mufla y balanza analítica. Además de algunos reactivos y solventes como: H_2SO_4 , CH_3COOH , $NaClO_2$, $NaOH$, H_2O destilada, C_6H_{14} , CH_2Cl_2 y CH_3OH .

Material Vegetal

La cascara de cacao de la variedad forastero se colecto en el municipio de Cunduacán, Tabasco, México. La cascara se preparó para los análisis de acuerdo a la norma TAPPI T264 cm-97.

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



inifap



Preparación de muestra

La preparación de la muestra consistió en secado de las cáscaras al sol hasta peso constante, trituración en molino tipo Willey y tamizado en cribas de mallas No. 45,60, 80 y 100 para la clasificación de tamaños de partícula de 355, 250, 180 y 150 μm respectivamente. La harina de cáscara de cacao retenida en la malla no. 60 de 250 μm de tamaño de partícula es la utilizada para todas las determinaciones químicas. Todas las determinaciones se hicieron por cuadruplicado.

Métodos

La obtención de los extraíbles se realizó tomando como base la norma TAPPI T 204 cm-97, utilizando como solventes hexano, diclorometano y metanol. Brevemente la indicación consiste en tomar una muestra de 8 g base seca, la cual se introdujo en un dedal de extracción de celulosa, en equipo Soxhlet con 150 ml de hexano durante 4 horas de reflujo, luego se repitió el mismo proceso en 150 ml de diclorometano y finalmente en 150 ml de metanol durante 5 horas. Al término de cada proceso de extracción con cada uno de los disolventes, la muestra sólida se secó hasta peso constante, y el disolvente con los extraíbles se eliminó a presión reducida en un rotavapor. La cantidad de extractos se calculó como la relación en porcentaje de los pesos anhidros del residuo de cada disolvente menos el blanco entre la muestra inicial multiplicados por 100. En cuanto a la lignina, se determinó de acuerdo a la norma TAPPI T 222 om-02: se colocó en un baño de agua a 20°C, 1 g de muestra seca libre de extraíbles en un vaso de precipitado de 100 ml, al que se añadieron 15 ml de H_2SO_4 al 72%, la muestra se mantiene con agitación suave y constante durante 2 h, al término de este tiempo se detuvo la agitación de la muestra, se agregaron 30 ml de H_2O destilada, la mezcla se transfirió a un matraz bola de 1000 ml, se agregan 545 ml más de H_2O destilada alcanzando una concentración del 3% del H_2SO_4 , esta muestra se colocó en ebullición con reflujo durante 4 horas, posteriormente se filtró al vacío en crisol Gooch de 50 ml porosidad ASTM 40-60 C y finalmente se secó al horno a 105°C hasta peso constante. La lignina insoluble en ácido se determinó en porcentaje como el peso del residuo multiplicado por 100 entre la muestra libre de extractos. La holocelulosa se determinó de acuerdo a la norma ASTM D-1104; la cual consistió en colocar 2.5 g de muestra libre de extraíbles en matraz Erlenmeyer de 250 ml, se añadió 80 ml de H_2O destilada, 0.5 ml de CH_3COOH y 1 g de NaClO_2 , este proceso se mantuvo a 75°C durante 4 horas, agregando cada hora 0.5 ml de CH_3COOH y 1 g de NaClO_2 . La muestra se filtró en crisol Gooch y se lavó con 150 ml de H_2O destilada, se eliminó el agua por evaporación presión reducida, hasta peso constante para la cuantificación. El contenido de holocelulosa se expresa en porcentaje como la relación del peso de residuo entre el peso de la muestra libre de extractos multiplicado por 100. La celulosa se determinó de acuerdo a la norma TAPPI T 203 cm-99, en donde se partió de una muestra de 2 g de holocelulosa, se colocó en un vaso de precipitado de 250

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



iniqap



ml, el cual se llevó a un baño de agua de 20°C, se adicionaron 10 ml de NaOH al 17.5% y 15 ml más en intervalos de 5 ml cada 5 minutos, para un total de 25 ml de NaOH 17.5% y se dejó en reposo durante 30 minutos, al término de 45 minutos se añadieron 33 ml H₂O destilada y se dejó en reposo durante 1 h más, posteriormente se pasó a filtración en crisol Gooch para lavado de flujo lento con 100 ml de NaOH al 8.3%, 100 ml de H₂O destilada, 15 ml de CH₃COOH y finalmente lavado con H₂O destilada hasta pH neutro. Se filtró al vacío de acuerdo a la norma. El contenido de celulosa se determinó una vez seco el residuo en horno hasta peso constante, el resultado expresado en porcentaje es la relación del peso anhidro del residuo entre el peso anhidro de la holocelulosa multiplicado por 100. El contenido de hemicelulosas se determinó con la diferencia entre los valores de holocelulosa menos celulosa. En el caso de cenizas, se determinó con 1 gramo de muestra, la cual se colocó en un crisol de porcelana seco y de peso conocido, el crisol se introdujo en una mufla y se calentó hasta llegar a 575°C durante dos horas, donde se incineró sin producir flama, posterior a esto, se sacó, enfrió en desecador y pesó, se regresó la muestra a la mufla con las mismas condiciones de temperatura y se dejó una hora más para llevar a peso constante. El calculo se realizó con el peso de la ceniza multiplicado por 100 entre el peso inicial de la muestra, para el reporte de resultados en porcentaje.

Resultados y Discusión

Los resultados obtenidos de la cuantificación del material lignocelulósico se muestran en el Cuadro 1.

