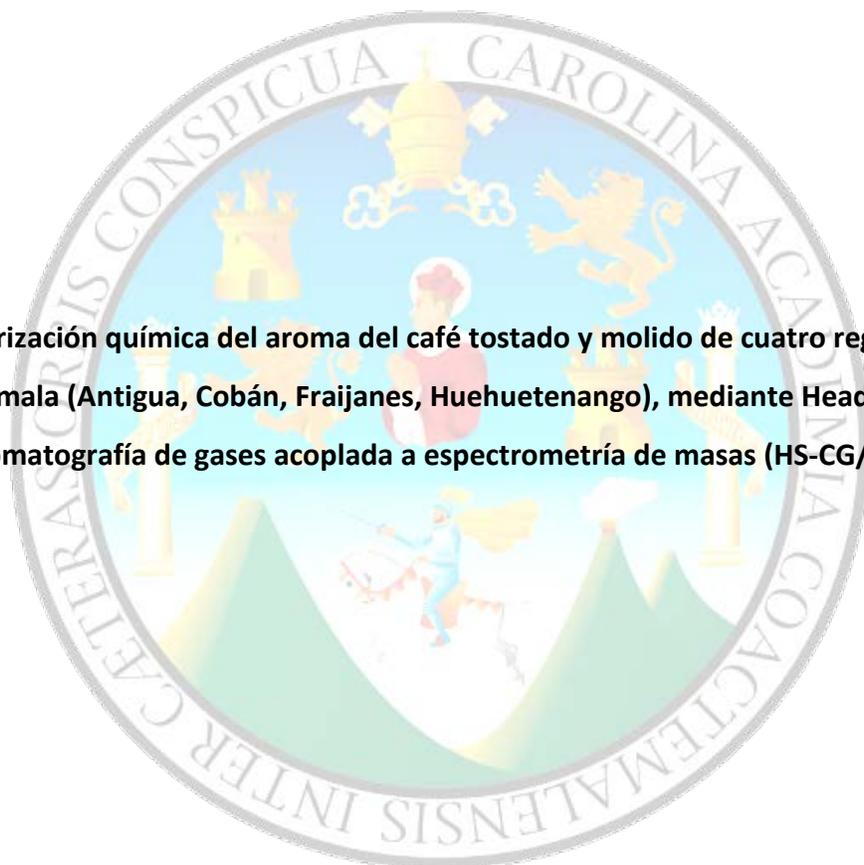


UNIVERSIDAD DE SAN CARLOS DE GUATEMALA
FACULTAD DE CIENCIAS QUÍMICAS Y FARMACIA

Caracterización química del aroma del café tostado y molido de cuatro regiones de Guatemala (Antigua, Cobán, Fraijanes, Huehuetenango), mediante Headspace y cromatografía de gases acoplada a espectrometría de masas (HS-CG/EM)

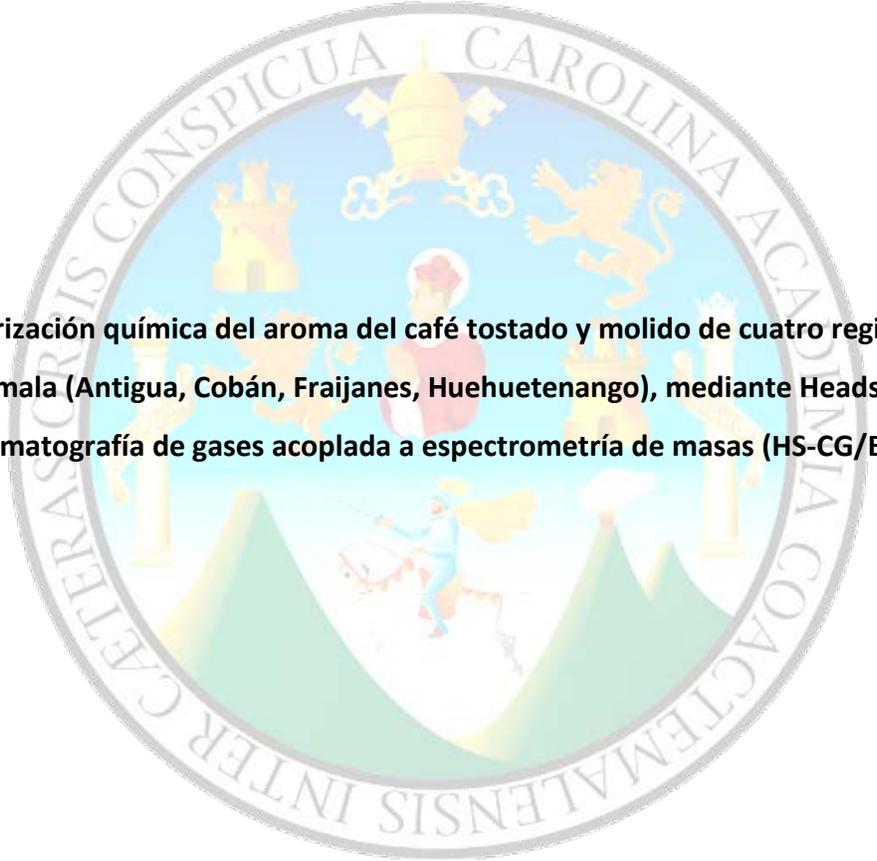


Herbert Alejandro Ismatul Rejopachí

QUÍMICO

Guatemala, Agosto de 2017

UNIVERSIDAD DE SAN CARLOS DE GUATEMALA
FACULTAD DE CIENCIAS QUÍMICAS Y FARMACIA

The seal of the University of San Carlos of Guatemala is a circular emblem. It features a central figure of a saint, likely St. Charles, seated on a throne. Above the figure is a golden crown. To the left is a golden castle, and to the right is a golden lion rampant. Below the figure are two green mountains. The entire scene is set against a light blue background. The seal is surrounded by a grey border containing the Latin text "CAROLINA ACADEMIA COACTEMALENSIS INTER CETERA SCIENTIIS CONSPICUA".

Caracterización química del aroma del café tostado y molido de cuatro regiones de Guatemala (Antigua, Cobán, Fraijanes, Huehuetenango), mediante Headspace y cromatografía de gases acoplada a espectrometría de masas (HS-CG/EM)

Informe de Tesis

Presentado por

Herbert Alejandro Ismatul Rejopachí

Para optar al título de

QUÍMICO

Guatemala, Agosto de 2017

JUNTA DIRECTIVA

Dr. Rubén Dariel Velásquez Miranda	Decano
M.A Elsa Julieta Salazar Meléndez de Ariza	Secretaria
MSc. Miriam Carolina Guzmán Quilo	Vocal I
Dr. Juan Francisco Pérez Sabino	Vocal II
Lic. Carlos Manuel Maldonado Aguilera	Vocal III
Br. Andreina Delia Irene López Hernández	Vocal IV
Br. Carol Andrea Betancourt Herrera	Vocal V

AGRADECIMIENTOS

A mi familia, que ha sido la estructura de mi vida.

Al Pueblo de Guatemala que sostiene esta Universidad.

A la Asociación Nacional del café ANACAFE, y en especial a Eduardo Ambrosio del departamento de Catación, por proporcionar las muestras de este estudio y sobre todo por su colaboración y entusiasmo por la investigación científica.

Al Instituto de Investigaciones Químicas, Biológicas, Biofísicas de la Universidad Mariano Gálvez de Guatemala; el análisis de muestras fue realizado gracias a la capacidad analítica montada en su laboratorio.

A la Licda. Delia Arriola, Lic. William Quiroa y en especial al Lic. Willy Knedel, por su apoyo y asesoría científica y gracias por abrir las puertas de su institución.

A mi hermano Oscar Ismatul que me prestó el capital para financiar la investigación.

Al Dr. Juan Francisco Perez Sabino, por facilitarme el acceso a los artículos científicos, base de este trabajo y por todo su apoyo y asesoría.

A Licda. Silvia Coto, Lic. Rodolfo Orozco y a Jhoni Álvarez *in memoriam* por la confianza y darme la oportunidad laboral de aproximarme a la docencia.

A Regina Hurtarte, gracias creer en mí, y porque con tu amor me hiciste avanzar bajo todas las tormentas.

A la familia Hurtarte Marín y Santos Hurtarte por toda su gentileza y cariño.

A mis hermanos, Oscar y Jose Carlos, compañeros de vida, toda mi admiración y gratitud.

A mis compañeros de Biesterfeld de Guatemala, en especial a Sindy Polanco, Sergio Aifan, Andrea de Ceberg y al Ing. Juan Luis Curan, por la confianza, la comprensión y la amistad.

A mis compañeros y amigos: Guillermo, Anival, Willy, Juanjo, Gaby Chaulón, Mafer Marin, Farfán, Alejandra Ayala, Elisandra, Jorge Samayoa, mi afecto y gratitud.

Al catedrático Daniel Alarcón Osorio, por las inspiradoras conversaciones de literatura.

A los compañeros: Carlos López, químico que murió víctima de la presión innecesaria y Diego Barillas, en espera de que pronto se haga justicia y se restablezca su derecho a estudiar.

Y con todo mi amor a mi hija Adriana, porque solo tus pequeñas manos fueron capaces de darme la fuerza que me faltaba y tu sonrisa le dio sentido a todas mis batallas.

DEDICATORIA

Quiero dedicar estos años de estudio a mi familia, mis hermanos, abuelos, a mi esposa e hija, y en especial a mis padres, para quienes la educación de sus hijos fue la motivación de sus esfuerzos.

A mi padre, que me enseñó a leer; una de las cosas más importantes que me ha pasado en la vida, y que, además, tuvo a bien llevar enciclopedias a casa, abriéndome así las puertas al conocimiento. Padre, excelente maestro, sigo siendo tu alumno.

A mi madre, que cuando era niño me compraba lápices, crayones, láminas ilustrativas e incluso una tabla periódica. Gracias porque no preguntabas para qué me iban a servir, yo no habría sabido responder, pues solo eran un gusto, un extraño encanto por las ciencias y el arte y en especial por aquella hojita emplastada, donde había una descripción precisa y elegante de los elementos que forma el mundo. Madre, gracias por tus esfuerzos, tu ejemplo de vida, y tu incansable amor.

Esta dedicatoria debió suceder hace varios años, pero se ha aplazado por razones ajenas a mi voluntad, y más bien ligadas a mi rebeldía y a mi incapacidad de alinearme al sistema educativo. En mi caso, parafraseando a Kafka, la universidad es pasar por una cuerda, que estaba puesta tan bajo, que parecía más estar ahí para hacer tropezar que para ser cruzada. Pero cada uno de esos tropiezos me dejó grandes lecciones. Decía el poeta Thoreau que el hombre no fracasa por su falta de conocimiento, sino por su falta de amor a la sabiduría. Hoy valoro más la sabiduría que cualquier dato que se pueda encontrar en los libros o internet.

A ustedes familia, por mostrarme que la integridad no significa ser perfecto, sino ser capaz de reconocer los propios errores y esforzarse por corregirlos, y que, contrario a lo que piensan algunos académicos, no son diamantes lo que necesita nuestra sociedad, sino humanos capaces de pensar por su cuenta, sujetos críticos, profesionales inconformes que luchen por mejorar el mundo. Dice el científico Michiu Kaku, que los niños nacen siendo científicos pero son aplastados por la sociedad y el sistema educativo. Gracias por no dejar que aplastaran mi espíritu y porque desde niño motivaron la fascinación que sentía por el arte y la naturaleza y porque siempre apoyaron mis esfuerzos por convertirme en un “científico”, gracias por los libros, las palabras, las lecciones de vida y todo su amor: ustedes son mi *alma mater*. Y si en esta ocasión hay un aplauso, sea para ustedes.

*DE TODO, QUEDARON TRES COSAS
la certeza de que estaba siempre comenzando,
la certeza de que había que seguir
y la certeza de que sería interrumpido antes de terminar.*

*Hacer de la interrupción un camino nuevo,
hacer de la caída, un paso de danza,
del miedo, una escalera,
del sueño, un puente, de la búsqueda,...un encuentro*

FERNANDO PESSOA

El café es vida.

ISAÍAS ISMATUL

...y entonces olor a café, ah, olor maravilloso del café...

JULIO CORTAZAR

Me gusta la vida enormemente
pero, desde luego,
con mi muerte querida y mi café
y viendo los castaños frondosos de París

CESAR VALLEJO

Nos sentábamos ante una taza de café y acusábamos al mundo entero y lo acusábamos a fondo.

THOMAS BERNHARD

Ese carácter alemán. Esas canciones melancólicas. Al bajar la escalera esta mañana, con el olor de café recién hecho en la nariz, iba tarareando bajito: «Es wär so schön gewesen.»

HENRY MILLER

Un café que perfuma todo un barrio de la ciudad durante diez minutos.

OLIVERIO GIRONDO

Fue a la cocina volvió al cabo de un momento con una cafeterita esmaltada, la taza, la cuchara, el azúcar, y lo colocó todo en la mesa baja que separaba las butacas, salió otra vez, volvió con los periódicos, echó café en la taza, azúcar, Usted no toma café, claro, Si aún me quedara una hora de vida tal vez la cambiara por un café caliente, Pues daría más que aquel rey Enrique, que daba su reino por un caballo...[]

JOSÉ SARAMAGO

Puede ser una tarde en las afueras, puede ser música de Brahms, puede ser mapas, puede ser ajedrez, puede ser café, pueden ser las palabras de Epicteto, que enseñan el desprecio del oro...

J.L. BORGES

Una breve siesta después del almuerzo y el café que tomo en general sólo una vez al día, comunican a mis horas vespertinas una vivacidad mental característica. En esas horas logro trabajar mejor que en cualquier otro momento.

JERZY ANDRZEJEWSKI:

Los platillos de las balanzas golpeaban el mostrador con alegre sonido; el rollo de bramante desaparecía con rapidez; los enlatados tableteaban arriba y abajo como en manos de un malabarista; los mezclados aromas del té y el café eran una delicia para el olfato.

CHARLES DICKENS

[...]en los últimos años de la guerra, en que inclusive los tambores de hojalata escaseaban y estaban controlados, hubo de ofrecer a los comerciantes azúcar o unos gramos de café en grano para que, por debajo del mostrador, le entregaran mi instrumento.

GÜNTER GRASS

“Si me despiertan invitándome a un café con leche, concluí, nada estará perdido...”

ROBERTO BOLAÑO

“Pidió café y un rato estuvo inatenta y distraída, luego, de repente, brillaron sus ojos y pareció haber llegado a un término con sus cavilaciones.”

HERMANN HESSE

“—¿Una tacita para mí? —preguntó Larsen antes de servirse—. Un café arriba de la comida y un café arriba del hambre. Es mejor que el viejo aperitivo.”

JUAN CARLOS ONETTI

He tomado café con ustedes con gran placer, y ahora me siento melancólico. Les ruego que me excusen.

THOMAS MANN

Id y aprended de todos...[]

Leído en un mural de Arnaldo Ramirez Amaya.

INDICE

1. RESUMEN	1
2. INTRODUCCIÓN	3
3. ANTECEDENTES	5
3.1 Origen y generalidades del café en Guatemala.....	5
3.2 Importancia del café en Guatemala.....	5
3.3 Tipos y variedades de café.....	6
3.4 Tipos de café exclusivos de Guatemala.....	7
3.4.1 Café de Antigua	8
3.4.2 Café de Cobán.....	8
3.4.3 Café de Fraijanes	9
3.4.4 Café de Huehuetenango.....	8
3.5 Composición química del aroma del café.....	10
3.6 Efecto del tostado en el aroma del café.....	15
3.7 Compuestos volátiles del café tostado.....	17
3.7.1 Pizarinas.....	20
3.7.2 Piridinas.....	21
3.7.3 Pirroles.....	22
3.7.4 Oxazoles.....	22
3.7.5 Compuestos azufrados.....	22
3.7.6 Furanos.....	24
3.7.7 Compuestos carbonilos.....	24
2.7.8 Fenoles.....	25

3.8	Headspace estático.....	25
3.9	Cromatografía de gases acoplada a espectrometría de masas	28
4.	JUSTIFICACIÓN.....	30
5.	OBJETIVOS.....	31
5.1	General.....	31
5.2	Específicos.....	31
6.	HIPÓTESIS.....	32
7.	MATERIALES Y MÉTODOS.....	33
7.1	Universo.....	33
7.2	Muestra.....	33
7.3	Recursos.....	33
7.3.1	Humanos.....	33
7.3.2	Materiales.....	33
7.4	Métodos.....	34
7.5	Análisis de resultados.....	36
8.	RESULTADOS.....	37
9.	DISCUSION.....	62
10.	CONCLUSIONES.....	69
11.	RECOMENDACIONES.....	71
12.	REFERENCIAS.....	72
13.	ANEXOS.....	76

1. RESUMEN

El objetivo del presente trabajo fue caracterizar cuatro de las principales poblaciones de cultivos de café (Antigua, Cobán, Fraijanes y Huehuetenango), a través de la identidad y porcentaje relativo de compuestos químicos presentes en la fracción volátil del café tostado, responsable de su aroma.

La Asociación Nacional del Café de Guatemala (ANACAFE) ha definido ocho regiones de cultivo de café en el territorio, y diferenciado a las mismas por aspectos morfológicos de las plantas, condiciones de cultivo y perfiles de taza. Sin embargo no se cuenta con información respecto a los compuestos químicos volátiles que presentan las variedades de café de Guatemala, por lo tanto se inicio este estudio para contribuir al conocimiento general del café de Guatemala.

Para la determinación de los componentes químicos del aroma, se utilizó la técnica de Headspace y Cromatografía de Gases acoplada a Espectrometría de Masas (HS-CG/EM), que constituye una herramienta poderosa para la separación e identificación de componentes en diversas matrices y resultó ideal para muestras de café tostado.

La obtención de las áreas bajo los picos de los cromatogramas permitió establecer una “huella digital” cromatográfica para cada muestra de café analizada. Además, la identificación los picos por comparación de los espectros de masas, permite una clara identificación y clasificación de los compuestos químicos presentes en el aroma del café.

Los resultados obtenidos fueron analizados utilizando las técnicas de estadística multivariada, Análisis de Componentes Principales (ACP), y Análisis

Discriminante canónico (ADC). El empleo del ACP mostro que existen diferencias entre las poblaciones de Antigua, Huehuetenango y Fraijanes con claras tendencias de agrupamiento. Además el ACP permitió identificar a las 12 variables que más contribuyen a la diferenciación de las poblaciones. El análisis discriminante canónico se realizó tomando en cuenta estas 12 variables y con ellas fue posible caracterizar a las poblaciones asignándoles una función que las distingue entre sí, con significancia estadística.

El proceso de producción del café desde la siembra hasta la taza, es complejo e implica gran cantidad de variables que es preciso controlar con mayor cuidado. Principalmente identificar con mayor certeza la variedad genética exacta de cada muestra. Es necesario continuar con las investigaciones sobre los componentes químicos del aroma, ya que este es uno de los aspectos que determinan la calidad y está íntimamente ligado al sabor del café.

Los hallazgos de este trabajo pueden ser utilizados para relacionarlos con la calidad de cada uno de los cafés, y así establecer cuales son aquellos compuestos y su proporción que contribuyen a la calidad y con esto establecer nuevos controles de calidad que sea objetivos en las distintas etapas de la producción. Además esta información puede contribuir a la obtención de los registros de denominación de origen de los distintos cafés de Guatemala.

2. INTRODUCCION

El consumo de café, se remonta al siglo XII, en Etiopía y Arabia, y actualmente es la segunda bebida más consumida en el mundo, solamente por debajo del té. Los altos índices mundiales de consumo de café, dan cuenta de la importancia social y agroeconómica que tiene el grano.

