



MINISTERIO DE CIENCIA, INNOVACIÓN Y UNIVERSIDADES









Compuestos aromáticos y su relación con la calidad

Luis Noguera Artiaga CIAGRO-UMH



OLOR / AROMA



Impresión que los efluvios producen en el olfato





Es una percepción del sentido del olfato que surge cuando se detectan moléculas volátiles en el aire. Se produce cuando ciertas moléculas volátiles provenientes de cualquier fuente aromática llegan a las células receptoras en la nariz y activan los receptores olfativos.



Los aromas en los alimentos son el resultado de una combinación de factores químicos, físicos y biológicos que actúan durante su procesamiento, preparación y almacenamiento.

Estos compuestos volátiles pueden ser producidos durante el proceso de cocinado, fermentación, maduración o simplemente por la ruptura de células durante su manipulación.

Factores que contribuyen a la formación de aromas en los alimentos:



Ácidos grasos, aminoácidos, azúcares..., pueden reaccionar entre sí durante el procesado, formando nuevos compuestos

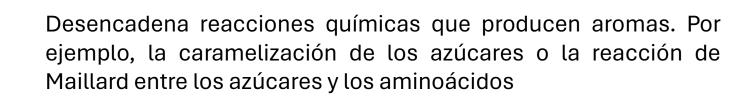


Los aromas en los alimentos son el resultado de una combinación de factores químicos, físicos y biológicos que actúan durante su procesamiento, preparación y almacenamiento.

Estos compuestos volátiles pueden ser producidos durante el proceso de cocinado, fermentación, maduración o simplemente por la ruptura de células durante su manipulación.

Factores que contribuyen a la formación de aromas en los alimentos:





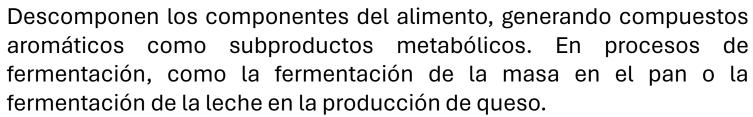


Los aromas en los alimentos son el resultado de una combinación de factores químicos, físicos y biológicos que actúan durante su procesamiento, preparación y almacenamiento.

Estos compuestos volátiles pueden ser producidos durante el proceso de cocinado, fermentación, maduración o simplemente por la ruptura de células durante su manipulación.

Factores que contribuyen a la formación de aromas en los alimentos:







Los aromas en los alimentos son el resultado de una combinación de factores químicos, físicos y biológicos que actúan durante su procesamiento, preparación y almacenamiento.

Estos compuestos volátiles pueden ser producidos durante el proceso de cocinado, fermentación, maduración o simplemente por la ruptura de células durante su manipulación.

Factores que contribuyen a la formación de aromas en los alimentos:





Se producen cambios bioquímicos que contribuyen al desarrollo de aromas más complejos y característicos.



- En el caso particular de los frutos, el aroma depende de una mezcla compleja de compuestos volátiles.
- Estos se forman durante la maduración del fruto mediante rutas bioquímicas, a partir de precursores.
- Hidratos de carbono, lípidos, proteínas, aminoácidos... se catabolizan y generan nuevos compuestos.
- La mayor producción de estos compuestos ocurre durante el climaterio.
- La velocidad de formación de estas sustancias aumenta después del inicio del climaterio y el proceso continúa tras la recolección de la fruta hasta que comienza la senescencia.

En muchas familias de plantas que no tienen relación entre sí, se encuentran compuestos aromáticos en común. A pesar de la diversidad genética, en las células de la mayoría de vegetales las rutas metabólicas son comunes por lo que los productos generados también.

