

Supplementary material

Characterization of Sparkling Wine Based on Polyphenolic Profiling by Liquid Chromatography Coupled to Mass Spectrometry

Eleonora Oliva ^{1,2}, Aina Mir-Cerdà ^{1,3}, Manuel Sergi ⁴, Sònia Sentellas ^{1,3,5} and Javier Saurina ^{1,3,*}

¹ Department of Chemical Engineering and Analytical Chemistry, Universitat de Barcelona, E08028 Barcelona, Spain

² Faculty of Bioscience and Technology for Food, Agriculture and Environment, 64100 Teramo, Italy

³ Research Institute in Food Nutrition and Food Safety, Universitat de Barcelona, Recinte Torribera, E08921 Santa Coloma de Gramenet, Spain

⁴ Chemistry Department, University La Sapienza, 00185 Rome, Italy

⁵ Serra Hünter Fellow, Generalitat de Catalunya, E08007 Barcelona, Spain

* Correspondence: Correspondence: xavi.saurina@ub.edu

Table S1. Chemical structures of principal families of phenolic compounds tentatively present in white wines.

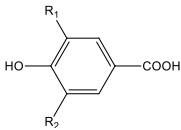
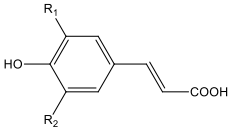
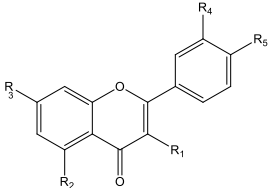
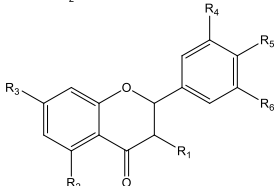
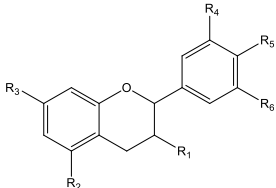
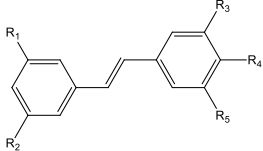
Family	Subfamily	General structure	Substitutions
Phenolic acids	Benzoic acids		R1: H, OH, OCH ₃ R2: H, OH, OCH ₃
	Cinnamic acids		R1: H, OH, OCH ₃ R2: H, OCH ₃
Flavonoids	Flavones Flavonols		R1: H, OH R2: H, OH R3: OH R4: H, OH R5: H, OH
	Flavonones Flavononols		R1: H, OH R2: OH R3: H, OH R4: H, OH R5: OH, OCH ₃ R6: H, OH
	Catechins		R1 to R3: OH R4: H, OH R5: OH R6: H, OH
Stilbenes			R1 to R4: H, OH, OCH ₃ R5: H, OH

Table S2. MRM transitions for the detection of polyphenols by LC-ESI-MS/MS.

Polyphenol	Parent ion (<i>m/z</i>)	Daughter ion (<i>m/z</i>)	DP (V)	CE (V)	CXP (V)
Gallic acid	169.0	124.9	−40	−22	−19
Caffeic acid	178.9	134.8	−45	−20	−1
Quercetin	300.9	150.8	−80	−32	−1
Kaempferol	285.1	117.0	−91	−63	−3
Resveratrol	226.8	143.3	−70	−34	−1
Ferulic acid	192.6	134.3	−30	−22	−1
Vanillic acid	166.9	151.8	−65	−20	−1
Ethyl gallate	197.2	123.8	−60	−34	−3
Catechin	289.1	109.2	−110	−42	−19
Epicatechin	288.7	124.9	−85	−33	−7
p-Coumaric acid	163.0	119.3	−60	−18	−1
Rutin	609.2	299.6	−95	−48	−23
Myricetin	316.9	150.8	−95	−40	−9
Syringic acid	196.9	120.9	−40	−26	−9
Astilbin	449.1	285.0	−100	−32	−1
Trans-coutaric acid	295.0	162.9	−30	−20	−11
Caftaric acid	311.1	179.0	−50	−22	−11
4-hydroxybenzoic acid	136.8	92.9	−55	−18	−7
Chlorogenic acid	352.9	190.6	−60	−20	−17
4-Hydroxytyrosol	152.9	122.9	−7	−22	−8
Procyanidin B1	577.3	288.9	−90	−10	−40
Procyanidin B2	577.1	407.1	−75	−26	−21
2,5-dihydroxybenzoic acid	152.8	108.0	−50	−18	−15
3,4-dihydroxybenzoic acid	152.9	108.9	−70	−20	−3

