



CARTA DE AUTORIZACIÓN

CÓDIGO

AP-BIB-FO-06

VERSIÓN

1

VIGENCIA

2014

PÁGINA

1 de 1

Neiva, 15 enero 2019

Señores

CENTRO DE INFORMACIÓN Y DOCUMENTACIÓN

UNIVERSIDAD SURCOLOMBIANA

Ciudad

El (Los) suscrito(s):

KAREN TATIANA SALAS CALDERÓN, con C.C. No. 1075288322,

Autor (es) de la tesis y/o trabajo de grado o titulado: Comparación de muestras de café comercial, especial y defectos de café mediante análisis del espectro Infrarrojo por transformada de Fourier (FTIR) presentado y aprobado en el año _2018_ como requisito para optar al título de INGENIERO AGRÍCOLA

Autorizo (amos) al CENTRO DE INFORMACIÓN Y DOCUMENTACIÓN de la Universidad Surcolombiana para que con fines académicos, muestre al país y el exterior la producción intelectual de la Universidad Surcolombiana, a través de la visibilidad de su contenido de la siguiente manera:

- Los usuarios puedan consultar el contenido de este trabajo de grado en los sitios web que administra la Universidad, en bases de datos, repositorio digital, catálogos y en otros sitios web, redes y sistemas de información nacionales e internacionales “open access” y en las redes de información con las cuales tenga convenio la Institución.
- Permita la consulta, la reproducción y préstamo a los usuarios interesados en el contenido de este trabajo, para todos los usos que tengan finalidad académica, ya sea en formato Cd-Rom o digital desde internet, intranet, etc., y en general para cualquier formato conocido o por conocer, dentro de los términos establecidos en la Ley 23 de 1982, Ley 44 de 1993, Decisión Andina 351 de 1993, Decreto 460 de 1995 y demás normas generales sobre la materia.
- Continúo conservando los correspondientes derechos sin modificación o restricción alguna; puesto que de acuerdo con la legislación colombiana aplicable, el presente es un acuerdo jurídico que en ningún caso conlleva la enajenación del derecho de autor y sus conexos.

De conformidad con lo establecido en el artículo 30 de la Ley 23 de 1982 y el artículo 11 de la Decisión Andina 351 de 1993, “Los derechos morales sobre el trabajo son propiedad de los autores”, los cuales son irrenunciables, imprescriptibles, inembargables e inalienables.

EL AUTOR/ESTUDIANTE:

Firma: *Tatiana Salas C.*

Vigilada Mineducación



DESCRIPCIÓN DE LA TESIS Y/O TRABAJOS DE GRADO

CÓDIGO	AP-BIB-FO-07	VERSIÓN	1	VIGENCIA	2014	PÁGINA	1 de 3
---------------	---------------------	----------------	----------	-----------------	-------------	---------------	---------------

TÍTULO COMPLETO DEL TRABAJO: Comparación de muestras de café comercial, especial y defectos de café mediante análisis del espectro Infrarrojo por transformada de Fourier (FTIR)

AUTOR O AUTORES:

Primero y Segundo Apellido	Primero y Segundo Nombre
SALAS CALDERON	KAREN TATIANA

DIRECTOR Y CODIRECTOR TESIS:

Primero y Segundo Apellido	Primero y Segundo Nombre
GIRON HERNANDEZ	LUNIER JOEL

ASESOR (ES):

Primero y Segundo Apellido	Primero y Segundo Nombre
BARRIOS RODRIGUEZ	YEISON FERNANDO
DELGADO JOVEN	BERTULFO
CORTÉS MACÍAS	ERIKA TATIANA

PARA OPTAR AL TÍTULO DE: INGENIERO AGRÍCOLA

FACULTAD: INGENIERÍA

PROGRAMA O POSGRADO: AGRÍCOLA

CIUDAD: NEIVA

AÑO DE PRESENTACIÓN: 2018

NÚMERO DE PÁGINAS: 16

TIPO DE ILUSTRACIONES (Marcar con una X):

Diagramas_X_ Fotografías_X_ Grabaciones en discos___ Ilustraciones en general___ Grabados___
Láminas___ Litografías___ Mapas___ Música impresa___ Planos___ Retratos___ Sin ilustraciones___
Tablas o Cuadros_X_

SOFTWARE WORD (MICROSOFT OFFICE)

Vigilada mieducación

La versión vigente y controlada de este documento, solo podrá ser consultada a través del sitio web Institucional www.usco.edu.co, link Sistema Gestión de Calidad. La copia o impresión diferente a la publicada, será considerada como documento no controlado y su uso indebido no es de responsabilidad de la Universidad Surcolombiana.



MATERIAL ANEXO:

PREMIO O DISTINCIÓN (*En caso de ser LAUREADAS o Meritoria*):

PALABRAS CLAVES EN ESPAÑOL E INGLÉS:

<u>Español</u>	<u>Inglés</u>
1. café comercial	comercial coffee
2. café especial	special coffee
3. propiedades fisicoquímicas	physicochemical properties
4. compuestos químicos	Chemical compounds
5. longitud de onda	wavelength

RESUMEN DEL CONTENIDO: (Máximo 250 palabras)

En el presente trabajo se evaluaron y compararon los espectros de infrarrojo por transformada de Fourier de muestras de café comerciales (molidos e instantáneos), defectos de café, y cafés especiales con grado de tostado medio y alto. También, se realizaron la caracterización físico-química y sensorial de las muestras. En el análisis sensorial participaron consumidores comunes y jueces semi-entrenados que evaluaron las muestras mediante una escala semiestructurada que evaluaba once atributos. Los resultados obtenidos se evaluaron estadísticamente mediante análisis de varianza (ANOVA simple) para determinar si existían diferencias significativas entre las variables evaluadas. Adicionalmente, se efectuó un análisis de componentes principales para comprimir la información de los espectros de infrarrojo y observar las agrupaciones de las muestras estudiadas. Se identificó que todas las variables físico-químicas evaluadas tuvieron diferencias estadísticamente significativas ($p < 0.05$). En cuanto a los resultados sensoriales, ambos grupos de evaluadores evidenciaron preferencias por las muestras de café especial con tostado media, y solo los jueces semi-entrenados lograron discriminar entre las muestras de café especiales y no especiales. El análisis del espectro de infrarrojo por transformada de Fourier permitió la caracterización de las muestras; mediante la identificación de compuestos químicos: cafeína (1650 cm^{-1} , 2920 cm^{-1} , 2850 cm^{-1}), ácidos clorogénicos ($1050\text{-}1400\text{ cm}^{-1}$), lípidos (1740 cm^{-1}), carbohidratos (872 cm^{-1}), que permitieron la agrupación de las muestras en el análisis de componentes principales, con los dos primeros componentes se explicó un 92.37% de la varianza de las muestras. El café instantáneo se separó del resto de las muestras y los cafés con grado de tostado alto y medio formaron grupos que se localizaron por debajo del segundo componente principal (18.92%).

ABSTRACT: (Máximo 250 palabras)

In the present work, the Fourier transform infrared spectra of commercial (ground and instant) coffee samples, coffee defects, and specialty coffees with medium and high roast degrees were evaluated and compared. Also, the physical and chemical characterization of the samples was carried out. In the sensory analysis, common consumers and semi-trained judges participated, who evaluated the samples using a semi-structured scale that



evaluated eleven attributes. The results obtained were statistically evaluated by analysis of variance (simple ANOVA) to determine if there were significant differences between the variables evaluated. Additionally, an analysis of the main components was carried out to compress the information of the infrared spectra and observe the groupings of the samples studied. It was identified that all the physicochemical variables evaluated had statistically significant differences ($p < 0.05$). Regarding the sensory results, both groups of evaluators showed preferences for the samples of special coffee with medium roasting, and only the semi-trained judges managed to discriminate between the special and non-special coffee samples. The analysis of the infrared spectrum by Fourier transform allowed the characterization of the samples; by identifying chemical compounds: caffeine (1650 cm^{-1} , 2920 cm^{-1} , 2850 cm^{-1}), chlorogenic acids ($1050\text{-}1400 \text{ cm}^{-1}$), lipids (1740 cm^{-1}), carbohydrates (872 cm^{-1}), which allowed the grouping of the samples in the analysis of main components, with the first two components explained a 92.37% of the variance of the samples. The instant coffee was separated from the rest of the samples and the coffees with high and medium toasting degree formed groups that were located below the second main component (18.92%).