El café goza de la preferencia de millones de consumidores en el mundo entero, debido principalmente a su acción estimulante, su aroma y sabor. En Guatemala, el café se conoce desde tiempos de la colonia, fue introducido por los Jesuitas que lo trajeron de Europa. El cultivo y comercialización del café, es de gran importancia para la economía de Guatemala, ya que es el principal producto de exportación y genera millones de divisas anuales para el país.

El aroma y el sabor del café, reflejado en perfil de taza, son las principales características de la calidad del grano, y se deben a una compleja mezcla de cientos de compuestos químicos. A la fecha, se han descubierto más de seiscientos compuestos diferentes en el aroma del café. La mayoría de estos compuestos se pueden clasificar como: furanos, pirazinas, cetonas, aldehídos, pirroles, alcoholes y tiofenos, entre otros.

El café de Guatemala, es reconocido mundialmente por su calidad, y esta es debida a la diversidad de condiciones de cultivo. En Guatemala se han definido 8 regiones de cultivo que, debido al tipo suelo, el clima y la altura de cultivo, producen cafés que muestran características particulares. El café de éstas regiones se conoce internacionalmente como: Antigua Coffe®, Traditional Atitlán®, Rainforest Cobán®, Fraijanes Plateau®, Highland Huehue®, Volcanic San Marcos®, New Oriente®, y Acatenango Valley®. En esta investigación se analizaron siete muestras provenientes de cuatro de estas regiones: Antigua, Cobán, Fraijanes y

Huehuetenango. Las variedades de café de Guatemala, se diferencian por aspectos físicos y principalmente por los perfiles de taza, que son características organolépticas percibidas por expertos catadores, sin embargo, estos criterios pueden variar de catador a catador. Dado que el sabor y el aroma, son percepciones subjetivas a estímulos causados por sustancias químicas, por lo tanto, es necesario evaluar métodos que permitan diferenciar objetivamente estas características.

El desarrollo de nuevas técnicas de análisis, ha permitido la separación e identificación de cientos de componentes volátiles constituyentes del aroma del café tostado. Una de las técnicas que mejores resultados ha dado es la Headspace, unida a la Cromatografía de Gases y la Espectrometría de Masas (HS-CG/EM), constituyen un método poderoso para la identificación de componentes volátiles en diversas matrices analíticas.

A la fecha no se habían realizado investigaciones que permitan conocer las diferencias exactas entre los cafés de diferentes regiones de Guatemala, basándose en la composición química de su aroma y, debido a la gran importancia socioeconómica que representa el café para Guatemala, fue importante realizar esta investigación ya que ha contribuido al conocimiento exacto de las características químicas del café. La información obtenida a través de un análisis de compuestos volátiles con Headspace y cromatografía de gases acoplada a espectrometría de masas, y evaluación de los datos por medio de técnicas de estadística multivariada, permitió realizar una caracterización objetiva de los cafés regionales de Guatemala, basándose la presencia o ausencia de compuestos y el porcentaje relativo en cada tipo. Además esta información podrá ser utilizada para establecer nuevos controles de calidad ya que estos datos se pueden vincular con aquellos cafés que han presentado mejores cualidades organolépticas.

3. ANTECEDENTES

3.1 Origen y generalidades del café en Guatemala:

La palabra café presente diversas posibilidades etimológicas, algunos aseguran que su origen es mahometano, lo llamaban “kahoueh” y era el nombre utilizado para designar a las bebidas alcohólicas. Los turcos, a su vez, lo llamaban “Kahaveh”. Otras versiones aseguran que proviene de la región de Kaffa, lugar donde se cosechaba (Wagner, 2001; Anacafé, 1995).

La planta de café, es originaria de Etiopía, de esta región africana, fue llevado a Arabia. Los árabes lo comercializaron al lejano oriente y después a Europa. Durante la época colonial, los europeos lo trajeron a América (Wagner, 2001).

Las primeras plantas de café fueron traídas a Guatemala por iniciativa de los jesuitas a mediados del siglo XVIII. Posteriormente, alrededor de 1800, luego de que plagas de langostas destruyeran plantaciones de añil y xiquilite, el gobierno decidió fomentar la producción de nuevos productos, incluido el café (Wagner, 2001; Anacafé, 1995).

En 1888 el café de Guatemala obtuvo el primer lugar en la exhibición Mundial de París, iniciando de esta forma el reconocimiento mundial por su calidad (Anacafé, 1995).

3.2 Importancia del Café para Guatemala:

El café, al ser uno de los principales productos de intercambio mundial, constituye un recurso importante para la economía de Guatemala. El café representa aproximadamente el 40 % de los ingresos generados por productos agrícolas de exportación, generando miles de empleos y beneficiados directa o indirectamente.

Sin embargo, el cultivo de café no se limita a valor económico, ya que representa un aporte para la protección de la biodiversidad; las áreas de cultivo suman aproximadamente 270,000 hectáreas, 6.4 % de del área boscosa de Guatemala y es hogar para cientos de especies vegetales y animales (ANACAFE, 2008).

3.3 Tipos y variedades de café:

Los tipos de café producidos en Guatemala, se clasifican como “Arábigos Lavados”, esta clasificación es compartida con los demás países centroamericanos, México, Colombia, Ecuador, Perú, República dominicana, India y Papúa Nueva Guinea. Colombia es el principal productor de café arábigo (*Coffea arabica*) con cerca del 35%, el segundo lugar lo ocupa México con 12% y Guatemala se posiciona en el tercer lugar con 9%. Guatemala produce café en todos sus departamentos (Anacafé, 1995).

Dentro de los cafés *Coffea arabica* se encuentran algunas variedades, que son el resultado de mutaciones, o cruces genéticos. Anacafé ha registrado 7 variedades de las cuales tres son las más importantes y más cultivadas en Guatemala: Caturra 25 %, Catuai 25%, y Bourbon que representa el 30% de las plantaciones. Otras ocupan posiciones menos relevantes: Pache 5%, Mundo Novo 2%, Típica un 2%, Otras 11%; (ANACAFE. 1991)

La producción en Guatemala abarca una amplia gama de tipos de café. Las zonas de cultivos se encuentran localizadas a diferentes alturas sobre el nivel del mar y presentan diversos climas (Ver anexos 5 al 10)(Anacafé, 1995).

Tabla 1: Tipo de café según la altura de cosecha.

TIPOS DE CAFÉ	
Tipo de café	Altura de cosecha
Estrictamente duro	Arriba de 1370m
Semi duro y duro	1066m – 1370m
Prima y Extra prima	762m -1066m

Fuente: Anacafé. GreenBook. Guatemalan Coffees. 2008.

3.4 Tipos de café exclusivos de café de Guatemala:

Las regiones donde se cultiva café en Guatemala poseen diferentes microclimas debido a la altitud, tipo de suelo, temperatura, nubosidad y régimen lluvioso. Estas variaciones brindan las características del grano de café en lo relativo a tamaño, estructura y consistencia, proporcionando calidades que son diferenciables entre sí. Esta regionalización natural única, produce varios tipos exclusivos de café. Los siguientes son 4 de los cafés característicos de Guatemala (Anacafé, 1995; Anacafé, 2008):

3.4.1 Café de Antigua(Antigua Coffe[®]):

Es un tipo de café reconocido internacionalmente, que es objeto de sobreprecio en los mercados gourmet. Se cultiva en una zona localizada entre volcanes, cuyas laderas forman un valle con condiciones ecológicas y climáticas particularmente propicias para el cultivo del café. Los suelos, de origen volcánico, son jóvenes y presentan condiciones óptimas de fertilidad para el grano (Anacafé, 1995; Anacafé, 2008).

Las épocas lluviosas y secas, están justamente definidas, lo que influye para una maduración homogénea del fruto. Otros factores que contribuyen a definir su calidad son la temperatura, que oscila entre 19 y 22°C y la altitud que va de 1500 a 1700 msnm. Expertos nacionales y extranjeros consideran al café Genuino Antigua, como uno de los cafés más finos que se producen en el mundo (Anacafé, 1995; Anacafé, 2008).

3.4.2 Café de Cobán (Rainforest Cobán[®]):

Se cultiva en una extensa zona al norte del territorio nacional, la cual tiene un alto potencial para producir cafés de calidad. Su clasificación ecológica corresponde a una zona de bosque muy húmedo, subtropical con suelos de textura franco limoso. Sus condiciones son distintas a otras regiones cafetaleras de Guatemala, esencialmente por la influencia de la cuenca del Atlántico. Su temperatura influenciada por los vientos alisios del norte, oscila entre 15°C y 23°C, la región recibe una lluvia de 3000 a 3500 milímetros al año. Su clima es nuboso con pocas horas de luz y alta humedad relativa (80-90%) tiene altitudes entre 1300 y 1500 msnm. Estas condiciones naturales otorgan al café que se produce en la región, las características y la calidad de los cafés tipo duro y estrictamente duro (Anacafé, 1995; Anacafe, 2008).

3.4.3 Café de Fraijanes (Fraijanes Plateau[®]):

Se cultiva al norte del lago de Amatitlán y en las montañas que rodean el Valle de la Ermita, donde está asentada la capital de Guatemala. Es una región de bosque húmedo montañoso. El río Aguacapa es responsable, conjuntamente con el Lago de Amatitlán, de conservar el nivel friático de los suelos donde se cultiva este café. El suelo es principalmente de origen volcánico, rico en potasio, lo que contribuye a darle cuerpo a la bebida (Anacafé, 1995; Anacafé, 2008).

La región productora se encuentra rodeada de volcanes recientes, algunos de los cuales, como el Pacaya, tienen actividad constante, depositando cenizas volcánicas con nutrientes minerales que son aprovechados por las plantas de café para la formación de sus frutos (Anacafé, 1995; Anacafé, 2008).

Su altitud está entre 1400 y 1800 metros sobre el nivel del mar, con una temperatura moderada durante todo el año, 22°C en promedio. La cima de estas montañas, manifiesta una humedad relativa de 60% y precipitaciones pluviales de 1500 mm/año. La combinación de estos factores orográficos, geográficos y climáticos determina las características del grano, que es de tipo estrictamente duro, similar al Genuino Antigua (Anacafé, 1995; Anacafé, 2008).

3.4.4 Café de Huehuetenango:

Se cultiva en la región de la Cordillera de los Cuchumatanes, cuyas montañas alcanzan elevaciones superiores a 3600 metros sobre el nivel del mar. Esta zona se localiza próxima a la frontera con México, en donde alcanza elevaciones arriba de 2000 msnm. Tiene una precipitación promedio de 1800 mm/año y humedad relativa de 70% con temperaturas frescas que promedian 23°C (Anacafé, 1995; Anacafé, 2008).

Pertenece a la zona subtropical húmeda, lo que contribuye a la obtención de un café de buena apariencia, con maduración uniforme, propia de una estación seca definida. Esto produce una floración homogénea que da como resultado un café con un leve sabor vinoso en la taza, lo que aumenta su calidad (Anacafé, 1995; Anacafé, 2008).

El ambiente donde se cultivan cafés Huehuetenango, está definido por los vientos cálidos provenientes del istmo Tehuantepec y las masas de aire frío provenientes de los Cuchumatanes. Esta alteración de climas permite que se pueda cultivar café a alturas superiores a 2000 msnm. Sus condiciones ecológicas y otras relacionadas con el suelo, hacen que se distinga y diferencie tanto por el tamaño del grano como por su sabor (Anacafé, 1995; Anacafé, 2008).

La mayor parte de la producción proviene de pequeños productores que lo cosechan a mano, además, debido a las condiciones del suelo, altitud, temperatura, precipitación y humedad relativa, se obtiene un grano de la más alta calidad (Anacafé, 1995; Anacafé, 2008).

3.5 Composición química del aroma del café:

Analizar la composición química del café ha generado múltiples investigaciones, convirtiéndose en un reto para la química analítica. En el transcurso del tiempo, se ha identificado una gran cantidad de sustancias que son responsables directa e indirectamente del aroma y sabor del café. (Gautschi, 1967).

En 1926 se realizó primera investigación sobre el aroma del café tostado. Los investigadores fueron, Reichstein y Staudinger. En su investigación identificaron los primeros compuestos del aroma del café: alquiperazinas, α -dicetonas, furfurilmercaptano y guayacoles. Cabe destacar que estas investigaciones se realizaron antes de la implementación de técnicas de cromatografía de gases y espectrometría de masas. En esa época se conocían únicamente 13 compuestos en el aroma del café, posteriormente en los años 1950 el número se incrementó a más de 60. En la década de 1965 a 1975 el número de constituyentes aumentó a más de 600 (Tressl, 1989; Parliment y Stahl, 1995; Bonnländer y Eggers, 2005).

Una de las primeras investigaciones sobre el incremento de compuestos volátiles en la etapa de tueste del café fue realizada en 1960 por John W. Rhoades, quien analizó siete variedades de café procedente de América. Se identificaron 19 compuestos volátiles, de los cuales 16 fueron detectados en los granos de café verde, en una o más de las siete variedades analizadas. Se determinó que el sulfuro de hidrógeno, formato de metilo y propionil acetilo alcanzaron concentraciones máximas dentro de la temperatura normal de tueste (350°F –430°F). A su vez se concluyó que la proporción entre el diacetilo y propionil acetilo, podía ser indicador del grado de tueste del café (*Rhoades, 1960*).

En 1967, el equipo de investigadores de Bondarovich, reportó datos de espectroscopia infrarroja (IR), espectrometría de masas (EM) y cromatografía de gases (CG) de un gran número de constituyentes del complejo aroma del café tostado. Estos estudios indicaron la posibilidad de que pirazinas y dihidroxipirazinas contribuyeran al sabor de los alimentos tostados (Bondarovich, 1967).

En 1969, Feldman y colaboradores, realizaron investigaciones sobre la composición del café verde arábigo de Haití, Colombia y Angola. La investigación se enfocó en los cambios en la composición química que experimentaba el café, al pasar por el proceso de tueste, además, los compuestos no volátiles que se producen durante el procesamiento del grano. Durante el tueste a 220 °C, se destruyeron varios aminoácidos como: cisteína,

lisina, arginina y serina en las tres muestras. En cuanto a la composición de ácidos volátiles, el Robusta presentó mayores concentraciones de ácido fórmico y menores concentraciones de ácido acético que los arábigos (Feldaman, 1969).

En investigaciones posteriores se identificaron 13 nuevos compuestos del complejo del aroma del café tostado. Se identificaron varios derivados de pirazinas de importancia organoléptica (Friedel, 1971).

En 1974 se identificó una serie de 20 oxazoles y 23 tiazoles, en café tostado utilizando cromatografía de gases. Estos compuestos identificados fueron asociados con el sabor del café, pero no se logró atribuir a ningún compuesto en particular el aroma distintivo del café tostado (Vitzthum y Werkhoff, 1974).

En una investigación realizada en 1987, se identificaron 350 compuestos volátiles producidos durante el calentamiento. Se logró la caracterización de 100 furanos monocíclicos, 13 furanonas y 8 furanos bicíclicos. Luego del tostado de granos verdes, 160 compuestos fueron identificados, 53 de ellos no habían sido estimados como parte del aroma del café (Baltes y Bochmann, 1987).

En 1989, se caracterizaron más de 700 compuestos en los extractos del aroma del café tostado. Los compuestos heterocíclicos constituían el 80-85% de la fracción volátil en cantidades de 700 – 900 ppm en cafés arábigos de tueste medio (Tressel, 1989).

En 1990 se logró identificar un compuesto importante en el aroma del café Robusta, el 2-metilisoborneol (MIB), un derivado terpénico bicíclico responsable del olor a tierra y moho. Para su identificación se empleó la cromatografía de gases con detección por olfateo y espectrometría de masas (GC/O-MS, por sus siglas en inglés) (Vitzthum, 1990).

Las investigaciones realizadas en 1992, aplicando la técnica extractiva simultánea destilación/extracción, aislaron y luego identificaron por cromatografía tres compuestos azufrados en café arábigo tostado (3-metil-2-buten-1-tiol, 3-mercapto-3-metilbutanol y formato 3-mercapto-3-metilbutilo). Se determinó que el precursor de estos constituyentes volátiles es el 3-metil-2-buten-1-ol llamado también prenil alcohol, compuesto encontrado en café tostado en el año 1967 (Holscher, 1992).

En 1997 mediante el uso del método combinado “Headspace, Solid Phase Microextraction-Gas Chromatography” (HS-SPME-GC), identificaron 36 compuestos volátiles en una mezcla 50/50 de café arábigo y café Robusta (Bicchi, 1997).

En 1999 utilizando de café arábigo procedente de Colombia, se determinó que los compuestos importantes generados en el tueste y responsables del agradable aroma del café arábigo eran el 2-furfuriltiol, 4-vinilguayacol, varias alquilpirazinas, furanonas, acetaldehído, y propanal. Además, se determinó que algunos compuestos azufrados como el 3-metil-2-buten-1-tiol y el 3-mercapto-3-metilbutilformato no tenían influencia en el aroma de este café (Czerny y Mayer, 1999).

En 1999, un equipo de investigadores liderado por Mayer, cuantificaron 28 compuestos odorantes potentes en cafés arábigos de diferentes procedencias y grados de tueste. Las concentraciones de los siguientes compuestos: (2,3-butanodiona; 2,3 pentanodiona, 3-isobutil-2-metoxipirazina; 4-hidroxi-2,5-dimetil-3(2H)-furanona, 4-vinil- y 4-etilguaiacol; 2-furfuriltiol, 3-mercapto-3-metilbutilformato y 3-metil-2-buten-1-tiol) cambiaron para los cafés de los diferentes lugares (Colombia, El Salvador, Kenia y Brasil). Mientras que los diferentes grados de tueste (suave, mediano, fuerte) influyeron en las concentraciones de los siguientes compuestos: propanal, 2(5)-etil-4-hidroxi-5(2)-metil-3(2H) furanona, guayacol, 4-etilguayacol, 2-furfuriltiol, 3-metil-2-buten-1-tiol y metanotiol (Mayer, 1999).

En el 2000, se estudiaron, mediante el análisis de dilución del extracto del aroma (AEDA, por sus siglas en inglés), los potentes odorantes presentes en granos verdes de

café arábigo colombiano, y sus cambios durante el tueste. Encontraron que el compuesto 3-isobutil-2-metoxipirazina era el compuesto responsable del característico olor desagradable (peasy) en los granos de café verde. Este compuesto no presentó cambio en su concentración después del tostado, en comparación con otros compuestos que aumentaron luego de esta etapa, como lo fue el (*E*)- β -damascenona. Así mismo, fue identificado por vez primera el 2-metoxi-3,5dimetilpirazina, como un compuesto activo del aroma del café verde y del tostado (Czerny y Grosch, 2000).

En el 2000 el investigador Mayer en colaboración con Czerny y Grosch, cuantificaron 25 compuestos odorantes en muestras de café arábigo procedente de Colombia, a un tueste medio, además realizaron la cuantificación en la bebida preparada. También realizaron una imitación del aroma del café tostado, al mezclar 27 compuestos sintéticos. Un grupo de expertos realizó la evaluación sensorial. El resultado del experimento indicó que los compuestos: 2-furfuriltiol, 4-vinilguayacol, varias alquilpirazinas, furanonas, acetaldehído, propanal, metilpropanal, 2- y 3-metilbutanal tuvieron el impacto más grande en el aroma del café tostado. Por otro lado la ausencia de 2,3-butanodiona, 2,3-pentanediona, β -damascenona y vainillina en el modelo del aroma no fueron percibidos por el panel de expertos (Mayer *et al.*, 2000).