Las diferencias son CUANTITATIVAS más que CUALITATIVAS



Aldehídos

Cetonas

Ésteres

Alcoholes

Terpenos

Sulfurados

Compuestos orgánicos que contienen el grupo funcional -CHO

$$H_3C$$
Hexanal



Aldehídos

Compuestos orgánicos que contienen el grupo funcional -CO-

Cetonas

Ésteres

Alcoholes

Terpenos

Sulfurados



Aldehídos

Cetonas

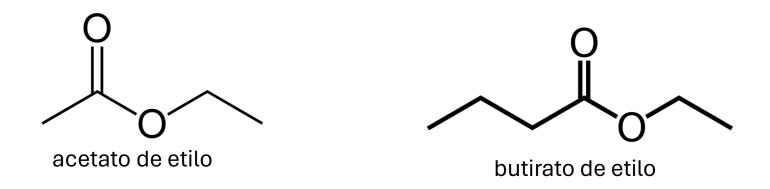
Ésteres

Alcoholes

Terpenos

Sulfurados

Compuestos derivados de la reacción entre un ácido y un alcohol (-COO-).





Aldehídos

Compuestos orgánicos que contienen el grupo funcional -OH

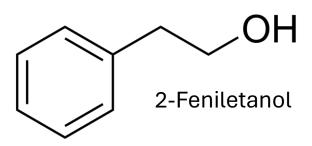
Cetonas

Ésteres

Alcoholes

Terpenos

Sulfurados





Aldehídos

Cetonas

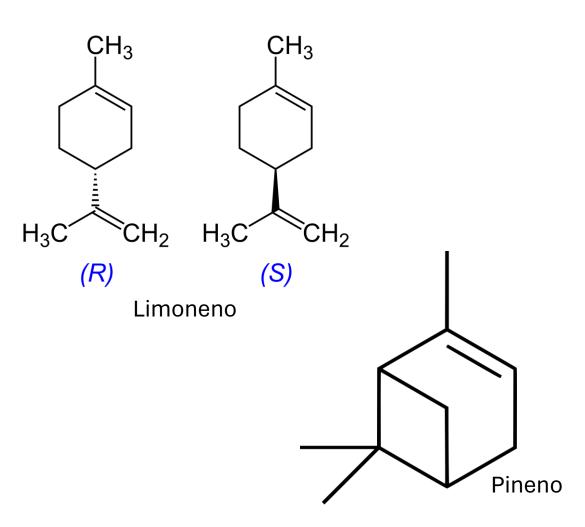
Ésteres

Alcoholes

Terpenos

Sulfurados

Compuestos orgánicos derivados del isopreno





Aldehídos

Compuestos que contienen azufre

Cetonas

Ésteres

Alcoholes

Terpenos

Sulfurados



A los componentes particularmente responsables del aroma característico de un alimento se les denomina compuestos impacto o compuestos diana



En función de la presencia de estos compuestos puede realizarse una clasificación del aroma:



El aroma es debido de modo decisivo a un solo compuesto. La presencia de otras sustancias aromáticas sólo sirve para matizar el aroma característico que se percibe del alimento



A los componentes particularmente responsables del aroma característico de un alimento se les denomina compuestos impacto o compuestos diana

En función de la presencia de estos compuestos puede realizarse una clasificación del aroma:



Varios compuestos, de los cuales uno juega un papel principal, crean o determinan el aroma típico del alimento



A los componentes particularmente responsables del aroma característico de un alimento se les denomina compuestos impacto o compuestos diana

En función de la presencia de estos compuestos puede realizarse una clasificación del aroma:



El aroma sólo se puede reproducir con gran fidelidad gracias a un gran número de compuestos. Ordinariamente no está descrito ningún compuesto impacto.



A los componentes particularmente responsables del aroma característico de un alimento se les denomina compuestos impacto o compuestos diana

En función de la presencia de estos compuestos puede realizarse una clasificación del aroma:



El aroma del alimento no se puede reproducir fielmente, ni utilizando gran número de compuestos volátiles









- Es el primer sentido que usamos al nacer.
- Olemos con el cerebro NO con la nariz: la nariz es la que tiene los receptores olfativos que están directamente conectados con el cerebro.
- Un aroma está formado por multitud de moléculas químicas → Se transforman señales químicas en eléctricas.
- Los aromas evocan EMOCIONES.
- Cada persona tiene un olor que es único → huella olfativa.
- Cada persona percibe de forma distinta los olores.





