

Ciencia Latina Revista Científica Multidisciplinar, Ciudad de México, México.
ISSN 2707-2207 / ISSN 2707-2215 (en línea), enero-febrero 2025,
Volumen 9, Número 1.

https://doi.org/10.37811/cl_rcm.v9i1

**IDENTIFICACIÓN Y CUANTIFICACIÓN DE
METABOLITOS PRIMARIOS CON
IMPORTANCIA NUTRICIONAL EN MANGO
ATAULFO (MANGIFERA INDICA L.)
MEDIANTE RESONANCIA MAGNÉTICA
NUCLEAR**

IDENTIFICATION AND QUANTIFICATION OF PRIMARY
METABOLITES WITH NUTRITIONAL IMPORTANCE IN
ATAULFO MANGO (MANGIFERA INDICA L.) BY NUCLEAR
MAGNETIC RESONANCE

Jimena Morales-Miñón

Escuela Superior de Ingeniería Química e Industrias Extractivas Instituto Politécnico Nacional

Adriana García-Arcos

Escuela Superior de Ingeniería Química e Industrias Extractivas Instituto Politécnico Nacional

Manuel José Toriz-Maldonado

Escuela Superior de Ingeniería Química e Industrias Extractivas Instituto Politécnico Nacional

Lino Becerra-Martínez

Universidad Isidro Fabela de Toluca, Campus de la Salud

Elvia Becerra-Martínez

Centro de Nanociencias y Micro y Nanotecnologías, Instituto Politécnico Nacional México

Identificación y cuantificación de metabolitos primarios con importancia nutricional en mango Ataulfo (*Mangifera indica* L.) mediante resonancia magnética nuclear

Jimena Morales-Miñón¹

jmoralesm1909@alumno.ipn.mx

<https://orcid.org/0009-0003-1902-6753>

Escuela Superior de Ingeniería Química e
Industrias Extractivas Instituto Politécnico
Nacional
México

Adriana García-Arcos

agarciaa1912@alumno.ipn.mx

<https://orcid.org/0009-0006-1457-0137>

Escuela Superior de Ingeniería Química e
Industrias Extractivas Instituto Politécnico
Nacional
México

Manuel José Toriz-Maldonado

jtorizm1700@alumno.ipn.mx

<https://orcid.org/0009-0006-1874-8828>

Escuela Superior de Ingeniería Química e
Industrias Extractivas Instituto Politécnico
Nacional
México

Lino Becerra-Martínez

becerralino935@gmail.com

Universidad Isidro Fabela de Toluca, Campus de
la Salud
México

Elvia Becerra-Martínez

elmartinezb@ipn.mx

<https://orcid.org/0000-0002-8598-0516>

Centro de Nanociencias y Micro y
Nanotecnologías, Instituto Politécnico
Nacional México

RESUMEN

Entre las variedades más populares de mango se encuentra el Ataulfo originario de Tapachula, Chiapas, el cual destaca por sus propiedades físicas como olor, sabor, textura y así mismo por ser fuente de vitaminas, minerales, fibras y antioxidantes. Debido a su importancia comercial este trabajo describe el análisis cualitativo y cuantitativo de metabolitos de interés nutricional en jugo de mango Ataulfo usando un protocolo de metabolómica basado en RMN. Para este propósito se cosecharon frutos de mango Ataulfo en el verano de 2023 en fincas de Tapachula, Chiapas; el jugo del mango fresco se mezcló con D₂O (TMS 100 mM, EDTA 10 mM y NaN₃ 2 mM), se ajustó el pH de la solución a 5 y se realizó el análisis espectroscópico. En los espectros de RMN ¹H se identificaron y cuantificaron un total de 28 metabolitos primarios de interés nutricional para el ser humano, entre los cuales se encuentran azúcares, aminoácidos, ácidos orgánicos y metabolitos como colina, nicotinamida adenina dinucleótido, (NAD⁺) y trigonelina. Con esta información se puede dar un valor agregado al mango Ataulfo que beneficiara a su comercialización, exportación y con ello la economía de los agricultores. Además, el método espectrométrico utilizado se caracteriza por una gran sencillez, robustez y reproducibilidad.

Palabras clave: mangifera indica l, metabolitos primarios, resonancia magnética nuclear

¹ Autor principal

Correspondencia: jmoralesm1909@alumno.ipn.mx

Identification and quantification of primary metabolites with nutritional importance in Ataulfo mango (*Mangifera indica* L.) by nuclear magnetic resonance

ABSTRACT

Among the most popular mango varieties is the Ataulfo mango, native to Tapachula, Chiapas, which stands out for its physical properties such as aroma, flavor, texture, and its rich content of vitamins, minerals, fiber, and antioxidants. Due to its commercial importance, this study describes the qualitative and quantitative analysis of nutritionally relevant metabolites in Ataulfo mango juice using an NMR-based metabolomics protocol. For this purpose, Ataulfo mango fruits were harvested in the summer of 2023 from farms in Tapachula, Chiapas. The fresh mango juice was mixed with D₂O (TMS 100 mM, EDTA 10 mM, and NaN₃ 2 mM), the pH of the solution was adjusted to 5, and spectroscopic analysis was performed. In the ¹H NMR spectra, a total of 28 primary metabolites of nutritional interest for human health were identified and quantified, including sugars, amino acids, organic acids, and metabolites such as choline, nicotinamide adenine dinucleotide (NAD⁺), and trigonelline. This information can add value to Ataulfo mango, benefiting its commercialization, exportation, and consequently, the economy of farmers. Moreover, the spectrometric method used is characterized by its simplicity, robustness, and reproducibility.