En el 2001 se investigó el café arábigo tostado y molido logrando identificar 122 compuestos volátiles: 26 furanos, 20 cetonas, 20 pirazinas, 9 alcoholes, 9 aldehídos, 8 ésteres, 6 pirroles, 6 tiofenos, 4 compuestos azufrados, 3 compuestos bencénicos, 2 compuestos fenólicos, 2 piridinas, 2 tiazoles, 1 ozazol, 1 lactona, 1 alcano, 1 alqueno y 1 ácido, mediante el uso de la técnica de extracción del espacio de cabeza o “headspace” estático (SH, por sus siglas en inglés) acoplado a CG/EM (Zaens *et al.*, 2001).

En 1992 Murota *et al.* Estudiaron las diferencias entre los cafés de diferentes variedades y regiones del mundo, en donde se incluyó el café de Guatemala, junto con café de café Mocha, Mandeheling, Kilimanjaro, Colombia y Brazil. El estudio mostró que a través de un

análisis de Headspace y cromatografía de gases acoplado a espectrometría de masa se identificaron 80 compuestos diferentes y comunes a las distintas variedades de cafés, de los que destacan cetonas, aldehídos, furanos, pirazinas y alcoholes (Murota, 1992).

3.6 Efecto del tostado en el aroma del café:

En la etapa de tueste de los granos de café adquieren su característico color, además, es la etapa más importante para la formación del aroma, debido a que se generan muchos cambios físicos y complejas reacciones químicas. Varios de estos cambios están relacionados con la reacción de Maillard donde se generan compuestos como dióxido de carbono, agua, compuestos aromáticos y del sabor. Además, se generan sustancias coloreadas de alto peso molecular, solubles y parcialmente insolubles en agua (melanoides). En la primera etapa, se pierde humedad libre; en la segunda ocurren reacciones químicas complejas, deshidratación, fragmentación, recombinación y polimerización (*Parliment, 1995*).

Los mecanismos de la formación de los compuestos volátiles del aroma del café son extremadamente complejos y existe una amplia interacción entre las rutas involucradas. Los principales mecanismos y cambios en la composición que ocurren durante el tostado son:

- Reacción de Maillard o pardeamiento no enzimático entre sustancias con contenido de nitrógeno, aminoácidos y proteínas, pero también trigonelina, serotonina, y carbohidratos, hidroxiaácidos y fenoles.
- Degradación de Strecker de aminoácidos (vía reacción de Maillard). Degradación de aminoácidos a aldehídos, amoníaco, y dióxido de carbono, por la desaminación y decarboxilación de un α -aminoácido. Cada aminoácido produce su aldehído específico, con su aroma característico.

- Formación de compuestos de azufre de bajo peso molecular que contribuyen al aroma global. Ejemplo: el metional producido en la degradación de Strecker se descompone fácilmente dando metanotiol (metilmercaptano), que se oxida a disulfuro de dimetilo.
- Degradación de aminoácidos y proteínas. Hay una destrucción de arginina, y pérdidas sustanciales de cisteína, lisina, metionina, serina y treonina. Degradación de aminoácidos azufrados, los aminoácidos polares con grupos -OH, SH, y -NH₂, fueron encontrados en la producción de aromas en el café.
- Degradación de trigonelina o ácido N-metil-nicotínico. Bajo las condiciones de acidez suave que prevalecen durante el tostado del café, la trigonelina se desmetila a ácido nicotínico, produciéndose un incremento de 30 veces en la concentración y actividad de niacina del café. La termólisis de la trigonelina genera piridinas, pirroles, y compuestos bicíclicos; además la descarboxilación de la trigonelina es otra fuente de dióxido de carbono generado durante el tueste.
- Degradación de azúcares. Azúcares no volátiles (pentosas, hexosas, disacáridos) son degradados por calentamiento para producir productos con aroma a caramelo, y color oscuro. Ejemplos de los aromáticos incluyen: Furanol (2,5-dimetil-4-hidroxi-3-[2H]-furanona), maltol (3-hidroxi-2-metilpiran-4-ona), cicloteno, compuestos dicarbonilos como diacetilo.
- Degradación de lípidos. La autooxidación de ácidos grasos insaturados, principalmente los de cadena larga (C18) produce aldehídos insaturados tales como 2,4-alcadienal, 2-enal y hexanal. El 2-nonenal juega un rol prominente en el aroma del café. Se le ha encontrado en concentraciones bajas (0.08 ppb) y ha sido patentado con notas de aroma a madera (Illy y Viani, 1995; Parliment y Stahl 1995).

3.7 Compuestos volátiles del café tostado.

La mayoría de los compuestos volátiles del café son el resultado de reacciones complejas durante el proceso de tueste, a partir de compuestos no volátiles presentes en el grano verde. Las interacciones de los componentes volátiles, constituyen una mezcla compleja que da como resultado la formación del aroma y sabor característico del café (*Dark y Nursten, 1985*).

El aroma final del café tostado, es decir, sus constituyentes volátiles, depende de varios factores como la especie y variedad de café, condiciones de cultivo: clima y suelo, almacenamiento después de la cosecha, tiempo y temperatura de tueste y por último el equipo utilizado para el tueste (*Dark y Nursten, 1985*).

Las dos especies principales de café, *C. arabica* y *C. canephora*, se diferencian considerablemente en precio, calidad y aceptación del consumidor. Debido al bajo costo, los cafés Robustas se utilizan como llenadores en las mezclas tostadas y molidas, agregando notas terrosas y fenólicas a algunos cafés de tueste oscuro, cafés *espresso*, consumidos en la parte Occidental de Europa (*Parliment y Stahl, 1995*).

La mayoría de los compuestos aromáticos son generados a un tueste mediano del café. Algunos compuestos aromáticos se degradan a temperaturas altas, mientras que otros como el guayacol, furfuriltiol y la piridina, demuestran un aumento a temperaturas altas de tueste. Estos tres compuestos contribuyen particularmente al aroma de los cafés negros. La razón, del porqué algunos compuestos disminuyen y otros aumentan a través del proceso de tostado, puede deberse a que los volátiles pueden ser derivados de dos o más precursores, los cuales se degradan en proporciones diferentes durante el tueste. (*Dark y Nursten, 1985*).

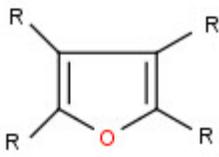
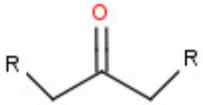
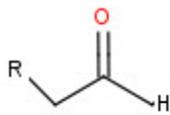
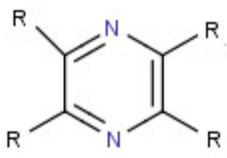
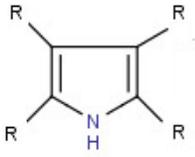
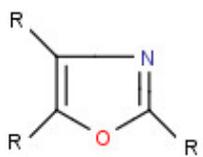
El aroma del café tostado es muy complejo. Está compuesto de muchos compuestos volátiles con características odoríficas diferentes, algunos agradables otros desagradables, y muchos otros debajo de su umbral detectable. La concentración, la proporción y la influencia de un compuesto volátil con otro, afectan la calidad final de aroma (Dark y Nursten, 1985).

TABLA 2: Compuestos químicos identificados en el aroma del Café.

Grupo	Numero de compuestos	Grupo	Numero de compuestos
Acetales	1	Éteres	2
Ácidos	22	Furanos	112
alcoholes	20	Hidrocarburos	72
Aldehídos	29	Cetonas	68
Compuestos alifáticos azufrados	22	Lactonas	9
Anhídridos	3	Oxazoles	28
Benzofuranos	2	Fenoles	40
Benzoxazoles	5	Piranos	2
Benzopirazinas	11	Pirazinas	81
Benzopiridinas	4	Piridinas	15
Benzopirroles	5	Pirones	4
Benzotiazoles	1	Pirroles	67
Benzotiofenos	1	Tiazoles	26
Ésteres	29	Tiofenos	30

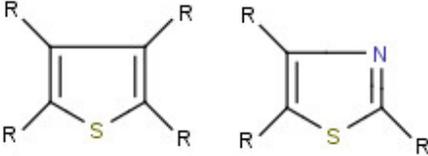
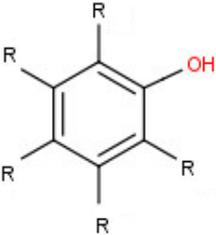
En la **Tabla 2**, se muestra los grupos identificados en el aroma del café tostado (Illy y Viani, 1995). Continúa en la pagina 19.

Tabla 3: Impresión del olor de algunos compuestos químicos encontrados en el aroma del café tostado.

GRUPO	ESTRUCTURA GENERAL	IMPRESIONES DEL OLOR
Furanos		Carne asada, caramelo, heno, almendra dulce, notas amargas
Cetonas		Manteca, fruta, caramelo,
Aldehidos		Acre fermentado, malta, papa cocida, manteca, miel, frutas, flores.
Pirazinas		Maíz dulce, amargo, maní tostado, tierra, moho, paprika, guisantes verdes.
Pirroles		Setas, medicina, aceite, cereal.
oxazoles		Avellana.

* R-puede ser sustituyente diverso. Fuente: (Dark , 1985; Illy, 1995, Czerny, 1996).
 Continúa en la pagina 20.

Continuación de la **Tabla 3**: IMPRESIÓN DEL OLOR DE ALGUNOS COMPUESTOS QUIMICOS ENCONTRADOS EN EL AROMA DEL CAFÉ TOSTADO.

GRUPO	ESTRUCTURA GENERAL	IMPRESIONES DEL OLOR
Compuestos azufrados. Ejemplo: tiofenos, tiazoles.	 <p style="text-align: center;">Tiofeno Tiazol</p>	Cebolla, caramelo, vegetales verdes, nuez, cereal.
Fenoles		Clavo ahumado, medicina.
Tioles o Mercaptanos		Coliflor, notas podrido, ajo.

* R-puede ser sustituyente diverso. Fuente: (Dark, 1985; Illy,1995; Czerny, 1996).

3.7.1 Pirazinas

Las pirazinas se han conocido en el café durante mucho tiempo. Son formadas probablemente en la etapa del tueste por las interacciones de aminas, derivadas de la degradación de la proteína con los carbohidratos (*Gautschi., 1967*). Más de 50 pirazinas se han identificado en café tostado. Se forman durante la degradación de Strecker, que consiste en la reacción de un aminoácido con un α -dicarbonilo, para la formación de aminocetona. Éstas por su parte se condensan para formar pirazinas y otros compuestos heterocíclicos (*Tressl, 1989; Illy y Viani, 1995*).

La tecnología y el nivel del tostado determinan la generación de las pirazinas gracias al aumento de los metiletilpirazinas. La concentración de 2-metoxi-3-isobutil- e isopropilpirazina varía de 10 a 50 ppb. Por tanto, se le considera un compuesto con un alto nivel de sabor en café tostado (*Tressl, 1989*).

Las pirazinas por sí mismas tienen un aroma a maíz dulce–amargo, mientras que las alquilpirazinas generalmente conducen a unas notas terrosas, nuez tostada y quemada (*Illy y Viani, 1995*). La 2-isobutil-3-metoxipirazina posee el aroma característico a paprikas y las metoxipirazinas relacionados tienen olores a guisantes verdes, papa, tierra, etc. La presencia de un grupo tiol en las pirazinas imparte un aroma a nuez y galleta. Si los grupos furfúril y tiol están presentes juntos, su aroma es a carne cocida (*Dark y Nursten, 1985*).

En 1996, Michael Czerny y colaboradores identificaron dos nuevos compuestos de pirazinas (2-etil-3,5-dimetilpirazina y 2-etenil-3-etil-5-metilpirazina) con olor a tierra en cafés Robustas (*Czerny, 1996*).

3.7.2 Piridinas

Las piridinas aumentan según el nivel de tueste, y sus niveles son más altos en los cafés arábigos que en los Robustas bajo condiciones similares (*Tressl, 1989*). Las piridinas poseen unas notas amargas, astringentes y tostadas. Por sí misma, la piridina es amarga y posee un aroma a tostado. La 2-metilpiridina es astringente, y la 3-etilpiridina tiene un aroma a caramelo y a manteca (*Illy y Viani, 1995*).

3.7.3 Pirroles

Los pirroles al igual que las piridinas, aumentan según el grado de tueste. Se encuentran en mayor concentración en los cafés arábigos que en los robustas. El pirrol y N-metil-2-formilpirrol son derivados de la trigonelina (*Tressl, 1989*). En general los pirroles poseen olores diversos. En el caso del furfuralpirrol presenta olores a hongos, mientras que el aroma del acilpirrol dependiendo de su concentración llega desde un olor medicinal extendiéndose a aceitoso. Otros pirroles presentan notas a cereales (*Illy y Viani, 1995*).

3.7.4 Oxazoles

Se han identificado 28 oxazoles, pero no se detectó ninguna oxazolina. Los oxazoles tiene un aroma dulce a avellana, ninguna nota a tostado se ha divulgado para estos volátiles (*Dark y Nursten, 1985; Illy y Viani, 1995*).

3.7.5 Compuestos azufrados

Los compuestos azufrados son extremadamente importantes en el aroma del café tostado, a pesar de estar presentes en concentraciones bajas. El furfuraltiol tiene un aroma fresco de café tostado en concentraciones de 0,01 a 0,5 ppb pero llega a ser desagradablemente sulfurado a concentraciones más altas. El dimetildisulfuro es parte esencial del aroma de cafés de alta calidad, y su presencia se dice mejora notablemente su aroma y sabor. Algunos otros compuestos azufrados son menos agradables; tal es el caso del sulfuro de hidrógeno que a menudo se forma en preparaciones de bebidas de cafés muy prolongadas (*Dark y Nursten, 1985*).

Los tiofenos tienden a poseer aroma a cebolla, mostaza y aromas azufrados; aunque sus ésteres, como los aldehídos y cetonas suelen ser dulces (miel o caramelo) contribuyendo al aroma de una manera positiva. En cambio, los tiazoles que contiene en el anillo heterocíclico tanto al nitrógeno como al azufre, imparten una variedad de aromas que van generalmente desde nueces tostadas hasta olores a vegetales, tendiendo a aumentar esos aromas con la sustitución de la molécula. Los derivados alquilos tienden a poseer notas a vegetales verdes, los grupos –OH, notas a nuez dulce, y los acetilos unas notas a cereales y nueces (*Dark y Nursten, 1985*).

Los cafés Robustas contienen mayor cantidad de compuestos azufrados que los arábigos (*Illy y Viani, 1995*). Esto fue comprobado por Tressel en 1989, quien encontró que, a niveles de tueste similares, los cafés Robustas poseen altas cantidades de furfurilmercaptano, furfurilmetilsulfuro, furfurilmetildisulfuro (formados en la degradación de la cisteína y metionina en presencia de azúcares reductores). Mientras que los arábigos les corresponden los derivados 5-metilados (*Tressl, 1989*).

A concentraciones de 0.1 a 1 ppb de furfurilmercaptano, posee un aroma a café recién preparado mientras que de 5 a 10 ppb se le percibe con nota un poco azufrada comparable a café viejo. Ya el 5-metilfurfurilmercaptano otorga la nota azufrado por encima de los 5 ppb. Ambos componentes se forman durante el tueste y aumentan de 5 a 10 veces durante el almacenamiento de los granos de café tostado. Por lo tanto, ambos constituyentes determinan el aroma y sabor de los cafés tostados frescos así como también son responsables del aroma indeseable del café viejo (*Tressl, 1989*).

3.7.6 Furanos

Los furanos, generados por la degradación pirolítica de azúcares, tienen un aroma a caramelo o azúcar quemada. El 2-metilfurano tiene fragancias etéreas, el furfural a hierbas y heno, y muchas de las furfurilcetonas poseen aroma a caramelo o azúcar quemada. El furfurilalcohol se ha encontrado en altas concentraciones en los cafés de tueste oscuro, impartiendo notas amargas y características aromáticas de esos tipos de cafés. La 4-hidroxi-2,5-dimetil-3(2H)-furanona se ha descrito con un aroma desde caramelo de sabor a piña, almendras dulces, conserva de fresa, caldo de carne de vaca (*Dark y Nursten, 1985; Illy y Viani, 1995*).

3.7.7 Compuestos carbonilados

Los aldehídos pueden estar entre los compuestos más volátiles. Los de bajo peso molecular como el metanal y etanal poseen aroma a acre y tienden a picar, mientras que los compuestos de cadena más largas poseen aromas a frutas y flores. En conjunto, los aldehídos se presentan en concentraciones relativamente altas en los cafés recién tostados, pero son perdidos prontamente por volatilización y oxidación. (*Dark y Nursten, 1985; Illy y Viani, 1995*).

El aroma de las cetonas varían considerablemente, recorren desde lo frutal dulce hasta lo mantecoso, es el caso de las α -dicetonas. Otras son dulces, frutal, algo picante como es el caso de la propanona, mientras que la 2,3-butanona, la 2,3-pentadiona y el diacetilo imparten notas mantecosas al café (*Dark y Nursten, 1985*).

3.7.8 Fenoles.

Los fenoles están presentes en concentraciones bajas, incrementándose con el grado de tueste, tienen aromas a clavo ahumado, quemado con notas amargas astringentes y medicinales (*Illy y Viani, 1995*). Son característicos de los cafés Robustas y los cafés de tueste fuerte, donde las concentraciones de los fenoles tienden a ser relativamente altas (*Dark y Nursten, 1985*).

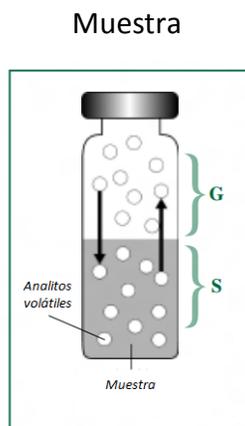
3.8 Headspace estático

Espacio de cabeza estático (comúnmente Headspace)/cromatografía de gases (abreviado HS-CG), es una técnica utilizada para la concentración y el análisis de compuestos orgánicos volátiles. Esta técnica es relativamente simple y puede proporcionar una sensibilidad similar a la purga dinámica y análisis de trampa. La popularidad de esta técnica ha crecido y se ha ganado aceptación para los análisis de alcohol en sangre y disolventes residuales en productos farmacéuticos. Otras aplicaciones comunes incluyen análisis industrial de monómeros en polímeros y plásticos, compuestos de sabor en bebidas y productos alimenticios, y fragancias en perfumes y cosméticos. (Kolb y Ettre, 2006).

Matrices de muestras, como sangre, plásticos y cosméticos, contienen compuestos de alto peso molecular, y material no volátil que puede permanecer en el sistema de GC con el resultado de malos rendimientos analítico. Muchos analistas de laboratorio usan extensivas técnicas de preparación de muestras para extraer y concentrar los compuestos de interés de este indeseado material no volátil. Estas técnicas de extracción y concentración requieren mucho tiempo y son costosas. Los análisis por Headspace evitan este tiempo y disminuyen el coste ya que el muestreo es directamente la fracción volátil desde el recipiente en el que se coloca la muestra (Kolb y Ettre, 2006).

La mayoría de los productos de consumo y las muestras biológicas se componen de una amplia variedad de compuestos que difieren en peso molecular, polaridad, y la volatilidad. Para muestras complejas como estos, el Headspace es el método más rápido y más limpio para el análisis de compuestos orgánicos volátiles. Una muestra del espacio de cabeza se preparan normalmente en un vial que contiene la muestra, el disolvente de dilución, un modificador de la matriz, y el espacio superior (ver Figura 1). En mezclas complejas de muestra, es posible extraer los componentes volátiles y aislarlos de los no volátiles, en una porción de Headspace o vapor de un vial de muestra (Kolb y Ettre, 2006).