- Nuestra habilidad para percibir e interpretar los olores deriva de los 396 genes funcionales que codifican los receptores olfativos:
 - OR5A1 → b-Ionona
 - OR11A1 \rightarrow 2-Ethylfenchol
 - OR7D4 → Androstenona
- Los olores no están estructurados. No tienen bordes, no son objetos que se puedan agrupar en el espacio. Son mezclas de diferentes composiciones y concentraciones... son muy difíciles de clasificar.



Humans Can Discriminate More than 1 Trillion Olfactory Stimuli

C. Bushdid^{1,*}, M. O. Magnasco², L. B. Vosshall^{1,3}, A. Keller^{1,†}

- et Present address: Université Pierre et Marie Curie, 4 Place Jussieu, 75005 Paris, France.
- Hide authors and affiliations

Science 21 Mar 2014: Vol. 343, Issue 6177, pp. 1370-1372 DOI: 10.1126/science.1249168

Corrected 18 August 2016; see full text.

Humans Can Discriminate More than 1 Trillion Olfactory Stimuli

C. Bushdid, 14 M. O. Magnasco, 2 L. B. Vosshall, 1,3 A. Keller 1+

Humans can discriminate several million different colors and almost half a million different tones. but the number of discriminable olfactory stimuli remains unknown. The lay and scientific literature typically claims that humans can discriminate 10,000 odors, but this number has never been empirically validated. We determined the resolution of the human sense of smell by testing the capacity of humans to discriminate odor mixtures with varying numbers of shared components. On the basis of the results of psychophysical testing, we calculated that humans can discriminate at least 1 trillion olfactory stimuli. This is far more than previous estimates of distinguishable olfactory stimuli. It demonstrates that the human olfactory system, with its hundreds of different olfactory receptors, far outperforms the other senses in the number of physically different stimuli it can discriminate.

criminated, one must know the range and resolution of the sensory system. Color stimuli vary in wavelength and intensity. Tones vary in frequency and loudness. We can therefore determine the resolution of these modalities along those axes and then calculate the number average resolution of the visual and auditory of discriminable tones and colors from the range

³Laboratory of Neurogenetics and Behavior, The Rockefeller University, 1230 York Avenue, Box 63, New York, NY 10065, USA. ²Laboratory of Mathematical Physics. The Rockefeller University, 1230 York Avenue, Box 212, New York, NY 10065. USA, 3Howard Hughes Medical Institute, 1230 York Avenue, Post Office Box 63, New York, NY 10065, USA.

*Present address: Université Pierre et Marie Curie, 4 Place †Corresponding author. E-mail: andreas.keller@rockefeller.edu

To determine how many stimuli can be dis-and resolution. Humans can detect light with a wavelength between 390 and 700 nm and tones in the frequency range between 20 and 20,000 Hz. Working within this range, researchers carried out psychophysical experiments with color or tone discrimination tasks in order to estimate the systems. From these experiments, they estimated that humans can distinguish between 2.3 million and 7.5 million colors (1, 2) and -340,000 tones (3). In the olfactory system, it is more difficult to estimate the range and resolution because the dimensions and physical boundaries of the olfactory stimulus space are not known. Further, olfactory stimuli are typically mixtures of odor molecules that differ in their components. Therefore, the strategies used for other sensory modal-

ities cannot be applied to the human olfactory system. In the absence of a straightforward empirical approach, theoretical considerations have been used to estimate the number of discriminable olfactory stimuli. An influential study from 1927 posited four elementary odor sensations with sufficient resolution along those four dimensions to allow humans to rate each elementary sensation on a nine-point scale (4). The number of discriminable olfactory sensations was therefore estimated to be 94 or 6561 (4). This number was later rounded up to 10,000 and is widely cited in lay and scientific publications (5-7). Although this number was initially calculated to reflect how many olfactory stimuli humans can discriminate, it has also sometimes been used as the number of different odor molecules that exist, or the number of odor molecules that humans can detect. We carried out mixture discrimination testing to determine a lower limit of the number of olfactory stimuli that humans can discriminate.