Keywords: *mangifera indica* l, primary metabolites, nuclear magnetic resonance

Artículo recibido 15 enero 2025

Aceptado para publicación: 19 febrero 2025



INTRODUCCIÓN

El mango (*Mangifera indica* L.) es una de las frutas tropicales más populares y económicamente importante en el mundo debido a sabor dulce, aroma deliciosa y color brillante, además de su composición nutricional (vitaminas, minerales, fibra y fotoquímicos). Pertenece a la familia Anacardiaceae y es nativa del sur de Asia (Thapa et al., 2024). La producción mundial alcanzó 70 millones de toneladas en 2023, seguida por el plátano, la piña, la papaya y el aguacate, 2023). India es el principal productor de mango con el 35% de la producción mundial (25.6 millones de toneladas), seguido por Indonesia, China, México y otros (FAOSTAT, 2023). A nivel mundial, México ocupa el cuarto lugar en producción de mango y se posiciona como el mayor exportador, abasteciendo el 21 % de la demanda mundial, principalmente a EE. UU. con más de 476,000 toneladas en 2021. En 2021, México produjo 2,386,040 toneladas de mango, con un valor de 535,729,687.22 USD. Además, se proyecta un crecimiento acumulado de 42.7 % en la producción nacional y un incremento en la demanda mundial de mango de 3.38 a 4.06 millones de toneladas para 2030 (Pacheco-Jiménez et al., 2024). En México la producción de mango se distribuye en 23 estados; sin embargo, más del 97% de la producción se concentra en 10 estados (Guerrero, Nayarit, Chiapas, Oaxaca, Sinaloa, Michoacán, Veracruz, Jalisco, Colima y Campeche) (Tovar-Pedraza et al., 2020). Existen muchas variedades de mango, los más comercializados, el Ataulfo, Haden, Manila, Kent, Keitt, Tommy Atkins, Parvin y Petacon, entre los más populares se encuentran el mango Ataulfo.

El mango ataulfo (*Mangifera indica* L.) es originario de Tapachula, Chiapas. Es una variedad de mango que ha demostrado ser un éxito en el mercado internacional debido a sus características sensoriales únicas: sabor, olor y textura. Además, de ser un fruto de consistencia firme, drupa regordeta y dulce, baja acidez, con semilla delgada y pulpa abundante (Salvador-Figueroa et al., 2023; Sáyago-Ayerdi et al., 2013). Manthey & Perkins-Veazie (2009) informaron que la capacidad antioxidante y concentración de compuestos fenólicos del mango ‘Ataulfo’ eran mayor que en otras variedades de mango, variedades como Tommy Atkins, Kent, Keitt y Haden. También contiene alta cantidad de vitaminas A y C, es rico en minerales, fibras y antioxidantes como ácido ascórbico, carotenoides y compuestos fenólicos, mientras que su contenido de calorías, grasas y sodio es bajo (Ma et al., 2011). La capacidad antioxidante de frutas y vegetales se ha correlacionado con su contenido y composición fenólica total. Se reportan

diferentes factores que afectan esta capacidad antioxidante, tales como el cultivar, las condiciones agronómicas, la manipulación post-cosecha y la etapa de maduración. La actividad antioxidante, metabolismo secundario y metabolismo primario de mango y otras frutas tropicales ha sido ampliamente estudiada, pero en el mango Ataulfo originario de México falta conocimiento sobre estado nutricional de la fruta. Por lo tanto, el objetivo de este trabajo fue determinar el perfil metabólico de mango Ataulfo usando resonancia magnética nuclear.

METODOLOGÍA

Origen de los frutos

Durante el verano de 2023, se cosecharon frutos de mango Ataulfo en fincas de Tapachula, Chiapas (14°54'40"N 92°15'52"O; 177 msnm). Para el análisis se eligieron diez frutos, estos se seleccionaron con base en color, tamaño, textura y peso. Las similitudes de las muestras se estimaron a juzgar por la experiencia individual de los recolectores de Chiapas.

Preparación de muestras para análisis de resonancia magnética nuclear (RMN)

El jugo de mango fresco se extrajo con un exprimidor manual de frutas y luego se centrifugó durante 20 minutos a 10 000 rpm. A continuación, 900 µL de jugo se mezcló con una solución de 100 µL de D₂O que contenía 100 mM de TMS (ácido trimetilsililpropiónico), 10 mM de EDTA (ácido etilendiaminotetraacético) y 2 mM de NaN₃ (azida de sodio). El pH se ajustó a 5.00 teniendo en cuenta que los desplazamientos químicos de algunas señales en los espectros de RMN ¹H de los jugos de frutas están condicionados a este parámetro. Por último, 600 µL de la solución se transfirió a un tubo de RMN de 5 mm para el análisis espectroscópico (Ramírez-Pérez et al., 2024).

Perfil de metabolitos primarios

La identificación de los metabolitos por RMN se realizó mediante la adquisición e interpretación de experimentos de RMN 1D y 2D, como espectroscopía de ¹H (Figura 1), espectroscopía de ¹³C, espectroscopía de correlación homonuclear (2D ¹H-¹H COSY, Correlated Spectroscopy), correlaciones cuánticas simples heteronucleares (2D ¹H-¹³C HSQC, Heteronuclear Single Quantum Coherence) y correlación de enlaces múltiples heteronucleares (2D ¹H-¹³C HMBC, Heteronuclear Multiple Bond Correlation). La asignación de señales de los metabolitos identificados se confirmó comparando los desplazamientos químicos con los reportados en bases de datos como Base de Datos del Metaboloma

Humano (HMDB; <http://www.hmdb.ca/>) y el Banco de Datos de Resonancia Magnética Biológica (BMRB; <http://www.bmrb.wisc.edu>).

Análisis de resonancia magnética nuclear (RMN)

Las muestras de jugo de mango Ataulfo fueron analizadas en un espectrómetro Bruker AscendTM 750 MHz (Bruker Biospin, Rheinstetten, Germany) equipado con una sonda TXI de 5 mm. El análisis de RMN ¹H se adquirió usando la secuencia de pulsos NOESYPR1D a 298.1 °K + 0.1 sin rotación. Los parámetros de adquisición son los siguientes: tamaño del FID = 64 K, número de escaneos = 256, ancho espectral = 15.00 ppm, ganancia del receptor = 32, tiempo de adquisición = 2.18, tiempo de relajación = 10 s y resolución FID = 0.45 Hz.

El procesamiento de los datos de RMN se realizó de acuerdo a (Ramírez-Pérez et al., 2024). En los espectros de RMN ¹H se realizó la corrección de la fase y línea base utilizando el software Mestrenova (v.6.1.0 Mestrelab Research SL, Santiago de Compostela, Spain). La señal del TSP se utilizó para referenciar los espectros a 0.0 ppm y se normalizó usando la intensidad de la señal de TSP. Se eliminó la región espectral en 4.70 a 4.90 ppm que corresponde a la señal residual del agua.