Cuadro 1. Componentes lignocelulósicos del cacao en México

Extraíbles (%)	20.82	Hexano	0.48 ± 0.03		
		Diclorometano	0.21 ± 0.01		
		Metanol	20.12 ± 0.16		
Lignina (%)	30.01 ± 0.72			Cenizas	1.80 ± 0.20
Holocelulosa (%)	43.62 ± 1.19	celulosa	63.07 ± 0.19	Cenizas	2.81 ± 0.06
		Hemicelulosa	36.93 ± 0.19		

Los extraíbles totales obtenidos fueron de 20.82%, de los cuales el 20.12 %, de la totalidad de extraíbles corresponde a los solubles en metanol, los cuales podrían ser carbohidratos de bajo peso molecular y sales, el 0.21% corresponde a los solubles en diclorometano, que, con base en la norma

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



utilizada, estos podrían ser además de ceras y grasas, resinas y fitoesteroles y con un porcentaje muy bajo del 0.48% están los extraíbles en hexano, de acuerdo con la norma de estudio, el hexano puede extraer en los materiales lignocelulósicos ceras y grasas. El contenido de extraíbles encontrado en este trabajo es cercano al $23.66\% \pm 1.77\%$ reportado por Titiloye et al., (2013). El contenido de lignina derivado de la cáscara de cacao $30.01 \pm 0.72\%$ se puede identificar como equivalente al $24.16\% \pm 2.6\%$, reportado por Sandesh et al., (2020) y cercano al $27.9\% \pm 2.1\%$ reportando por Redgwell et al., (2003), como también por Asiedu, Neba, & Addo (2019), los cuales utilizaron el método de lignina Klason, equivalente a la norma utilizada en este estudio. Sin embargo, el contenido de lignina reportado en este estudio está muy por encima del 14.7% reportado por Daud et al., (2014), lo anterior se indica de acuerdo a la norma T 222 om-06 utilizada en este trabajo. El contenido de holocelulosa en CPH de este estudio arroja un valor de 43.62 ± 1.19 en el cual se concentran los valores de α -celulosa 63.07 ± 0.19 y hemicelulosa de 36.93 ± 0.19 con respecto a la holocelulosa, en este aspecto para holocelulosa el valor es bajo de acuerdo al reporte de Asiedu, Neba, & Addo (2019), cuadro 2.

Cuadro 2. Componentes lignocelulósicos de cacao de dos distintos países

País	Lignina (%)	Holocelulosa (%)	Referencia
India	24.16	45	Sandesh, Shishir, & Vaman Rao, 2020
Ghana	18.19	61.09	Asiedu, Neba, & Addo, 2019

El contenido de celulosa en cáscara de cacao para este trabajo, presenta valores muy cercanos próximos a los encontrados en la literatura los cuales son de: 35.4% y 35% reportados por Daud et al., (2014) y Campos-Vega et al., (2018) respectivamente. Daud et al., (2014) reportó el método clorito equivalente al usado en este trabajo. En cuanto al contenido de hemicelulosas calculado en este trabajo, el cual fue de 36.93 ± 0.19 , está cercano al $16.75\% \pm 9.6\%$ y 22.4% reportados por Sandesh et al., (2020) y Redgwell et al., (2003) respectivamente. Finalmente, el contenido de cenizas reportado en este estudio de 4.61% se encuentra en un rango menor a 6.7% - 10.02% y 6.7% - 13% reportados por Vázquez et al., (2019) y Campos-Vega et al., (2018) respectivamente.

Conclusiones

Se encontraron ligeras diferencias en los datos reportados por otros autores y los datos obtenidos en este trabajo respecto a los componentes de cáscara de cacao podrían ser atribuidas a la materia

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



inifap



prima de estudio, el método de análisis y las diferentes ubicaciones geográficas de colecta. La mayoría de los datos obtenidos en este trabajo coinciden en rangos de porcentaje con los reportados en la literatura para variedades similares siempre están dentro del amplio rango encontrado en la literatura. Se destaca a la lignina es el segundo componente más abundante en CPH variedad forastero, además, el porcentaje de lignina es superior en comparación con lo reportado para otros CPH de distintas regiones, lo anterior constituye una notable observación que encamina los objetivos del proyecto hacia sus metas finales.

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



inifap



Literatura Citada

- Asiedu, N., Neba, F., & Addo, A. (2019). Modeling the attainable regions for catalytic oxidation of renewable biomass to specialty chemicals: Waste biomass to carboxylic acids. *South African Journal of Chemical Engineering*, 1-14.
- Babatope, B. (2005). Rheology of cocoa-pod husk aqueous system. Part-I: Steady state. *Rheological Acta*, 72-76.
- Campos-Vega, R., Nieto-Figueroa, K. H., & Oomah, B. D. (2018). *Cocoa (Theobroma cacao L.) pod husk: renewable source of bioactive compounds. Trends in Food Science & Technology*. doi:10.1016/j.tifs.2018.09.022
- Daud, Z., Awang, H., Mohd Kassim, A. S., Mohd Hatta, M. Z., & Mohd Aripin, A. (2014). Cocoa Pod Husk and Corn Stalk: Alternative Paper Fibres Study on Chemical Characterization and Morphological Structures. *Advanced Materials Research*, 911, 331–335. doi:10.4028/www.scientific.net/amr.911.331
- Djeke, M., Angui, P., & Kouadio, Y. (2011). Descomposition of ground cocoa shells in ferralitic soils in the Oumé zone, west-central Côte d'Ivoire effects on soil chemical characteristics. *Biotechnology, Agronomy, Society and Environment*, 109-117.
- International Cocoa Organization. (26 de Febrero de 2021). *The International Cocoa Organization*. Obtenido de Statistics: https://www.icco.org/wp-content/uploads/Production_QBCS-XLVII-No.-1.pdf
- Norma ASTM D10377.
- Norma TAPPI. T 204 cm-97. Solvent extractives of Wood and Pulp.
- Norma TAPPI. T 222 om-97. Acid-insoluble lignin in Wood and Pulp.
- Norma TAPPI. T 264 cm-97. Preparation of Wood for chemical analysis.
- Redgwell, R., Trovato, V., Merinat, S., Curti, D., Hediger, S., & Manez, A. (2003). *Dietary fibre in cocoa shell: characterisation of component polysaccharides. Food Chemistry*, 81(1), 103–112. doi:10.1016/s0308-8146(02)00385-0
- Sandesh, K., Shishir, R. K., & Vaman Rao, C. (2020). Optimization and comparison of induction heating and LPG assisted acid pretreatment of cocoa pod for ABE fermentation. *Fuel*, 262, 116499. doi:10.1016/j.fuel.2019.116499
- Vásquez, Z. S., de Carvalho Neto, D. P., Pereira, G. V. M., Vandenberghe, L. P. S., de Oliveira, P. Z., Tiburcio, P. B., ... Soccol, C. R. (2019). *Biotechnological approaches for cocoa waste management: A review. Waste Management*, 90, 72–83. doi:10.1016/j.wasman.2019.04.030

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



inifap



- Vriesmann, L., Teófilo, R., & Petkowics, C. (2011). Optimization of nitric acid-mediated extraction of pectin from cacao pod husks (*Theobroma cacao* L.) using surface methodology. *Carbohydrate Polymers*, 1230-1236.
- Titiloye, J. O., Abu Bakar, M. S., & Odetoye, T. E. (2013). Thermochemical characterisation of agricultural wastes from West Africa. *Industrial Crops and Products*, 47, 199–203. doi:10.1016/j.indcrop.2013.03.011
- Yapo, B., Besson, V., Koukala, B., & Koffi, K. (2013). Adding Value to Cacao Pod Husks as a Potential Antioxidant-Dietary Fiber Source. *American Journal of Food and Nutrition*, 28-16.