DP: declustering potential, CE: collision energy, CXP: collision cell exit potential.

Table S3. Concentrations in mg L⁻¹ of polyphenols in the set of samples analyzed in triplicate. Sample nomenclature: base wine (BW), stabilized wine (SW), sparkling wine (3 months aged, 3M), sparkling wine (7 months aged, 7M), A-type Pinot Noir (PA), B-type Pinot Noir (PB), C-type Pinot Noir (PC), D-type Pinot Noir (PD), A-type Xarel-lo (XA), B-type Xarel-lo (XB), C-type Xarel-lo (XC), and D-type Xarel-lo (XD). .

Sample	Gallic Acid	Caffeic acid	Vanillic Acid	Ethyl gallate	Astilbin	Caftaric acid	4-Hydroxybenzoic acid	2,5-Dihydroxybenzoic acid	3,4-Dihydroxybenzoic acid	OH-Tyrosol	Ferulic acid	Syringic acid	p-Coumaric acid	Catechin	Epicatechin	Coumaric acid	Procyanidin B1	Procyanidin B2
3MPA	0.25	2.47	0.37	0.13	0.46	22.60	0.09	0.05	0.11	0.17	0.10	0.00	0.08	0.78	0.25	0.97	0.68	0.56
3MPA	0.26	2.31	0.36	0.12	0.49	23.10	0.08	0.05	0.11	0.18	0.10	0.01	0.08	0.71	0.24	1.04	0.68	0.56
3MPA	0.17	2.40	0.37	0.12	0.46	22.90	0.09	0.05	0.11	0.18	0.12	0.00	0.07	0.74	0.25	1.02	0.67	0.55
7MPA	0.26	2.45	0.30	0.12	0.43	21.30	0.07	0.21	0.13	0.19	0.07	0.20	0.03	0.26	0.20	0.29	0.00	0.00
7MPA	0.27	2.46	0.28	0.13	0.47	21.60	0.07	0.22	0.13	0.19	0.07	0.18	0.04	0.25	0.18	0.28	0.00	0.00
7MPA	0.26	2.30	0.29	0.13	0.47	21.20	0.07	0.21	0.13	0.19	0.06	0.18	0.04	0.26	0.18	0.30	0.00	0.00
SWPA	0.25	2.74	0.37	0.14	0.51	27.50	0.07	0.12	0.10	0.28	0.19	0.01	0.39	0.66	0.22	0.87	0.60	0.55
SWPA	0.25	2.65	0.36	0.13	0.51	27.90	0.07	0.12	0.12	0.28	0.18	0.01	0.38	0.62	0.22	0.90	0.60	0.54
SWPA	0.25	2.62	0.35	0.14	0.52	27.30	0.08	0.10	0.10	0.27	0.20	0.01	0.36	0.62	0.23	0.83	0.58	0.54
BWPA	0.13	1.48	0.24	0.08	0.44	23.80	0.02	1.01	0.40	0.75	0.31	0.06	0.76	1.24	0.43	3.07	0.74	0.58
BWPA	0.13	1.53	0.27	0.08	0.44	23.60	0.03	1.04	0.41	0.73	0.30	0.06	0.71	1.09	0.38	2.71	0.75	0.57
BWPA	0.13	1.46	0.25	0.08	0.42	24.00	0.03	1.00	0.39	0.73	0.29	0.05	0.71	1.13	0.41	2.66	0.75	0.58
3MPB	0.86	0.90	0.23	0.40	1.31	10.20	0.07	0.25	0.08	0.18	0.10	0.02	0.02	0.94	0.31	1.90	0.60	0.54
3MPB	0.87	0.90	0.24	0.39	1.45	9.85	0.08	0.25	0.08	0.18	0.11	0.02	0.02	0.92	0.29	1.98	0.58	0.55
3MPB	0.83	0.87	0.26	0.39	1.46	9.77	0.07	0.25	0.08	0.20	0.09	0.01	0.02	0.94	0.29	1.94	0.58	0.54
7MPB	0.97	1.10	0.24	0.41	1.57	10.90	0.09	0.05	0.16	0.39	0.18	0.23	0.16	0.24	0.20	0.29	0.00	0.00
7MPB	0.97	1.03	0.23	0.42	1.63	10.50	0.09	0.05	0.16	0.38	0.18	0.24	0.14	0.25	0.18	0.29	0.00	0.00
7MPB	0.94	0.97	0.31	0.44	1.55	11.30	0.09	0.05	0.17	0.38	0.19	0.23	0.14	0.24	0.18	0.29	0.00	0.00
SWPB	0.77	0.80	0.36	0.39	1.28	9.11	0.08	0.41	0.15	0.38	0.16	0.08	0.27	0.46	0.24	2.89	0.52	0.00
SWPB	0.77	0.79	0.34	0.39	1.35	9.34	0.08	0.42	0.15	0.38	0.16	0.08	0.26	0.45	0.23	2.75	0.52	0.00
SWPB	0.77	0.80	0.35	0.39	1.29	9.56	0.08	0.42	0.15	0.35	0.15	0.08	0.25	0.42	0.23	2.69	0.53	0.00