Los análisis de RMN 1D y 2D para la identificación de metabolitos se realizaron en un espectrómetro Bruker de 750 MHz que operaba a 750.12 MHz y a 298 °K. El espectro de RMN ¹³C se obtuvo utilizando los siguientes parámetros: número de escaneos = 20480, tiempo de adquisición = 0.72, tiempo de relajación = 2 s, ancho espectral = 45454.5 Hz y tamaño de FID = 64 k datos. El experimento COSY se obtuvo con un ancho espectral de 7500 Hz en las dos dimensiones; se utilizó 2k × 128 con 256 escaneos por incremento y un tiempo de relajación de 2 s. El experimento HSQC, se realizó 1024 escaneos y 128 incrementos con un tiempo de adquisición de 0.065 s y un tiempo de relajación de 1.5 s. Los anchos espectrales fueron 7653.1 y 45454.5 Hz para las dimensiones de ¹H y ¹³C, respectivamente, con ¹J_{CH} = 145 Hz. El experimento HMBC, se adquirió con 128 escaneos y 128 incrementos, con un tiempo de adquisición de 0.26 s y un tiempo de relajación de 2 s. Los anchos espectrales fueron los mismos para HSQC.

Cuantificación relativa de metabolitos primarios

La cuantificación de los compuestos se realizó mediante la integración de las señales de RMN ¹H utilizando TMS como estándar interno. La intensidad de una señal en el espectro de RMN ¹H es

proporcional a la concentración molar del metabolito Villa-Ruano et al. (2019 y 2020). Para obtener las concentraciones relativas se utilizó la siguiente expresión:

$$\frac{M_X}{M_Y} = \frac{I_X \cdot N_Y}{I_Y \cdot N_X}$$

donde: M_X = Concentración relativa del metabolito; M_Y = Concentración relativa del estándar interno (TMS); I_X = Valor relativo de la integral de la señal del metabolito en el espectro de RMN ^1H ; I_Y = Valor relativo de la integral de la señal del estándar interno en el espectro de RMN ^1H (TMS); N_X = Número de protones de la señal del metabolito; N_Y = Número de protones de la señal del estándar interno (TMS).

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

Perfil de metabolitos primarios en jugo de mango

Usando RMN ^1H fue posible identificar el perfil de metabolitos primarios en jugo de mango Ataulfo, que representa la huella dactilar metabólica de este fruto. En la Figura 1A se muestra el espectro de RMN ^1H obtenido a 750 MHz, un total de 28 metabolitos primarios fueron identificados. En el espectro se distinguen claramente tres regiones: La primera región se encuentra entre 0.00 y 3.00 ppm y observan las señales de los protones alifáticos que pertenecen a los ácidos orgánicos y los aminoácidos (Figura 1B). Las señales dobles entre 0.92-1.03 ppm corresponden a la isoleucina, leucina y valina. El doble de la alanina y treonina aparecen en 1.46 y 1.31 ppm, respectivamente. La asparagina se identificó mediante las señales doble de dobles en 2.85 y 2.95 ppm. Las señales doble de dobles en 2.69 y 2.82 ppm se asignó al ácido aspártico. El ácido glutámico se identificó por la señal múltiple en 2.34 ppm. En esta región también se detectaron las señales características de cuatro ácidos orgánicos: ácido acético (1.92 ppm), ácido cítrico (2.56 y 2.69 ppm), ácido málico (2.39 y 2.57 ppm) y ácido succínico (2.42 ppm). La segunda región, de 3.00 a 6.00 ppm es la más compleja y consiste en señales superpuestas principalmente atribuibles a señales de azúcares como fructosa, galactosa, glucosa (isómeros α y β), mio-inositol y sacarosa (Figura 1C). La señal del protón anomérico de α -glucosa se identificó en 5.22 ppm, mientras que el protón anomérico de β -glucosa se encontró en 4.63 ppm. Las señales que identifican la fructosa se encontraron en 3.98 y 4.01 ppm. La sacarosa y galactosa se identificaron mediante los protones anoméricos en 4.56 y 5.25 ppm, respectivamente. Por último, el alcohol de azúcar

mio-inositol mostró una señal triple en 3.27 ppm; en esta región también observamos señales simples que corresponden a colina (3.18 ppm) y betaína (3.25 ppm).

Finalmente, en la tercera región, de 6.00 a 9.00 ppm se observan señales débiles características de compuestos aromáticos como aminoácidos, ácidos orgánicos y nucleósidos (Figura 1D). Los aminoácidos aromáticos identificados en esta región se encuentran entre 6.88-7.41 ppm. La fenilalanina se encuentra en 7.32, 7.37, 7.42 ppm y tirosina en 6.88 y 7.15 ppm. En esta región el protón característico del ácido fórmico aparece en 8.44 ppm mientras que protón del ácido fumárico se observa en 6.55 ppm. Los nucleósidos se identificaron por las señales de resonancia características de los protones aromáticos de los anillos heterocíclicos. Así, la uridina se identificó con la señal doble que aparece en 7.89 ppm. Para asignar cada una de las señales de los metabolitos, se emplearon experimentos de RMN 1D como ^1H y ^{13}C , experimentos de RMN 2D como ^1H - ^1H COSY (Correlated Spectroscopy), ^1H - ^{13}C HSQC (Heteronuclear Single Quantum Coherence), y ^1H - ^{13}C HMQC (Heteronuclear Multiple Bond Correlation). La Tabla 1 resume los desplazamientos químicos de los metabolitos identificados en el espectro de RMN ^1H obtenido a 750 MHz de jugo de mango Ataulfo.

Figura. 1. Espectro de RMN ^1H obtenido a 750 MHz de jugo de mango Aaulfo. A) Espectro de RMN ^1H completo de 0.00 a 10.00 ppm; B) Espectro de RMN ^1H expandido de 0.90 a 3.30 ppm (8x); C) Espectro de RMN ^1H expandido de 3.20 a 5.50 ppm; D) Espectro de RMN ^1H expandido de 6.10 a 8.60 ppm (32x).

