



DESARROLLO DE UN MODELO QUIMIOMÉTRICO POR PLS PARA LA CUANTIFICACIÓN DE ÁCIDO PALMÍTICO EN UNA MEZCLA DE ÁCIDOS GRASOS MEDIANTE FTIR-ATR

Juan José Romero Tovar¹, María del Carmen Cortés Pérez¹, Kimberlin Denice García Montes¹ y Alejandro Núñez Vilchis¹

¹ Laboratorio de Instrumentación Analítica, Facultad de Química, UAQ. jromero40@alumnos.uaq.mx

Los ácidos grasos (AG) desempeñan un papel fundamental en los sistemas biológicos y son macronutrientes esenciales de la dieta humana, algunos de ellos son el ácido palmítico (AP), el ácido esteárico (AE) y el ácido oleico (AO)¹. El AP tiene una presencia considerable en productos de origen natural, industrial y en sistemas biológicos, ejemplo de ello, el cuerpo humano donde representa entre el 20-30% de los AG totales². Dada su importancia biológica y aunado a las matrices analíticas en las que usualmente se encuentra este compuesto, actualmente se emplea la cromatografía de gases con distintos detectores para su determinación, la cual, aun siendo una poderosa técnica de análisis, presenta ciertas desventajas como la exhaustiva preparación de muestra y la necesidad de derivatización de los AG para su detección³. En este sentido, se presenta un campo de estudio relacionado con el desarrollo de metodologías enfocadas en el uso de herramientas matemáticas e instrumentación sencilla para el análisis de AP en mezclas complejas. Considerando esto, optamos por utilizar espectroscopía de infrarrojo medio como técnica instrumental, por la simplicidad del análisis, mínimo tamaño de muestra y la gran cantidad de información obtenida de una medición, combinada con regresión de mínimos cuadrados parciales (PLS) para obtener un modelo matemático capaz de estimar la concentración de AP en presencia de otros AG. Utilizando la absorbancia a 1740 cm⁻¹ de número de onda como variable predictora en la regresión por PLS y analizando una serie de mezclas de AP, AE y AO en un espectrómetro infrarrojo con transformada de Fourier (FTIR), se llegó a una función que pudo explicar arriba del 99 % (R² = 0.997) de la dispersión de la variable de respuesta (definida como 'g/L de AP') y por tanto capaz de estimarla con precisión, superando a un análisis de correlación lineal simple por estándar externo cuyo R² fue de 0.918. Se observó una posible limitante en el modelo relacionado con las proporciones de los AG por lo que se requiere continuar con los estudios para encontrar nuevas funciones que complementen al actual o, en su defecto, corregirlo, sin embargo, este trabajo aporta una alternativa metodológica rápida, simple y precisa para la determinación de AP en matrices complejas que pudiera extrapolarse a otros compuestos biológicos similares. 1. Mancini, A., Imperlini, E., Nigro, E., Montagnese, C., Daniele, A., Orrù, S., & Buono, P. (2015). Biological and nutritional properties of palm oil and palmitic acid: Effects on health. *Molecules*, 20(9), 17339-17361. 2. Carta, G., Murru, E., Banni, S., & Manca, C. (2017). Palmitic acid: Physiological role, metabolism and nutritional implications. *Frontiers in Physiology*, 8. 3. Chiu, H.-H., & Kuo, C.-H. (2020). Gas chromatography-mass spectrometry-based analytical strategies for fatty acid analysis in biological samples. *Journal of Food and Drug Analysis*, 28(1), 60-73.