Figura 1: representación de un vial para Headspace. G) fracción gaseosa Headspace. S) Muestra



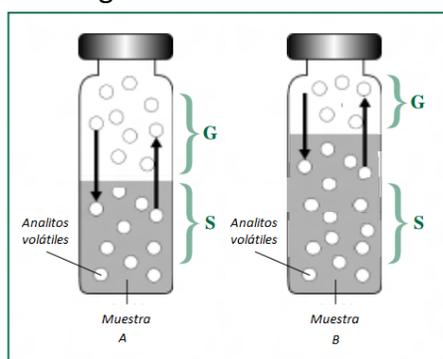
Fuente: adaptado de Restek Corp. (2000), A Technical Guide for Static Headspace Analysis Using GC, Guía Técnica.

La metodología para el Headspace es muy simple, dependiendo de la naturaleza de la muestra puede colocarse directamente o diluida y se pone en un contenedor cerrado y sellado que es lo suficientemente grande para permitir algo de espacio vacío en el vial, donde los vapores pueden colectarse. La muestra se calienta a temperatura controlada durante un período de tiempo para permitir que los solventes de la matriz se volatilicen, entren en fase gaseosa, y alcancen el equilibrio con el o los solventes restantes en el vial. Esta fase gaseosa o el espacio de cabeza, se muestrea y se inyecta en la columna

utilizando presión como el modo de inyección. La precisión de la inyección de un inyector de headspace puede dar consistentemente $< 10.0\%$ de desviación estándar relativa (DER) y frecuentemente $da = 2.0\%$ DER, similar a la precisión encontrada con la inyección en cromatografía de líquidos (Kott, y Ming, 2010).

Volumen de la muestra: Los viales de muestra para headspace típicamente vienen en tamaños de 10 mL y 20 mL. Con frecuencia, se necesita analizar cantidades muy pequeñas de un solvente residual en una matriz, lo que genera el problema de la sensibilidad. Generalmente se incrementaría la concentración de una muestra o se inyectaría más muestra en una columna para obtener una mejor señal, incrementando así la potencia de la señal. Con el Headspace, más volumen de muestra no siempre proporciona el incremento esperado en las cuentas de área porque a más grande el volumen de muestra, menor es el volumen del headspace real (ver Figura 2) (Kott, y Ming, 2010).

Figura 2: dos viales de Headspace con diferente cantidad de muestra, se puede observar que con el aumento de muestra se genera una disminución de espacio de cabeza.



Fuente: adaptado adaptado de Restek Corp. (2000)
A Technical Guide for Static Headspace Analysis Using GC, Guía Técnica

Tiempo de incubación: El equilibrio solvente-vapor juega un papel en el análisis del Headspace. Mientras más rápidamente pueda evaporarse un solvente dentro del Headspace, más de ese solvente particular será inyectado en la columna. La incubación del vial de Headspace es una consideración importante en el desarrollo de métodos por

CG con Headspace. Si la muestra se incuba durante un período de tiempo demasiado corto, menos del analito estará en el Headspace, lo cual puede afectar las cuentas de área generales. Después de un cierto punto, sin embargo, el analito y la solución de la cual proviene se encontrará en equilibrio; más incubación no resultará en más muestra que entre a la fase de vapor y puede resultar en la degradación de la muestra o causar reacciones secundarias.

Composición del diluyente: la sal afecta el punto de ebullición del agua y por consiguiente, el equilibrio de un solvente con su vapor. Como el Headspace también depende de los equilibrios solvente-vapor, se pueden agregar sales para incrementar la concentración de vapor en una muestra con Headspace. Las sales han sido usadas en el análisis de Headspace, sin embargo, esta técnica trabaja mejor para solventes con base acuosa, los cuales no son los mejores solventes para el análisis de CG. Por lo tanto, se pueden utilizar solventes de alto punto de ebullición como el dimetilsulfóxido (DMSO) y dimetilformamida (DMF) como diluyentes de la muestra. (Consideraciones experimentales en la cromatografía de gases con headspace, Laila Kott y Hong Ming Chen)

3.9 Cromatografía de gases acoplada a Espectrometría de masas (CG/EM)

El análisis del aroma del café ha progresado velozmente, debido en gran parte al desarrollo de nuevas técnicas y mejoramiento de equipos. Tal es el caso de la cromatografía de gases acoplada a la espectrometría de masas (CG/EM o GC/MS, por sus siglas en inglés). La combinación de estas dos técnicas ha permitido la separación e identificación de mezclas complejas en un solo análisis. Actualmente más de 660 compuestos volátiles se han identificados (principalmente en café tostado) más que en cualquier otro alimento o bebida. (*Dark y Nursten, 1985*).

Un sistema de cromatografía de gases (CG) acoplado a espectrometría de masas (EM) consta básicamente en: un gas de arrastre; un puerto de inyección de la muestra; una columna de separación; un horno para la columna, y un sistema espectrométrico de masas (fuente de ionización, analizador de masas y un detector).

El procedimiento es básicamente el siguiente: la muestra se volatiliza en el puerto de inyección y se inyecta con exactitud y precisión en la cabeza de la columna cromatográfica. La elusión se produce por el flujo de una fase móvil (gas de arrastre inerte); su única función es de transportarlo a través de la columna. La columna por su parte, es el corazón de la cromatografía de gas. Posee una fase estacionaria en la cual se produce la retención de los analitos a diferentes proporciones como consecuencia de la adsorción física y produciendo luego la separación (*Skoog y Leary, 1994*).

El modo de ionización (impacto de electrones o ionización química) determina el tipo de abundancia de los iones producidos. En el modo de impacto de electrones (EI, por sus siglas en inglés) la fuente de iones de un espectrómetro de masas convierte los componentes de una muestra en iones por bombardeo con electrones. Se obtiene un haz de iones frecuentemente positivos que es entonces acelerado en el analizador de masas. La dispersión está basada en las relaciones masa/carga de los iones del analito. El espectrómetro de masas contiene un detector para iones que convierte el haz de iones en una señal eléctrica de los componentes de la muestra que puede ser entonces procesada, almacenada en la memoria de un ordenador y mostrada o registrada (*Skoog y Leary, 1994*).

4. JUSTIFICACION

El café de Guatemala es apreciado internacionalmente y se reconoce como uno de los mejores a nivel mundial. Las características de cultivo, clima, tipo de suelo, temperatura, altitud y nubosidad, proporcionan al café de regiones de Guatemala características de aroma y sabor únicos en el mundo.

El aroma, una de las características más importantes para evaluar la calidad de un café, es apreciado por expertos catadores de manera organoléptica. Sin embargo, actualmente, no se cuenta con estudios que hayan caracterizado las sustancias químicas que proporcionan al café de distintas regiones de Guatemala su distintivo aroma.

Es necesario desarrollar estudios y comprobar métodos, como Headspace cromatografía de gases acoplada a espectrometría de masas (HS-CG/EM), que permitan la identificación de las sustancias químicas volátiles presentes en el café de Guatemala y proporcionar de esta forma, una herramienta útil, ya que se puede establecer la Huella digital cromatográfica, que permite caracterizar objetivamente las variedades de café que se cultivan en Guatemala.

Además se podrán implementar nuevos métodos para el control de la calidad del café, a través de sus perfiles cromatográficos.

Las investigaciones acerca de la composición química son importantes ya que permiten obtener conocimientos que contribuyan a mantener y mejorar la calidad del café cultivado en las principales regiones del país.

5. OBJETIVOS.

5.1 General.

Caracterizar la fracción volátil responsable del aroma del café tostado y molido de cuatro regiones de Guatemala (Antigua, Cobán, Fraijanes, y Huehuetenango), mediante la técnica de Headspace y cromatografía de gases acoplada a espectrometría de masas (HS-CG/EM).

5.2 Específicos.

- 5.2.1 Separar los compuestos volátiles presentes en el aroma del café tostado y molido de cuatro regiones de Guatemala (Antigua, Cobán, Fraijanes, y Huehuetenango) mediante cromatografía de gases.
- 5.2.2 Identificar la mayoría de compuestos separados en el aroma del café por comparación de los patrones de fragmentación obtenidos por el detector de espectrometría de masas, con librerías de referencia.
- 5.2.3 Clasificar las especies químicas volátiles identificadas, responsables del aroma del café por grupo funcional.
- 5.2.4 Diferenciar químicamente las principales variedades de café cultivado en Guatemala utilizando técnicas de estadística multivariada.
- 5.2.5 Establecer una “huella digital” cromatográfica para cada variedad de café de Guatemala que se analice.

6. HIPÓTESIS.

Existen diferencias en la composición química del aroma del café tostado, entre las cuatro regiones a estudiar, que permiten diferenciarlas entre sí.

7. MATERIALES Y METODOS.

- 7.1 Universo: Café, molido y tostado de cuatro regiones de Guatemala, Antigua, Cobán, Fraijanes y Huehuetenango.
- 7.2 Muestra: se analizarán 7 muestras de doscientos gramos de café en cada una de las cinco regiones de estudio. Se contabilizarán las fincas productoras de café en cada una de las cinco regiones de estudio, de la totalidad de fincas, se seleccionaran siete al azar. En cada finca se procederá a tomar 300 gramos de café en grano seco de la cosecha 2011-2012. El café seco de cada finca, se somete a proceso de tostado y molido; este café constituye la muestra que será analizada.
- 7.3 Recursos:
- 7.3.1 Humanos:
- 7.3.1.1 Autor: Herbert Alejandro Ismatul Rejopachí
- 7.3.1.2 Asesor: Doctor Francisco Pérez Sabino
- 7.3.2 Materiales:
- 7.3.2.1 Recursos Institucionales:
- 7.3.2.1.1 Laboratorio de Química. Instituto de Investigaciones Químicas, Biológicas, Biomédicas y Biofísicas. Universidad Mariano Gálvez de Guatemala.
- 7.3.2.1.2 Laboratorio de Físicoquímica de la Facultad de Ciencias Químicas y Farmacia Universidad de San Carlos de Guatemala.
- 7.3.2.1.3 Departamento de Catación. Asociación Nacional del Café (ANACAFÉ).

7.3.2.2 Instrumentos y Equipos.

- 7.3.2.2.1 Balanza analítica.
- 7.3.2.2.2 Refrigeradora
- 7.3.2.2.3 Dispensador de nitrógeno líquido.
- 7.3.2.2.4 Molino para granos.
- 7.3.2.2.5 Automuestreador Headspace: Agilent Technologies G1888
- 7.3.2.2.6 Cromatógrafo de Gases. Agilent Technologies. 6890N
- 7.3.2.2.7 Detector de masas: Agilent Technologies 5973.

7.3.2.3 Cristalería.

- 7.3.2.3.1 Vidrios de reloj
- 7.3.2.3.2 Viales de Headspace 20 ml con tapones de aluminio y silicona.
- 7.3.2.3.3 Beakers.

7.4 Métodos:

7.4.1 Muestreo:

Se trabajó con 7 muestras obtenidas de diferentes fincas cada región: Antigua, Cobán, Fraijanes y Huehuetenango, de la cosecha 2011-2012. Todos los cafés corresponden a la especie, *Coffe Arabica* de diferentes variedades. Debido a la altura en la que se cosechan los cafés, se consideran estrictamente duros. Las muestras de grano verde se limpiaron y se procedió a tostarlas en un horno Probat para muestras de 110 gramos, a una temperatura inicial de 150°C y final de 175°C durante períodos de tiempo entre 8 y 10 minutos. Para lograr un grado de tueste de 60-65 en la escala Agtron. Las muestras se enfriaron y almacenaron en bolsas metalizadas con válvula desgasificadora de una

vía. Todas las muestras fueron procesadas y proporcionadas por el Departamento de Catación de ANACAFÉ. La información de la procedencia de las muestras se detalla en la tabla 1 de anexos:

7.4.2 Almacenamiento y preparación de las muestras.

En el laboratorio las muestras fueron codificadas, pesadas y guardadas en refrigeradora a temperatura menor a 10°C, en frascos ámbar cerrados herméticamente para evitar la pérdida de componentes volátiles.

7.4.3 Extracción de compuestos volátiles con Headspace.

Cada muestra de café se trata por separado de la siguiente forma:

7.4.3.1 Se pesan 10 gramos de café en grano.

7.4.3.2 Se congelan con nitrógeno líquido en un beaker de 100ml.

7.4.3.3 Se transfieren los granos a un molino para granos hasta pulverizar.

7.4.3.4 Pesar 4 gramos exactos de muestra molida en viales para Headspace de 20ml y se coloca tapa de aluminio y silicona.

7.4.3.5 Se ajustan las condiciones de la siguiente manera previo a analizar por cromatografía de gases:

Temperatura del horno: 100 °C

Temperatura del loop: 105 °C

Temperatura de la línea de transferencia: 105 °C

Tiempo de incubación del vial: 100 minutos con agitación.

Presurización: 0.5 minutos a 18 kPa.

Volumen del loop: 1 mL.

- 7.4.4 Condiciones para la cromatografía de gases con detector de masas:
- Cromatografo de gases: Agilent 6890N.
 - Detector: masas Agilent 5973.
 - Split: 5:1
 - Velocidad promedio: 26 cm/s.
 - Flujo: 0.5 mL/min.
 - Programa de temperatura del horno: 40 °C por 6 minutos y luego rampa de 3 °C/min hasta 190 °C
 - Tiempo total de la cromatografía: 56 minutos.

7.5 Análisis de Resultados.

- 7.5.1 Variables de interés: las variables obtenidas para cada muestra son la identidad del compuesto y el área de los picos sobresalientes del cromatograma.
- 7.5.2 Obtención de perfiles cromatográficos, “huellas digitales” mediante el área de los picos de los cromatogramas (HS-CG/EM).
- 7.5.3 Identificación de compuestos químicos por comparación con la biblioteca Nist02 de patrones de fraccionamiento de masas.
- 7.5.4 Análisis univariados: Para la caracterización: valores promedio, desviación estándar de % relativo.
- 7.5.5 Análisis Multivariados (Análisis de Componentes Principales y Análisis de Discriminantes Canónicos) mediante el programa XStat para Windows. Para evaluar si los resultados obtenidos permiten identificar los aromas del café de cada región y distinguirlos entre sí.

8. RESULTADOS

8.1 Análisis cromatográfico:

Método de Headspace y cromatografía de gases con detector de masas (HS-CG/EM), establecido para el análisis de muestras de café tostado y molido.

Headspace:

- Temperatura del horno: 100 °C
- Temperatura del loop: 105°C
- Temperatura de la línea de transferencia: 105°C
- Tiempo de incubación del vial: 100 minutos con agitación
- Presurización: 0.5 minutos a 18kPa
- Volumen del loop: 1 mL

Cromatógrafo:

- Sistema cromatográfico Agilent 6890N.
- Detector: Espectrómetro de masas, Agilent 5973
- Columna: Innowax, 30 m x 0.25 mm ID x 0.25 um de fase estacionaria.
- Split: 5:1
- Velocidad promedio: 26 cm/seg
- Flujo: 0.5 mL/min
- Programa de temperatura del horno: 40 °C por 6 minutos y luego rampa de 3°C/min hasta 190°C.
- Tiempo total de cromatografía.

8.2 Resultados de la cromatografía de gases con detector de masas.

Tabla 4: Áreas bajo picos en el cromatograma. Muestras de café de la región Antigua.

No.	Nombre IUPAC	CAS	ANT-1	ANT-2	ANT-3	ANT-4	ANT-5	ANT-6	ANT-7
1	Acetona	67-64-1	876525321	852389802	863228296	812974663	1005985308	974079018	827488769
2	2-metilfurano	534-22-5	180994921	215360237	193789113	167665892	243762851	24012834	182738308
3	Metanol	67-56-1	475621160	455252878	488886540	450748859	497292492	502368838	448505752
4	2-metilbutanal	96-17-5	476557705	422473725	456612472	439552177	557088309	526213897	437331704
5	Etanol	64-17-5	52216343	47389394	32886140	35733961	54628080	40002616	41113920
6	2,3-butanodiona	431-03-8	275789949	274649935	297126996	277008035	300618675	322725388	278924054
7	2,3-hexanodiona	38-48-246	6499863	6752868	6286183	6243886	8051436	8166805	6032711
8	1-metil-1H-Pirrol	96-54-8	16220253	16496167	17019596	16287094	21788408	22225669	16365234
9	3-metilfenol	108-39-4	4605587	9908014	9571002	8549181	11999326	10763716	8454020
10	Piridina	110-86-1	100278732	84867076	109322341	94610714	131804351	152768931	99819465
11	1,3-diazina	289-95-2	31277726	19020756	299926469	30547286	31233006	30970378	28305826
12	2-(metoximetil)-furano	13679-46-4	4880115	7357191	6198505	4115282	5060848	6334684	3933619
13	3-metil-3-buten-1-ol	763-32-6	9897462	13562826	6878599	7123395	11563298	12313847	6468694
14	3-Hidroxi-2-butanona	513-86-0	81467671	77418719	78652573	75513373	82605062	89341757	74046128
15	1-Hidroxi-2-propanona	116-09-6	591546454	491183685	523156833	596519853	526889071	501486643	570655111
16	2,5-dimetilpirazina	123-32-0	42504989	34202541	35686644	40043855	42992200	37518350	39391532
17	2,6-dimetilpirazina	108-50-9	44926058	35709341	42759341	43522159	48714763	44848822	43400361
18	Etilpirazina	13925-00-3	19947453	17055423	19339731	19694730	21675768	19811243	19249737
19	2,3-dimetilpirazina	5910-89-4	16100093	7553976	6821635	5402906	6181942	5608443	5202783
20	2-metil-3-pentanol	565-67-3	24474011	17588281	16491655	17065015	19101619	18987565	16942329
21	1-metilpropil ester, ácido fórmico	589-40-2	12874396	14740658	11320074	12169301	13568252	13538058	12094649
22	1-Hidroxi-2-butanona	5077-67-8	60907876	61097209	57122216	60833867	63606095	61821552	59825691
23	Ácido acético	64-19-7	851963261	908515127	696465051	832250393	835186375	778987824	785501971

Continuación de la **tabla 4**.

24	Furfural	98-01-1	1104709552	1038977116	1098526291	1014471673	1061433148	1004884785	1030282683
25	Furfurilformiato	13493-97-5	23993149	27965273	22677523	22380891	25199235	25930719	21868092
26	1-(2-furanil)-etanona	1192-62-7	54114935	35991760	32439850	30311299	35249979	34129776	30484838
27	Acetato de 2-furanmetanol	623-17-6	36120420	35607008	34539224	31583222	40518545	41323374	30856951
28	Ácido propanoico	79-09-4	66823460	70239769	58119846	59948872	67433637	62432206	58605017
29	5-metil-2-furancarboxaldehído	623-17-6	87857806	85946128	87606963	80865211	91049124	89907674	82090931
30	Butirolactona	620-02-0	24118993	22297651	23634296	21554297	26239605	28965073	21308349
31	2-furanmetanol	98-00-0	418902844	428374001	442810863	456589862	474518934	466713327	434998202
32	Ácido pentanoico	109-52-4	39786441	38243510	42356596	358661968	43272917	46828417	34263499
	SUMATORIA		6114504999	5874188045	6118259457	5807743172	6406312659	6006012229	5756550930

Tabla 5: Áreas bajo picos en el cromatograma. Muestras de café de la región Cobán.