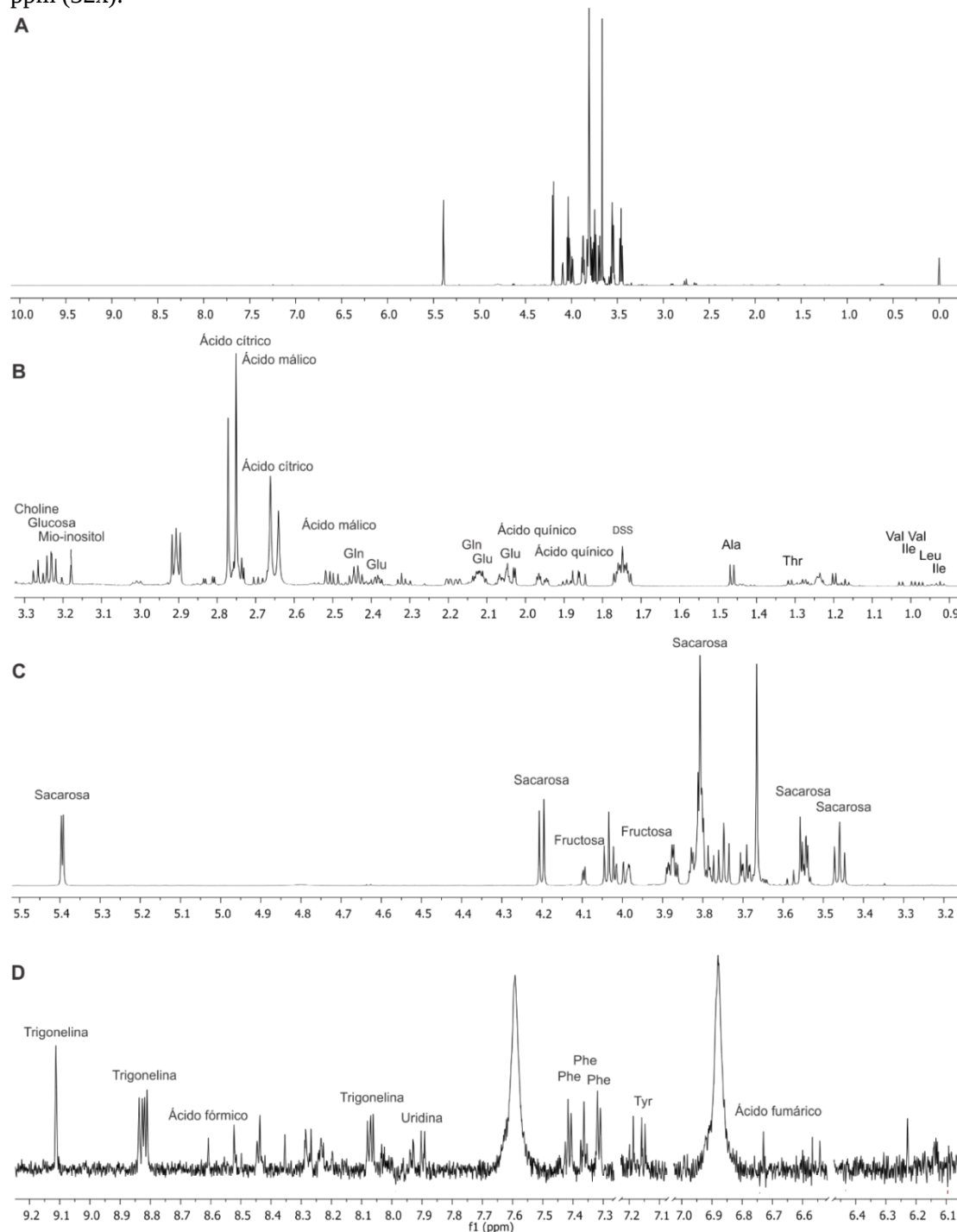


Tabla 1. Metabolitos identificados en los espectros de RMN ^1H de jugo de mango.

Metabolito		Desplazamiento químico (ppm), J (Hz), multiplicidad
Azúcares		
1	Fructosa	3.98 (m), 4.01 (dd, $J = 12.7, 1.3$ Hz)
2	Galactosa	4.56 (d, $J = 7.0$ Hz), 5.25 (d, $J = 3.3$ Hz)
2	Glucosa (isómeros α, β)	3.23 (dd, $J = 9.4, 8.0$ Hz), 4.63 (d, $J = 7.9$ Hz), 5.22 (d, $J = 3.7$ Hz)
4	Mio-inositol	3.27 (t, $J = 9.4$ Hz)
5	Sacarosa	4.03 (t, $J = 8.7$ Hz), 4.2 (d, $J = 8.8$ Hz), 5.4 (d, $J = 3.8$ Hz)
Aminoácidos		
6	Ácido aspártico	2.69 (dd, $J = 17.5, 8.4$ Hz), 2.82 (dd, $J = 17.5, 3.7$ Hz)
7	Ácido glutámico	2.04 (m), 2.11 (m), 2.34 (m)
8	Alanina	1.46 (d, $J = 7.2$ Hz)
9	Asparagina	2.85 (dd, $J = 16.9, 7.8$ Hz), 2.95 (dd, $J = 16.9, 4.2$ Hz)
10	Fenilalanina	7.32 (m), 7.37 (m), 7.42 (m)
11	GABA	1.89 (H-3, m), 2.29 (H-2, t, $J = 7.6$), 3.0 (H-4, t, $J = 7.4$)
12	Glutamina	2.11 (m), 2.44 (m)
13	Isoleucina	0.92 (t, $J = 7.4$ Hz), 0.99 (d, $J = 7.0$ Hz), 1.46 (m)
14	Leucina	0.95 (d, $J = 6.1$ Hz), 0.95 (d, $J = 6.2$ Hz), 1.70 (m)
15	Treonina	1.31 (d, $J = 6.6$ Hz), 3.59 (d, $J = 4.8$ Hz), 4.26 (m)
16	Tirosina	6.88 (d, $J = 8.4$ Hz), 7.15 (d, $J = 8.4$ Hz)
17	Valina	0.99 (d, $J = 7.0$ Hz), 1.03 (d, $J = 7.0$ Hz), 2.26 (m),
Ácidos orgánicos		
18	Ácido acético	1.92 (s)
19	Ácido cítrico	2.56 (d, $J = 15.6$ Hz), 2.69 (d, $J = 15.6$ Hz)
20	Ácido fórmico	8.44 (s)
21	Ácido fumárico	6.55 (s)
22	Ácido málico	2.39 (dd, $J = 15.5, 9.9$ Hz), 2.57 (dd, $J = 15.5, 3.2$ Hz)
23	Ácido quínico	1.93 (m), 2.07 (m), 2.12 (m), 2.17 (m)
24	Ácido succínico	2.42 (s)
Otros compuestos		
25	Betaína	3.25 (s)
26	Colina	3.18 (s), 4.0 (m)
27	Trigonelina	8.83 (m), 9.11 (s)
28	Uridina	5.89 (d, $J = 8$ Hz), 5.89 (d, $J = 4.6$ Hz), 7.89 (d, $J = 8.1$ Hz)