BWPB	0.29	0.40	0.22	0.14	0.69	1.60	0.01	0.33	0.35	0.38	0.18	0.31	0.61	0.31	0.19	0.35	0.00	0.00
BWPB	0.29	0.37	0.28	0.15	0.68	1.63	0.01	0.32	0.33	0.38	0.17	0.29	0.56	0.30	0.17	0.36	0.00	0.00
BWPB	0.30	0.38	0.24	0.15	0.69	1.69	0.01	0.31	0.36	0.35	0.18	0.27	0.60	0.31	0.18	0.35	0.00	0.00
3MPC	1.61	0.62	0.75	0.52	1.74	3.50	0.16	0.50	0.36	0.35	0.20	0.04	0.55	1.29	0.40	2.67	0.97	0.59
3MPC	1.54	0.58	0.77	0.53	1.70	3.78	0.15	0.49	0.38	0.35	0.18	0.04	0.53	1.34	0.40	2.92	1.02	0.58
3MPC	1.54	0.60	0.77	0.52	1.76	3.40	0.15	0.51	0.36	0.35	0.19	0.04	0.52	1.35	0.39	2.68	0.96	0.58
7MPC	1.62	0.65	0.61	0.51	1.67	3.20	0.15	0.41	0.48	1.17	0.28	0.77	0.54	0.70	0.48	0.56	0.55	0.54
7MPC	1.53	0.64	0.64	0.51	1.76	3.14	0.13	0.38	0.42	1.02	0.25	0.72	0.50	0.72	0.48	0.54	0.54	0.54
7MPC	1.51	0.59	0.61	0.52	1.64	3.08	0.14	0.40	0.46	1.02	0.26	0.74	0.49	0.71	0.49	0.57	0.55	0.55
BWPC	1.37	0.56	0.57	0.49	1.47	2.72	0.15	0.23	0.16	0.32	0.20	0.31	0.26	0.40	0.36	0.94	0.00	0.00
BWPC	1.29	0.52	0.55	0.50	1.47	2.40	0.14	0.23	0.14	0.32	0.20	0.32	0.22	0.47	0.33	0.94	0.00	0.00
BWPC	1.42	0.56	0.60	0.52	1.58	2.55	0.13	0.23	0.14	0.33	0.19	0.33	0.24	0.46	0.33	0.97	0.00	0.00
3MPD	1.39	0.88	0.61	0.44	4.61	7.20	0.18	0.80	0.31	0.45	0.26	0.05	0.46	1.20	0.43	2.98	1.08	0.59
3MPD	1.46	0.81	0.57	0.45	4.59	7.34	0.18	0.80	0.28	0.43	0.25	0.05	0.42	1.31	0.42	3.24	1.09	0.60