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



inifap



Características estructurales y propiedades fisicoquímicas del almidón de huauzontle (*Chenopodium nuttalliae* saff.)

López-Monterrubio, Diana I.⁴⁰; Vernon-Carter, E. Jaime⁴¹; Lobato-Calleros, Consuelo⁴²;
Alvarez-Ramirez, Jose⁴³

Resumen

Las tendencias actuales marcan la pauta para la búsqueda de fuentes naturales y novedosas de biopolímeros. El almidón es uno de los biopolímeros más usados por la industria alimentaria. Este trabajo tuvo como objetivo evaluar las propiedades fisicoquímicas, funcionales y estructurales del almidón nativo de semilla de huauzontle (*Chenopodium nuttalliae* saff.). Obteniendo un rendimiento de extracción superior al 50% y un contenido de amilosa inferior al 10%. Asimismo, por su reducido tamaño de partícula el almidón de huauzontle puede clasificarse como un almidón muy pequeño y mostró un patrón de difracción de rayos x congruente con otros pseudocereales. Además de una alta capacidad de retención de agua (99.6 %). Estos resultados mostraron que el almidón nativo de huauzontle cuenta con características tecnológicas deseables.

Palabras clave: Almidón, Huauzontle, Propiedades fisicoquímicas, Pseudocereal

Abstract

Current trends set the standard for the search for natural and novel sources of biopolymers. Starch is one of the biopolymers most used by the food industry. This work aimed to evaluate the physicochemical,

⁴⁰ Doctorado en Biotecnología. Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa. ixelmonterrubio@gmail.com

⁴¹ Departamento de Ingeniería de Procesos e Hidráulica, Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa. Av. San Rafael Atlixco No. 186, Col. Vicentina, Delegación Iztapalapa, México, D.F. C.P. 09340. jvc@xanum.uam.mx

⁴² Departamento de preparatoria agrícola. Universidad Autónoma Chapingo. Carretera México-Texcoco, km 31.5, Texcoco Estado de México, CP 56230. consuelobato@yahoo.com

⁴³ Departamento de Ingeniería de Procesos e Hidráulica, Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa. Av. San Rafael Atlixco No. 186, Col. Vicentina, Delegación Iztapalapa, México, D.F. C.P. 09340. jjar1963@gmail.com

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



iniqap



functional and structural properties of the native starch of huauzontle seed (*Chenopodium nuttalliae* saff.). Obtaining an extraction yield greater than 50% and an amylose content less than 10%. Likewise, due to its small particle size, huauzontle starch can be classified as a very small starch and showed an x-ray diffraction pattern congruent with other pseudo-cereals. In addition to a high-water retention capacity (99.6%). These results showed that native huauzontle starch has desirable technological characteristics.

Keywords: Starch, Huauzontle, Physicochemical properties, Pseudo-cereal

Introducción

El almidón es una macromolécula de gran importancia económica ya que es uno de los carbohidratos primarios en la dieta humana (Toutounji *et al.*, 2019), su estructura se compone de dos tipos de moléculas llamadas amilosa y amilopectina, la primera lineal (1,4)- α -D-glucano y la segunda ramificada con enlaces (1,4)- α -D entre los residuos de D-glucosa y puntos de ramificación (1,6)- α -D. Además, cuenta con una amplia gama de aplicaciones en diversos ámbitos como lo son el alimentario, farmacéutico y textil por mencionar algunos (Castanha *et al.*, 2018). Sin embargo, es bien sabido, que la industria demanda nuevas fuentes de almidón con propiedades y características únicas, cuyos costos de producción sean mínimos. Debido a esto, los estudios sobre almidones nativos de fuentes nuevas son esenciales para diversificar la gama de almidones utilizados por la industria, así como, para mejorar el uso de estos. Los pseudocereales son dicotiledóneas y producen semillas con una alta proporción de almidón (Jan *et al.*, 2017).

Las características intrínsecas de los almidones como son su tamaño molecular, forma y composición se encuentran fuertemente influenciadas por el origen botánico, lo cual conlleva a diferentes propiedades funcionales y por tanto diferentes aplicaciones (Castanha *et al.*, 2018). En consecuencia, este trabajo tuvo como objetivo caracterizar las propiedades fisicoquímicas, funcionales y estructurales del almidón nativo de semilla de huauzontle (*Chenopodium nuttalliae* saff.).

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



inifap



Metodología

Materiales

La semilla de Huauzontle (*Chenopodium nuttalliae saff.*) se obtuvo de un productor local de la comunidad de Tepoztlán, Morelos, México, con coordenadas GPS de 18 ° 59 '7 "N y 99 ° 5' 59" W y una elevación sobre el nivel del mar de 1.706 m. El ácido clorhídrico (HCl), el hidróxido de sodio (NaOH) y el etanol fueron de calidad analítica y se compraron a J.T. Baker (Xalostoc, Estado de México, México). El agua utilizada en todos los experimentos fue destilada y desionizada.

Extracción de almidón

El almidón se extrajo según la metodología utilizada por Medina *et al.* (2010), con algunas modificaciones, la semilla de huauzontle se tamizaron para eliminar las impurezas y se sumergieron en agua destilada durante 1 hora en una proporción de 1: 6. Posteriormente se molieron en una licuadora (Oster 465-15, México) durante 1 minuto, a partir de esto se obtuvo una suspensión que posteriormente se filtró, esto se repitió 3 veces. La suspensión se centrifugó a 6500 rpm durante 10 min, a 21°C en una centrífuga 5810R, Eppendorf, Hamburgo, Alemania), se eliminó el sobrenadante y se lavó el sedimento con agua destilada y se centrifugó a 6500 rpm durante 10 min, a 21°C, tres veces más. El almidón se secó en una estufa de aire forzado a 40 ° C durante 24 horas (HCF-62, Riossa Digital, Puebla, México).