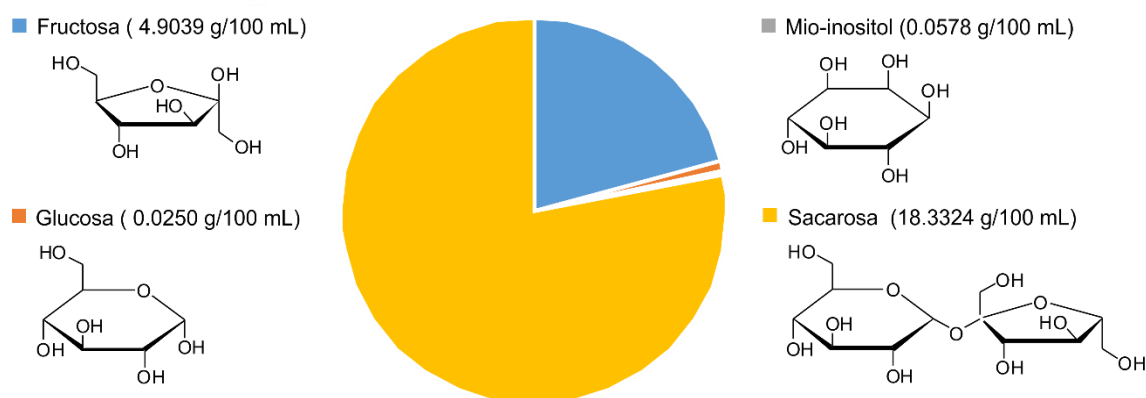
s: singulete; d:doble; t:triple; m:multiplete

Concentración relativa de azúcares en jugo de mango Ataulfo

La calidad organoléptica de las frutas depende en gran medida del contenido y la composición de azúcares presentes. Se identificaron y cuantificaron cuatro azúcares solubles en el jugo de mango Ataulfo como fructosa (4.9039 g/100 mL), glucosa (0.0250 g/100 mL), mio-inositol (0.0578 g/100 mL) y sacarosa (18.3324 g/100 mL). La acumulación de azúcares solubles proporciona dulzura a la fruta y mejora su valor comercial (Liu et al., 2023). Megha et al. (2022) reportó que el dulzor del mango depende principalmente de la composición de los azúcares presentes, que se atribuye principalmente del

genotipo y factores ambientales. Pero, las variaciones de azúcar en la fruta en diferentes estaciones, lugares de crecimiento, en los árboles de los mismos huertos, en mismo árbol, así como dentro de la fruta, no son despreciables en comparación con la variación entre genotipos. Por otro lado, azúcares, como la glucosa, la sacarosa, la galactosa y la maltosa presentes en las frutas proporcionan la energía necesaria para que el cuerpo pueda realizar sus funciones físicas y mentales. El efecto general sobre la salud depende del nivel de consumo individual de la fruta entera y también del consumo de una mezcla de diferentes compuestos biodisponibles presentes en las frutas. Las frutas recién exprimidas, enlatadas o embotelladas, que se componen de una o más frutas sin edulcorantes o azúcares añadidos, se consideran jugos de fruta al 100 %. Aunque la composición de los jugos de frutas es diferente a la de las frutas enteras, estas contienen polifenoles y vitaminas de las frutas. Muchos estudios han revelado que el consumo de fruta entera reduce el riesgo de varias enfermedades crónicas no transmisibles, como enfermedades cardiovasculares, cáncer, enfermedades respiratorias crónicas, enfermedad renal crónica, osteoartritis, osteoporosis, cataratas, Alzheimer y diabetes mellitus. La diabetes se ha disparado en todo el mundo; los estudios epidemiológicos han revelaron que el consumo de frutas reduce el riesgo de diabetes, obesidad, hipertensión y enfermedades cardiovasculares, mientras que la ingesta de jugos de frutas aumenta el riesgo de diabetes entre las mujeres. A nivel mundial, la diabetes tipo 2 ha incrementado rápidamente con el aumento de la obesidad (Sadhana et al., 2019).

Figura 2. Concentración relativa de azúcares identificados en los espectros de RMN ^1H obtenido a 750 MHz de jugo de mango Ataulfo.