3MPD	1.44	0.87	0.58	0.45	4.69	7.36	0.18	0.77	0.29	0.44	0.24	0.05	0.42	1.34	0.42	3.29	1.09	0.58
7MPD	1.53	0.91	0.52	0.49	5.13	7.08	0.18	0.39	0.70	1.31	0.31	0.55	0.66	2.57	1.45	1.37	0.75	0.61
7MPD	1.49	0.89	0.56	0.51	5.09	7.53	0.16	0.39	0.67	1.26	0.32	0.52	0.60	2.57	1.51	1.19	0.72	0.61
7MPD	1.48	0.91	0.56	0.50	5.07	6.79	0.19	0.40	0.69	1.24	0.30	0.52	0.63	2.40	1.47	1.33	0.70	0.61
SWPD	1.52	0.70	0.52	0.47	5.73	8.89	0.20	0.66	0.58	0.85	0.23	0.06	0.89	0.93	0.47	2.94	0.58	0.55
SWPD	1.53	0.65	0.54	0.46	5.54	9.39	0.19	0.67	0.55	0.80	0.21	0.06	0.89	0.98	0.45	2.90	0.57	0.56
SWPD	1.52	0.63	0.54	0.47	5.69	10.20	0.19	0.68	0.53	0.81	0.22	0.06	0.86	0.98	0.43	2.71	0.58	0.55
BWPD	1.20	0.75	0.41	0.37	4.38	5.68	0.13	0.61	0.81	1.63	0.27	0.66	0.92	1.07	0.58	1.66	0.00	0.00
BWPD	1.19	0.69	0.39	0.37	4.41	5.75	0.13	0.60	0.81	1.51	0.27	0.66	0.90	1.03	0.54	1.63	0.00	0.00
BWPD	1.20	0.69	0.40	0.36	4.42	5.37	0.14	0.60	0.82	1.47	0.27	0.66	0.91	1.00	0.54	1.52	0.00	0.00
3MXA	0.29	1.66	0.00	0.12	0.16	14.90	0.02	0.13	0.12	0.28	0.22	0.02	0.41	0.42	0.19	0.84	0.53	0.00
3MXA	0.28	1.70	0.00	0.12	0.16	14.70	0.02	0.14	0.13	0.28	0.22	0.01	0.40	0.42	0.19	0.86	0.53	0.00
3MXA	0.28	1.71	0.00	0.13	0.17	14.60	0.02	0.13	0.12	0.27	0.22	0.01	0.40	0.43	0.18	0.87	0.52	0.00
7MXA	0.29	1.79	0.00	0.12	0.15	15.10	0.02	0.31	0.20	0.35	0.20	0.28	0.57	0.26	0.16	0.37	0.00	0.00