APROBACION DE LA TESIS

Nombre Presidente Jurado: LUNIER JOEL GIRÓN HERNÁNDEZ

Firma:

Nombre Jurado: BERTULFO DELGADO JOVEN

Firma:

Nombre Jurado: ERIKA TATIANA CORTES MACIAS

Firma:

Comparación de muestras de café comercial, especial y defectos de café mediante análisis del espectro Infrarrojo por transformada de Fourier (FTIR)

Comparison of different samples of commercial coffee, special coffee and coffee defects by infrared spectrum analysis by Fourier transformation (FTIR)

Karen Tatiana Salas¹, Yeison Fernando Barrios² y Lunier Joel Giron³

Resumen

En el presente trabajo se evaluaron y compararon los espectros de infrarrojo por transformada de Fourier de muestras de café comerciales (molidos e instantáneos), defectos de café, y cafés especiales con grado de tostado medio y alto. También, se realizó la caracterización fisicoquímica y sensorial de las muestras. En el análisis sensorial participaron consumidores comunes y jueces semi-entrenados que evaluaron las muestras mediante una escala semiestructurada que evaluaba once atributos. Los resultados obtenidos se evaluaron estadísticamente mediante análisis de varianza (ANOVA simple) para determinar si existían diferencias significativas entre las variables evaluadas. Adicionalmente, se efectuó un análisis de componentes principales para comprimir la información de los espectros de infrarrojo y observar las agrupaciones de las muestras estudiadas. Se identificó que todas las variables fisicoquímicas evaluadas tuvieron diferencias estadísticamente significativas ($p < 0.05$). En cuanto a los resultados sensoriales, ambos grupos de evaluadores evidenciaron preferencias por las muestras de café especial con tostado medio, y solo los jueces semi-entrenados lograron discriminar entre las muestras de café especiales y no especiales. El análisis del espectro de infrarrojo por transformada de Fourier permitió la caracterización de las muestras; mediante la identificación de compuestos químicos: cafeína (1650 cm^{-1} , 2920 cm^{-1} , 2850 cm^{-1}), ácidos clorogénicos ($1050\text{-}1400\text{ cm}^{-1}$), lípidos (1740 cm^{-1}), carbohidratos (872 cm^{-1}), que permitieron la agrupación de las muestras en el análisis de componentes principales, con los dos primeros componentes se explicó un 92.37% de la varianza de las muestras. El café instantáneo se separó del resto de las muestras y los cafés con grado de tostado alto y medio formaron grupos que se localizaron por debajo del segundo componente principal (18.92%).

Palabras clave: café comercial; café especial; propiedades fisicoquímicas; compuestos químicos; longitud de onda

Abstract

In the present work, the Fourier transform infrared spectra of commercial (ground and instant) coffee samples, coffee defects, and specialty coffees with medium and high roast degrees were evaluated and compared. Also, the physical and chemical characterization of the samples was carried out. In the sensory analysis, common consumers and semi-trained judges participated, who evaluated the samples using a semi-structured scale that evaluated eleven attributes. The results obtained were statistically evaluated by analysis of variance (simple ANOVA) to determine if there were significant differences between the variables evaluated. Additionally, an analysis of the main components was carried out to compress the information of the infrared spectra and observe the groupings of the samples studied. It was identified that all the physicochemical variables evaluated had statistically significant differences ($p < 0.05$). Regarding the sensory results, both groups of evaluators showed preferences for the samples of special coffee with medium roasting, and only the semi-trained judges managed to discriminate between the special and non-special coffee samples. The analysis of the infrared spectrum by Fourier transform allowed the characterization of the samples; by identifying chemical compounds: caffeine (1650 cm^{-1} , 2920 cm^{-1} , 2850 cm^{-1}),

chlorogenic acids (1050-1400 cm^{-1}), lipids (1740 cm^{-1}), carbohydrates (872 cm^{-1}), which allowed the grouping of the samples in the analysis of main components, with the first two components explained a 92.37% of the variance of the samples. The instant coffee was separated from the rest of the samples and the coffees with high and medium roasting degree formed groups that were located below the second main component (18.92%).

Key words: commercial coffee; special coffee; physicochemical properties; chemical compounds; wavelength

¹Estudiante de ingeniería Agrícola. Universidad Surcolombiana Av. Pastrana Borrero-cra1. E-mail: u20121108810@usco.edu.co*(Autor para correspondencia)

²Ingeniero Agrícola. Santiago-Chile. E-mail: yfbr06@gmail.com

³PhD. Ciencia e ingeniería de los alimentos. Dpto de Ingeniería Agrícola, Universidad Surcolombiana. Av. Patrana Borrero-cra1. E-mail: joel.giron@usco.edu.co

1. INTRODUCCIÓN

Después del agua, el café es la bebida más popular en el mundo y hace parte de las materias primas importantes del comercio internacional. La necesidad de entregar productos de calidad a los consumidores lleva a que se implementen técnicas de mejora día a día. Este aspecto es de gran importancia para la industria debido a que es la base del éxito en el mercado competitivo en la actualidad (Barbin, *et al.*, 2015). Un café de buena calidad es el resultado de las buenas prácticas agrícolas y el manejo correcto en la poscosecha, además, sus características intrínsecas cumplen con un requisito que puede ser una necesidad o una expectativa (ISO, 2000). Sin embargo, la adición de productos adulterantes y granos con defectos es una práctica que se facilita cuando el café ha sido tostado y molido, lo que afecta negativamente sus características (Reis, *et al.*, 2013a), (Reis, *et al.*, 2013b).

Después de la etapa de trilla se hace evidente la presencia de granos defectuosos que deben ser seleccionados y eliminados mediante el análisis físico para evitar desbalances en las características organolépticas de la bebida. Posteriormente se obtiene el café en almendra, que son los granos que cumplen con los requerimientos de exportación (excelso). Finalizada la etapa de tostado, la visualización de los defectos en los granos se hace difícil, por tal razón, es necesario poder establecer técnicas especializadas con las cuales se identifiquen estos tipos de defectos. La evaluación sensorial es la técnica más aplicada para la valoración final de muchos productos alimenticios. Sin embargo, esta metodología subjetiva que es ampliamente utilizada en la evaluación del café, presenta limitantes debido a que se hace necesaria la presencia de catadores expertos y los procedimientos implican un gasto de tiempo considerable. Además, pequeñas variaciones en la etapa de tostado pueden influir en los atributos evaluados; lo anterior dificulta la implementación del análisis como un procedimiento rutinario de inspección (Craig, *et al.*, 2018).

La subjetividad de los métodos sensoriales podría reemplazarse mediante la aplicación de técnicas analíticas que han permitido discriminar diferentes tipos de café tostado incluidos aquellos con defectos; sin embargo, esas técnicas también suelen ser dispendiosas en tiempo y labor. Estudios recientes han demostrado correlaciones entre calidad de la taza y diferentes parámetros químicos, que incluyen compuestos volátiles (Piccino, *et al.*, 2014), como diterpenos (Novaes, *et al.*, 2015) y ácidos clorogénicos (Zanin, *et al.*, 2016). No obstante, a pesar de ser rápidos y relativamente más económicos que los métodos sensoriales, aún se necesitan métodos analíticos que permitan una evaluación confiable de la calidad de los cafés, para ser utilizados como práctica de rutina (Craig, *et al.*, 2018). En consecuencia, tanto la industria como las organizaciones reguladoras buscan correlacionar la información sensorial y experimental con el fin de hacer más robustas y económicas las metodologías de detección instrumental (Feria-Morales, 2002). En este sentido, en la industria alimentaria existe una amplia investigación sobre métodos espectroscópicos, incluida la espectroscopia infrarroja por transformada de Fourier (FTIR), convirtiéndola en una alternativa atractiva frente a los métodos analíticos tradicionales ya que facilita la preparación de las muestras, las determinaciones se hacen rápidas y con un mínimo de solventes tóxicos. Así, se reduce el tiempo de los procedimientos, los costos y se incrementa el número de muestras que se pueden analizar (Rodríguez-Saona & Allendorf, 2011).

En café, la técnica de FTIR, ha permitido evaluar y establecer las características diferenciales entre algunos tipos de café tostado, con la ayuda de metodologías estadísticas adecuadas. Otra de las aplicaciones de la espectroscopia FTIR consiste en la autenticación y detección de adulterantes en los alimentos. Los espectros infrarrojos pueden registrar cambios de absorción de la radiación por las moléculas que experimentan vibraciones dada la absorción de energía. Cada grupo funcional proporciona una absorción característica, independientemente de su relación con el resto de la molécula (Rodríguez-Saona & Allendorf, 2011). Los análisis espectrales han surgido como una herramienta promisorio y confiable ante la evaluación objetiva de los atributos de calidad del café. Diferentes autores han demostrado que los enfoques de infrarrojo cercano y medio tienen un gran potencial para obtener información rápida sobre la composición química y las propiedades relacionadas del café, además de su capacidad para cuantificar, determinar atributos y establecer algunas características importantes (humedad, lípidos, contenido de cafeína, entre otros.) Este sistema de evaluación espectral infrarrojo puede aportar beneficios económicos a la industria del café al aumentar la confianza del consumidor en la calidad de los productos (Barbin, *et al.*, 2015). Por tanto, el objetivo de este trabajo consistió en establecer diferencias entre las propiedades químicas de distintos tipos de cafés: molido comercial (CM), especial con tostado alto y medio (EA) (EM), instantáneo (CI) y granos de café defectuoso (D) mediante la caracterización del espectro infrarrojo FTIR.