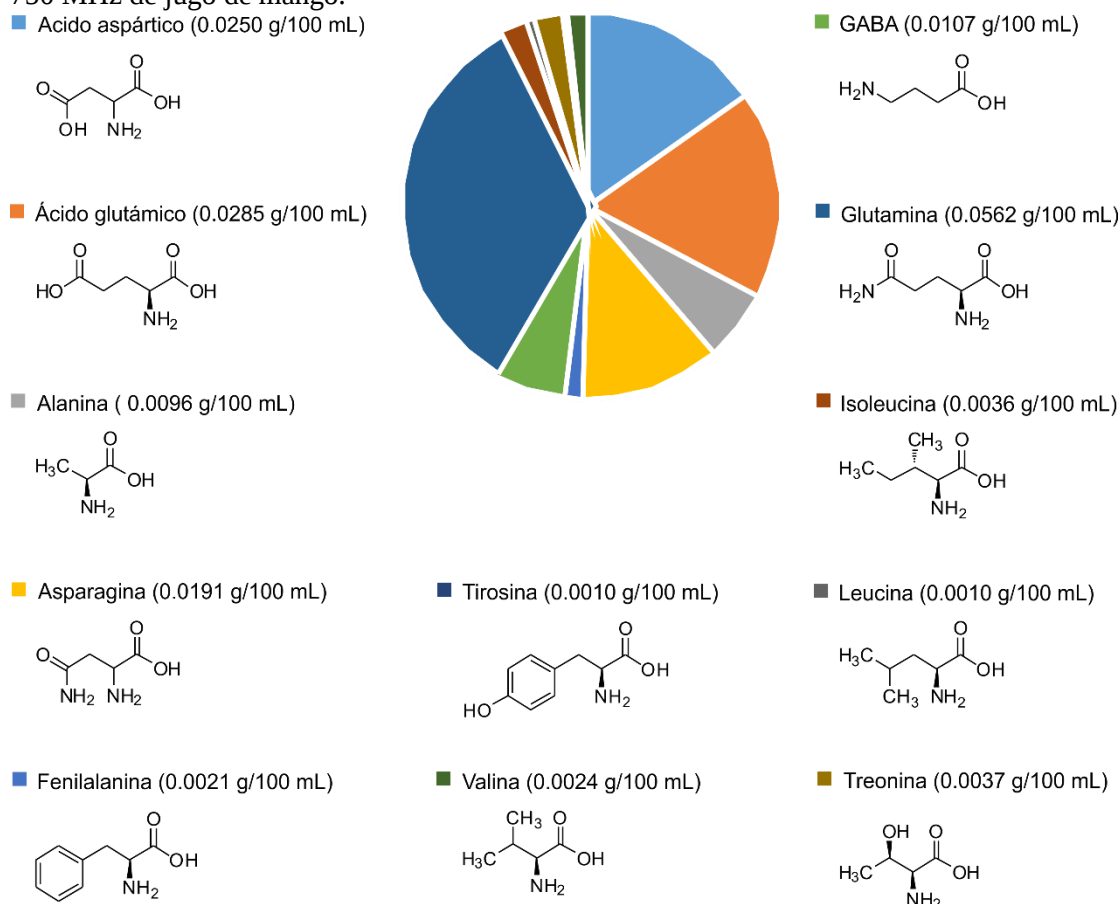


Concentración relativa de aminoácidos en jugo de mango Ataulfo

Las concentraciones relativas de los aminoácidos identificados en los espectros de RMN ^1H de jugo de mango Ataulfo se presentan en la Figura 3. Se identificaron y cuantificaron un total de 12 aminoácidos, los más abundantes fueron ácido aspártico (0.0250 g /100 mL), ácido glutámico (0.0285 g /100 mL) y glutamina (0.0562 g/100 mL), mientras que los menos abundantes fueron fenilalanina (0.0021 g /100 mL), leucina (0.0010 g /100 mL), tirosina (0.0010 g /100 mL). Los aminoácidos son componentes muy importantes de los alimentos, ya que son los componentes básicos de las proteínas. Se clasifican en aminoácidos esenciales y no esenciales; los aminoácidos esenciales se obtienen de fuentes externas, mientras que los aminoácidos no esenciales son sintetizados por el cuerpo humano (Chilakala et al., 2021). Cinco aminoácidos esenciales fueron identificados y cuantificados isoleucina (0.0036 g /100 mL), leucina (0.0010 g /100 mL), fenilalanina (0.0021 g /100 mL), treonina (0.0037 g /100 mL), valina (0.0024 g /100 mL).

La glutamina y el glutamato son abundantes en el mango, esto puede explicarse por su papel central en el metabolismo de los aminoácidos, en particular en las reacciones de transaminación. Las plantas generalmente absorben nitrógeno inorgánico en forma de nitrato, nitrito y amoníaco antes de incorporarlo a los aminoácidos, que finalmente se reducen a amonio, NH_4 . Esta reacción es catalizada por enzima glutamina sintasa. Estos aminoácidos no se consideran aminoácidos esenciales, pero desempeñan funciones importantes en el mantenimiento del crecimiento y la salud tanto en neonatos como en adultos (Onwuchekwa et al., 2029)

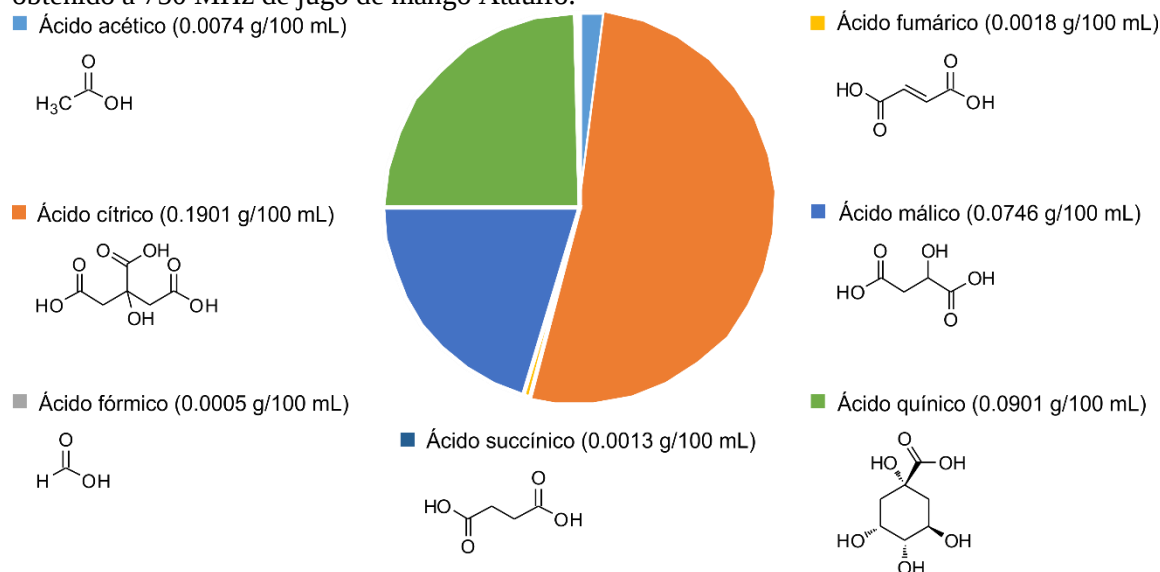
Figura 3. Concentración relativa de aminoácidos identificados en los espectros de RMN ^1H obtenido a 750 MHz de jugo de mango.



Concentración relativa de ácidos orgánicos en jugo de mango Ataulfo

Se identificaron y cuantificaron siete ácidos orgánicos en el jugo de mango Ataulfo (Figura 4). La cuantificación mostró que el ácido cítrico (0.1901 g/100 mL) fue el más abundante, seguido de ácido quínico (0.0901 g/100 mL) y ácido málico (0.0746 g/100 mL). También se detectaron concentraciones más pequeñas de ácido acético (0.0074 g/100 mL), ácido fórmico (0.0005 g/100 mL), ácido fumárico (0.0018 g/100 mL) y ácido succínico (0.0013 g/100 mL). Los ácidos orgánicos son necesarios para el metabolismo aeróbico de las plantas y como constituyentes del sabor, contribuyen a la calidad de la fruta, las propiedades organolépticas y la acidez de la fruta (Maldonado-Celis et al., 2019). Shi et al. (2015) reportaron que el ácido cítrico (4.31-41.74 mg/g) y ácido málico (0.59-20.63 mg/g) fueron los ácidos orgánicos principalmente identificados en 28 variedades de mango. La concentración de ácidos orgánicos varía dependiendo del genotipo, además, de factores bióticos y abióticos durante el cultivo del fruto como a temperatura, la luz, la fertilización, el suministro de agua y otras prácticas de manejo de la planta.