Composición química

El análisis de humedad, ceniza, fibra, proteína total y lípidos totales se llevó a cabo como se describe en AOAC (2000). El carbohidrato libre de nitrógeno total se calculó por la diferencia {100 - (% de proteínas +% de lípidos +% de fibra +% de cenizas)}. La proteína total se determinó mediante el método Kjeldhal (N: 6.25).

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



inifap



Contenido de amilosa aparente

El contenido aparente de amilosa se determinó de acuerdo con la metodología ISO. Primero se hizo una curva de referencia usando amilopectina y amilosa como estándar. 200 mg, base seca; de almidón de huauzontle se dispersó en 1 mL de etanol (96%) y 10 mL de NaOH (1 M), con agitación constante durante 1 h. La solución se transfirió a un matraz de vidrio volumétrico (100 mL) y el volumen se completó con agua destilada. Se mezcló una alícuota de 2 mL de esta solución con 2.1 mL de ácido clorhídrico (0.1 M), 2 mL de solución de yoduro (2 g de yoduro de potasio + 0.2 g de yodo + agua (hasta 100 mL)), y el volumen fue completado con agua destilada. Después de 30 min de reposo en una habitación oscura, se leyó la absorbancia a 620 nm y 510 nm.

Morfología del gránulo: microscopía electrónica de barrido (SEM) y distribución del tamaño de partícula.

Se usó microscopía electrónica de barrido para evaluar la morfología y el aspecto general de los gránulos de almidón. El microscopio se operó a un voltaje de aceleración de 15 kV con un aumento de 5000 y 10000x. El almidón seco se montó en soportes de aluminio y se cubrió con una fina capa de oro en un Fine Coat Ion Sputter JFC 1100 (Jeol Ltd., Akishima, Japón) y luego se evaluó en el microscopio.

La distribución de tamaño de los gránulos de almidón se determinó mediante análisis de difracción por láser (Mastersizer 3000, Malvern Instruments Ltd., Malvern, Reino Unido). La muestra de almidón (50 mg, base seca) se suspendió en 5 mL de agua y se agitó suavemente para dispersar los almidones. La suspensión se agregó lentamente al Mastersizer y el oscurecimiento se ubicó en el intervalo de 15-20%.

Calorimetría diferencial de barrido (DSC)

Las características térmicas del almidón se estudiaron mediante calorimetría diferencial de barrido (DSC) (TA Instruments, Q1000, New Castle, DE, EE. UU.) Previamente calibradas con indio. La temperatura de

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



iniqap



gelatinización se evaluó según lo indicado por Hoyos-Leyva *et al.* (2017) con ligeras modificaciones. Las muestras (3 mg en base seca) se pesaron directamente en bandejas de aluminio DSC y se agregaron 7 μ L de agua desionizada. Después del sellado, las bandejas se dejaron equilibrar una hora a temperatura ambiente antes de llevar a cabo el análisis. Las muestras se calentaron de 25 a 150 ° C a una velocidad constante de calentamiento de 10 ° C/min. Se utilizó una bandeja de aluminio vacía como referencia. Las temperaturas (To-onset, Tp-peak, Te-end) y la entalpía de las transiciones térmicas (ΔH , J g⁻¹) se calcularon utilizando un software asociado (Universal Analysis 2000, New Castle, DE, EE. UU.).

Espectroscopia infrarroja de transformada de Fourier (FTIR)

Los espectros infrarrojos se registraron con un espectrofotómetro FTIR (Frontier, Perkin Elmer, Ciudad de México, México), equipado con un accesorio de reflectancia total atenuado universal. La muestra seca (10 mg) de almidón se puso en contacto con el cristal de diamante utilizando un ajuste de geometría de 60 unidades de medidor de fuerza, y la absorbancia en números de onda de 4000 cm⁻¹ a 400 cm⁻¹ con una resolución de 4 cm.

Análisis de difracción de rayos X

La cristalinidad de las muestras de almidón en polvo se determinó utilizando un difractómetro de rayos X, Siemens D-5000 (Siemens D5000, Bruker AXS GmbH, Karlsruhe, Alemania) con las siguientes condiciones: la radiación CuK α ($\lambda = 1.543 \text{ \AA}$) y un haz secundario monocromado de grafito operado a 40 kV y 30 mA. Se utilizó el paquete de software Origin Pro para determinar el área total bajo la curva. El porcentaje de cristalinidad se calculó utilizando la siguiente fórmula:

$$\%Cristalinidad = \frac{(Area \text{ bajo los picos})}{Area \text{ total}} \times 100$$

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



Capacidad de absorción de agua.

Se utilizó el método de Beuchat (1977), que se basa en la adición de 10 mL de agua destilada a 1 g de la muestra en tubos de centrífuga. La suspensión se homogeneizó durante 30 segundos y luego se dejó reposar durante 30 minutos. Posteriormente, los tubos se cerraron y se centrifugaron durante 15 minutos a 3000 rpm, descartando el sobrenadante. Las paredes externas de los tubos se secaron y se pesaron. La masa de agua absorbida se expresó como g / 100 g de almidón de acuerdo con la fórmula siguiente:

$$AC = (\text{peso del tubo con muestra húmeda} - \text{peso del tubo con muestra seca}) \times 100$$

Poder de hinchamiento y solubilidad

Estas propiedades se determinaron a temperaturas de 60, 70, 80 y 90 ° C de acuerdo con el método descrito por de Castro et al. (2018). Para este análisis, se pesaron 25 mg de almidón huauzontle por triplicado en tubos de ensayo de polipropileno de 15 mL, previamente tarados, se mezclaron con 10 mL de agua destilada, posteriormente se homogeneizó la suspensión y se llevó a baño de agua a las temperaturas anteriormente mencionadas, durante 30 min, las muestras se homogeneizaron cada 10 min. Luego, la muestra se centrifugó a 3200 rpm durante 15 min. El sobrenadante se recogió, se colocó en un vaso previamente pesado y se llevó al horno a 105 ° C durante 24 h, para determinar el peso del almidón soluble. El índice de solubilidad y el poder de hinchamiento se calcularon mediante las siguientes fórmulas:

$$\text{Solubilidad (\%)} = \frac{\text{Peso del sobrenadante en base seca}}{\text{Peso de la muestra}} \times 100$$

$$\text{Poder de hinchamiento (g/g)} = \frac{\text{Peso del sedimento}}{\text{Peso de la muestra} \times (100 - \% \text{ solubilidad})}$$

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



inifap



Resultados

Rendimiento de extracción y características químicas del almidón.