Natural olfactory stimuli are almost always mixtures of large numbers of diverse components at different ratios. The characteristic scent of a rose. for example, is produced by a mixture of 275 components (8), although typically, only a small percentage of components contribute to the perceived smell. We reduced the complexity by investigating only mixtures of 10, 20, or 30 components drawn from a collection of 128 odorous molecules (table S1). These 128 molecules were previously intensitymatched by Sobel and co-workers, which enabled us to produce mixtures in which each component contributes equally to the overall smell of the mix-

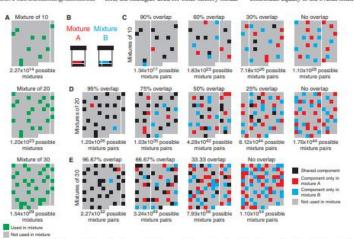


Fig. 1. Odor mixtures used to test the resolution of the human olfactory and the number of possible mixtures of each type. (B) Example of one mixture system. (A) Illustration of sample mixtures with exactly 10, 20, or 30 components

pair. (C to E) Schematics of each of the 13 types of odor pairs used for discrim-(green squares) picked from a collection of 128 odorous molecules (gray squares) ination tests, along with the total number of possible mixture pairs of each type.

Laboratory of Neurogenetics and Behavior, The Rockefeller University, 1230 York Avenue, Box 63, New York, NY 10065, USA.

²Laboratory of Mathematical Physics, The Rockefeller University, 1230 York Avenue, Box 212, New York, NY 10065, USA.

³Howard Hughes Medical Institute, 1230 York Avenue, Post Office Box 63, New York, NY 10065, USA.

et Corresponding author. E-mail: andreas.keller@rockefeller.edu



CONCEPTO DE UMBRAL

Reconocimiento:

Cantidad minúscula del agente estimulante que produce una sensación olfativa

Identificación:

Cantidad mínima del agente estimulante que permite su identificación

Saturación:

Concentraciones a partir de la cual ya no es posible cuantificar el aroma (ni su identificación)

El olfato se encarga de detectar olores no tanto de cuantificarlos



La concentración puede modificar la percepción

Hexanal → oxidación (grasas), aroma vegetal (productos vegetales)

3-metil-1-butanol → fermentado (zumos), chocolate, dulce (nueces), esmalte y vegetal (vinos), frutado (queso), verde/vegetal (jamón serrano), quemado (pescado)...

Efecto matriz \rightarrow en función de la concentración de etanol y proteínas en el vino se puede modificar la volatilidad de sus compuestos aromáticos.