2. Materiales y métodos

2.1. Selección y preparación de muestras

Se utilizaron 14 muestras de café para consumo: cuatro de café comercial instantáneo (CI), cuatro de café comercial molido (CM) y tres de café especial anteriormente evaluadas mediante el protocolo establecido por la Asociación Americana de Cafés Especiales (SCAA) llevadas a tostado medio (EM) y alto (EA). Adicionalmente, se trabajó con cinco tipos de defectos de acuerdo a la clasificación establecida por la SCAA. La tabla 1 muestra los diferentes tratamientos y las características de los cafés utilizados en el estudio.

Tabla 1. Tratamientos y características de las muestras de café.

Tratamiento	Tamaño (g)	Muestra	Característica
Comercial molido (CM)	250	C 518	Tosti3n alta
	250	C 310	Tosti3n alta
	250	C 215	Tosti3n alta
	250	C 085	Tosti3n alta
Comercial instant3neo (CI)	50	I 108	Soluble
	50	I 425	Soluble
	50	I 175	Soluble
	85	I 398	Soluble
Especial tosti3n alta (EA)	126.1	EA 963	Colombia
	126.6	EA 302	Caturra
	126.5	EA 125	Castillo
Especial tosti3n media (EM)	104.1	EM 278	Tabi
	105.5	EM 048	Castillo
	103.1	EM 614	Bourbon rosado
Defectos (D)	124.2	D 981	Negro total o parcial
	124.4	D 714	Broca de punto o deteriorada

124.2	D 870	Decolorado
123.9	D 115	Mordido o partido
125.6	D 501	Vinagre o parcialmente vinagre

2.1 Tostación de las muestras

El proceso de tostado para las muestras de cafés especiales y los defectos de café, fue realizado en una máquina de tambor rotatorio TC 150R (Quantik, Colombia). Cuando el valor de la temperatura alcanzó los 200°C se introdujeron 150 gramos de cada una de las muestras, y se extrajeron cuando la temperatura estaba entre 180-190 °C dependiendo del tratamiento. Para establecer el nivel de tostado, se aplicaron los rangos de luminosidad (L^*) establecidos por Wei & Tanokura (2015) en el espacio de color CIELAB. Las muestras de cafés comerciales se adquirieron en supermercados locales y se les determinó un grado de tostado alto. Por lo tanto, para los cafés especiales se fijaron dos niveles de tostado, medio y alto. Adicionalmente, los granos defectuosos se llevaron a un nivel de tostado alto.

2.2 Determinaciones analíticas

2.2.1. Determinación de color (L^*)

La determinación de color se realizó de acuerdo con la metodología de Zanin, *et al.*, (2016). Se midió el grado de luminosidad (L^*) en cada muestra por triplicado. Se utilizó un colorímetro CR-410 (Konica Minolta Sensing Inc., Japan) con iluminante D65, y observador 10°, previamente calibrado con una placa estándar de cerámica blanca.

2.2.2. Determinación de actividad de agua

La actividad de agua (a_w) se determinó mediante el equipo Vapor Sorption Analyzer (VSA) (AquaLab, USA) con un peso de muestra de 2.5 gramos.

2.2.3. Determinación de sólidos solubles contenidos (S.S)

El índice de refracción en el extracto de la bebida se determinó por triplicado mediante el refractómetro digital PR-201 α (ATAGO, USA), previamente calibrado con agua destilada.

2.2.4. Determinación de acidez titulable

Las muestras se prepararon de acuerdo a la norma técnica colombiana NTC 3566 (ICONTEC, 2011). Se realizó una extracción con 5 g de café tostado y molido en 100 ml de agua a 90°C en agitación durante 3 min. El extracto se llevó a un volumen de 100 ml en un balón aforado como lo indica la NTC 5247. La titulación se realizó con hidróxido de sodio hasta que el pH alcanzó un valor de 6.5 (ICONTEC, 2004). El valor de acidez titulable se obtuvo mediante la ecuación 1.

$$A = \frac{B * C * 2 * 354.31 * R * H}{D} \quad (1)$$

2.2.5. Determinación de pH

El pH se determinó con el potenciómetro OHAUS ST5000 (EE.UU.) con 2.25 g de café al cual se le adicionaron 50 ml de agua a una temperatura de 80 °C; posteriormente, el extracto de café se llevó a temperatura ambiente y se realizó la medición (Mazzafera, 1999).

2.2.6. Determinación de humedad

El contenido de humedad de las muestras se determinó con la ayuda de un analizador de humedad OHAUS-MB45 (Parsippany, EE. UU.), a una temperatura de 105 °C durante 5 minutos; el procedimiento se realizó por triplicado siguiendo la metodología de Zanin, *et al.*, (2016).

2.3 Análisis sensorial de las muestras

Se realizó un análisis sensorial de cada una de las muestras de los diferentes tratamientos. Para el caso de los tratamientos T1 (CM), T3 (EA), T4 (EM) y T5 (D) se implementó el método de preparación AeroPress con una relación de 7 gramos por 100 mililitros de agua filtrada con carbón activado a una temperatura de 90°C de acuerdo a lo recomendado por Sánchez & Chambers (2015).

Para el tratamiento T2 (CI) se implementó la metodología descrita por Oliveira, *et al.*, (2009). Se utilizó una relación de 2 gramos de muestra por 150 mililitros de agua filtrada con carbón activado a 90°C

Se realizaron dos sesiones de catación, la primera sesión estuvo conformada por 10 jueces semi-entrenados y una segunda sesión integrada por 10 consumidores habituales del producto, para un total de 20 personas. Se consideraron como jueces semi-entrenados a aquellos que tenían conocimiento teórico, práctico y habilidad en el análisis sensorial de café, y como consumidores habituales a las personas que no realizan evaluaciones sensoriales periódicas, pero que consumen habitualmente café. En el momento del análisis sensorial, a cada participante se le proporcionaron 50 ml de la bebida de café preparada para que evaluaran los atributos de: aroma, color, dulzor, sabor, sabor residual, cuerpo, acidez, sabor a café, intensidad de amargo y el puntaje global en una escala semiestructuradas de aceptación de cero a diez (AENOR, 2006), figura 1. El valor de cero indicaba la menor aceptación y el valor de diez era la mayor aprobación del atributo de la muestra en evaluación.

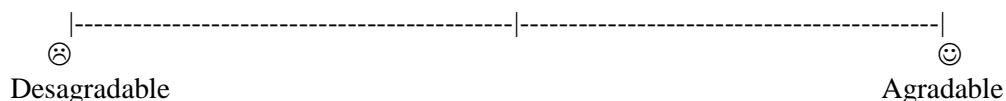


Figura 1. Escala de aceptación para el formato de análisis sensorial.

2.4 Análisis del espectro infrarrojo

Para el análisis se modificó la metodología empleada por Craig, *et al.*, (2015). Se utilizó un espectrómetro FTIR Cary 630 (Agilent, USA) con un detector DLATGS y un accesorio de muestreo ATR. Las mediciones de FTIR-ATR se realizaron a unas condiciones ambientales de humedad relativa de 56.33% y una temperatura de 24.83°C. Se pesó aproximadamente 1 gramo de café molido-tostado y se colocó en el accesorio de muestreo ejerciendo una ligera presión. Todos los espectros se registraron dentro del rango de 4000-650 cm⁻¹ con una resolución de 8 cm⁻¹ y 20 escaneos. El espectro final se obtuvo del promedio de cinco lecturas de la muestra.

2.5 Análisis estadístico

En la primera parte del estudio, se utilizó un análisis de varianza (ANOVA simple) para determinar si existió diferencia significativa en cada uno de los parámetros evaluados, se consideraron variables dependientes: acidez, pH, sólidos solubles (S.S), humedad, actividad de agua (a_w), luminosidad (L^*) y los atributos sensoriales. El procedimiento de LSD (menor diferencia significativa) se utilizó para evaluar diferencias entre las medias con un nivel de significancia del 5% el cual se ejecutó con el programa Statgraphics (versión 5.0; Manugistics, Inc., Rockville MD, USA). En la segunda parte del estudio se realizó un análisis multivariante de componentes principales para observar si la información obtenida del espectro infrarrojo permitía realizar agrupaciones de los cafés evaluados. Con los datos en bruto, se construyó la matriz de covarianza para el análisis de PCA considerando como columnas las longitudes de onda y como filas los valores obtenidos de absorbancia en cada una de las muestras, siendo las columnas las mediciones de cada variable. Se utilizaron los valores obtenidos desde la longitud de onda de 1900 cm^{-1} hasta 800 cm^{-1} . El procedimiento se ejecutó con el programa R Core Team (2018) licencia GPU General Public License.

3. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

3.1. Caracterización fisicoquímica:

En la tabla 2 se presentan los valores medios y la desviación estándar de los resultados de los parámetros fisicoquímicos evaluados para cada tratamiento.

Tabla 2. Resultados fisicoquímicos de los diferentes tratamientos.