No.	Nombre IUPAC	CAS	COB-1	COB-2	COB-3	COB-4	COB-5	COB-6	COB-7
1	Acetona	67-64-1	678157911	840407378	928812032	772485681	751142565	826199471	796099903
2	2-metilfurano	534-22-5	175828575	192209998	188483376	163128479	140855769	205091650	194272163
3	Metanol	67-56-1	430588674	437935804	452114225	402206419	409078684	444397301	425839373
4	2-metilbutanal	96-17-5	615118966	478584988	583016653	443520477	524374328	424998973	466746345
5	Etanol	64-17-5	22194988	80019119	34916516	24870152	31083020	20947238	16965383
6	2,3-butanodiona	431-03-8	291656552	260605712	238550232	249498746	234122272	250383310	271026526
7	2,3-hexanodiona	38-48-246	6287025	5733216	6329663	5180754	4340701	5477717	5720554
8	1-metil-1H-Pirrol	96-54-8	13147249	15538492	37650030	13330969	11785599	14606335	14571397
9	3-metilfenol	108-39-4	7202929	8855924	8771964	8133142	7415627	7998779	8596239
10	Piridina	110-86-1	4731258	92470845	111232983	75184418	65857839	97507065	81880008
11	1,3-diazina	289-95-2	21529030	29822986	30044294	25326924	23163296	26479133	26548110

Continuación de la tabla 5:

12	2-(metoximetil)-furano	13679-46-4	4902950	4898582	5311753	3616850	3241168	5601784	4002676
13	3-metil-3-buten-1-ol	763-32-6	6560885	6328653	7349737	5203612	4380985	7825339	6763835
14	3-Hidroxi-2-butanona	513-86-0	73370324	71119298	67406384	66751223	59478869	66726635	69199787
15	1-Hidroxi-2-propanona	116-09-6	528293723	467029755	431465259	498162117	475953248	373385968	4816266669
16	2,5-dimetilpirazina	123-32-0	36736787	38138675	38159706	35734987	36041655	32909869	34375239
17	2,6-dimetilpirazina	108-50-9	38972361	43738797	44783115	39466355	37869483	41610346	38981410
18	Etilpirazina	13925-00-3	16989864	19497681	20061651	17885153	17052514	18136011	17030102
19	2,3-dimetilpirazina	5910-89-4	4377943	5127846	5922491	4655823	4849124	5945976	4601643
20	2-metil-3-pentanol	565-67-3	26548447	15721561	16064875	14768826	13601507	15678176	14857072
21	1-metilpropil ester, acido formico	589-40-2	15069127	11335901	11345632	10720970	9833359	11097761	10618917
22	1-Hidroxi-2-butanona	5077-67-8	54428795	53046359	50500570	52354147	47143270	46261661	51064604
23	Ácido acético	64-19-7	742795934	683300024	682745438	703073955	574027561	581242904	724590992
24	Furfural	98-01-1	1185303811	901267190	882371270	947546778	906947948	870684282	887942012
25	Furfurilformiato	13493-97-5	20106057	19774797	20957984	19067610	14654687	16908011	18940676
26	1-(2-furanyl)-etanona	1192-62-7	37173986	26798835	26889827	28354206	24616069	27675421	28302226
27	Acetato de 2-furanmetanol	623-17-6	33579148	29260918	37193366	27537833	21914740	31995094	27643621
28	Ácido propanoico	79-09-4	62231564	51993104	52147985	53882173	43470731	46504110	51852188
29	5-metil-2-furancarboxaldehido	623-17-6	87506243	77622331	75605073	76653553	72314207	78994279	75883821
30	Butirolactona	620-02-0	27215374	22968258	29013824	20398369	17058891	18547694	20291903
31	2-furanmetanol	98-00-0	341889282	398869691	436575873	389510763	333180766	358850556	373976521
32	Ácido pentanoico	109-52-4	56138880	35361367	31538172	30436071	23685541	28684536	40321032
	SUMATORIA		5666634642	5425384085	5593331953	5228647535	4944536023	5009353385	5291132947

Tabla 6: Áreas bajo picos en el cromatograma. Muestras de café de la región Fraijanes.

No.	Nombre IUPAC	CAS	FR1	FR2	FR3	FR4	FR5	FR6	FR7
1	Acetona	67-64-1	921086875	760863521	896083643	866924271	861428364	843419277	887243531
2	2-metilfuran	534-22-5	186840885	137943178	182279962	204412203	196925555	168302197	199418920
3	Metanol	67-56-1	915770067	42153030	464695888	493564254	440100296	460325494	440676716
4	2-metilbutanal	96-17-5	473572534	390656953	4634445853	523053592	497146384	489568224	477563227
5	Etanol	64-17-5	41089964	15733573	65219486	20936893	54973805	48586011	42088896
6	2,3-butanodiona	431-03-8	254635622	226795567	229454372	268812140	263894321	244043298	316127836
7	2,3-hexanodiona	38-48-246	5460908	4973684	5541785	7223799	7599847	5332091	6172742
8	1-metil-1H-Pirrol	96-54-8	22989052	14516096	18323578	18795676	21295686	15518622	19234952
9	3-metilfenol	108-39-4	10387147	8077485	9566151	10156886	9951932	8779444	9472343
10	Piridina	110-86-1	125083396	93917280	112189985	98976522	118143585	85287410	109966527
11	1,3-diazina	289-95-2	33390685	30210884	27261582	24768344	25973467	23762525	30398552
12	2-(metoximetil)-furan	13679-46-4	6838409	4718902	4767690	4318015	4103156	4826323	3903785
13	3-metil-3-buten-1-ol	763-32-6	9493262	7165220	8065960	8250192	6365053	9575469	8119271
14	3-Hidroxi-2-butanona	513-86-0	74723030	67026391	72269732	67301736	73476100	64448422	66818287
15	1-Hidroxi-2-propanona	116-09-6	428060131	524113765	505588517	528794541	531626552	496813435	465106925
16	2,5-dimetilpirazina	123-32-0	45858851	40633954	39868609	37646347	33012993	40278808	39192315
17	2,6-dimetilpirazina	108-50-9	51891777	44168927	43158439	41036272	36029203	43805478	44923020
18	Etilpirazina	13925-00-3	25453472	20519710	20073434	18283764	18085035	20724576	20518426
19	2,3-dimetilpirazina	5910-89-4	6940964	5918768	5580887	4875606	5044792	6811462	5504932
20	2-metil-3-pentanol	565-67-3	16896424	14204566	15136923	15288846	16304982	15366909	14411246
21	1-metilpropil éster, ácido fórmico	589-40-2	11354603	12641198	13991122	14277961	13637889	12606855	136433320
22	1-Hidroxi-2-butanona	5077-67-8	52747785	54784932	55830939	57418143	58661592	53150503	52533182
23	Ácido acético	64-19-7	834616665	984270747	1037120458	1087957562	999273416	999425539	1001019059
24	Furfural	98-01-1	460720973	468663240	476899861	478748473	471394199	455159166	412779975
25	Furfurilformiato	13493-97-5	19028584	15616910	17136775	16628513	19112379	13656237	15842427

Continuación de la **tabla 6**.

26	1-(2-furanil)-etanona	1192-62-7	28013871	25700645	28871862	28454307	26875798	26227912	27007089
27	Acetato de 2-furanmetanol	623-17-6	58505499	44492801	48461800	46403217	50045349	40801394	37521357
28	Ácido propanoico	79-09-4	59602618	53874700	57254667	57634607	56192690	52477168	50574151
29	5-metil-2-furancarboxaldehido	623-17-6	87837958	74410607	82750060	83732468	76918038	77138555	58040328
30	Butirolactona	620-02-0	31695840	22370333	25914538	23067857	26535192	20148158	22096222
31	2-furanmetanol	98-00-0	438006479	424712860	431145586	397424502	459256214	374539313	417494255
32	Ácido pentanoico	109-52-4	26649382	24403540	20986332	30858848	27160674	25605249	20541798
	SUMATORIA		5765243712	4660253967	5484936476	5586026357	5506544538	5246511524	5335955612

Tabla 7: Áreas bajo picos en el cromatograma. Muestras de café de la región Huehuetenango.

No.	Nombre IUPAC	CAS	HUE-1	HUE-2	HUE-3	HUE-4	HUE-5	HUE-6	HUE-7
1	Acetona	67-64-1	784977172	845854445	764989260	900236275	903282196	1023303156	881030237
2	2-metilfurano	534-22-5	176692727	194385410	143855620	180049047	206788720	324635698	217232357
3	Metanol	67-56-1	477070987	475068230	493401821	519871589	457951103	685902356	558120995
4	2-metilbutanal	96-17-5	421752903	469917640	482117089	549383439	515017490	745249203	613543589
5	Etanol	64-17-5	25250392	56459289	140671306	7184377	16579344	321685279	72231659
6	2,3-butanodiona	431-03-8	292100203	268902135	255302778	7063813	271970241	373559398	295796971
7	2,3-hexanodiona	38-48-246	5977167	5977938	8593465	6459315	5957959	130926212	4952813
8	1-metil-1H-Pirrol	96-54-8	14665965	18247427	23633655	3776077	19643410	31161809	15756848
9	3-metilfenol	108-39-4	9125346	8701090	11847906	15011439	9365842	42924329	8436685
10	Piridina	110-86-1	88969786	124187315	61453406	9884124	107694392	11082916	99713792
11	1,3-diazina	289-95-2	24301042	26594968	23744238	67831095	35008918	141507684	2631322
12	2-(metoximetil)-furan	13679-46-4	4673511	4751923	5154098	32212312	4840057	43419319	5105344

Continuación de la **tabla 7**.

13	3-metil-3-buten-1-ol	763-32-6	8639869	7995171	9514658	3996265	5780493	8435786	6644694
14	3-Hidroxi-2-butanona	513-86-0	76281051	73893232	69465573	73984845	77814708	89094765	74446446
15	1-Hidroxi-2-propanona	116-09-6	556096887	490615597	561285019	554270354	480578508	567386053	491016662
16	2,5-dimetilpirazina	123-32-0	35514769	36344258	40610969	42258887	41400166	34703592	36005464
17	2,6-dimetilpirazina	108-50-9	40925491	41829882	40379247	48876067	46484396	41869269	41508578
18	Etilpirazina	13925-00-3	17918620	17592645	23217342	28330634	21157321	17390350	21166942
19	2,3-dimetilpirazina	5910-89-4	5035813	4727648	5969704	8680536	5970009	3407716	5012431
20	2-metil-3-pentanol	565-67-3	17425674	15755912	16233723	17608167	15802136	19964574	15806099
21	1-metilpropil ester, ácido formico	589-40-2	12238770	11541076	15295661	11016954	11457857	13576403	9770831
22	1-Hidroxi-2-butanona	5077-67-8	59662212	55049909	61454632	58371521	55473222	68180856	65453249
23	Ácido acético	64-19-7	864139703	752843143	723357278	713955354	647238209	998754421	720505625
24	Furfural	98-01-1	1045504971	953038540	990039143	1011837957	927213479	1005475482	951254490
25	Furfurilformiato	13493-97-5	21482654	20035639	15796683	19629164	21426233	26363986	19224266
26	1-(2-furanil)-etanona	1192-62-7	32593791	28956941	25207963	29586676	27543810	36935842	30303999
27	Acetato de 2-furanmetanol	623-17-6	33397420	32228194	25193519	25871587	33621542	44677644	34280739
28	Ácido propanoico	79-09-4	62587733	55788067	52585919	55030481	49682607	71781912	56697290
29	5-metil-2-furancarboxaldehido	623-17-6	87653599	80933110	75566043	80477659	76673195	95454019	90220531
30	Butirolactona	620-02-0	21599627	24821646	21810530	24156033	23003783	30818122	26940280
31	2-furanmetanol	98-00-0	416624289	409966467	392872586	425847182	436519567	463379012	443790524
32	Ácido pentanoico	109-52-4	46981682	42855349	36733156	32017632	29074076	47283315	35495098
	SUMATORIA		5787861826	5655860236	5617353990	5564766857	5588014989	7560290478	5950096850

Tabla 8: Clasificación de los compuestos químicos encontrados.

Grupo funcional	Nombre IUPAC
Cetonas	Acetona 2, 3-butanodiona 2,3-hexanodiona 3-Hidroxi-2-butanona 1-Hidroxi-2-propanona 1-Hidroxi-2-butanona 1-(2-furanyl)-etanona 3,3-dimetil-2-butanona* 1-(acetiloxi)-2-butanona*
Furanos	2-metilfurano 2-metoximetilfurano 2,5-dimetilfurano*
Alcoholes	Metanol Etanol 3-metil-3-buten-1-ol 2-metil-3-pentanol 2-furanmetanol 2-metil-3-buten-2-ol*
Aldehídos	2-metilbutanal 5-metil-2-furancarboxaldehido Furfural Hidroxiacetaldehído* Propanal*
Pirroles	1-metil-1H-Pirrol
Fenoles	3-metilfenol
Piridinas	Piridina
Diazinas	1,3-diazina
Pirazinas	2,5-dimetilpirazina 2,6-dimetilpirazina Etilpirazina 2,3-dimetilpirazina Metilpirazina*
Ésteres	1-metilpropil éster, ácido fórmico Furfurilformiato Acetato de 2-furanmetanol
Ácidos carboxílicos	Ácido acético Ácido propanoico Ácido pentanoico Ácido fórmico*
Lactonas	Butirolactona

*Compuestos identificados pero no fueron tomados en cuenta para los análisis estadísticos.

1.1 Análisis estadístico de los resultados.

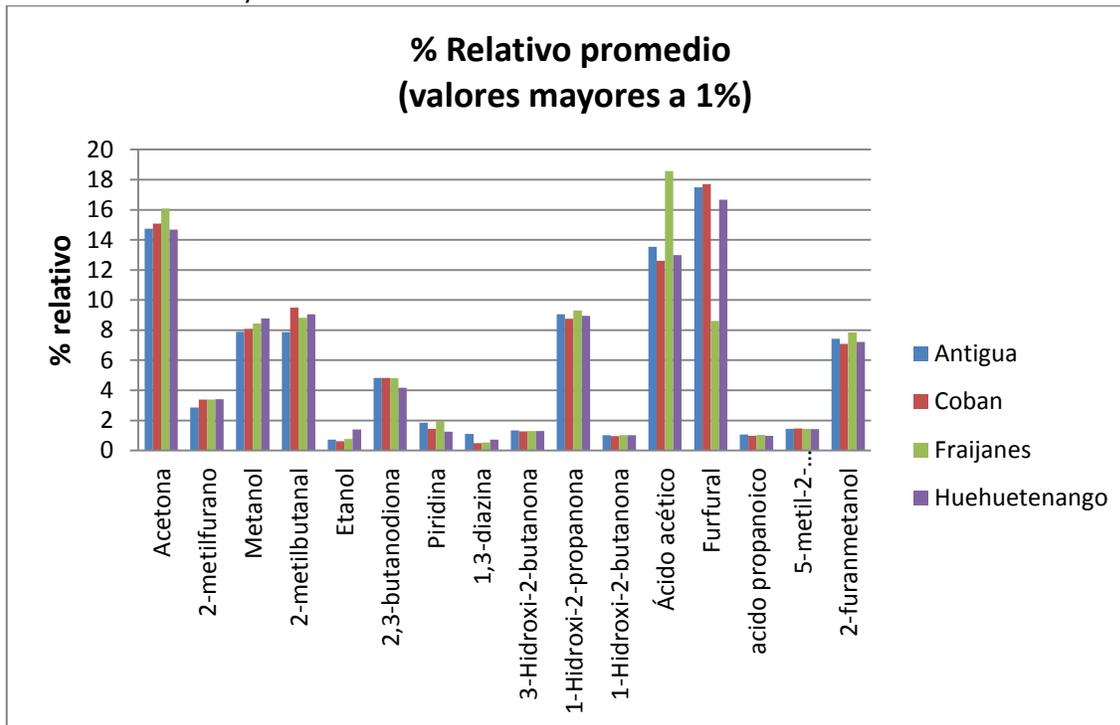
Tabla 9: Media de los valores de porcentaje relativo y desviación estándar para cada región analizada.

No	Nombre IUPAC	Antigua		Cobán		Frijanes		Huehuetenango	
		Media	desv.	Media	desv.	Media	desv.	Media	desv.
1	Acetona	14.750	0.857	15.081	1.543	16.072	0.396	14.689	1.171
2	2-metilfurano	2.866	1.140	3.393	0.418	3.386	0.281	3.419	0.548
3	Metanol	7.886	0.227	8.091	0.417	8.446	4.334	8.774	0.506
4	2-metilbutanal	7.867	0.616	9.499	1.072	8.817	0.468	9.062	1.066
5	Etanol	0.721	0.123	0.619	0.395	0.761	0.316	1.405	1.490
6	2,3-butanodiona	4.818	0.272	4.835	0.302	4.807	0.550	4.179	1.794
7	2,3-hexanodiona	0.114	0.012	0.105	0.009	0.112	0.016	0.343	0.613
8	1-metil-1H-Pirrol	0.300	0.039	0.322	0.157	0.346	0.038	0.299	0.121
9	3-metilfenol	0.152	0.037	0.154	0.012	0.176	0.005	0.238	0.152
10	Piridina	1.834	0.364	1.434	0.644	1.976	0.202	1.251	0.817
11	1,3-diazina	1.108	1.674	0.493	0.058	0.523	0.077	0.725	0.617
12	2-(metoximetil)furano	0.090	0.021	0.085	0.016	0.089	0.017	0.226	0.240
13	3-metil-3-buten-1-ol	0.161	0.047	0.119	0.022	0.152	0.020	0.123	0.033
14	3-Hidroxi-2-butanona	1.328	0.072	1.276	0.052	1.296	0.078	1.288	0.071
15	1-Hidroxi-2propanona	9.049	0.868	8.765	0.875	9.314	1.143	8.942	0.941
16	2,5-dimetilpirazina	0.647	0.050	0.679	0.030	0.739	0.087	0.649	0.104
17	2,6-dimetilpirazina	0.722	0.054	0.769	0.048	0.814	0.099	0.732	0.104
18	etilpirazina	0.325	0.017	0.341	0.023	0.383	0.047	0.358	0.089
19	2,3-dimetilpirazina	0.125	0.062	0.096	0.014	0.109	0.017	0.096	0.034
20	2-metil-3-pentanol	0.310	0.042	0.314	0.069	0.287	0.013	0.285	0.019
21	1-metilpropil ester, ácido fórmico	0.215	0.020	0.215	0.024	0.246	0.024	0.205	0.034
22	1-Hidroxi-2-butanona	1.011	0.041	0.955	0.033	1.028	0.080	1.020	0.070
23	Ácido acético	13.538	1.273	12.609	0.847	18.563	2.027	12.979	1.058
24	Furfural	17.482	0.603	17.705	1.672	8.612	0.737	16.657	1.684
25	Furfurilformiato	0.404	0.037	0.350	0.026	0.311	0.029	0.345	0.034
26	1-(2-furanil)-etanona	0.600	0.130	0.537	0.059	0.510	0.023	0.507	0.036
27	acetato de 2-furanmetanol	0.595	0.054	0.561	0.076	0.868	0.106	0.547	0.063
28	Ácido propanoico	1.054	0.076	0.972	0.073	1.033	0.063	0.969	0.060
29	5-metil-2-furancarboxaldehido	1.438	0.033	1.467	0.075	1.440	0.167	1.413	0.092
30	Butirolactona	0.399	0.039	0.416	0.063	0.456	0.056	0.415	0.029
31	2-furanmetanol	7.425	0.344	7.087	0.571	7.856	0.701	7.213	0.553
32	Ácido pentanoico	0.666	0.060	0.657	0.171	0.470	0.065	0.649	0.103