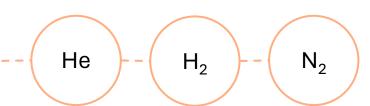




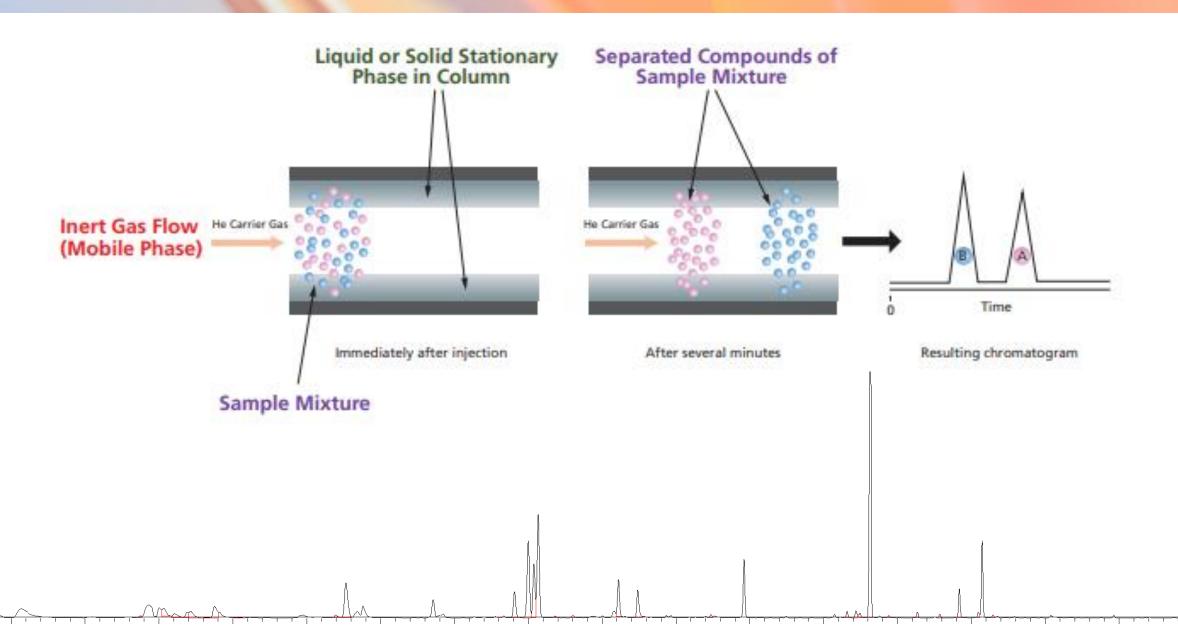
Cromatografía de gases

La muestra se volatiliza y se inyecta en la cabeza de una columna cromatográfica.

La elución se produce por el flujo de una fase móvil que es un gas inerte, y a diferencia de la mayoría de los tipos de cromatografía, la fase móvil no interacciona con las moléculas del analito; su única función es la de transportar el analito a través de la columna.