7MXA	0.29	1.76	0.00	0.13	0.17	14.90	0.02	0.30	0.23	0.31	0.19	0.27	0.54	0.26	0.16	0.37	0.00	0.00
7MXA	0.28	1.70	0.00	0.12	0.18	15.30	0.02	0.29	0.21	0.32	0.18	0.29	0.52	0.26	0.16	0.38	0.00	0.00
SWXA	0.26	1.66	0.00	0.13	0.16	15.90	0.01	0.15	0.12	0.30	0.25	0.02	0.45	0.46	0.19	0.86	0.53	0.00
SWXA	0.27	1.69	0.00	0.13	0.16	16.40	0.01	0.14	0.13	0.27	0.23	0.02	0.45	0.49	0.20	0.88	0.54	0.00
SWXA	0.27	1.72	0.00	0.12	0.14	16.30	0.01	0.15	0.12	0.28	0.21	0.02	0.44	0.47	0.19	0.88	0.54	0.00
BWXA	0.26	1.45	0.00	0.11	0.10	19.60	0.00	0.32	0.24	0.33	0.19	0.27	0.59	0.27	0.17	0.38	0.00	0.00
BWXA	0.26	1.42	0.00	0.12	0.12	19.90	0.00	0.32	0.21	0.31	0.19	0.28	0.59	0.27	0.17	0.36	0.00	0.00
BWXA	0.25	1.47	0.00	0.12	0.12	19.80	0.00	0.32	0.24	0.34	0.19	0.27	0.55	0.25	0.16	0.39	0.00	0.00
3MXB	0.73	0.73	0.12	0.26	0.37	16.30	0.13	0.38	0.14	0.36	0.14	0.07	0.26	0.40	0.20	2.15	0.00	0.00
3MXB	0.74	0.73	0.11	0.27	0.35	15.80	0.13	0.39	0.15	0.34	0.14	0.08	0.22	0.40	0.19	2.34	0.00	0.00
3MXB	0.73	0.71	0.09	0.27	0.35	16.10	0.12	0.40	0.15	0.34	0.14	0.07	0.22	0.36	0.19	2.26	0.00	0.00
7MXB	0.79	0.85	0.11	0.30	0.41	16.40	0.18	0.25	0.17	0.35	0.22	0.35	0.33	0.37	0.30	1.00	0.00	0.00
7MXB	0.78	0.89	0.11	0.31	0.44	16.40	0.15	0.26	0.17	0.32	0.21	0.34	0.32	0.40	0.31	1.05	0.00	0.00
7MXB	0.76	0.86	0.11	0.31	0.42	16.30	0.16	0.27	0.16	0.32	0.20	0.34	0.26	0.40	0.27	1.11	0.00	0.00
SWXB	0.76	0.81	0.22	0.31	0.45	18.50	0.11	0.51	0.17	0.33	0.20	0.09	0.41	0.35	0.20	2.45	0.00	0.00
SWXB	0.77	0.79	0.26	0.31	0.42	18.50	0.11	0.50	0.16	0.32	0.18	0.09	0.41	0.35	0.18	2.66	0.00	0.00
SWXB	0.77	0.78	0.26	0.31	0.47	18.50	0.11	0.50	0.16	0.31	0.17	0.09	0.38	0.36	0.18	2.60	0.00	0.00
BWXB	0.48	0.63	0.05	0.21	0.21	9.59	0.08	0.30	0.20	0.31	0.25	0.36	0.41	0.45	0.30	1.04	0.00	0.00
BWXB	0.48	0.64	0.06	0.22	0.22	9.86	0.08	0.28	0.18	0.30	0.24	0.38	0.37	0.45	0.30	1.01	0.00	0.00
BWXB	0.47	0.56	0.06	0.21	0.20	9.57	0.08	0.28	0.18	0.30	0.23	0.36	0.37	0.44	0.28	1.06	0.00	0.00
3MXC	0.59	1.04	0.14	0.20	1.41	18.60	0.19	0.80	0.52	0.80	0.20	0.06	0.94	0.81	0.32	2.87	0.56	0.00
3MXC	0.59	1.04	0.13	0.21	1.40	19.10	0.18	0.79	0.54	0.73	0.21	0.06	0.91	0.82	0.29	2.65	0.56	0.00
3MXC	0.59	1.02	0.14	0.21	1.59	19.80	0.16	0.79	0.53	0.74	0.21	0.06	0.88	0.87	0.28	2.81	0.55	0.00
7MXC	0.58	1.18	0.17	0.21	1.34	16.70	0.26	0.50	0.43	0.91	0.27	0.79	0.56	0.50	0.25	0.58	0.00	0.00
7MXC	0.59	1.16	0.17	0.21	1.20	17.40	0.23	0.51	0.44	1.01	0.27	0.81	0.60	0.50	0.26	0.69	0.00	0.00
7MXC	0.59	1.16	0.17	0.20	1.23	20.20	0.22	0.50	0.42	0.92	0.28	0.82	0.59	0.51	0.25	0.65	0.00	0.00
SWXC	0.54	1.08	0.12	0.20	1.37	17.90	0.20	0.89	0.53	0.82	0.24	0.08	1.10	0.65	0.22	2.74	0.00	0.00
SWXC	0.54	1.12	0.12	0.21	1.36	17.30	0.19	0.91	0.52	0.77	0.24	0.07	1.07	0.65	0.22	2.59	0.00	0.00