La composición química del almidón de semilla de huauzontle se presenta en la **Tabla 1**. El contenido de cenizas fue mayor que el reportado para almidones comerciales como papa y maíz (0.21 y 0.32, respectivamente, Przetaczek-Roznowska, 2017). Además, se encontró un alto contenido de proteína, pero un bajo nivel de grasa, lo que hace que el almidón de semilla de huauzontle sea un ingrediente alimentario saludable (Wang *et al.*, 2019). El contenido total de carbohidratos fue de 85 % (base húmeda), resultando en un almidón con suficiente pureza (Felisberto *et al.*, 2019). Aunado a esto se obtuvo un rendimiento del 55 %, resultados similares a los obtenidos por (Assad-Bustillos *et al.*, 2014).

Tabla 1. Composición química del almidón obtenido de la semilla de huauzontle (*Chenopodium nuttalliae* *saff.*).

Parametro	Huauzontle
Humedad	11.93 ± 0.05
Cenizas	0.60 ± 0.02
Proteína	1.26 ± 0.00
Extracto etereo	0.26 ± 0.02
Fibra	0.21 ± 0.00
Carbohidratos	85.75 ± 0.05
Amilosa amarente	9.94 ± 0.04
Amilopectina	90.05 ± 0.04

Resultados expresados como medias ± desviación estándar.

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



inifap



Contenido de amilosa aparente

El contenido de amilosa en el almidón de semilla de huauzontle fue de 9.94 ± 0.04 % (**Tabla 1**), este resultado concuerda por lo reportado por Assad-Bustillos *et al.*, 2014 (10 %). El contenido de amilosa depende de las características de la cadena de amilosa-amilopectina en cada almidón (Zabot *et al.*, 2019), el cual se encuentra influenciado por las características botánicas y los métodos de determinación (de Castro *et al.*, 2018). Los almidones cerosos contienen casi exclusivamente amilopectina y son deseables para la dieta humana debido a sus efectos prebióticos y los beneficios de salud asociados para el colón (Šárka & Dvořáček, 2017). Así mismo, las propiedades funcionales de los almidones dependerán de su contenido de amilosa, aquellos con bajo contenido, como lo es el almidón de semilla de huauzontle, tienden a la alta retención de agua y a proveer texturas pegajosas y porosas, por lo cual gelatinizan con facilidad además de que los geles producidos cuentan con claridad, debido a esto, son ideales para su uso en sopas, salsas, pudines y alimentos para bebés (Abegunde *et al.*, 2013; Šárka & Dvořáček, 2017).

Morfología y distribución del tamaño de partícula

En la **Fig. 1** se presenta la morfología del almidón de semillas de huauzontle tomadas por microscopía electrónica de barrido (SEM). La morfología es un análisis importante para la caracterización de productos en polvo. Las propiedades físicas del almidón como lo son la gelatinización, la cristalinidad y la solubilidad se ven fuertemente influenciados por el tamaño del gránulo (Wijaya *et al.*, 2019). Los gránulos de almidón de huauzontle son irregulares, de forma angular y poligonal, con superficies casi lisas, similares a los almidones de quínoa (Jan *et al.*, 2016). En general, el tamaño de las partículas se ve corroborado por los resultados presentados en este estudio, los gránulos de almidones de semilla de huauzontle presentaron un diámetro promedio de 1.35 ± 0.10 μm , el cual es clasificado como gránulos muy pequeños (Lindeboom *et al.*, 2004). El tamaño de partícula de los almidones tiene una gran influencia sobre la aplicación de estos,

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



inifap



por ejemplo, gránulos finos son ideales para productos altos en grasa, ya que se utilizan como sustitutos de esta (Abegunde *et al.*, 2013).

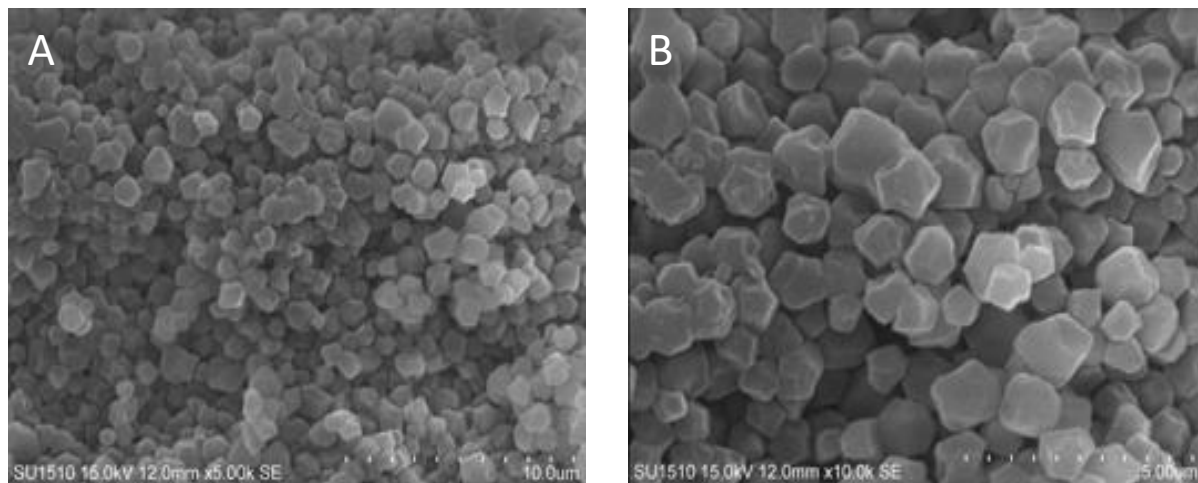


Figura 1. Morfología del almidón de la semilla de huauzontle observada por SEM (A, B).

Calorimetría diferencial de barrido (DSC)

El termograma de gelatinización (**Fig. 2**) mostró una curva amplia de la transición térmica del almidón de huauzontle, lo cual, puede ser relacionado con la lenta lixiviación de las cadenas de amilosa durante el proceso de hinchamiento, esto se corrobora con el alto rango de gelatinización (Hoyos-Leyva *et al.*, 2017). La estabilidad estructural del almidón comenzó a romperse a los $T_o = 60.51$ °C, a medida que se alcanzó la temperatura máxima ($T_p = 65.4$ °C), algunas partes cristalinas se vuelven amorfas debido a la hinchazón de la región, propiciando la disociación y desdoblamiento de las dobles hélices (Wijaya *et al.*, 2019). El valor de T_p se encuentra directamente relacionado con el contenido de amilosa, por su parte, la amilopectina posee baja estabilidad térmica gracias a su estructura ramificada, ocasionando valores de T_p menores, lo cual podría corroborar los valores obtenidos en este estudio (Wijaya *et al.*, 2019).