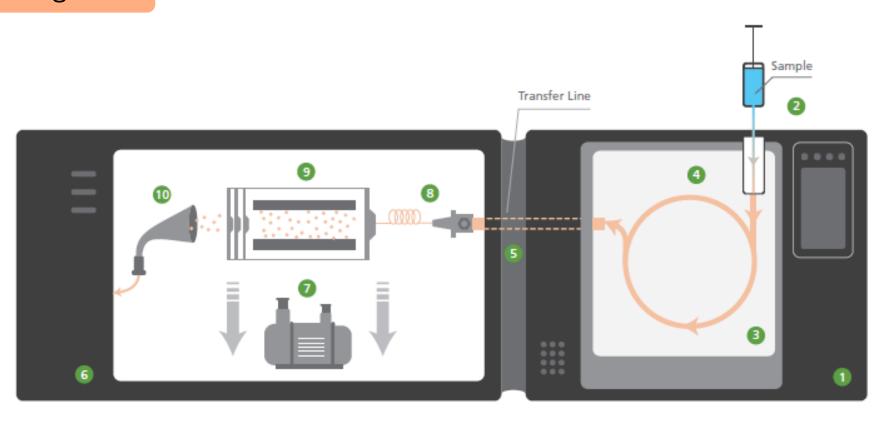








Cromatógrafo de gases



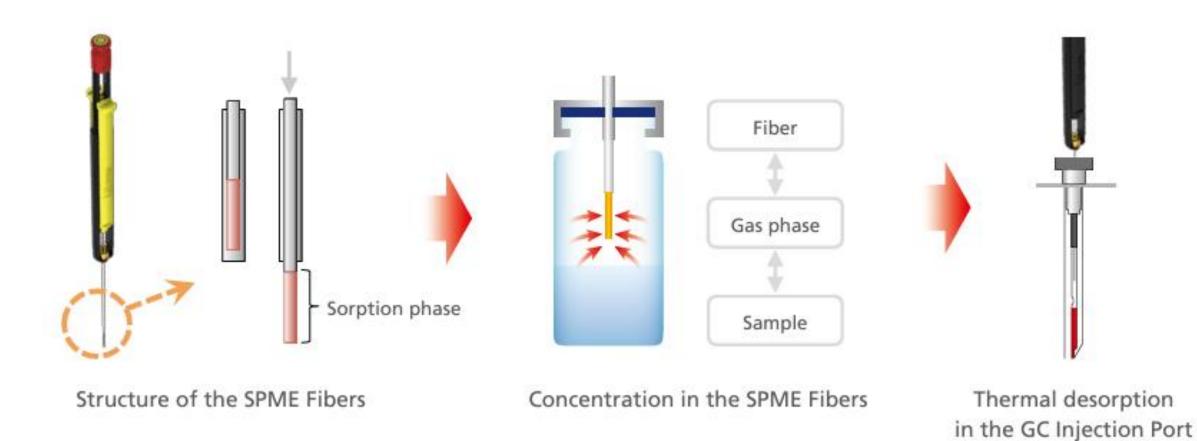
- GC
- 2 Injection Port
- Column Oven
- 4 GC Column
- GCMS Interface
- 6 MS

- Turbomolecular Pump
- 8 Ion Source

- Mass Analyzer
- Detector

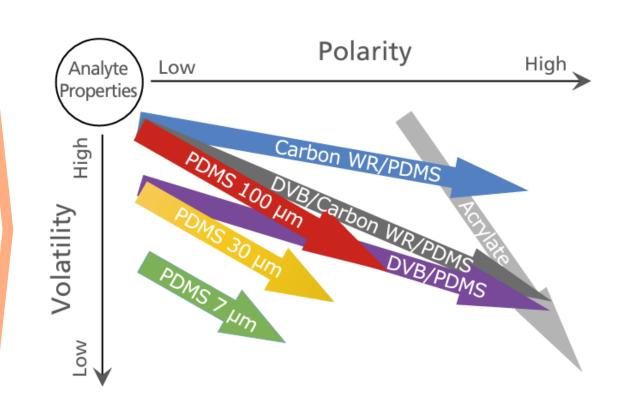


Extracción de compuestos por SPME





Divinylbenzene (DVB)/PDMS 65 µm Carbon Wide Range (WR)/PDMS 80 µm DVB/Carbon WR/PDMS 80 µm Polydimethylsiloxane (PDMS) 100 μm Polydimethylsiloxane (PDMS) 30 μm Polydimethylsiloxane (PDMS) 7 μm