Tratamiento	Acidez titulable	pH	S.S (°Brix)	%H	a_w	L^*
CM	16.207 ± 6.663^a	5.500 ± 0.308^b	1.350 ± 0.117^a	2.962 ± 1.222^b	0.270 ± 0.097^c	21.971 ± 0.653^a
D	15.332 ± 5.670^a	5.623 ± 0.200^b	1.167 ± 0.097^a	2.046 ± 0.186^a	0.125 ± 0.018^a	21.109 ± 0.591^a
EA	34.386 ± 7.043^b	4.934 ± 0.012^a	1.311 ± 0.078^a	2.056 ± 0.151^a	0.143 ± 0.020^a	21.822 ± 0.693^a
EM	48.535 ± 3.374^c	4.768 ± 0.059^a	1.256 ± 0.073^a	3.036 ± 0.300^b	0.239 ± 0.043^{bc}	25.212 ± 2.000^b
CI	120.395 ± 13.821^d	4.780 ± 0.088^a	4.767 ± 0.915^b	3.124 ± 0.653^b	0.195 ± 0.020^b	28.887 ± 1.235^c

*Diferentes letras minúsculas indican diferencias significativas para los tratamientos de café

Los valores de acidez titulable no presentaron diferencias significativas ($p > 0.05$) entre los tratamientos de café comercial molido y defectos de café. Se evidenciaron diferencias significativas ($p < 0.05$) en los tratamientos de café especiales con tostado medio y alto, junto con las muestras de café comercial instantáneo. Los cafés especiales (EA) (EM) y comerciales instantáneos presentaron una acidez mayor en comparación a los otros tratamientos. Las muestras de café comercial molido junto con los defectos evaluados de café, presentaron los menores valores de acidez, lo que puede estar relacionado con prolongados tiempos de almacenamiento. Se debe tener en cuenta que la cantidad de ácidos en la bebida de café depende de diferentes características entre las que se encuentran la especie, el tipo de beneficio, el tiempo de almacenamiento; como estas muestras se almacenaron por un tiempo prolongado, el café se pudo reposar y así afectar su acidez. Finalmente, otro factor importante es el tostado, en el que niveles medios generan una acidez más agradable y balanceada que en cafés con tostación oscura (Puerta-Quintero, 2011). El café comercial instantáneo presentó el mayor valor en cuanto a este parámetro, atribuyéndose a la relación utilizada de café para realizar la medición.

En cuanto al pH, se presentaron diferencias estadísticamente significativas ($p < 0.05$). Los tratamientos de café especial tostado medio, comercial instantáneo y especial con tostado alto mostraron menores valores frente a los tratamientos comerciales molidos y defectos de café. Valencia, *et al.*, (2015) reportaron valores de pH entre 4.9 y 5.2 para el café, los valores obtenidos en este trabajo corresponden a los reportados por los autores. Adicionalmente, se presentó un comportamiento inversamente proporcional entre el pH y la acidez. A medida que el pH disminuyó, los valores de la acidez aumentaron. Estos comportamientos coinciden con lo reportado por Gloess, *et al.*, (2013).

En relación con el contenido de sólidos solubles se presentaron diferencias significativas ($p < 0.05$) entre los tratamientos, lo que se debe a los altos valores observados en las muestras de cafés instantáneos frente a los otros tipos. Es importante resaltar que en cada extracción se obtienen diferentes porcentajes de sólidos solubles con una respectiva concentración (Medina-Almeida & Riaño-Luna, 2006). En general, los valores obtenidos concuerdan con lo reportado por Gloess, *et al.*, (2013) para los cafés filtrados. El comportamiento del café instantáneo se atribuye a la estructura del producto; esta desempeña un papel importante en la extracción de los sólidos solubles en la preparación de la bebida y su interacción con las variables relacionadas con el agua: presión, temperatura y tiempo de contacto con el área específica de los gránulos del producto.

Los contenidos de humedad de todas las muestras exhibieron valores dentro de lo registrado por Hernández, *et al.*, (2007). Se presentaron diferencias significativas ($p < 0.05$) entre los tratamientos. Los menores valores de humedad fueron obtenidos por los defectos de café y las muestras especiales con grado de tostado alto, que se ubicaron en un mismo grupo, estas muestras se sometieron a una etapa de tostado prolongado, lo que influyó en la remoción de gran parte del contenido de agua que se encontraba en el grano; mientras que los cafés comerciales instantáneos, comercial molido y especiales con tostado medio se clasificaron en el grupo con los mayores valores de humedad, este resultado es afectado por el proceso de almacenamiento que depende principalmente de factores como aspectos ambientales, tecnológicos, disponibilidad de oxígeno, humedad relativa del ambiente, área superficial del producto, temperatura y material del empaque (Manzocco & Lagazio, 2009). El tratamiento con el mayor contenido de humedad fue el de café instantáneo, la estructura de la muestra es muy fina, atribuyéndole la facilidad de adquirir la humedad del ambiente durante el proceso de preparación de la muestra. Lo que se explica el comportamiento del café instantáneo frente a las demás muestras (Lee, *et al.*, 2017).

Los valores de actividad de agua oscilaron entre 0.125 a 0.270 y presentaron diferencias estadísticamente significativas ($p < 0.05$). Los tratamientos de café especial con grado de tostado alto y defectos de café exhibieron los menores valores, seguidos por los cafés instantáneos y los cafés especiales de tostado medio.

Los mayores valores fueron presentados por los tratamientos de café instantáneo y café especial con tostado medio. Valores similares se obtuvieron en el trabajo realizado por Baptistini, *et al.*, (2017) quienes realizaron experimentos en condiciones similares. Todos los tratamientos presentaron valores a_w para inhibir el crecimiento de mohos, levaduras y bacterias; lo que repercute en el almacenamiento de la muestra (Puerta-Quintero, 2006).

Al observar los resultados de la determinación en la coordenada de luminosidad (L^*) se presentaron diferencias significativas ($p < 0.05$) para los tratamientos. Las muestras de los tratamientos de defectos de café, especiales con grado de tostado alto y comerciales molidos se calificaron como cafés oscuros, mientras que las muestras de los cafés especiales con grado de tostado medio se clasificaron como tostado medio y el tratamiento de café comercial instantáneo como tostado canela según la tabla de tostado descrita por Wei & Tanokura (2015). El color del tratamiento de café comercial instantáneo cambió en la preparación de la bebida, lo que permitió ubicarlo en la categoría de cafés oscuros. Lo anterior se tuvo en cuenta en el análisis sensorial.

3.2. Análisis Sensorial

La producción de café registrada en el año 2017 en Colombia fue de 15.276 sacos de 60 kilogramos (ICO, 2018) y la exportación de café en ese mismo año fue de 12.982 sacos de 60 kilogramos de café verde equivalente (FNC, 2018) lo

que evidencia que la mayoría de la producción se exporta. En el mercado nacional, dependiendo del precio que se pague por el producto, se puede consumir café con características diferentes al de exportación, que muchas veces consiste en la mezcla de granos sanos con defectuosos. Una de las estrategias utilizadas para disminuir las diferencias en la percepción sensorial en la mayoría del café que se comercializa en Colombia, consiste en llevar los granos a un nivel alto de tostado. Los resultados obtenidos para el análisis sensorial de los atributos para cada una de las muestras se observan en la Tabla 3.

Tabla 3. Percepción de los consumidores comunes y los jueces semi-entrenados ante cada atributo evaluado.

Tipo de consumidor	Tratamiento	Aroma	Color	Dulzor	Sabor residual	Sabor	Cuerpo	Acidez	Sabor a café	Amargo	Puntaje global
Consumidores comunes	CM	5.065 ± 2.335 ^{ab}	5.565 ± 2.641 ^b	3.915 ± 1.878 ^{ab}	5.005 ± 2.465 ^a	4.780 ± 2.267 ^{ab}	4.275 ± 2.288 ^a	3.210 ± 1.831 ^{ab}	4.305 ± 2.182 ^a	5.360 ± 2.649 ^a	4.375 ± 2.365 ^a
		4.385 ± 2.405 ^a	5.803 ± 3.088 ^b	3.145 ± 2.149 ^a	4.818 ± 2.408 ^a	3.465 ± 2.482 ^a	4.590 ± 2.601 ^a	2.643 ± 1.991 ^a	3.433 ± 2.162 ^a	5.195 ± 2.638 ^a	3.058 ± 2.432 ^a
	CI	5.532 ± 2.386 ^{ab}	6.716 ± 2.523 ^b	3.560 ± 2.057 ^{ab}	5.464 ± 2.027 ^a	4.424 ± 2.153 ^a	4.608 ± 1.898 ^a	4.388 ± 1.553 ^c	4.520 ± 1.999 ^a	4.824 ± 2.310 ^a	4.216 ± 2.217 ^a
		4.860 ± 3.252 ^{ab}	5.520 ± 1.410 ^b	4.740 ± 1.566 ^c	6.00 ± 2.311 ^a	4.247 ± 2.782 ^a	4.987 ± 1.761 ^a	4.093 ± 2.025 ^{bc}	4.863 ± 2.212 ^{ab}	4.933 ± 3.209 ^a	4.547 ± 3.119 ^{ab}
	EA	6.620 ± 2.783 ^b	2.160 ± 2.318 ^a	6.060 ± 2.458 ^c	5.360 ± 3.033 ^a	6.520 ± 2.852 ^b	5.260 ± 1.936 ^a	5.390 ± 2.139 ^c	6.580 ± 3.267 ^b	5.990 ± 2.818 ^a	6.510 ± 3.036 ^b
		Jueces semi-entrenados	CM	0.454 ± 0.746 ^a	8.804 ± 1.770 ^c	0.727 ± 0.955 ^a	4.767 ± 4.195 ^{ab}	0.713 ± 2.045 ^a	4.492 ± 3.765 ^a	1.108 ± 1.496 ^a	0.496 ± 0.991 ^a
3.642 ± 2.557 ^b	6.383 ± 2.087 ^b			2.950 ± 1.881 ^b	4.050 ± 2.619 ^a	0.354 ± 1.989 ^b	4.146 ± 2.580 ^a	2.463 ± 1.642 ^b	2.821 ± 1.837 ^b	4.942 ± 2.476 ^c	2.892 ± 2.065 ^b
CI	0.644 ± 0.994 ^a		8.331 ± 1.995 ^c	0.639 ± 1.091 ^a	6.284 ± 3.750 ^b	0.542 ± 1.357 ^a	5.023 ± 3.766 ^a	0.832 ± 1.084 ^a	0.677 ± 1.048 ^a	1.961 ± 2.374 ^a	0.439 ± 0.709 ^a
	4.550 ± 3.214 ^b		5.861 ± 2.217 ^b	3.425 ± 2.253 ^b	4.742 ± 2.609 ^{ab}	3.217 ± 2.909 ^b	4.760 ± 2.089 ^a	3.319 ± 2.330 ^b	3.817 ± 2.500 ^b	3.878 ± 2.368 ^{bc}	3.836 ± 2.809 ^b
EA	7.108 ± 2.058 ^c		2.275 ± 1.872 ^a	5.992 ± 2.016 ^c	5.517 ± 2.562 ^{ab}	6.163 ± 2.183 ^c	4.313 ± 2.253 ^a	5.008 ± 2.271 ^c	6.042 ± 2.921 ^c	6.883 ± 2.719 ^d	5.567 ± 2.539 ^c