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



inifap



El ΔH es un indicador de la pérdida de orden molecular dentro del gránulo durante la gelatinización debido al rompimiento de los puentes de hidrógeno (Alvani *et al.*, 2011), valores bajos sugieren una menor estabilidad de los cristales, lo cual puede estar relacionado con el tamaño del granulo, la forma del granulo y la longitud de la cadena de amilopectina (Wani *et al.*, 2010). El almidón de huauzontle mostró un valor de entalpia bajo (3.97 J/g), el cual fue similar a los valores de ΔH de quinoa (4.3 J/g, Jan *et al.*, 2017), bambu (4.07 J/g, Felisberto *et al.*, 2019) y ñame (3.86 J/g, Sharlina *et al.*, 2017), los bajos valores de entalpia pueden ser asociados con una menor cantidad de dobles hélices en las moléculas de amilopectina (Hoyos-Leyva *et al.*, 2015), por otro lado puede encontrarse relacionado con el bajo contenido de amilosa de la muestra, puesto que mayores contenidos de amilosa resultan en entalpías más altas (Jan *et al.*, 2017).

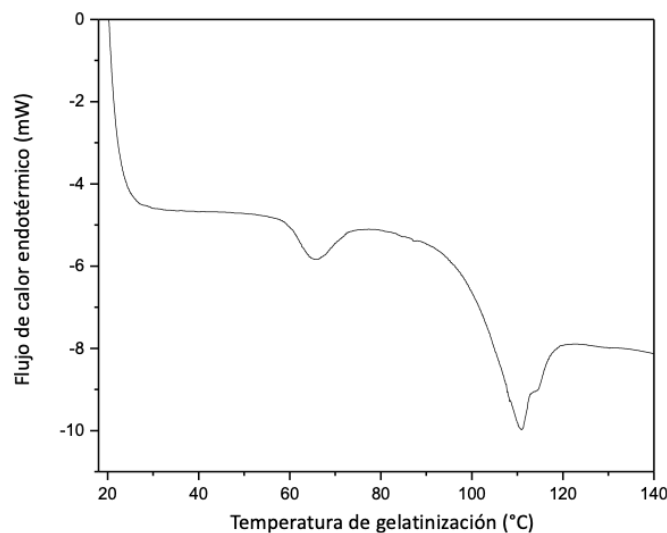


Figura 2.- Calorimetría diferencial de barrido de almidón de semilla huauzontle..

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



Espectroscopia por transformada de Fourier

Los espectros FTIR de los almidones de semilla de huauzontle se muestran en la **Figura 3**. Los espectros de los almidones de semilla de huauzontle mostraron un patrón similar a los reportados para amaranto y quinoa, con picos notables de absorbancia en las longitudes de onda 3318, 2931, 1639, 1344, 1014 cm^{-1} . La frecuencia de estiramiento a aproximadamente 3318 cm^{-1} se asignó al grupo O-H (Jan *et al.*, 2016). El pico observado a 2931 cm^{-1} se atribuyó a los estiramientos de C-H (Jan *et al.*, 2017). El almidón también mostró una banda ancha de estiramiento asimétrico C=N y C=C debido a la presencia del esqueleto de enlace glicosídico en la región de 1200-900 cm^{-1} , por su parte, las bandas anchas en la región de 800-500 cm^{-1} representan los modos vibracionales de flexión del anillo de glucosa piranosa (Jan *et al.*, 2016). La presencia de moléculas de agua asociadas con el granulo de almidón está denotada por el pico a 1639 cm^{-1} (Wijaya *et al.*, 2019). Por su parte, las bandas encontradas a 1150 y 1077 cm^{-1} están relacionadas con las regiones cristalinas y amorfas dentro de los gránulos de almidón, respectivamente (Hoyos-Leyva *et al.*, 2017).

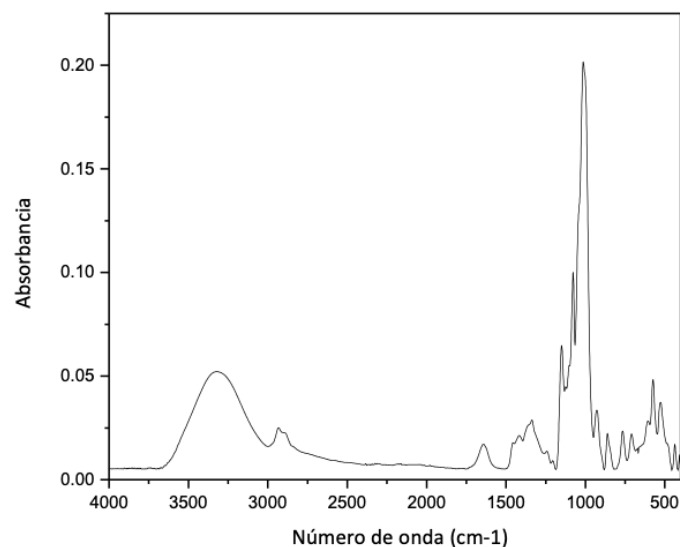


Figura 3. Espectro FTIR de almidón de huauzontle.

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



inifap



Patrón de difracción de rayos X y contenido de cristalinidad.

La **Figura 4** muestra el patrón de difracción de rayos X del almidón de semilla de huauzontle. El almidón mostro picos de difracción a 15.1° y 22.9° y, un doblete a 16.9° y $18.1^\circ 2\theta$, lo cual indica que presenta una estructura cristalina de tipo A (Fuentes *et al.*, 2019). Estos resultados están de acuerdo con otros pseudocereales, como la quínoa (Jan *et al.*, 2016), el cual pertenece a la misma familia taxonómica del huauzontle. La amilopectina con estructura cristalina tipo A se caracteriza por una longitud de cadena de 23 a 29 unidades de glucosa y puentes de hidrógeno entre sus grupos hidroxilo, dando lugar a una estructura exterior de doble hélice (Zabot *et al.*, 2019). La disposición estructural de dos amilopectinas paralelas promueve la formación de una región cristalina (Sharlina *et al.*, 2017). Este tipo de estructura cristalina es típica de los cereales (Teixeira *et al.*, 2018).