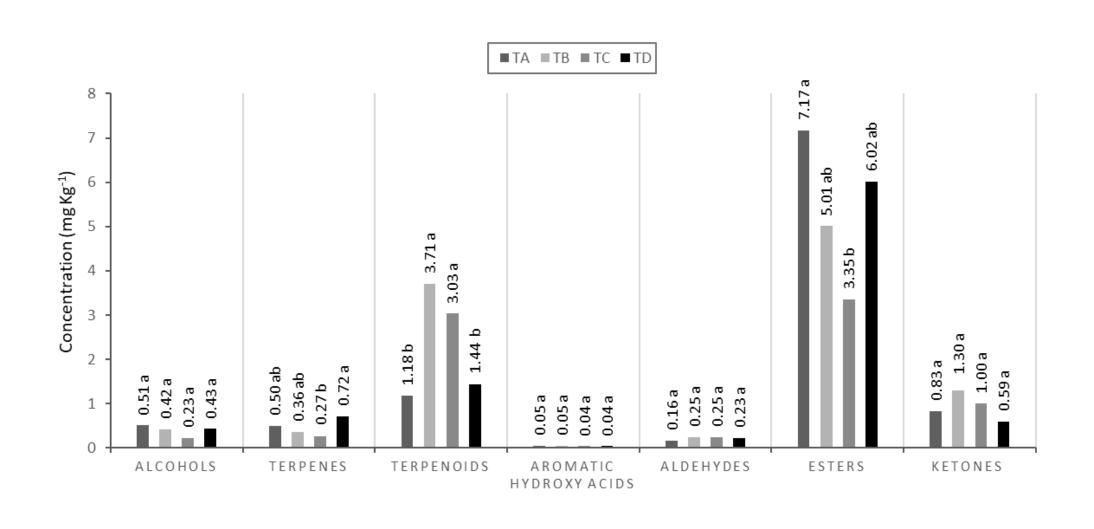
PERFIL DE **COMPUESTOS VOLÁTILES** DE **ALBARICOQUE**





| | | | Ret. | | |
|-----------|--------------------------------------|--------|-------|---------------------------------------|--------|
| Ret. Time | Compuesto | % Área | Time | Compuesto | % Área |
| 6,66 | 1-Hexanol | 6,69 | 25,88 | Decanal | 0,52 |
| 11,85 | 5-Hepten-2-one, 6-methyl- | 0,33 | 26,49 | β-Cyclocitral | 0,33 |
| 12,51 | Butanoic acid, butyl ester | 2,03 | 27,89 | Butanoic acid, 2-methyl-, hexyl ester | 2,89 |
| 12,65 | Hexanoic acid, ethyl ester | 2,37 | 28,03 | Benzeneacetic acid, ethyl ester | 0,74 |
| 13,01 | 3-Hexen-1-ol, acetate, (E)- | 1,50 | 28,69 | cis-Geraniol | 0,59 |
| 13,44 | Acetic acid, hexyl ester | 0,87 | 31,21 | Salicylic acid | 1,96 |
| 13,56 | 2-Hexen-1-ol, acetate | 2,09 | 35,77 | Hexanoic acid, 3-hexenyl ester, (Z)- | 1,33 |
| 14,08 | p-Cymene | 0,10 | 36,09 | Hexanoic acid, hexyl ester | 1,67 |
| 14,37 | Limonene | 6,79 | 36,21 | Hexanoic acid, 2-hexenyl ester, (E)- | 1,66 |
| 15,12 | Benzeneacetaldehyde | 0,22 | 36,54 | Decanoic acid, ethyl ester | 0,89 |
| 18,47 | Butanoic acid, pentyl ester | 1,01 | 37,18 | Dodecanal | 0,40 |
| 18,81 | Linalool | 8,96 | 38,15 | Dihydro-β-ionone | 1,09 |
| 23,95 | Terpinen-4-ol | 0,08 | 38,91 | Nerylacetone | 0,58 |
| 24,51 | Butanoic acid, 3-hexenyl ester, (Z)- | 6,35 | 39,57 | γ-Decalactone | 5,28 |
| 24,98 | Butanoic acid, hexyl ester | 18,57 | 40,22 | betaionone | 0,94 |
| 25,17 | Butanoic acid, 2-hexenyl ester, (E)- | 16,67 | 40,71 | δ-Decalactone | 0,32 |
| 25,31 | Octanoic acid, ethyl ester | 3,38 | 48,35 | γ-Dodecanolactone | 0,61 |