*Diferentes letras minúsculas indican diferencias significativas para los tratamientos de café

Los consumidores comunes y los jueces semi-entrenados mostraron preferencias por las muestras de café especial con grado de tostado medio, las que obtuvieron los mejores resultados por atributo frente los demás tratamientos. Lo observado se relaciona con los puntajes obtenidos para los atributos de: sabor, olor, amargo característico y puntaje global, los cuales son importantes para determinar la preferencia por el consumo de un tipo de café (Samoggia & Riedel 2018). Al procesar estadísticamente los resultados de la percepción de los consumidores se observaron diferencias significativas ($p < 0.05$) entre los resultados para todos los atributos, excepto: sabor residual, cuerpo e intensidad de amargo en el caso de los consumidores comunes, y cuerpo para los jueces semi-entrenados.

Los tratamientos de café comerciales molidos, café instantáneo, defectos de café y los especiales con tueste alto se clasificaron en un mismo grupo debido a que obtuvieron calificaciones similares que se atribuyen a la costumbre de los evaluadores comunes a consumir café que encuentran en el mercado (café con un nivel alto de tostado). Los defectos de café y los cafés comerciales molidos presentaron similitudes en los resultados del análisis sensorial que probablemente se asocian al contenido de defectos que los cafés comerciales puedan tener. Los resultados para el análisis sensorial de los consumidores comunes evidencian que este tipo de jueces no logran diferenciar entre cafés clasificados como especiales (café especial con tueste alto) de otros que no son especiales (defectos de café y cafés comerciales). Adicionalmente, los consumidores comunes no fueron capaces de definir características particulares (descriptores) de cada muestra.

Los jueces semi-entrenados diferenciaron entre los distintos tipos de café. Estadísticamente, las muestras se asociaron de la siguiente manera: un primer grupo en el que se encontraban los cafés comerciales molidos junto con los defectos de café, esto se puede asociar con la posible presencia de granos defectuosos en las muestras del café comercial. Un segundo grupo en el que se ubicaron las muestras de cafés instantáneos y cafés especiales con tueste

alto, en este grupo es posible que la aceptación sensorial de las muestras de café instantáneo sea dada por la composición química del producto que mejora su perfil (aditivos) y sensorialmente los aproxima a las características de un café especial con tueste alto. Finalmente, se generó otro grupo conformado solamente por las muestras de cafés especiales con tueste medio.

Adicionalmente, los jueces semi-entrenados proporcionaron descriptores para las muestras evaluadas, los que se muestran en la figura 2. Las muestras de café especial llevadas a un grado de tostado medio, se destacaron por presentar características dulces, afrutadas y cítricas. Se observó que a medida que el tostado aumentó, los descriptores positivos que se presentaron en el tostado medio disminuyeron. Las muestras con tostación alta evidenciaron características positivas dulces y de especias marrones (nuez y canela). Además, algunos descriptores no deseados como humo, quemado, alcohol, fenólico, madera, heno, entre otros.

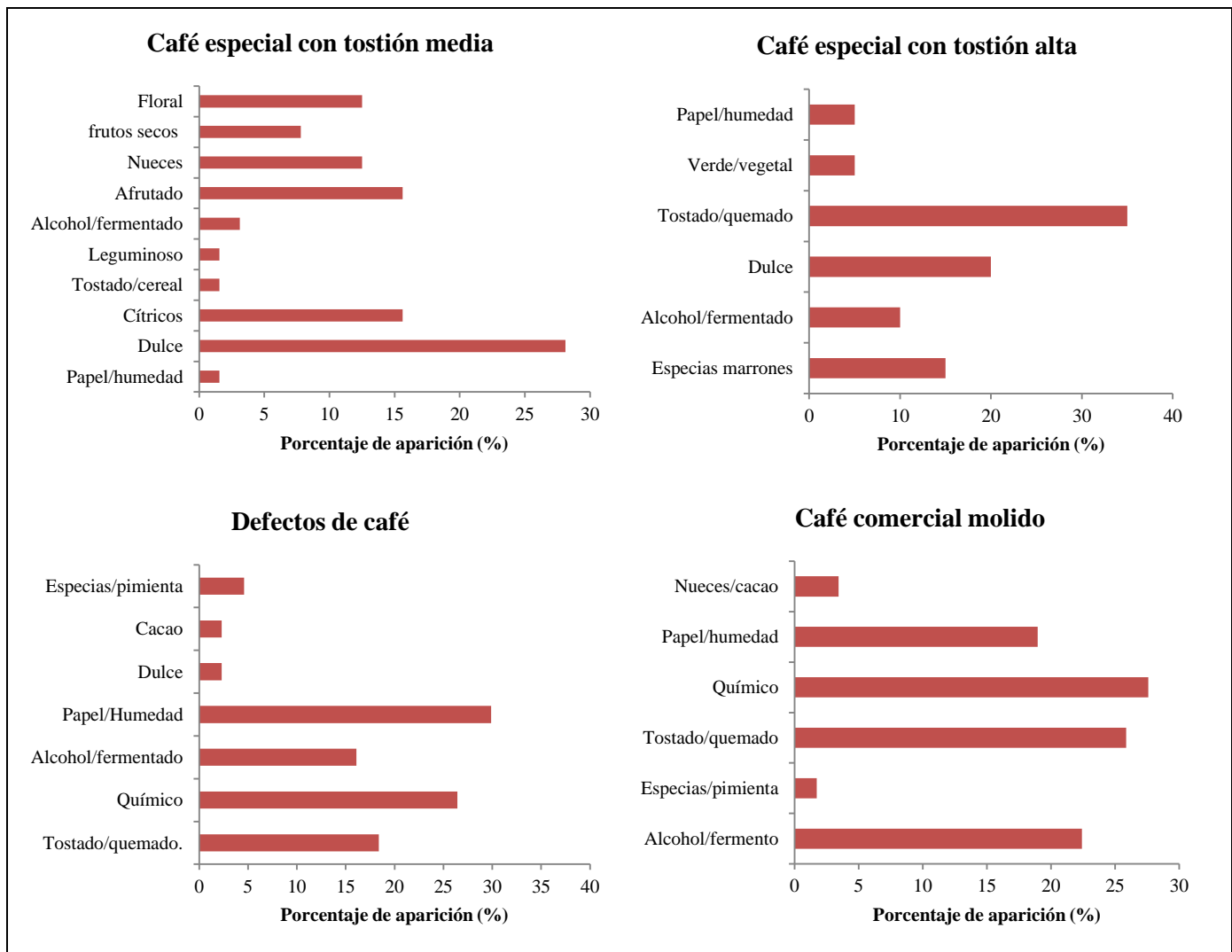


Figura 2. Descriptores proporcionados por los jueces semi-entrenados y su porcentaje de aparición por tratamiento de café; asociados de acuerdo a la rueda de sabores del catador de café basado en el diccionario de léxico sensorial de World Coffee Research (WCR & SCA, 2016)

Los tratamientos de café comercial molido y los defectos de café compartieron descriptores que se asocian generalmente con una baja calidad. Entre los que se observaron notas como: salado, medicinal, fermentado, amargo, madera, fenólico, alcohol, vinoso, tierra, humo, cenizas, rancio, mohoso/húmedo, pimienta, entre otros.