El almidón de semilla de huauzontle tuvo un porcentaje de cristalinidad del 39.21 %, esto concuerda con informes anteriores que han indicado que los almidones tipo A cuentan con un porcentaje de cristalinidad entre el 33 y 45 % (Zhang *et al.*, 2017). De acuerdo con Hoyos-Leyva *et al.* (2017) y Felisberto *et al.* (2019) la cristalinidad del almidón está directamente relacionada con el contenido de amilopectina e inversamente al contenido de amilosa. Es bien sabido que, la amilopectina es el componente cristalino en los gránulos de almidón, por su parte la amilosa tiene carácter amorfo (Kim *et al.*, 2018).

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



inifap

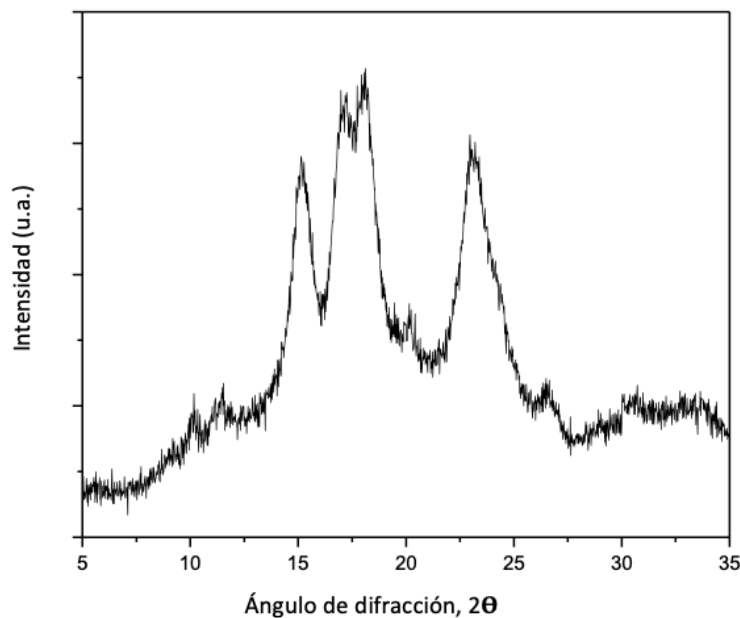


Figura 4. Diffractogramas de almidón huauzontle.

Capacidad de retención de agua

El almidón de huauzontle mostró una capacidad de retención de agua del $99.6 \pm 0.3 \%$, la alta capacidad de absorción de agua observada demuestra una característica deseable para su uso como ingrediente en productos que requieren una alta retención de agua (de Castro *et al.*, 2018). La capacidad de unión al agua del almidón de huauzontle esta dada por los enlaces de hidrógeno entre las moléculas de agua y los grupos hidroxilo en las moléculas de almidón (Sharlina *et al.*, 2017). Pequeños tamaños de partícula favorecen la alta absorción de agua, aunado a esto, las superficies lisas mostradas por los almidones son de gran importancia en la aplicación en alimentos, como podría ser en la elaboración de películas comestibles sin arrugas (Zabot *et al.*, 2019).

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



inifap



Poder de hinchamiento y solubilidad

El poder de hinchamiento y la solubilidad de los almidones de semilla de huauzontle a diferentes temperaturas (50–90 °C) se muestran en la **Figura 5**. El poder de hinchamiento y la solubilidad aumentaron a medida que aumenta la temperatura de calentamiento. El poder de hinchamiento del almidón de semilla de huauzontle varió de 3.55 a 24.45 g/g, mientras que los valores de solubilidad estuvieron en el rango de 5.49 a 18.20 % en un rango de temperatura de 50 a 90 °C. Mayores temperaturas provocan una mayor vibración de las moléculas de almidón, provocando así la ruptura de los enlaces intermoleculares y favoreciendo la formación de sitios de unión con las moléculas de agua mediante puentes de hidrógeno (de Castro *et al.*, 2018). El poder de hinchamiento y la solubilización de los almidones se ve influenciado por diversos factores, como, el contenido de amilosa, las interacciones amilosa-amilopectina y amilosa-amilosa, la capacidad de retención de agua de las moléculas de almidón, el tamaño del gránulo, el grado de cristalinidad y la presencia de otros componentes menores (Jiang *et al.*, 2012; Li & Zhu, 2017). El elevado poder de hinchamiento del almidón de semilla de huauzontle se atribuyó a su bajo contenido de amilosa, ya que la amilosa inhibe el hinchamiento, diversos estudios han encontrado una correlación inversa entre el contenido de amilosa y el poder de hinchamiento (Kim *et al.*, 2018; Wijaya *et al.*, 2019). Por su parte, la baja solubilidad sugiere que puede haber interacciones adicionales entre las cadenas amilosa-amilosa y amilopectina-amilopectina (Jiang *et al.*, 2012), aunado a esto, la estructura compacta y mayor cristalinidad, típica de almidones de cereales, influyeron en la baja solubilidad de estos (Zhang *et al.*, 2017).

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021

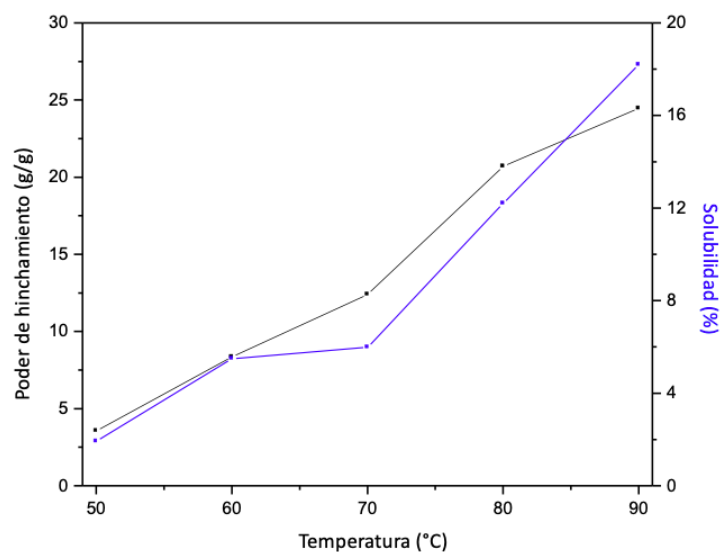


Figura 5. Poder de hinchamiento y solubilidad del almidón de huauzontle.