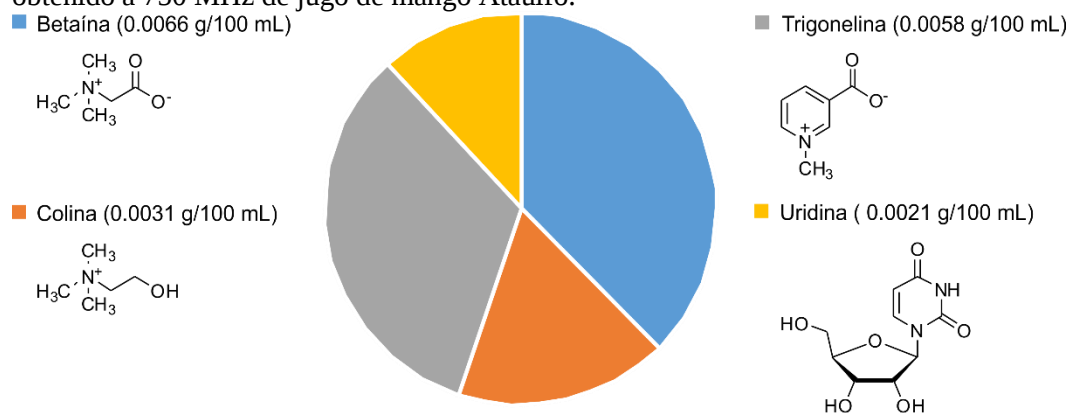
Figura 4. Concentración relativa de los ácidos orgánicos identificados en los espectros de RMN ^1H obtenido a 750 MHz de jugo de mango Ataulfo.



Concentración relativa de betaína, colina, trigonelina y uridina en jugo de mango Ataulfo

Finalmente se identificó y cuantificó betaína (0.0066 g/100mL), colina (0.0031 g/100mL), trigonelina (0.0058 g/100mL) y uridina (0.0021 g/100mL) en el jugo de mango Ataulfo.

Figura 5. Concentración relativa de compuestos diversos identificados en los espectros de RMN ^1H obtenido a 750 MHz de jugo de mango Ataulfo.



La colina es necesaria para la síntesis de los fosfolípidos en las membranas celulares, el metabolismo del grupo metilo y la neurotransmisión colinérgica. Mientras que la betaína, un derivado de la colina, también es importante debido a su papel en la donación de grupos metilo a la homocisteína para formar metionina (Heinzmann et al 2010). Zeisel et al. (2003) realizaron análisis por Cromatografía de Líquidos acoplada a la Espectrometría de masas para determinar la concentración de betaína y colina en lácteos, huevos, especias, hierbas, grasas, aceites, carne, sopas, salsas, aderezos, embutidos, cereales, frutas y verduras, observando que los alimentos con la mayor concentración total de colina (mg/100 g) fueron:

hígado de res (418), hígado de pollo (290), huevos (251), germen de trigo (152), tocino (125), soja seca (116) y carne de cerdo (103). Los alimentos con la mayor concentración de betaína (mg/100 g) fueron: salvado de trigo (1339), germen de trigo (1241), espinaca (645), pretzels (237), camarones (218) y pan de trigo (201). Analizaron frutas como aguacates, arándanos, fresas, manzanas, melocotones, naranjas, peras, plátanos, pomelo, sandía y uvas. La concentración de colina variaba entre 0.33-8.64 mg/100 g, mientras que la de betaína entre 0.58-07 mg/100 g, este trabajo demuestra que el mango Ataulfo es una fruta con un alto contenido en betaína y colina (betaína 6.6 mg/100mL y colina 3.1 g/100mL).

CONCLUSIONES

En este trabajo se reporta por primera vez el perfil químico de mango Ataulfo originario de Tapachula, Chiapas usando resonancia magnética nuclear. Se identificó y cuantificó un total de 28 metabolitos de interés nutricional como aminoácidos, ácidos orgánicos y compuestos como colina, betaína, trigonelina y uridina. Conocer y entender los cambios en la composición química del fruto de mango Ataulfo permitirá a los productores dar un valor agregado a esta fruta para fines de exportación y mayor uso para la industria beneficiando a la economía de los agricultores y del país.

Agradecimientos

Esta investigación recibió apoyo financiero de la Secretaría de Investigación y Posgrado del Instituto Politécnico Nacional (Proyectos de investigación: 20231017 y 20240542). Agradecemos el subsidio otorgado a través del programa BEIFI-IPN.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Chilakala, S., Mehtab, V., Tallapally, M., Vemula, M., Shaikh, A.S., Chenna, S., & Upadhyayula, V. (2021). SEC-MS/MS determination of amino acids from mango fruits and application of the method for studying amino acid perturbations due to post harvest ripening. *LWT*, 138, 110680. <https://doi.org/10.1016/j.lwt.2020.110680>
- Heinzmann, S.S., Brown, I.J., Chan, Q., Bictash, M., Dumas, M.E., Kochhar, S., Stamler, J., Holmes, E., Elliott, P., Nicholson, J.K. (2010). Metabolic profiling strategy for discovery of nutritional biomarkers: proline betaine as a marker of citrus consumption. *The American Journal of Clinical Nutrition*, 92 (2), 436-443. <https://doi.org/10.3945/ajcn.2010.29672>