3.3 Espectros promedio

En la figura 3 se muestran los resultados de absorbancia para cada longitud de onda por tratamientos. Comparativamente, los tratamientos de café comercial molido, defectos de café, especiales con tueste alto y medio presentaron espectros similares. Sin embargo, se observaron diferencias en los niveles de absorbancia.

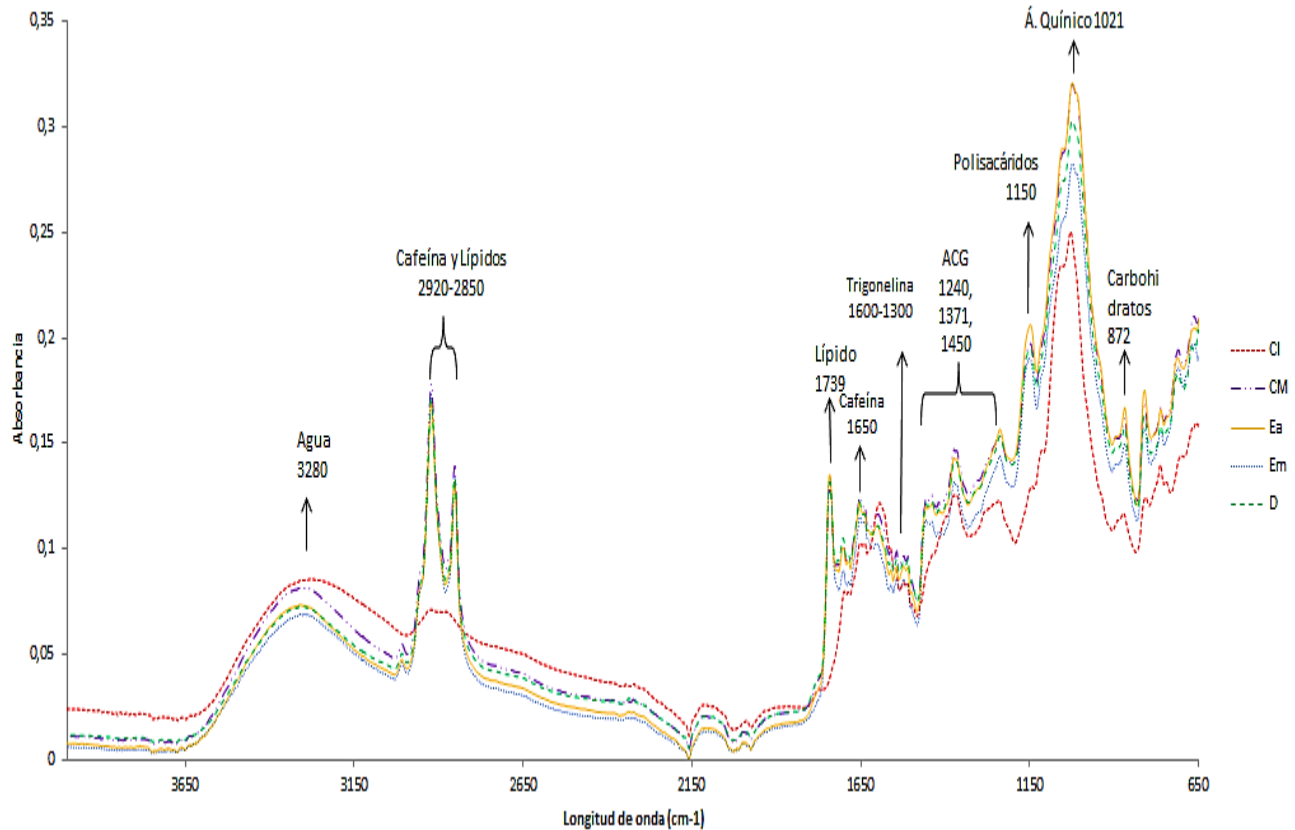


Figura 3 Resultado promedio del espectro infrarrojo por transformada de Fourier para cada tratamiento de café y sus compuestos.

El tratamiento de café comercial instantáneo mostró diferencias cualitativamente marcadas en comparación a los demás tratamientos. En el tostado del café, la exposición térmica genera cambios significativos en los componentes químicos originales del grano (Cho, *et al.*, 2014), y en la elaboración del café instantáneo existen etapas térmicas adicionales que causan diferencias en la concentración relativa y en la composición química del producto (Villalón-López, *et al.*, 2018) lo que explica la ausencia de picos en algunas de las longitudes de onda del espectro.

En la banda de 3280 cm^{-1} que se atribuye al agua, el comportamiento de todos los tratamientos fue similar, los mayores niveles de absorbancia se presentaron en las muestras de café instantáneo y café comercial molido, seguidos por las muestras de café especial con tueste alto y los defectos de café, que presentaron un mismo nivel absorbancia. Las muestras de café especial con tueste medio exhibieron la menor absorbancia en comparación con los demás tratamientos, la que puede estar relacionada con un valor bajo de su actividad de agua.

En relación a la presencia de cafeína en los tratamientos evaluados en este estudio, el compuesto se presentó en el rango de 2920 y 2850 cm^{-1} , resultados similares fueron mostrados por otros autores Paradkar & Irudayaraj (2002), la región en mención se asocia a la vibración del enlace C-H del grupo metilo de la molécula de cafeína (Craig, *et al.*, 2012a), (Craig, *et al.*, 2012b). El tratamiento de café comercial instantáneo presentó el nivel más bajo de

absorbancia. En otros estudios, las bandas afiladas a 2920 y 2850 cm^{-1} se atribuyen a bandas combinadas a las que contribuyen tanto la cafeína como los lípidos (Cremer & Kaletunç, 2003); (Craig *et al.*, 2012a). Adicionalmente, en la longitud de onda de 1659 cm^{-1} identificada como la banda determinante para la cafeína en café tostado (Garrigues, *et al.*, 2000), las muestras evaluadas mostraron un desplazamiento del pico a la longitud de 1650 cm^{-1} . Los tratamientos con mayor absorbancia fueron los de café comercial molido, los defectos de café y el café especial con tueste alto; con un menor valor de absorbancia se presentaron los tratamientos de especial con tueste medio y el café comercial instantáneo.

En las muestras estudiadas, la presencia de lípidos se mostró en la longitud de onda de 1739 cm^{-1} , los tratamientos de cafés molidos (comercial molido y especiales) presentan excitación en las moléculas en ese valor de longitud, pero no se presentó en el tratamiento de café instantáneo. Otros autores han asociado la banda de 1740 cm^{-1} con la vibración de carbonilo (C=O) del grupo éster en triglicéridos o en ésteres alifáticos indicando que podría estar asociada a lípidos (Kemsley, *et al.*, 1995); (Lyman, *et al.*, 2003); (Craig, *et al.*, 2012b)

En relación a la presencia de trigonelina en las muestras evaluadas, todos los tratamientos mostraron vibraciones en la banda de los 1650 cm^{-1} . El café instantáneo y el café especial llevado a un tostado medio presentaron la menor absorbancia en comparación a los demás tratamientos. Craig, *et al.*, (2012b) evidenció que esta sustancia se asocia a los picos en el rango de 1600-1300 cm^{-1} debido a la deformación axial de los enlaces C = C y C = N.

En la zona de 1517 cm^{-1} el café comercial instantáneo presentó la mayor absorbancia, que se atribuye a compuestos fenólicos (Capek, *et al.*, 2014), seguido por el tratamiento de café comercial molido. El café especial con tueste alto y los defectos de café presentaron similitudes en el valor de absorbancia, el café especial con tueste alto presentó la menor absorbancia.

Para los ácidos clorogénicos, las muestras de cafés molidos (comercial y especiales) exhibieron la mayor absorbancia en el rango de 1450-1240 cm^{-1} , a diferencia de las muestras de café instantáneo que no mostraron picos pronunciado en la región en mención. Resultados similares fueron descritos por Craig, *et al.*, (2012b) en el que los ácidos clorogénicos se presentaron en la región de 1450-1000 cm^{-1} . En el café instantáneo se observó una excitación en la banda de 1592 cm^{-1} , con la mayor absorbancia frente a los demás tratamientos evaluados. Adicionalmente, se evidenció un desplazamiento en el valor de longitud de onda debido a que el compuesto suele aparecer en los 1603 cm^{-1} y 1408 cm^{-1} (Capek, *et al.*, 2014). Sin embargo, en las muestras en estudio no se observó una fuerte excitación a la longitud de onda de 1408 cm^{-1} . El ácido quínico, que pertenece a la familia de los ácidos clorogénicos (Reis, *et al.*, 2013a), exhibió un pico pronunciado en la banda de 1021 cm^{-1} , en la que el café especial con grado de tostado medio y el café comercial mostraron la mayor absorbancia, todos los tratamientos tuvieron un comportamiento similar y el café instantáneo fue el tratamiento con menor absorbancia.