Conclusiones

La extracción de almidón de huauzontle es factible y cuenta con características tecnológicas deseables, como su alta capacidad de absorción de agua, su bajo tamaño de partícula, su bajo contenido de amilosa sigue que los geles de almidón de huauzontle podrían tener una baja tendencia a retrogradar. Por lo tanto, el almidón de huauzontle tiene potencial para ser utilizado como agente espesante y estabilizador en sistemas alimentarios, así como ingrediente para películas comestibles, además de un mayor uso y diversificación de este cultivo.

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



inifap



Lista de referencias

- Abegunde, O. K., Mu, T. H., Chen, J. W., & Deng, F. M. (2013). Physicochemical characterization of sweet potato starches popularly used in Chinese starch industry. *Food Hydrocolloids*, 33(2), 169-177.
- Alvani, K., Qi, X., Tester, R. F., & Snape, C. E. (2011). Physico-chemical properties of potato starches. *Food Chemistry*, 125(3), 958-965.
- AOAC. (2000). Official methods of analysis. Washington, DC, USA: Association of Official Analytical Chemists.
- Assad-Bustillos, M., Ramírez-Gilly, M., Tecante, A., & Chaires-Martínez, L. (2014). Physicochemical, functional, thermal and rheological characterization of starch from huauzontle seeds (*Chenopodium berlandieri* spp. *nuttalliae*). *Agrociencia*, 48(8).
- de Castro, D. S., dos Santos Moreira, I., de Melo Silva, L. M., Lima, J. P., da Silva, W. P., Gomes, J. P., & de Figueirêdo, R. M. F. (2018). Isolation and characterization of starch from pitomba endocarp. *Food Research International*. 124, 181-187.
- Felisberto, M. H. F., Beraldo, A. L., Costa, M. S., Boas, F. V., Franco, C. M. L., & Clerici, M. T. P. S. (2019). Physicochemical and structural properties of starch from young bamboo culm of *Bambusa tuldoidea*. *Food Hydrocolloids*, 87, 101-107.
- Fuentes, C., Perez-Rea, D., Bergentahl, B., Carballo, S., Sjö, M., & Nilsson, L. (2019). Physicochemical and structural properties of starch from five Andean crops grown in Bolivia. *International Journal of Biological Macromolecules*, 125, 829-838.
- Hoyos-Leyva, J. D., Alonso-Gomez, L., Rueda-Enciso, J., Yee-Madeira, H., Bello-Perez, L. A., & Alvarez-Ramirez, J. (2017). Morphological, physicochemical and functional characteristics of starch from *Marantha ruiziana* Koern. *LWT-Food Science and Technology*, 83, 150-156.
- Hoyos-Leyva, J. D., Bello-Pérez, L. A., Agama-Acevedo, E., & Alvarez-Ramirez, J. (2015). Optimising the heat moisture treatment of Morado banana starch by response surface analysis. *Starch-Stärke*, 67(11-12), 1026-1034.
- Jan, R., Saxena, D. C., & Singh, S. (2016). Physico-chemical, textural, sensory and antioxidant characteristics of gluten-free cookies made from raw and germinated *Chenopodium album* flour. *LWT-Food Science and Technology*, 71, 281-287.

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



inifap



- Jan, K. N., Panesar, P. S., Rana, J. C., & Singh, S. (2017). Structural, thermal and rheological properties of starches isolated from Indian quinoa varieties. *International Journal of Biological Macromolecules*, 102, 315-322.
- Jiang, Q., Gao, W., Li, X., Xia, Y., Wang, H., Wu, S., ... & Xiao, P. (2012). Characterizations of starches isolated from five different *Dioscorea* L. species. *Food Hydrocolloids*, 29(1), 35-41.
- Kim, Y. Y., Woo, K. S., & Chung, H. J. (2018). Starch characteristics of cowpea and mungbean cultivars grown in Korea. *Food Chemistry*, 263, 104-111.
- Li, D., & Zhu, F. (2017). Physicochemical properties of kiwifruit starch. *Food Chemistry*, 220, 129-136.
- Przetaczek-Rożnowska, I. (2017). Physicochemical properties of starches isolated from pumpkin compared with potato and corn starches. *International Journal of Biological Macromolecules*, 101, 536-542.
- Šárka, E., & Dvořáček, V. (2017). New processing and applications of waxy starch (a review). *Journal of Food Engineering*, 206, 77-87.
- Sharlina, M. E., Yaacob, W. A., Lazim, A. M., Fazry, S., Lim, S. J., Abdullah, S., ... & Kumaran, M. (2017). Physicochemical Properties of Starch from *Dioscorea pyrifolia* tubers. *Food Chemistry*, 220, 225-232.
- Teixeira, B. S., Garcia, R. H., Takinami, P. Y., & del Mastro, N. L. (2018). Comparison of gamma radiation effects on natural corn and potato starches and modified cassava starch. *Radiation Physics and Chemistry*, 142, 44-49.
- Wang, J. S., Wang, A. B., Ma, W. H., Xu, B. Y., Zang, X. P., Tan, L., ... & Li, J. Y. (2019). Comparison of physicochemical properties and in vitro digestibility of starches from seven banana cultivars in China. *International Journal of Biological Macromolecules*, 121, 279-284.
- Wani, I. A., Sogi, D. S., Wani, A. A., Gill, B. S., & Shivhare, U. S. (2010). Physico-chemical properties of starches from Indian kidney bean (*Phaseolus vulgaris*) cultivars. *International Journal of Food Science & Technology*, 45(10), 2176-2185.
- Wijaya, C., Do, Q. D., Ju, Y. H., Santoso, S. P., Putro, J. N., Laysandra, L., ... & Ismadji, S. (2019). Isolation and characterization of starch from *Limnophila aromatica*. *Heliyon*, 5(5), e01622.
- Zabot, G. L., Silva, E. K., Emerick, L. B., Felisberto, M. H. F., Clerici, M. T. P. S., & Meireles, M. A. A. (2019). Physicochemical, morphological, thermal and pasting properties of a novel native starch obtained from annatto seeds. *Food Hydrocolloids*, 89, 321-329.

10° CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y AGRONÓMICAS

División de Ciencias Económico Administrativas -
Universidad Autónoma Chapingo

21 y 22 de octubre de 2021



inifap



Zhang, L., Li, G., Wang, S., Yao, W., & Zhu, F. (2017). Physicochemical properties of maca starch. *Food Chemistry*, 218, 56-63.