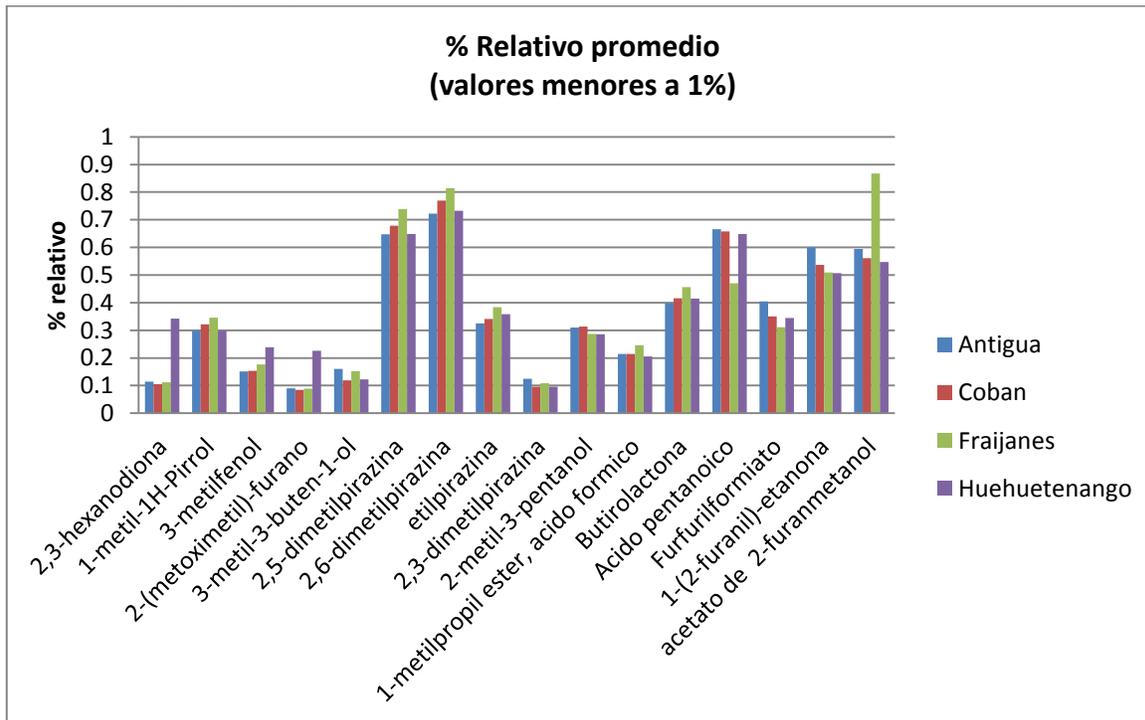
Los cálculos fueron realizados para el % relativo que es proporcional al área de los picos, y se calcula así:

$$\%relativo = ((\text{área de pico})/(\text{sumatoria de áreas})) \times 100.$$

Grafica 1: Porcentaje relativo de la presencia de cada componente en las cuatro regiones de estudio. Valores mayores a 1%.



Grafica 2: Porcentaje relativo de la presencia de cada componente en las cuatro regiones de estudio. Valores menores a 1%.



8.3 Análisis Estadísticos Multivariados.

8.3.1 Análisis de componentes principales (ACP)

Tabla 10: Variables utilizadas para el análisis de componentes principales convertidas a porcentaje relativo.

#	Variable	Observaciones	Min	Max	Media	Desviación estándar
1	Acetona	28	11.968	16.628	15.148	1.162
2	2-metilfurano	28	0.400	4.294	3.266	0.684
3	Metanol	28	0.905	15.884	8.299	2.098
4	2-metilbutanal	28	7.192	10.855	8.811	1.005
5	Etanol	28	0.129	4.255	0.876	0.808
6	2,3-butanodiona	28	0.127	5.924	4.659	0.948
7	2,3-hexanodiona	28	0.083	1.732	0.169	0.307
8	1-metil-1H-Pirrol	28	0.068	0.673	0.317	0.099
9	3-metilfenol	28	0.075	0.568	0.180	0.082
10	Piridina	28	0.083	2.544	1.624	0.607
11	1,3-diazina	28	0.044	4.902	0.712	0.879
12	2-(metoximetil)-furano	28	0.066	0.579	0.122	0.129
13	3-metil-3-buten-1-ol	28	0.072	0.231	0.139	0.036
14	3-Hidroxi-2-butanona	28	1.178	1.488	1.297	0.068
15	1-Hidroxi-2-propanona	28	7.425	11.246	9.017	0.930
16	2,5-dimetilpirazina	28	0.459	0.872	0.678	0.079
17	2,6-dimetilpirazina	28	0.554	0.948	0.759	0.084
18	etilpirazina	28	0.230	0.509	0.352	0.054
19	2,3-dimetilpirazina	28	0.045	0.263	0.106	0.037
20	2-metil-3-pentanol	28	0.264	0.469	0.299	0.042
21	1-metilpropil éster, ácido fórmico	28	0.164	0.272	0.220	0.029
22	1-Hidroxi-2-butanona	28	0.902	1.176	1.004	0.063
23	Ácido acético	28	11.383	21.121	14.422	2.779
24	Furfural	28	7.736	20.917	15.114	4.028
25	Furfurilformiato	28	0.260	0.476	0.353	0.045
26	1-(2-furanil)-etanona	28	0.449	0.885	0.538	0.080
27	acetato de 2-furanmetanol	28	0.443	1.015	0.643	0.152
28	Ácido propanoico	28	0.879	1.196	1.007	0.075
29	5-metil-2-furancarboxaldehido	28	1.088	1.597	1.439	0.100
30	Butirolactona	28	0.345	0.550	0.422	0.051
31	2-furanmetanol	28	6.033	9.114	7.395	0.604
32	Ácido pentanoico	28	0.383	0.991	0.610	0.132

Tabla 11: Valores propios, para análisis de componentes principales.

	F1	F2	F3	F4	F5	F6	F7	F8	F9	F10	F11	F12	F13	F14
Valor propio	7.34 0	5.29 2	3.59 3	2.98 1	2.32 9	2.06 5	1.67 1	1.20 3	1.06 1	0.94 2	0.70 7	0.66 7	0.52 7	0.50 5
Variabilidad (%)	22.9 38	16.5 36	11.2 29	9.31 7	7.27 7	6.45 2	5.22 2	3.75 9	3.31 7	2.94 2	2.20 8	2.08 4	1.64 6	1.57 8
% acumulado	22.9 38	39.4 74	50.7 04	60.0 20	67.2 98	73.7 50	78.9 73	82.7 31	86.0 48	88.9 91	91.1 99	93.2 83	94.9 29	96.5 07

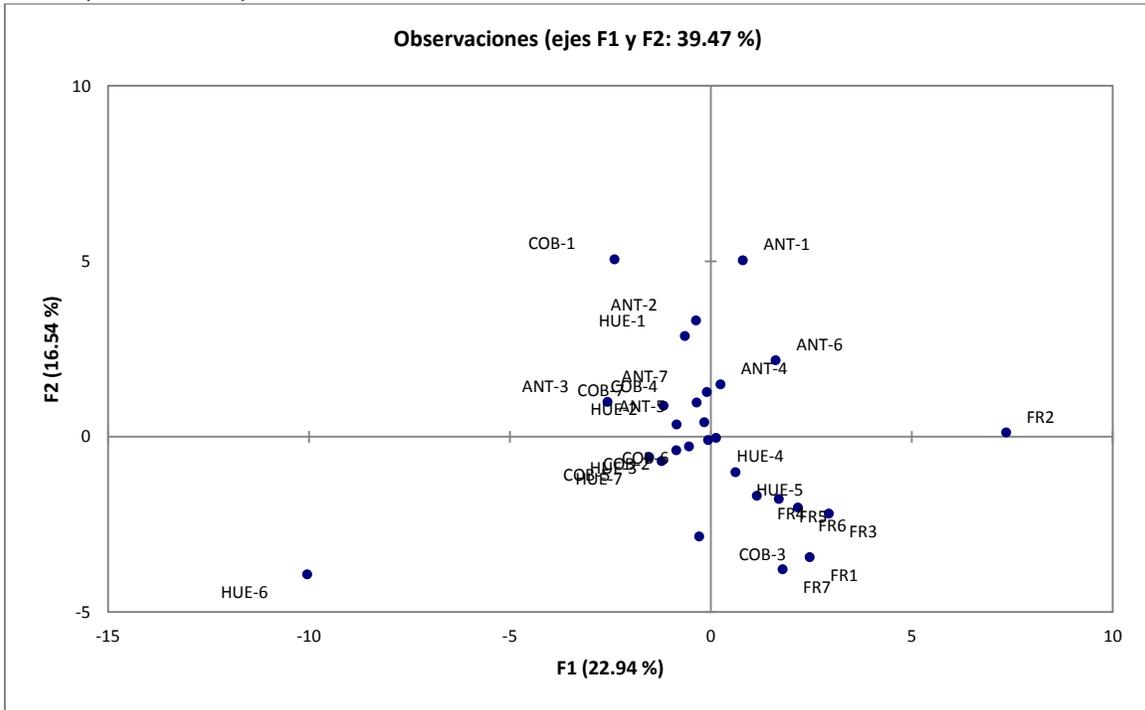
Continuación de la **Tabla 11.**

	F15	F16	F17	F18	F19	F20	F21	F22	F23	F24	F25	F26	F27
Valor propio	0.3 61	0.25 8	0.19 3	0.11 1	0.06 8	0.04 5	0.03 0	0.02 0	0.01 6	0.01 1	0.00 2	0.00 2	0.001
Variabilidad (%)	1.1 28	0.80 7	0.60 2	0.34 7	0.21 2	0.14 0	0.09 5	0.06 3	0.04 8	0.03 4	0.00 8	0.00 6	0.002
% acumulado	97. 636	98.4 43	99.0 45	99.3 92	99.6 04	99.7 44	99.8 38	99.9 02	99.9 50	99.9 84	99.9 92	99.9 98	100.0 00

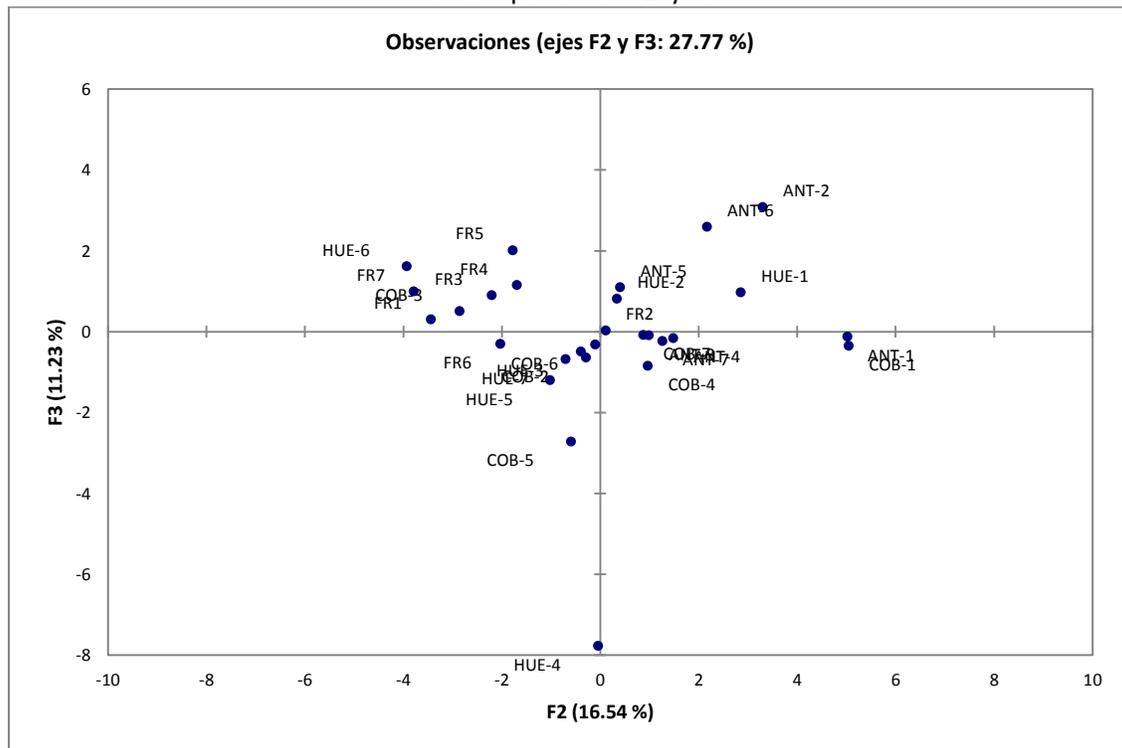
Tabla 12: Coordenadas de las observaciones para los componentes F1, F2 y F3

Observación	F1	F2	F3	Observación	F1	F2	F3
ANT-1	0.808	5.022	-0.126	HUE-1	-0.635	2.859	0.970
ANT-2	-0.358	3.305	3.077	HUE-2	-0.843	0.342	0.816
ANT-3	-2.565	0.986	-0.096	HUE-3	-0.852	-0.391	-0.493
ANT-4	0.248	1.485	-0.161	HUE-4	0.140	-0.044	-7.770
ANT-5	-0.156	0.406	1.097	HUE-5	0.623	-1.019	-1.205
ANT-6	1.624	2.169	2.591	HUE-6	-10.036	-3.929	1.614
ANT-7	-0.090	1.263	-0.236	HUE-7	-1.214	-0.699	-0.685
COB-1	-2.390	5.050	-0.350	FR1	2.472	-3.439	0.298
COB-2	-0.531	-0.287	-0.646	FR2	7.357	0.113	0.025
COB-3	-0.278	-2.855	0.505	FR3	2.946	-2.202	0.900
COB-4	-0.347	0.970	-0.845	FR4	1.151	-1.691	1.147
COB-5	-1.523	-0.593	-2.722	FR5	1.702	-1.777	2.011
COB-6	-0.062	-0.102	-0.320	FR6	2.179	-2.028	-0.303
COB-7	-1.167	0.875	-0.084	FR7	1.796	-3.788	0.991

Grafica 3: Análisis de componentes principales. Representación grafica de las coordenadas para los componentes F1 y F2.



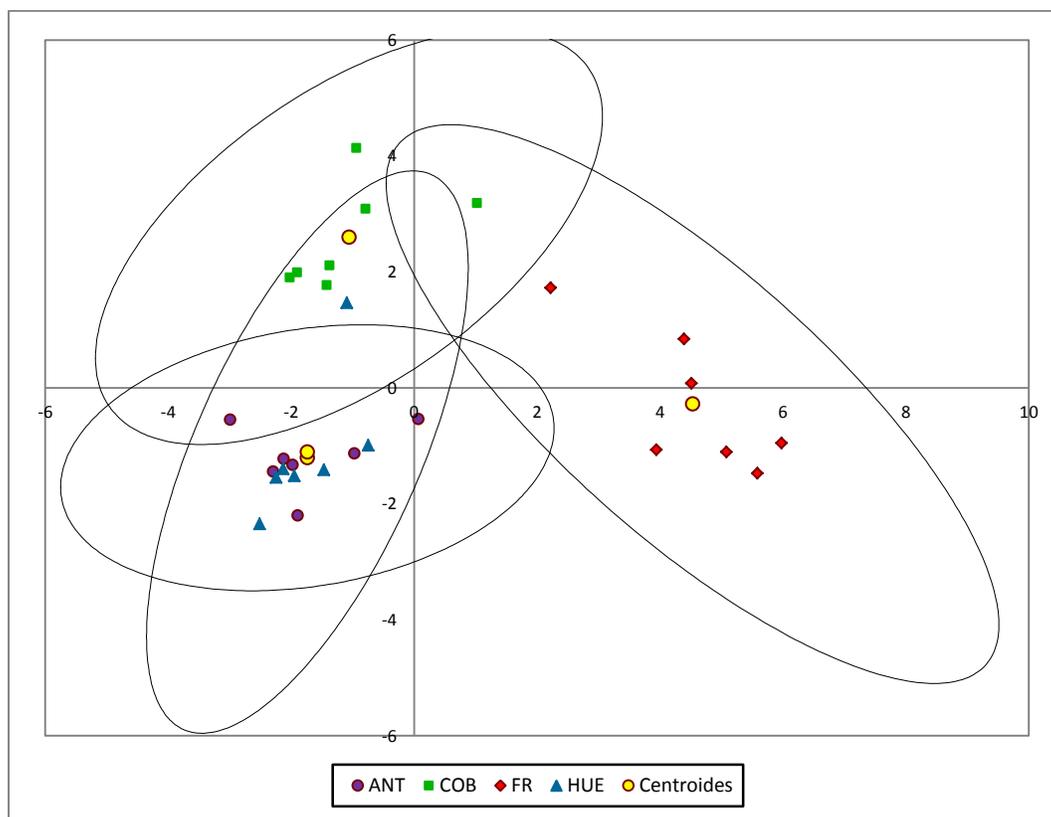
Grafica 4: Análisis de componentes principales. Representación grafica de las coordenadas para los componentes F2 y F3.



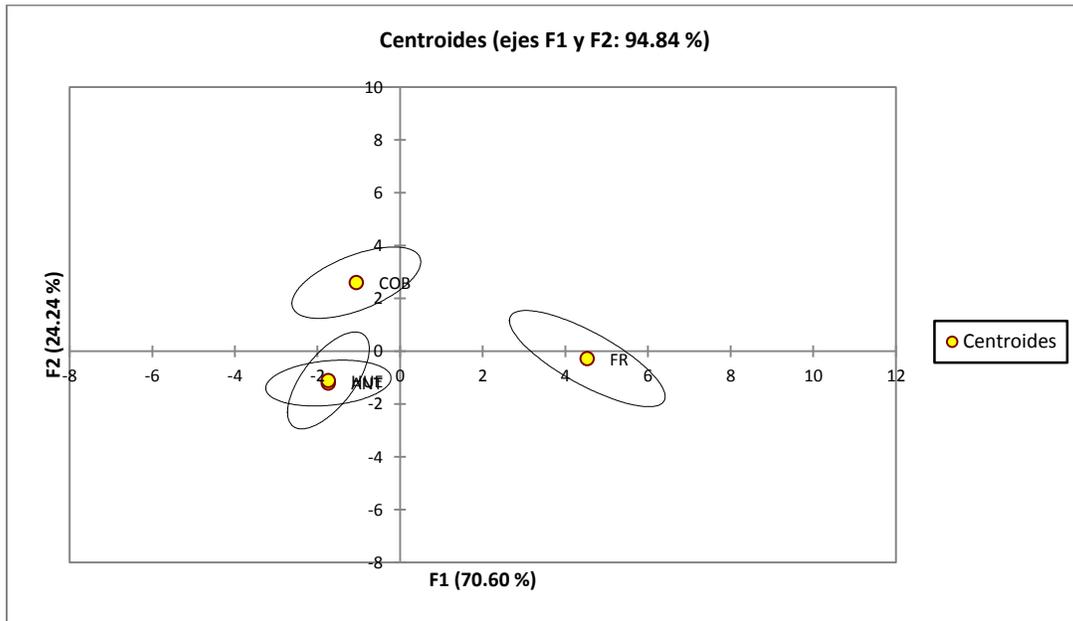
8.3.2 Análisis de discriminantes canónicos (AD).

Tabla 13: Variables utilizadas para el análisis discriminante.