En cuanto a los polisacáridos, los tratamientos que presentaron mayor absorbancia en la longitud de onda de los 1150 cm^{-1} fueron el café especial con tueste alto y el café comercial molido; en la fase de tostado se alcanzan temperaturas superiores a los 180°C que producen una reacción exotérmica que involucra compuestos como polisacáridos, entre otros (Hernández, *et al.*, 2008). Los polisacáridos se forman por la unión de azúcares simples que reaccionan en el tostado. Que los dos tratamientos en mención tengan similitud en la absorción, se relaciona con el tiempo y grado de tostado debido a que ambos tienen un grado de tostado similar (alto). Estos resultados muestran un desplazamiento en la longitud de onda, Craig, *et al.*, (2018) asocia la absorción en la banda de 1153 cm^{-1} a polisacáridos.

Para la presencia de carbohidratos en todos los tratamientos evaluados, se obtuvieron picos en el rango de 1700-600 cm^{-1} . El café especial con un grado de tostado alto presentó la mayor absorbancia, seguido por los tratamientos de café especial con grado de tostado medio, café comercial molido y defectos de café que presentaron comportamientos similares en la banda de 872 cm^{-1} con variaciones en el valor de absorbancia, lo que concuerda con lo escrito por Lyman, *et al.*, (2003). Sin embargo, la banda entre los 1400-900 cm^{-1} se asocia a vibraciones de los enlaces C – H, C – O, C – N y P – O que pueden estar relacionados con otros compuestos (Wang, *et al.*, 2009).

3.4. Análisis de componentes principales (PCA)

Al realizar el análisis de componentes principales (PCA) con la información obtenida de los espectros de infrarrojo, se obtuvo que con los dos primeros componentes se explicó el 92.37% de la varianza de las muestras. Como se muestra en la figura 4, en el cuadrante uno se ubicó la mayoría las muestras de los tratamientos de café comercial molido y los defectos de café.

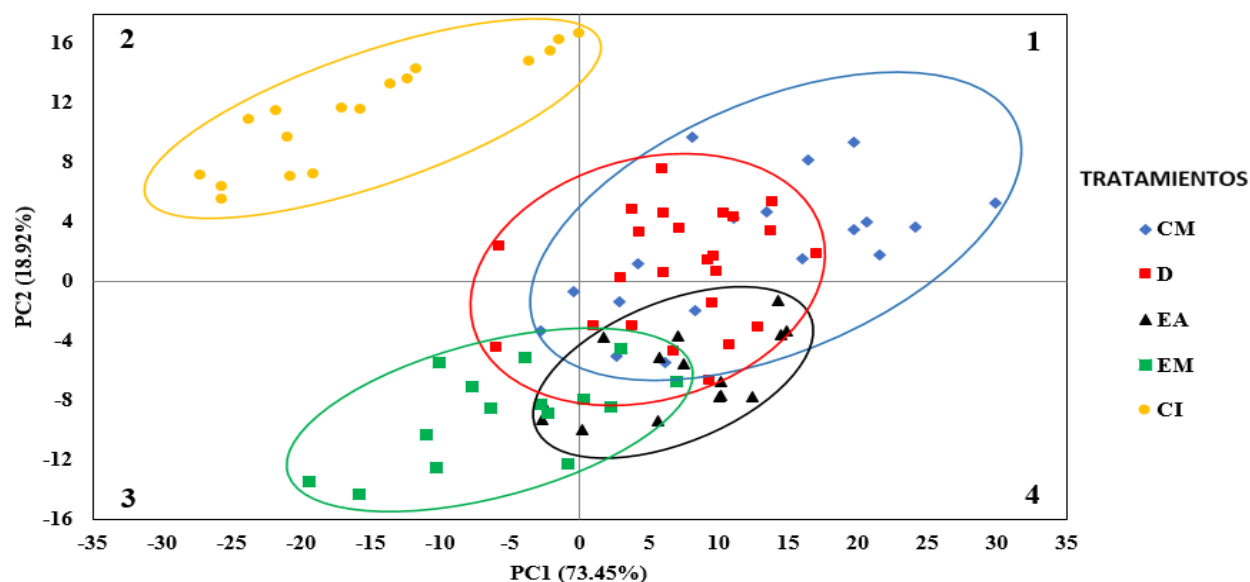


Figura 4. Análisis de componentes principales para los tratamientos evaluados en la zona de huella dactilar (1900-800 cm^{-1}) con los datos en bruto

En el cuadrante dos se localizó el grupo de las muestras de café comercial instantáneo, este tratamiento se diferenció claramente de los demás. Es posible que su composición química sea diferente a la típica del café. Por debajo del componente dos (CP2: 18.92%) se localizaron la totalidad de las muestras de cafés especiales, se observó que las muestras con tueste medio tienden a agruparse a la izquierda del componente uno (CP1: 73.45%), mientras que la mayoría de las muestras con tueste alto se ubicaron a la derecha del mismo componente. En el que también, se presentaron algunas muestras dispersas de los tratamientos de café comercial molido y defectos de café. Lo anterior indica que un nivel de tueste alto puede utilizarse para atenuar los defectos del café.

No se presentaron los datos brutos obtenidos del espectro infrarrojo tratados con primera derivada, segunda derivada, corrección de línea base y normalización de área debido a que no evidenciaron separación importante entre las muestras de café tostado y molido (tratamientos de café comercial molido, especial con tueste medio - alto y defectos de café) pero sí una separación pronunciada con las muestras de café comercial instantáneo.

4. CONCLUSIONES

La espectroscopia de transmisión de infrarrojo con transformada de Fourier (FTIR) permitió diferenciar el tratamiento de café instantáneo frente a los demás tratamientos; las muestras de café especial con tueste medio presentaron mayor absorbancia en la mayoría de los picos identificados para los diferentes compuestos del café.

Esta técnica resulta promisorio para la clasificación de muestras en función de la calidad para laboratorios e investigación; la técnica sensorial, como la catación sigue siendo una forma eficaz para la perfilación de un café.

El tipo de tratamiento de café (comercial molido - instantáneo, especial con tueste medio-alto y defectos) afecta el resultado de los parámetros fisicoquímicos. Los sólidos solubles dependen del tipo de obtención del extracto de la bebida. El pH y la actividad de agua presentaron comportamientos inversamente proporcionales, al igual que el pH y la acidez titulable.

La preferencia del café especial con tueste medio se evidenció ante los dos tipos de evaluadores (consumidores comunes y jueces semi-entrenados). El conocimiento y entrenamiento sensorial es importante y determinante para lograr una discriminación entre muestras de café de calidad y poder proporcionar atributos o descriptores que sobresalgan en una muestra.

El análisis de componentes principales con los resultados del espectro infrarrojo permitió generar agrupaciones de las diferentes muestras de café evaluadas. El café que principalmente se separó de todas las muestras fue el café instantáneo debido a su composición y/o proceso de elaboración. Los defectos de café, el café comercial molido y el café especial con tueste alto tienden a generar una agrupación que probablemente se deba al grado de tostado.

5. Referencias bibliográficas

AENOR., 2006. Norma UNE EN-ISO 4121:2003. Análisis sensorial. Directrices para la utilización de respuestas cuantitativas. Madrid, AENOR.

Barbin, D. F., Felicio, A. L., Da-Wen, S., Nixdorf, S. L., Hirooka, E. Y., 2015. Application of infrared spectral techniques on quality and compositional attributes of coffee: An overview. *Food Research International*. DOI: doi.org/10.1016/j.foodres.2014.01.005

Baptestini, M. F., Corrêa, P. C., Horta de Oliveira, G. H., Cecon, P. R., & Ferreira Soares, N., 2017. Kinetic modeling of water sorption by roasted and ground coffee. *Acta Scientiarum. Agronomía*. DOI: dx.doi.org/10.4025/actasciagron.v39i3.32576.