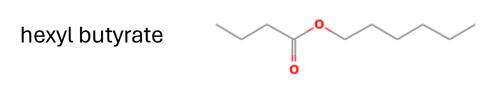






| Ret. Time | Compuesto | % Área | Ret. Time | Compuesto | % Área |
|-----------|--------------------------------------|--------|--------------|---------------------------------------|--------|
| 6,66 | 1-Hexanol | 6,69 | 25,88 | Decanal | 0,52 |
| 11,85 | 5-Hepten-2-one, 6-methyl- | 0,33 | 26,49 | β-Cyclocitral | 0,33 |
| 12,51 | Butanoic acid, butyl ester | 2,03 | 27,89 | Butanoic acid, 2-methyl-, hexyl ester | 2,89 |
| 12,65 | Hexanoic acid, ethyl ester | 2,37 | 28,03 | | 0,74 |
| 13,01 | 3-Hexen-1-ol, acetate, (E)- | 1,50 | 28,69 | cis-Geraniol | 0,59 |
| 13,44 | Acetic acid, hexyl ester | 0,87 | 31,21 | Salicylic acid | 1,96 |
| 13,56 | 2-Hexen-1-ol, acetate | 2,09 | 35,77 | Hexanoic acid, 3-hexenyl ester, (Z)- | 1,33 |
| 14,08 | p-Cymene | 0,10 | 36,09 | Hexanoic acid, hexyl ester | 1,67 |
| 14,37 | Limonene | 6,79 | 36,21 | Hexanoic acid, 2-hexenyl ester, (E)- | 1,66 |
| 15,12 | Benzeneacetaldehyde | 0,22 | 36,54 | Decanoic acid, ethyl ester | 0,89 |
| 18,47 | Butanoic acid, pentyl ester | 1,01 | 37,18 | Dodecanal | 0,40 |
| 18,81 | Linalool | 8,96 | 38,15 | Dihydro-β-ionone | 1,09 |
| 23,95 | Terpinen-4-ol | 0,08 | 38,91 | Nerylacetone | 0,58 |
| 24,51 | Butanoic acid, 3-hexenyl ester, (Z)- | 6,35 | 39,57 | γ-Decalactone | 5,28 |
| 24,98 | Butanoic acid, hexyl ester | 18,57 | 40,22 | betaionone | 0,94 |
| 25,17 | Butanoic acid, 2-hexenyl ester, (E)- | 16,67 | 40,71 | δ-Decalactone | 0,32 |
| 25,31 | Octanoic acid, ethyl ester | 3,38 | 48,35 | γ-Dodecanolactone | 0,61 |





Butanoic acid, 2-hexenyl ester, (E)-

Linalool

Limoneno

Afrutado

Fruta madura, fermentado, plátano

Floral, cítrico







| Compuesto | Conc. [ug/kg] | Umbral ppb | |
|-----------------|---------------|------------|--|
| β-ionona | 14 | 0,007 | |
| Linalol | 296 | 6 | |
| Decalactona | 492 | 11 | |
| Hexanal | 220 | 5 | |
| Limoneno | 950 | 38 | |
| Hexanol | 740 | 2500 | |
| Butil butanoato | 1300 | 10 | |
| Hexyl butanoato | 1500 | 250 | |
| 2-Hexenal | 730 | 17 | |



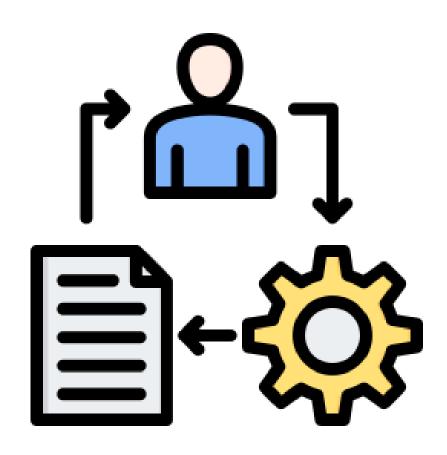
CONCLUSIONES

La percepción sensorial del olor está condicionada a la concentración del compuesto, así como a las sinergias/antagonismos entre los diferentes compuestos aromáticos del alimento.

La intensidad máxima (general) en un cromatograma no es un buen indicativo sobre la intensidad del olor (global). Algunos compuestos volátiles no tienen un olor intenso.

La concentración de un compuesto modifica la percepción sensorial de este (a concentraciones bajas puede relacionarse con un aroma y a concentraciones altas con otro).

La combinación de diferentes compuestos volátiles puede producir percepciones diferentes a las esperadas (teniendo en cuenta la percepción de los compuestos de manera individual).







MINISTERIO DE CIENCIA, INNOVACIÓN Y UNIVERSIDADES









Compuestos aromáticos y su relación con la calidad

Luis Noguera Artiaga CIAGRO-UMH