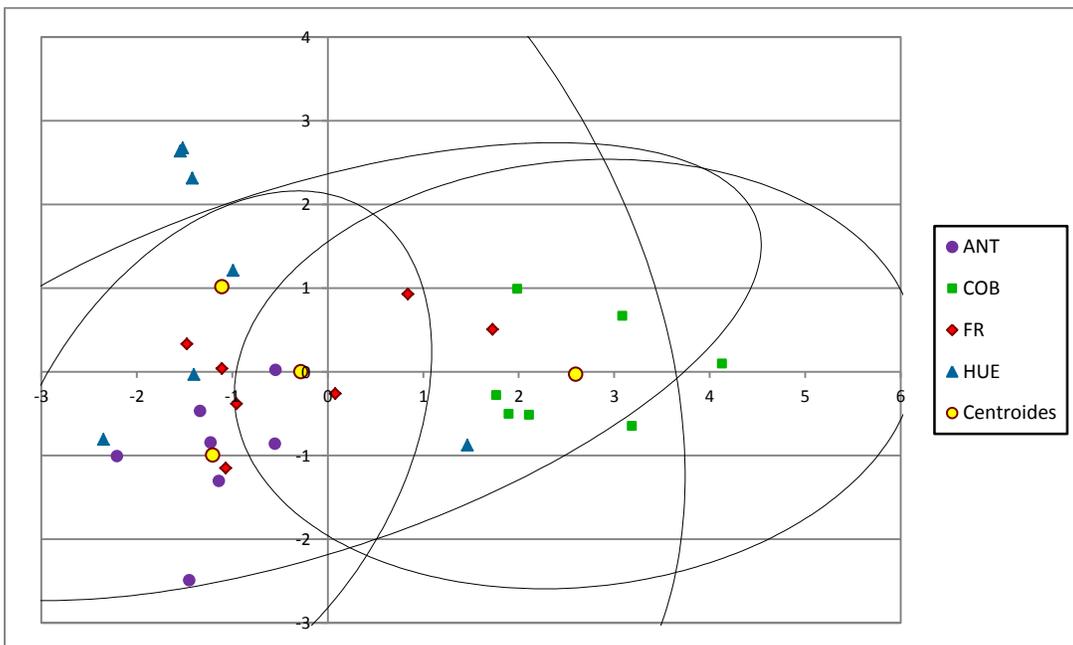
No.	Variable	Observaciones	Mínimo	Máximo	Media	Desviación típica
1	Acetona	28	11.968	16.628	15.148	1.162
2	Etanol	28	0.129	4.255	0.876	0.808
3	2,3-hexanodiona	28	0.083	1.732	0.169	0.307
4	3-metilfenol	28	0.075	0.568	0.180	0.082
5	Piridina	28	0.083	2.544	1.624	0.607
6	2-(metoximetil)-furano	28	0.066	0.579	0.122	0.129
7	3-Hidroxi-2-butanona	28	1.178	1.488	1.297	0.068
8	2,5-dimetilpirazina	28	0.459	0.872	0.678	0.079
9	2,6-dimetilpirazina	28	0.554	0.948	0.759	0.084
10	1-Hidroxi-2-butanona	28	0.902	1.176	1.004	0.063
11	acetato de 2-furanmetanol	28	0.443	1.015	0.643	0.152
12	2-furanmetanol	28	6.033	9.114	7.395	0.604

Grafica 5: representación grafica de las Funciones canónicas discriminantes.

Grafica 6: representación de los centroides de las funciones canónicas discriminantes.



Grafica 7: representación grafica de las funciones canónicas discriminates F2 y F3.



Grafica 8: representación de los centroides de las funciones canónicas discriminantes F2 y F3.

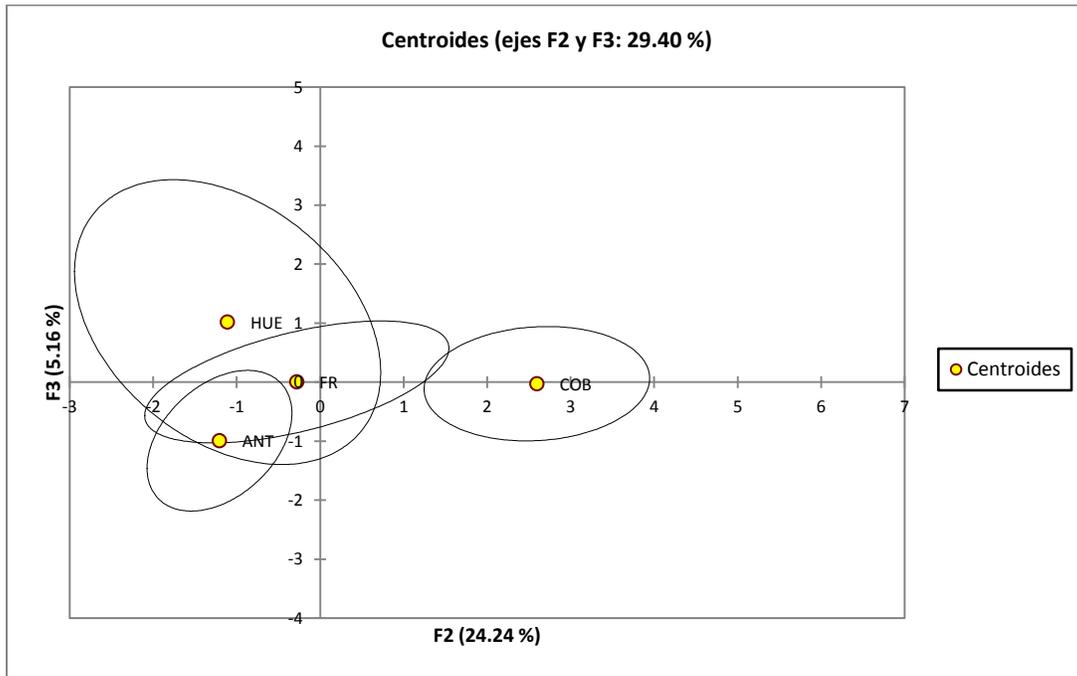


Tabla 14: Prueba significancia de Kullback para matrices de covarianza intraclase de las variables analizadas.

K (Valor observado)	948.557
K (Valor crítico)	270.684
GDL	234
p-valor	< 0.0001
alfa	0.05

Interpretación de la prueba:

H₀: Las matrices de covarianza intra-clase son iguales

H_a: Las matrices de covarianza intraclase son diferentes

Como el p-valor computado es menor que el nivel de significación alfa=0.05, se debe rechazar la hipótesis nula H₀, y aceptar la hipótesis alternativa H_a.

El riesgo de rechazar la hipótesis nula H₀ cuando es verdadera es menor que 0.01%.

Tabla 15: Valores propios:

	F1	F2	F3
Valor propio	8.073	2.771	0.590
Discriminación (%)	70.603	24.237	5.160
% acumulado	70.603	94.840	100.000

Tabla 16: Vectores medios:

	F1	F2	F3
Acetona	0.144	-0.365	0.027
Etanol	-0.048	-0.110	0.201
2,3-hexanodiona	-0.347	-0.271	-0.930
3-metilfenol	2.413	0.483	3.761
Piridina	-0.266	1.424	-0.315
2-(metoximetil)-furano	-1.440	5.738	-1.045
3-Hidroxi-2-butanona	-2.230	-0.998	-0.713
2,5-dimetilpirazina	1.609	4.495	-4.499
2,6-dimetilpirazina	-0.818	-3.423	5.293
1-Hidroxi-2-butanona	1.389	3.577	2.161
acetato de 2-furanmetanol	3.414	0.097	0.076
2-furanmetanol	-0.078	-0.294	-0.121

Tabla 17: Correlaciones canónicas:

F1	F2	F3
0.943	0.857	0.609

Tabla 18: Coeficientes de las funciones discriminantes canónicas:

	F1	F2	F3
Intersección	-12.247	-9.478	-8.986
Acetona	0.707	1.788	0.134
Etanol	-0.233	0.537	0.985
2,3-hexanodiona	-1.700	1.326	-4.555
3-metilfenol	11.819	-2.368	18.427
Piridina	-1.301	-6.978	-1.545
2-(metoximetil)-furano	-7.056	-28.109	-5.122
3-Hidroxi-2-butanona	-10.924	4.889	-3.492
2,5-dimetilpirazina	7.883	-22.020	-22.040
2,6-dimetilpirazina	-4.006	16.771	25.932
1-Hidroxi-2-butanona	6.804	-17.523	10.588
acetato de 2-furanmetanol	16.727	-0.473	0.371
2-furanmetanol	-0.383	1.442	-0.594

Tabla 19: Coeficientes estandarizados de las funciones discriminantes canónicas:

	F1	F2	F3
Acetona	0.761	1.926	0.144
Etanol	-0.184	0.424	0.777
2,3-hexanodiona	-0.521	0.407	-1.397
3-metilfenol	0.927	-0.186	1.445
Piridina	-0.729	-3.911	-0.866
2-(metoximetil)-furano	-0.852	-3.395	-0.619
3-Hidroxi-2-butanona	-0.754	0.337	-0.241
2,5-dimetilpirazina	0.583	-1.628	-1.629
2,6-dimetilpirazina	-0.323	1.351	2.090
1-Hidroxi-2-butanona	0.403	-1.038	0.627
acetato de 2-furanmetanol	1.293	-0.037	0.029
2-furanmetanol	-0.213	0.803	-0.331

Tabla 20: Funciones a los centroides:

	F1	F2	F3
ANT	-1.736	-1.207	-0.993
COB	-1.059	2.596	-0.027
FR	4.531	-0.280	0.003
HUE	-1.735	-1.109	1.018

Tabla 21: Prueba del Lambda de Wilks (aproximación de Rao)

Lambda	0.018
F (Valor observado)	3.118
F (Valor crítico)	1.717
GDL1	36
GDL2	39
p-valor	0.000
alfa	0.05

Interpretación de la prueba:

H0: Los vectores medios de las 4 clases son iguales.

Ha: Al menos uno de los vectores medios es diferente de otro.

Como el p-valor computado es menor que el nivel de significación $\alpha=0.05$, se debe rechazar la hipótesis nula H0, y aceptar la hipótesis alternativa Ha.

El riesgo de rechazar la hipótesis nula H0 cuando es verdadera es menor que 0.03%.

Tabla 22: Traza de Pillai

Traza	1.996
F (Valor observado)	2.484
F (Valor crítico)	1.678
GDL1	36
GDL2	45
p-valor	0.002
alfa	0.05

Interpretación de la prueba:

H0: Los vectores medios de los 4 clases son iguales.

Ha: Al menos uno de los vectores medios es diferente de otro.

Como el p-valor computado es menor que el nivel de significación $\alpha=0.05$, se debe rechazar la hipótesis nula H0, y aceptar la hipótesis alternativa Ha.

El riesgo de rechazar la hipótesis nula H0 cuando es verdadera es menor que 0.20%.

Tabla 23: Traza de Hotelling-Lawley:

Traza	11.435
F (Valor observado)	3.824
F (Valor crítico)	1.926
GDL1	36
GDL2	23
p-valor	0.001
alfa	0.05

Interpretación de la prueba:

H0: Los vectores medios de los 4 clases son iguales.

Ha: Al menos uno de los vectores medios es diferente de otro.

Como el p-valor computado es menor que el nivel de significación $\alpha=0.05$, se debe rechazar la hipótesis nula H0, y aceptar la hipótesis alternativa Ha.

El riesgo de rechazar la hipótesis nula H0 cuando es verdadera es menor que 0.06%.

Tabla 24: Raíz más grande de Roy

Raíz	8.073
F (Valor observado)	10.092
F (Valor crítico)	2.475
GDL1	12
GDL2	15
p-valor	< 0.0001
alfa	0.05

Interpretación de la prueba:

H0: Los vectores medios de los 4 clases son iguales.

Ha: Al menos uno de los vectores medios es diferente de otro.

Como el p-valor computado es menor que el nivel de significación $\alpha=0.05$, se debe rechazar la hipótesis nula H0, y aceptar la hipótesis alternativa Ha.

El riesgo de rechazar la hipótesis nula H0 cuando es verdadera es menor que 0.01%.

Tabla 25: Funciones de clasificación

	ANT	COB	FR	HUE
Intersección	-2622691436.383	-11591108879.254	-15040611292.086	-1790478359.483
Acetona	153619673.339	97601188.329	966578693.674	-2427133.485
Etanol	244663452.137	-681920157.922	796715482.966	67605351.852
2,3-hexanodiona	-13798557199.849	45434459051.999	25347814228.535	-15479229.469
3-metilfenol	277691708.205	7428858084.588	60730983981.983	185111188.064
Piridina	-353494602.606	-229415600.155	-1810932466.943	156162680.332
2-(metoximetil)-furan	9308341958.432	-3330754065.435	23783951503.051	489108723.179
3-Hidroxi-2-butanona	234178462.394	2485754035.751	433497263.003	2478357698.954
2,5-dimetilpirazina	1013169847.593	17514375175.185	45530176.773	-828652522.572
2,6-dimetilpirazina	2876357576.001	111784598.086	333325940.364	-119765688.913
1-Hidroxi-2-butanona	-771676184.712	3121979835.223	1359262845.604	1471668852.845
acetato de 2-furanmetanol	462028884.101	467847730.622	644844289.154	-799936006.488
2-furanmetanol	216471619.039	-219187565.910	-126383543.793	-62707238.645
Acetona*Acetona	-11785083.987	-4134338.810	-34955475.613	-2298438.504
Acetona*Etanol	50757178.299	-3198783.517	18682413.459	1323062.798
Acetona*2,3-hexanodiona	252965439.917	-121120385.704	-1009837913.133	857555.416
Acetona*3-metilfenol	166324504.338	290173532.302	490929672.973	3658600.139
Acetona*Piridina	25460502.908	6078643.590	50716331.196	3928352.399
Acetona*2-(metoximetil)-furan	-30861546.112	51521807.550	-911185187.989	16648175.899
Acetona*3-Hidroxi-2-butanona	36621848.224	-10489198.135	37779859.731	-41484689.770
Acetona*2,5-dimetilpirazina	-44078794.763	20545505.609	115587562.348	12252035.039
Acetona*2,6-dimetilpirazina	60992809.787	63852656.813	96192186.770	37077954.121
Acetona*1-Hidroxi-2-butanona	31378560.310	-86925195.724	15278045.298	-11747551.264
Acetona*acetato de 2-furanmetanol	36839408.463	-7331167.558	-137051557.688	27046913.018
Acetona*2-furanmetanol	-7849887.887	3046371.215	5251992.566	10223155.594
Etanol*Etanol	-301641644.538	-13873050.020	-42301463.334	-2655872.356

Continuación de la **tabla 25**

Etanol*2,3-hexanodiona	1452430774.552	1582109461.450	-747564188.836	6958729.250
Etanol*3-metilfenol	131407054.971	419636785.450	-4058910498.441	23250205.085
Etanol*Piridina	-40749238.751	-4588623.833	47774781.162	1130636.275
Etanol*2-(metoximetil)-furanó	-380144907.894	272196251.085	-111484058.269	-14052203.559
Etanol*3-Hidroxi-2-butanona	-431052266.917	27348345.554	70320717.694	-51690706.619
Etanol*2,5-dimetilpirazina	548133676.228	576622350.603	-187484535.593	30415530.777
Etanol*2,6-dimetilpirazina	-288051919.678	44493268.465	-187908544.847	-19042272.312
Etanol*1-Hidroxi-2-butanona	985524271.168	82485624.740	-132030819.688	4856697.425
Etanol*acetato de 2-furanmetanol	273289085.588	-60298049.269	33659610.598	-13457112.019
Etanol*2-furanmetanol	-184269696.180	-713257.194	-1245975.493	-3130463.169
2,3-hexanodiona*2,3-hexanodiona	-51391229026.603	-75715726773.553	-21869306366.397	-25165876.599
2,3-hexanodiona*3-metilfenol	5757533884.106	25117201566.163	-10046337012.123	72316852.911
2,3-hexanodiona*Piridina	-174898340.354	-32198327.693	753640250.986	-8132724.768
2,3-hexanodiona*2-(metoximetil)-furanó	7363235096.485	6870951522.569	-3924361957.787	3938006.530
2,3-hexanodiona*3-Hidroxi-2-butanona	1141385009.892	49061212.835	-281608003.142	17664121.710
2,3-hexanodiona*2,5-dimetilpirazina	5267213103.716	-27089877558.884	-3697156668.932	9247904.313
2,3-hexanodiona*2,6-dimetilpirazina	-70519854.913	-13151005876.419	-737236967.435	-31340719.237
2,3-hexanodiona*1-Hidroxi-2-butanona	-2589201613.537	-13612102969.443	-432608816.686	-46738961.845
2,3-hexanodiona*acetato de 2-furanmetanol	15202919296.499	7286176128.303	-3637522109.448	127688993.699
2,3-hexanodiona*2-furanmetanol	1108058269.069	520550355.094	547382529.496	-3542860.902
3-metilfenol*3-metilfenol	-3606927347.134	-44728933012.840	-163109327593.486	-412360028.936
3-metilfenol*Piridina	188797520.440	877211308.054	6266764417.552	-50256651.274
3-metilfenol*2-(metoximetil)-furanó	417952485.764	-15512398197.460	-52785178251.327	82104706.756
3-metilfenol*3-Hidroxi-2-butanona	-2762705253.981	5565460073.175	-3632060673.300	109362147.507
3-metilfenol*2,5-dimetilpirazina	-2879234710.099	-7324782233.131	-3744735434.736	110215108.719
3-metilfenol*2,6-dimetilpirazina	-451258246.124	123843042.976	-4981596209.427	-29100475.698
3-metilfenol*1-Hidroxi-2-butanona	245063866.136	-2335120092.590	-3646714842.173	-218132647.718

Continuación de la **tabla 25**

3-metilfenol* acetato de 2-furanmetanol	-839072257.770	-6514171513.543	8400260206.944	184398216.610
3-metilfenol* 2-furanmetanol	449525940.020	389160585.084	-830420311.974	-17285316.535
Piridina* Piridina	-53088265.027	-23840881.552	-150300741.070	-8707360.107
Piridina* 2-(metoximetil)-furan	-234103127.622	-10433693.658	504665093.766	-37862730.723
Piridina* 3-Hidroxi-2-butanona	238330357.126	6352835.217	235440806.875	-43923795.381
Piridina* 2,5-dimetilpirazina	-181147855.040	-11086619.361	-100764298.847	-11368111.963
Piridina* 2,6-dimetilpirazina	310250789.911	115779667.373	69043864.757	-10819821.236
Piridina* 1-Hidroxi-2-butanona	-61888286.818	-91272975.170	-363567388.605	-99543016.162
Piridina* acetato de 2-furanmetanol	-58053549.527	-20531518.336	70653612.118	23021578.093
Piridina* 2-furanmetanol	-15053700.679	12362712.234	43735126.571	-1320012.727
2-(metoximetil)-furan* 2-(metoximetil)-furan	-19340879513.392	-28643288581.846	-24448196647.566	-109490368.916
2-(metoximetil)-furan* 3-Hidroxi-2-butanona	2411986596.921	6894948877.328	756547467.571	-165699412.006
2-(metoximetil)-furan* 2,5-dimetilpirazina	-6652957313.484	-821299406.108	2279528512.003	-206624083.422
2-(metoximetil)-furan* 2,6-dimetilpirazina	-7152273136.947	9431267225.853	3439828314.047	78315151.917
2-(metoximetil)-furan* 1-Hidroxi-2-butanona	-4255849.211	-7487046663.208	-4674011162.776	-188900068.319
2-(metoximetil)-furan* acetato de 2-furanmetanol	3459546429.588	5133502681.897	3042408943.119	-220578116.606
2-(metoximetil)-furan* 2-furanmetanol	-177982527.233	-324430776.792	97268695.899	-4784871.638
3-Hidroxi-2-butanona* 3-Hidroxi-2-butanona	-1120619649.806	-1762852679.443	-1452228243.763	-1167014095.177
3-Hidroxi-2-butanona* 2,5-dimetilpirazina	-415470837.154	-3848932226.954	178267272.724	871349922.742
3-Hidroxi-2-butanona* 2,6-dimetilpirazina	111155747.114	1241543377.011	601522.145	645363146.179
3-Hidroxi-2-butanona* 1-Hidroxi-2-butanona	1806014091.087	3813043474.427	1045447919.732	-838720502.116
3-Hidroxi-2-butanona* acetato de 2-furanmetanol	840015884.328	-471596731.565	621382822.311	1097187515.707
3-Hidroxi-2-butanona* 2-furanmetanol	1518413.243	-150252992.060	135352229.142	67412730.583
2,5-dimetilpirazina* 2,5-dimetilpirazina	-2941198472.996	-8675109541.869	-1272009938.864	-581229359.307
2,5-dimetilpirazina* 2,6-dimetilpirazina	2191878016.326	3077486101.818	751840685.370	527148879.062
2,5-dimetilpirazina* 1-Hidroxi-2-butanona	885915095.481	438844148.750	225139520.109	129476145.101
2,5-dimetilpirazina* acetato de 2-furanmetanol	988966883.266	-799812818.035	69070828.760	-919169735.787

Continuación de la **tabla 25**.