Capek, P., Paulovičová, E., Matulová, M., Mislovičová, D., Navarini, L., Liverani, F. S., 2014. Coffea arabica instant coffee-Chemical view and immunomodulating properties. *Carbohydrate Polymers*. DOI: 10.1016 / j.carbpol.2013.12.068

Cho, A. R., Park, K. W., Kim, K. M., Kim, S. Y., Han, J., 2014. Influence of roasting conditions on the antioxidant characteristics of colombian coffee (Coffea Arabica L.) beans. *Journal of Food Biochemistry*. DOI: doi.org/10.1111/jfbc.12045

Craig, A. P., Botelho, B. G., Oliveira, L. S., Franca, A. S., 2018. Mid infrared spectroscopy and chemometrics as tools for the classification of roasted coffees by cup quality. *Food Chemistry*. DOI: doi.org/10.1016/j.foodchem.2017.11.066

Craig, A. P., Franca, A. S., Oliveira, L. S., 2012b. Discrimination between defective and non-defective roasted coffees by diffuse reflectance infrared Fourier transform spectroscopy. *LWT - Food Science and Technology*. DOI: doi.org/10.1016/j.lwt.2012.02.016

Craig, A. P., Franca, A. S., Oliveira, L. S., 2012a. Evaluation of the potential of FTIR and chemometrics for separation between defective and non-defective coffees. *Food Chemistry*. DOI:10.1016/j.foodchem.2011.11.121

Craig, A. P., Franca, A. S., Oliveira, L. S., Irudayaraj, J., Iilejeji, K., 2015. Fourier transform infrared spectroscopy and near infrared spectroscopy for the quantification of defects in roasted coffees. *Talanta*. DOI: doi.org/10.1016/j.talanta.2014.11.038

Cremer, D. R., Kaletunç, G., 2003. Fourier transform infrared microspectroscopic study of the chemical microstructure of corn and oat flour-based extrudates. *Carbohydrate Polymers*. DOI: doi.org/10.1016/S0144-8617(02)00266-7

Feria-Morales, A. M., 2002. Examining the case of green coffee to illustrate the limitations of grading systems/expert tasters in sensory evaluation for quality control. *Food Quality and Preference*. DOI: doi.org/10.1016/S0950-3293(02)00028-9

Federación Nacional de Cafeteros, FNC., 2018. Estadísticas Históricas - Exportaciones Colombianas de Café - Volumen de las exportaciones colombianas de café - mensual. Consultado el 18 de Octubre del 2018. https://www.federaciondecafeteros.org/particulares/es/quienes_somos/119_estadisticas_historicas/

Garrigues, J., Bouhsain, Z., Garrigues, S. y otros., 2000. Fourier transform infrared determination of caffeine in roasted coffee samples. *Fresenius J Anal Chem*. DOI: doi.org/10.1007/s002160050063

Gloess, A. N., Schönbacher, B., Klopffrogge, B., d'ambrosio, L., chatelain, K., Bongartz, A., Yeretziyan, C., 2013. Comparison of nine common coffee extraction methods: instrumental and sensory analysis. *European Food Research and Technology*. DOI: doi.org/10.1007/s00217-013-1917-x

Hernández, J. A., Heyd, B., Trystram, G., 2008. Prediction of brightness and surface area kinetics during coffee roasting. *Journal of Food Engineering*. DOI: 10.1016 / j.jfoodeng.2008.04.026

Hernández, J. A., Heyd, B., Irls, C., Valdovinos, B., Trystram, G., 2007. Analysis of the heat and mass transfer during coffee batch roasting. *Journal of Food Engineering*. DOI: doi.org/10.1016/j.jfoodeng.2005.12.041

International Coffee Organization, ICO., 2018. Tablas de estadísticas de Comercio: Exportaciones de café por los países exportadores. Consultado el 18 de octubre del 2018 . http://www.ico.org/trade_statistics.asp?section=Statistics

ICONTEC., 2004. Norma Técnica Colombiana NTC 5247. Café tostado en grano o molido. Determinación de la acidez titulable.

ICONTEC., 2011. Norma Técnica Colombiana NTC 3566. Café Verde. Preparación de muestras para uso en análisis sensorial.

International Organization for Standardization ISO., 2000. Quality management system, principles and terminology. Switzerland, Geneva.

Kemsley, E. K., Ruault, S., Wilson, R. H., 1995. Discrimination between *Coffea arabica* and *Coffea canephora* variant robusta beans using infrared spectroscopy. *Food Chemistry*. DOI: doi.org/10.1016/0308-8146(95)00030-M

Lee, S. J., Kim, M. K., Lee, K. G., 2017. Effect of reserved coffee grinding and roasting process on physicochemical properties including volatile compound profiles. *Innovative Food Science & Emerging Technologies*, 97-102. DOI: doi.org/10.1016/j.ifset.2017.07.009

Lyman, D. J., Benck, R., Dell, S., Merle, S., Murray-Wijelath, J., 2003. FTIR-ATR analysis of brewed coffee: Effect of roasting conditions. *Journal of Agricultural and Food Chemistry*. DOI: 10.1021/jf0209793

Manzocco, L., Lagazio, C., 2009. Coffee brew shelf life modelling by integration of acceptability and quality data. *Food Quality and Preference*. DOI: doi.org/10.1016/j.foodqual.2008.06.005

Mazzafera, P., 1999. Chemical composition of defective coffee beans. Food Chemistry. DOI: doi.org/10.1016/S0308-8146(98)00167-8

Medina-Almeida, J. L., Riaño-Luna, C. E., 2006. Evaluación del rendimiento de extracción de algunas cafeteras. CENICAFÉ, 31-26. Consultado el 8 de octubre del 2018. <https://www.cenicafe.org/es/publications/arc057%2801%29031-036.pdf>

Novaes, F. J. M., Oigman, S. S., Souza, R. O. M. A., Rezende, C. M., Neto, F. R. A., 2015. New approaches on the analyses of thermolabile coffee diterpenes by gas chromatography and its relationship with cup quality. Talanta. DOI: dx.doi.org/10.1016/j.talanta.2014.12.025

Oliveira, A. L., Cabral, F. A., Eberlin, M. N., Cordello, H. M. A. B., 2009. Sensory evaluation of black instant coffee beverage with some volatile compounds present in aromatic oil from roasted coffee. Food Science and Technology. DOI: dx.doi.org/10.1590/S0101-20612009000100012

Paradkar, M. M., Irudayaraj, J., 2002. Rapid determination of caffeine content in soft drinks using FTIR-ATR spectroscopy. Food Chemistry. DOI: doi.org/10.1016/S0308-8146(02)00116-4

Piccino, S., Boulanger, R., Descroix, F., Sing, A. S. C., 2014. Aromatic composition and potent odorants of the “specialty coffee” brew “Bourbon Pointu” correlated to its three trade classifications. Food Research International. DOI: dx.doi.org/10.1016/j.foodres.2013.07.034

Puerta-Quintero, G. I., 2011. Composición química de una taza de café. Cenicafé. Consultado el 8 de octubre del 2018. <https://www.cenicafe.org/es/publications/avt04142.pdf>

Puerta-Quintero, G. I., 2006. La humedad controlada del grano preserva la calidad del café. Avances técnicos, Cenicafé. Consultado el 8 de octubre del 2018. https://www.usfx.bo/nueva/vicerrectorado/citas/TECNOLOGICAS_20/Quimica_Industrial/2.pdf

Reis, N., Franca, A. S., Oliveira, L. S. 2013a. Discrimination between roasted coffee, roasted corn and coffee husks by Diffuse Reflectance Infrared Fourier Transform Spectroscopy. Food Science and Technology. DOI: 10.1016/j.lwt.2012.07.016

Reis, N., Franca, A. S., & Oliveira, L. S. 2013b. Performance of diffuse reflectance infrared Fourier transform spectroscopy and chemometrics for detection of multiple adulterants in roasted and ground coffee. LWT - Food Science and Technology. DOI: doi.org/10.1016/j.lwt.2013.04.008

Rodriguez-Saona, L. E., Allendorf, M. E., 2011. Use of FTIR for Rapid Authentication and Detection of Adulteration of Food. Annual Review of Food Science and Technology. DOI: doi.org/10.1146/annurev-food-022510-133750

Samoggia, A., Riedel, B. 2018. Coffee consumption and purchasing behavior review: Insights for further research. Appetite. DOI: doi.org/10.1016/j.appet.2018.07.002

Sánchez, K., Chambers, E. 2015. How Does Product Preparation Affect Sensory Properties? An Example With Coffee. Journal of Sensory Studies. DOI: doi.org/10.1111/joss.12184

Valencia, J., Pinzón, M., & Gutiérrez, R. 2015. Caracterización fisicoquímica y sensorial de tazas de café producidas en el departamento del Quindío. Revista Alimentos Hoy, 150-156.

Villalón-López, N., Serrano-Contreras, J. I., Téllez-Medina, D. I., Zepeda, G. L., 2018. An ¹H NMR-based metabolomic approach to compare the chemical profiling of retail samples of ground roasted and instant coffees. Food Research International. DOI: 10.1016/j.foodres.2017.11.077

Wang, J., Junio, S., Gautz, L., & Li, Q. X. 2009 Fourier transform infrared spectroscopy for kona coffee authentication. Journal of Food Science. DOI: 10.1111 / j.1750-3841.2009.01173.x

WCR., SCA., 2016. Ruedad de sabores del catador de café. 2.

Wei, F., Tanokura, M., 2015. Chemical Changes in the Components of Coffee Beans during Roasting. Coffee in Health and Disease Prevention. DOI: 10.1016/b978-0-12-409517-5.00010-3

Zanin, R., Corso, M., Kitzberger, C. S., Scholz, M. B., Benassi, M., 2016. Good cup quality roasted coffees show wide variation in chlorogenic acids content. LWT - Food Science and Technology. DOI: doi.org/10.1016/j.lwt.2016.08.012

6. Nomenclatura.

A: acidez química titulable de la muestra de café (mg ácido clorogénico/g café)

B: volumen de hidróxido (ml)

C: concentración del hidróxido de sodio

2: factor de dilución (adimensional)

354.31: peso molecular del ácido clorogénico (g/mol)

R: 1 /1000 Factor de conversión (L/ml)

H: 1000 / 1 Factor de conversión (mg/g)

D: gramos de café exactamente pesados (5.05)