



## **“Mass spectrometry based untargeted metabolomics in food and health area”**

**Autor: Leticia Lacalle Bergeron**

Directores: Dr. Juan Vicente Sancho Llopis y Dra. Tania Portolés Nicolau

Grupo de investigación: Química Analítica en Salud Pública y Medioambiente (Q-AMS), Instituto Universitario de Plaguicidas y Aguas (IUPA), Departamento de Química Física y Analítica, Universitat Jaume I de Castellón, 12 de mayo de 2022

### **Resumen:**

En esta Tesis Doctoral se ha evaluado la aportación de la metabolómica no dirigida en combinación con técnicas analíticas avanzadas basadas en el acoplamiento de separaciones cromatográficas con espectrometría de masas tanto de baja (MS) como de alta resolución (HRMS) en distintos estudios relacionados con el campo de la alimentación, la salud y la comunicación química intra-especie. Además, se evaluaron las ventajas que aportan los instrumentos de última generación basados en separación por movilidad iónica en combinación con espectrometría de masas de alta resolución (IMS-HRMS) en la elucidación de compuestos desconocidos.

Por un lado, se hace una revisión bibliográfica extensa del estado del arte de las técnicas estrategias más empleadas en cada etapa del flujo de trabajo de la metabolómica no dirigida. Por otro lado, se aplicó y evaluó la aproximación de la metabolómica no dirigida con distintas técnicas analíticas avanzadas en diferentes campos del conocimiento.

En el ámbito de la alimentación, se realizó un estudio cuyo objetivo era encontrar marcadores volátiles que confirmaran la diferencia entre productos pesqueros ahumados con diversas técnicas de procesado y que culminó satisfactoriamente en un modelo de clasificación. Por otra parte, se estudiaron las ventajas que la nueva combinación IMS-HRMS podía aportar para el descubrimiento de nuevos biomarcadores dietético, concretamente para la identificación de marcadores de ingesta de naranja a corto y medio plazo. Por último, se estudió el efecto de compuestos bioactivos como el resveratrol y el pterostilbeno en la esteatosis hepática. Además, se evaluaron las distintas herramientas para facilitar la identificación de biomarcadores gracias a la implementación de instrumentos IMS-HRMS.

Por otra parte, se aplicó la metabolómica no dirigida para el descubrimiento de compuestos relacionados con la comunicación intra-especie, un campo de estudio hasta ahora poco abordado con esta metodología hasta el momento. Concretamente para la identificación de compuestos emitidos por crías de ratón que indujeran a una activación del instinto maternal. Se estudió por separado los compuestos de naturaleza más volátil y aquellos de carácter menos volátil, adaptando las técnicas de análisis a cada una de ellas.