SWXC	0.54	1.11	0.12	0.20	1.32	17.60	0.18	0.90	0.52	0.75	0.23	0.07	0.98	0.62	0.23	2.77	0.00	0.00
BWXC	0.50	0.72	0.18	0.16	0.36	17.90	0.16	0.53	0.48	1.12	0.31	0.90	0.63	0.56	0.30	0.59	0.00	0.00
BWXC	0.49	0.76	0.22	0.17	0.36	18.80	0.16	0.52	0.49	1.03	0.31	0.82	0.63	0.59	0.29	0.65	0.00	0.00
BWXC	0.49	0.68	0.18	0.18	0.35	18.60	0.16	0.52	0.44	0.96	0.29	0.85	0.59	0.53	0.26	0.59	0.00	0.00
3MXD	0.65	1.22	0.29	0.22	0.61	12.00	0.31	1.05	0.39	0.73	0.33	0.06	0.85	0.64	0.21	2.56	0.55	0.00
3MXD	0.65	1.20	0.30	0.22	0.63	11.50	0.30	1.02	0.38	0.65	0.32	0.07	0.83	0.65	0.21	2.42	0.54	0.00
3MXD	0.65	1.14	0.21	0.23	0.61	12.20	0.29	1.05	0.38	0.68	0.30	0.06	0.75	0.63	0.21	2.37	0.55	0.00
7MXD	0.67	1.21	0.26	0.22	0.58	12.20	0.32	0.60	0.75	1.41	0.41	0.67	0.95	0.98	0.54	1.50	0.00	0.00
7MXD	0.65	1.22	0.24	0.22	0.58	12.50	0.31	0.62	0.76	1.44	0.36	0.67	0.92	0.96	0.52	1.42	0.00	0.00
7MXD	0.64	1.20	0.24	0.22	0.58	12.00	0.31	0.61	0.79	1.41	0.37	0.66	0.91	0.97	0.51	1.47	0.00	0.00
SWXD	0.65	1.20	0.13	0.22	0.71	12.80	0.27	1.08	0.37	0.69	0.32	0.06	0.80	0.67	0.24	2.26	0.56	0.00
SWXD	0.66	1.18	0.13	0.23	0.69	12.60	0.27	1.18	0.39	0.70	0.32	0.06	0.78	0.71	0.24	2.50	0.55	0.00
SWXD	0.66	1.18	0.13	0.21	0.69	13.00	0.28	1.18	0.37	0.68	0.32	0.06	0.80	0.70	0.21	2.76	0.54	0.00
BWXD	0.59	0.91	0.16	0.20	0.51	12.90	0.30	0.59	0.78	1.47	0.40	0.68	0.99	0.80	0.38	1.41	0.00	0.00
BWXD	0.58	0.91	0.13	0.20	0.51	13.50	0.27	0.63	0.77	1.40	0.37	0.66	0.95	0.78	0.39	1.57	0.00	0.00
BWXD	0.57	0.91	0.14	0.20	0.49	13.90	0.28	0.65	0.78	1.35	0.37	0.71	0.99	0.78	0.40	1.63	0.00	0.00