- Liu, B., Qi Xin, Q., Zhang, M., Chen, J., Lu, Q., Zhou, X., Li, X., Zhang, W., Feng, W., Pei, H., & Sun. J. (2023). Research progress on Mango post-harvest ripening physiology and regulatory technologies. *Foods*, 12(1), 1-25. <https://doi.org/10.3390/foods12010173>
- Ma, X.; Wu, H.; Liu, L.; Yao, Q.; Wang, S. & Zhan, R. (2011). Polyphenolic compounds and antioxidant properties in mango fruits. *Scientia Horticulturae*, 129(1), 102-107. <https://doi.org/10.1016/j.scienta.2011.03.015>.
- Maldonado-Celis, M.E., Yahia, E.M., Bedoya, R., Landázuri, P., Loango, N., Aguillón, J., Restrepo, B. & Guerrero Ospina J.C. (2019). Chemical composition of mango (*Mangifera indica* L.) fruit: Nutritional and phytochemical compounds. *Frontiers in Plant Science*, 10(1073), 1-21. <https://doi.org/10.3389/fpls.2019.01073>
- Manthey, J.A., & Perkins-Veazie, P. Influences of harvest date and location on the levels of β -carotene, ascorbic acid, total phenols, the in Vitro antioxidant capacity, and phenolic profiles of five commercial varieties of mango (*Mangifera indica* L.). *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, 57(22), 10825-10830. <https://doi.org/10.1021/jf902606h>
- Megha, R., Singh, S.K. Srivastav, M., Prakash, Jai, Saha, S., & Pradhan. S. (2022). Physico-chemical characterization and biochemical profiling of mango genotypes during different fruit development stages. *South African Journal of Botany*, 149, 476-486. <https://doi.org/10.1016/j.sajb.2022.06.023>
- Onwuchekwa, O., Afiukwa, C.A., Onwe, O., & Nwoba, E.G. (2019). Comparative evaluation of the proximate and amino acid composition of dried fruit pulps of mango (*Mangifera indica* Linn) accessions in Ebonyi State, Southeast Nigeria. *Journal of Biochemistry, Biotechnology and Allied Field*, 4(2), 10-20. <http://orcid.org/0000-0003-0397-2369>
- Pacheco-Jiménez, A.A., Lizardi-Mendoza, J., Basilio Heredia, J., Gutiérrez-Grijalva, E.P., Quintana-Obregón, E.A., & Muy-Rangel, M.D. (2024). Physicochemical characterization of pectin and mango peel (*Mangifera indica* L.) from Mexican cultivars. *Helyon*, 10(15), 15e35184. <https://doi.org/10.1016/j.heliyon.2024.e35184>
- Ramírez-Pérez, M., Hidalgo-Martínez, D., Reyes-López, C.A., Pinedo-Espinoza, J.M., Hernández-Fuentes, A.D., & Elvia Becerra-Martínez, E. (2024). Discrimination of different prickly pear

- (*Opuntia* spp.) accessions by NMR-based metabolomics. *Journal of Food Composition and Analysis*, 130, 106158. <https://doi.org/10.1016/j.jfca.2024.106158>
- Salvador-Figueroa, M., Rosas-Quijano, R., Martínez Luz uriaga, J.D., Gómez-Estrada, J.A., Vázquez-Ovando, A., & Gálvez-López, D. (2023). Postharvest characteristics of Ataulfo mango grown in Soconusco, Chiapas. *Agro Productividad*, 16(6), 57-71. <https://doi.org/10.32854/agrop.v16i7.2544>
- Sadhana, H.U., Ganavi, H.S., Veda, S.N., & Thakur, M.S. (2019) Natural fruit sugars and human health: A reality. *Advances in Nutrition & Food Science*, 4(2), 1-11. <https://doi.org/10.33140/anfs.04.02.5>
- Sáyago-Ayerdi, S.G., Moreno-Hernández, C.L., Montalvo-González, E., García-Magaña, M.L., Mata-Montes de Oca, M., Torres, J.L., & Pérez-Jiménez, J. (2013). Mexican ‘Ataulfo’ mango (*Mangifera indica* L) as a source of hydrolyzable tannins. Analysis by MALDI-TOF/TOF MS. *Food Research International*, 51(1), 188-194. <https://doi.org/10.1016/j.foodres.2012.11.034>
- Shi, S., Ma, X., Xu, W., Zhou, Y., Wu, H., & Wang, S. (2015). Evaluation of 28 mango genotypes for physicochemical characters, antioxidant capacity, and mineral content. *Journal of Applied Botany and Food Quality*, 88, 264-273. <https://doi.org/10.5073/JABFQ.2015.088.039>
- Thapa, K., Thapa, M., Dulal G., Paudel, R., Adhikari, S., Chapai, A., & Kalwar S.K. (2024), Varietal performance on pomological characters of different varieties of mango (*Mangifera indica*) at Sarlahi, Nepal, *International Journal of Horticulture*, 14(3), 169-174 <https://doi.org/10.5376/ijh.2024.14.0019>
- Tovar-Pedraza, M., Mora-Aguilera, J. A., Nava-Díaz, C., Lima, N. B., Michereff, S. J., Sandoval-Islas, J. S, Cámara, M. P. S., Téliz-Ortiz, D., & Leyva-Mir, S. G. (2020). Distribution and pathogenicity of *Colletotrichum* species associated aith Mango anthracnose in Mexico. *Plant Disease*, 104(1), 137-146. <https://doi.org/10.1094/PDIS-01-19-0178-RE>
- Villa-Ruano, N., Pérez-Hernández, N., L. Zepeda-Vallejo, L.G., Quiroz-Acosta, T., Mendieta-Moctezuma, A., Montoya-García, C., García-Nava, M.L., & Becerra-Martínez, E. (2019). ¹H-NMR Based metabolomics profiling of citrus juices produced in Veracruz, México. *Chemistry and Biodiversity*, 16(5), e1800479. <https://doi.org/10.1002/cbdv.201800479>

- Villa-Ruano, N., Rosas-Bautista, A., Rico-Arzate, E., Cruz-Narvaez, Y., Zepeda-Vallejo, L.G., Lalaleo, L., Hidalgo-Martínez, D., & Becerra-Martínez, E. (2020). Study of nutritional quality of pomegranate (*Punica granatum* L.) juice using ^1H NMR-based metabolomic approach: A comparison between conventionally and organically grown fruits. *LWT*, 134, 2020, 110222. <https://doi.org/10.1016/j.lwt.2020.110222>
- Zeisel, S.H., Mar, M.H., Howe, J., Holden, J.M. (2003). Concentrations of Choline-Containing Compounds and Betaine in Common Foods. *The Journal of Nutrition*, 133(5), 1302-1307. <https://doi.org/10.1093/jn/133.5.1302>