2,5-dimetilpirazina*2-furanmetanol	175330182.933	31501648.559	7144499.540	35302659.304
2,6-dimetilpirazina*2,6-dimetilpirazina	-2709473297.290	-3358306638.795	-8672223037.939	-937239488.931
2,6-dimetilpirazina*1-Hidroxi-2-butanona	-1376348110.727	-153719799.683	-388045477.923	-213095316.539
2,6-dimetilpirazina*acetato de 2-furanmetanol	-360943622.044	845055861.169	-263183396.619	-583852899.154
2,6-dimetilpirazina*2-furanmetanol	71930090.402	64287280.851	33927145.804	48804649.202
1-Hidroxi-2-butanona*1-Hidroxi-2-butanona	-1805668765.751	-3649250841.442	-859439849.321	-566004874.368
1-Hidroxi-2-butanona*acetato de 2-furanmetanol	-2149146827.843	142138103.423	360730365.198	95479163.599
1-Hidroxi-2-butanona*2-furanmetanol	393808168.120	357798516.900	72883496.825	164129798.037
acetato de 2-furanmetanol*acetato de 2-furanmetanol	-2409307500.033	-1116250584.365	-519884540.563	-927270852.641
acetato de 2-furanmetanol*2-furanmetanol	71306377.954	158292109.826	-7978195.504	122481750.763
2-furanmetanol*2-furanmetanol	-48934197.695	-16966905.040	-15500930.430	-31532164.295

Tabla 26: Clasificación a priori y a posteriori, probabilidades de pertenencia, coordenadas de las observaciones y cuadrados de las distancias:

Obs	A priori	A posteriori	Pr(ANT)	Pr(COB)	Pr(FR)	Pr(HUE)	F1	F2	F3	D ² (ANT)	D ² (COB)	D ² (FR)	D ² (HUE)
Obs1	ANT	ANT	1.000	0.000	0.000	0.000	-2.288	-1.448	-2.490	-134.439	590051238.020	3005401549.760	29761806.048
Obs2	ANT	ANT	1.000	0.000	0.000	0.000	-0.967	-1.137	-1.305	-134.439	430481342.266	344040326.910	22131956.403
Obs3	ANT	ANT	1.000	0.000	0.000	0.000	-2.990	-0.550	-0.860	-134.439	203204994.159	536592309.494	10994775.151
Obs4	ANT	ANT	1.000	0.000	0.000	0.000	-2.120	-1.227	-0.846	-134.439	29599477.147	616564044.594	22877924.534
Obs5	ANT	ANT	1.000	0.000	0.000	0.000	0.072	-0.544	0.023	-134.439	102162082.203	114449922.386	11532896.739
Obs6	ANT	ANT	1.000	0.000	0.000	0.000	-1.890	-2.207	-1.008	-134.439	96896829.860	282445783.433	65339424.989
Obs7	ANT	ANT	1.000	0.000	0.000	0.000	-1.971	-1.335	-0.469	-134.439	28938491.523	569856945.717	7036811.225
Obs8	COB	COB	0.000	1.000	0.000	0.000	-0.940	4.132	0.096	557792949.621	-123.172	986480514.397	110096359.462
Obs9	COB	COB	0.000	1.000	0.000	0.000	-1.900	1.986	0.990	413803548.802	-123.172	144902856.820	5193498.914
Obs10	COB	COB	0.000	1.000	0.000	0.000	1.027	3.186	-0.647	179565210.992	-123.172	177687671.064	107145846.866

Continuación de la tabla 26.

Obs11	COB	COB	0.000	1.000	0.000	0.000	0.000	-1.421	1.767	-0.278	67498968.266	-123.172	364471762.385	14468736.602
Obs12	COB	COB	0.000	1.000	0.000	0.000	0.000	-1.375	2.112	-0.513	163337648.137	-123.172	344463461.354	58784638.863
Obs13	COB	COB	0.000	1.000	0.000	0.000	0.000	-0.787	3.089	0.665	211667984.853	-123.172	262629791.317	29582935.274
Obs14	COB	COB	0.000	1.000	0.000	0.000	0.000	-2.020	1.898	-0.502	172628736.773	-123.172	309525732.665	15771671.280
Obs15	HUE	HUE	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	-2.132	-1.401	-0.033	87266662.656	61789894.975	648395676.819	-112.481
Obs16	HUE	HUE	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	-2.515	-2.351	-0.806	66636293.068	68852243.937	462527907.849	-112.481
Obs17	HUE	HUE	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	-1.468	-1.417	2.315	1657592814.932	710527278.587	2739814823.482	-112.481
Obs18	HUE	HUE	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	-2.245	-1.546	2.637	12226214272.804	17644903036.202	24614434330.16	-112.481
Obs19	HUE	HUE	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	-1.091	1.464	-0.876	221810070.462	170150036.642	171718865.149	-112.481
Obs20	HUE	HUE	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	-1.951	-1.517	2.676	256113757676.712	344562498797.697	237566125933.0	-112.481
Obs21	HUE	HUE	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	-0.746	-0.993	1.210	210166228.889	497789993.927	479512184.318	-112.481
Obs22	FR	FR	0.000	0.000	1.000	0.000	0.000	5.980	-0.955	-0.384	1276446086.45	711431093.698	-131.127	572589672.191
Obs23	FR	FR	0.000	0.000	1.000	0.000	0.000	5.584	-1.476	0.332	1268249327.82	1105682716.449	-131.127	268901879.212
Obs24	FR	FR	0.000	0.000	1.000	0.000	0.000	4.513	0.078	-0.262	649386456.127	348785570.531	-131.127	172611309.771
Obs25	FR	FR	0.000	0.000	1.000	0.000	0.000	5.082	-1.108	0.042	594937370.686	447958204.001	-131.127	232968773.321
Obs26	FR	FR	0.000	0.000	1.000	0.000	0.000	3.943	-1.067	-1.148	499852399.248	270578496.983	-131.127	93404531.005
Obs27	FR	FR	0.000	0.000	1.000	0.000	0.000	4.392	0.840	0.930	384571724.726	282713317.066	-131.127	244789233.859
Obs28	FR	FR	0.000	0.000	1.000	0.000	0.000	2.224	1.727	0.509	125612055.571	169917010.082	-131.127	83760596.534

9. DISCUSIÓN

Para determinar las condiciones que se utilizarían para separar los compuestos químicos del aroma del café se procedió a realizar distintas pruebas, tomando como guía la investigación realizada en España, Saenz et al, en la que se optimizaron las condiciones para el análisis por Headspace aplicado a muestras de café comercial(Saenz, 2001). Al obtener el cromatograma se analizó visualmente en cuál se obtenía un menor traslape de los picos, así como una base angosta, ya que esto indica una correcta separación. Las condiciones reportadas en la sección 8.1 fueron las que dieron mejores resultados.

El anexo 12) muestra un cromatograma del blanco realizado con un vial vacío de Heaspace bajo las mismas condiciones de análisis. Como puede observarse, en la región con tiempo de retención (RT) entre 10 y 11 minutos aparece un pico interferente que podría enmascarar picos que se encuentra debajo de él, este pico también se observa en todos los cromatogramas, este pico fue omitido del análisis e integración de resultados.

Debido a la complejidad de aroma del café y tal como se ha reportado en diversas investigaciones el aroma del café presenta más de 600 compuestos distintos.(Tressl, 1989; Parliment y Stahl, 1995; Bonnländer y Eggers, 2005). Los cromatogramas obtenidos muestran gran cantidad de picos de distintos tamaños, correspondientes a la presencia de sustancias diferentes, sin embargo algunos de ellos se encuentran en proporciones tan pequeñas que la integración e identificación de los mismos se realiza con una incerteza mayor. Por lo anterior solamente se tomaron en cuenta, para la integración e identificación, aquellos picos que resultaron más definidos y que se pueden distinguir claramente en todos los cromatogramas de las muestras analizadas. En el anexo 2 se incluyen los 28 cromatogramas obtenidos bajo las mismas condiciones y de donde se extrajo la información útil para cumplir los objetivos de esta investigación.

Las tablas 4, 5 6 y 7, muestran el área debajo de cada pico, para 32 picos comunes, esto constituye la “huella digital” cromatográfica y se muestra para cada una de las 7 muestras de las cuatro regiones de estudio. Estos 32 compuestos se tomaron en cuenta para realizar los análisis estadísticos pertinentes. Estos compuestos fueron identificados gracias a comparación de los espectros de masas obtenidos, con la biblioteca NIST02 del espectrómetro de masas utilizado. El equipo reporta 3 opciones de identificación para cada pico con un criterio de certeza expresado porcentualmente. Mientras más alto es el porcentaje, mayor es la probabilidad de que se trate del compuesto identificado. Este procedimiento permitió, la identificación certera de los 32 picos, aunque, debido a la presencia de compuestos de estructuras químicas similares o isómeros, algunos compuestos presentan mayor incerteza para su identificación. Tal es el caso del pico con tiempo de retención aproximado de 17.6 minutos que se reportó en el informe como 1, 3-Diazina, pero que el equipo reporta con la misma probabilidad 91% indicando que puede ser Pirazina, al ser estos compuestos isómeros, en los que únicamente la cambia la posición de los sustituyentes nitrógeno en un anillo aromático de seis. Existe la posibilidad de que ambos isómeros estén presentes en la fracción volátil del café, sin embargo, no es posible separarlos con la técnica empleada. Igual caso se encontró para el compuesto con tiempo de retención 38.1 minutos, en que el equipo reporta con igual probabilidad la presencia de ácido pentanoico o ácido 3-metilbutanoico, en este informe se identifica como ácido pentanoico.

La tabla 8, muestra la clasificación de los compuestos según el grupo funcional al que pertenecen. En esta tabla, se clasificaron 39 compuestos identificados con certeza. Sin embargo para los análisis estadísticos se utilizaron únicamente 32 debido a que en algunos cromatogramas no se realizó una clara distinción para los otros 7 picos de los compuestos, sin embargo, se incluyen ya que son compuestos que también se han identificado en otros análisis de volátiles en el café. Como se puede observar se identificaron 9 cetonas, 6 alcoholes, 5 aldehídos, 5 pirazinas, 4 ácidos carboxílicos, 3 furanos, 3 ésteres, 1 pirrol, 1 fenol, 1 piridina, 1 diazina y 1 lactona.

La tabla 9 muestra los valores promedios obtenidos para cada compuesto, agrupando a las muestras de café por regiones. Además se incluye la desviación estándar. Con esta información se realizaron las gráficas 1 y 2, que muestran las diferentes proporciones promedio de los compuestos de cada región. La grafica 1 muestra a los 16 compuestos que se encuentran en mayor proporción (porcentaje relativo mayor al 1%), y los compuestos de menor proporción (porcentaje relativo menor al 1%). A primera vista no existen grandes diferencias en los porcentajes relativos de cada compuesto (el porcentaje relativo es directamente proporcional a la concentración de cada compuesto, puesto que se inyecta el mismo volumen de muestra) de las cuatro distintas regiones analizadas. De los 32 compuestos analizados solamente 8 representan la mayoría del porcentaje relativo (acetona, ácido acético, metanol, 2-metilbutanona, 1-hidroxi-2-propanona, furfural y 2-furanmetanol). El resto se encuentran en menor proporción, lo que no indica que sean menos importantes para el aroma del café, ya que la presencia de pequeñas cantidades de una sustancia puede influir más en el aroma que otras que se encuentren en mayor cantidad (*Dark y Nursten, 1985*).

Realizar una diferenciación basado en criterios de concentración y mediciones estadísticas univariadas resulta poco fiable y difícil de interpretar para tomar decisiones. Ya que cada grupo (región de cultivo) presenta 32 variables. Por lo que habría que realizar muchos análisis para evaluar la normalidad la población respecto a cada compuesto y luego decidir la prueba, paramétrica o no paramétrica, adecuada, ya que dentro de cada región pueden o no existir diferencias significativas para cada uno de los 32 compuestos.

Varios estudios similares han mostrado la eficacia de emplear métodos de estadística multivariada para la caracterización de compuestos volátiles en diversas matrices de productos vegetales y alimentos (Murota,1992; Zambonin, 2005, Esteban-Díez,2004; Martín, 2001).

Por esta razón se utilizaron herramientas de estadística multivariada, ya que estas han sido desarrolladas para estudiar el comportamiento de tres variables o más al mismo tiempo. Estas técnicas multivariantes resultan adecuadas para conjuntos extensos de variables en donde se desconoce cuál o cuáles variables diferencian más a una población de otra. Primero, se realizó un análisis de componentes principales (ACP) que procura determinar un sistema más pequeño de variables que sinteticen el sistema original, descartando variables que resultan correlacionadas y resultan redundantes para distinguir a las poblaciones. Otro de los objetivos del CPA es identificar posibles agrupamientos no sospechados, ya que no toma en cuenta poblaciones preestablecidas (los datos no son segmentados por región de cultivo) (Santos, 1996; Polo, 2002).

La tabla 10 muestra un análisis estadístico tomando como variable únicamente la identidad del compuesto, con lo que se obtiene un total de 28 observaciones (7 de cada una de las cuatro regiones). Con esta información se realizó un ACP utilizando el programa XLstat para Windows, que establece matrices y cálculos permiten encontrar los componentes principales. Como se muestra en la tabla 11, las 32 variables originales (compuestos químicos) fueron reducidas a 27 valores propios, que permiten distinguir mejor a las poblaciones. Los primeros tres valores propios representan el 50.7 % de la variabilidad del sistema y son los que se utilizaron para representar gráficamente el ACP (gráficas 3 y 4). En la gráfica 3 se puede observar la representación de los puntos en sistema de coordenadas cartesianas. La cercanía de los puntos indica que no existe una gran diferencia entre los grupos, ya que se evidencia un único agrupamiento al centro del plano bidimensional, sin embargo puede observarse que todas las muestras de Antigua están distribuidas en una dirección positiva respecto del componente F2(eje y), lo que indica que comparten características propias y distintivas. Las muestras de la región Fraijanes también muestran una clara separación ya que se ubican en el cuadrante inferior derecho, dirección positiva para F1 y negativa para F2.

El café de Cobán se ubica en el centro de la distribución y es que presenta más diversidad intragrupo, ya que la muestra COB-1 y COB-3 se encuentran muy alejados de la distribución, lo que indica que son muy diferentes entre sí.

Además, la gráfica 3 da cuenta de cierta separación de las muestras de Huehuetenango ya que cinco de las siete se ubican en la dirección negativa del componente F2. De las muestras de Huehuetenango, la muestra HUE-6, se ubica bastante separada del grupo central, lo que indica que posee características muy particulares que lo diferencian del resto. Es importante destacar que el café, proviene de la finca El injerto, que ha obtenido diversos reconocimientos y durante varios años a sido seleccionado como uno de los mejores a nivel mundial, y este año fue alcanzó el mejor precio para un café de Guatemala en la subasta internacional.

La grafica 4, es la representación de los puntos para F2 y F3, donde también se puede observar con cierta claridad la separación de las muestras de la región Antigua en el cuadrante superior derecho. Se observa nuevamente la tendencia negativa en el componente F2 para las muestras de Huehuetenango. Además se observa otro café de Huehuetenango (HUE-4) que posee características distintivas del resto de la población.

La tabla 13, muestra las variables que se utilizaron para realizar un análisis de discriminantes canónico. Las variables empleadas para este análisis, fueron seleccionadas a partir de la información obtenida en el análisis de componentes principales, siendo estas las que aportan mayor variabilidad. El análisis discriminante AD (también conocido como análisis factorial discriminante, AFD) es un método que puede generar una función discriminante que puede ser utilizada para distinguir entre dos o más grupos, y de este modo tomar decisiones. Es decir puede modelizar la pertenencia a un grupo de individuos en función de valores generados por varias variables, y además de predecir el grupo más probable para un individuo, conociendo únicamente los valores de las variables que le caracterizan. (Santos, 1996; Polo, 2002). Para realizar este análisis también se utilizó el programa Xlstat para Windows. Este método estadístico genera matrices de covarianza intraclase con las variables analizadas y genera funciones y vectores que pueden representarse en espacios bi y tridimensionales.

La grafica 5 muestra las funciones discriminantes generadas para el café de cuatro regiones de Guatemala. F1 (eje x) y F2 (eje y). Se puede observar claramente que tomando en cuenta 12 variables se puede distinguir con claridad a las distintas poblaciones de café. Es evidente la diferencia que muestra la población de Fraijanes (marcador: cuadros verdes) con tendencia positiva en F1. Además se puede diferenciar al grupo de muestras de Cobán, con tendencia negativa en F1 y positiva en F2. Las poblaciones de Antigua y Huehuetenango son las que, en esta representación y tomando en cuenta 12 variables, muestran más similitud. Sin embargo como lo comprueba con las funciones de clasificación, este análisis logra distinguir y clasificar bien a las muestras en la región correcta (Tablas 25 y 26). La grafica 6 muestra con mayor claridad la diferencia de los grupos ya que toma en cuenta solamente el centroide de las funciones discriminantes canónicas.

La grafica 7 muestra la representación de las funciones canónicas F2(eje x) y F3(eje y), donde se puede observar nuevamente una clara diferenciación para las muestras de café de Cobán. En ese gráfico también se puede observar una mejor agrupación de las muestras de Antigua y su diferencia respecto del grupo de Huehuetenango, que no se podía distinguir claramente en grafico 6 de las funciones F1 y F2. El grafico 8 también muestra una simplificación, al representar solamente los centroides de las funciones discriminantes.

La tabla 14, muestra la Prueba significancia de Kullback, donde se evidencia que las matrices de covarianza intraclase de las variables son diferentes con significancia estadística. Además para comprobar la validez de las afirmaciones que muestran las gráficas, se realizan varias pruebas para confirmar que los vectores medios (tabla 17) son estadísticamente diferentes, como se evidencia con la pruebas: del Lambda de Wilks(tabla 21), Traza de Pillai (tabla 22), Traza de Hotelling-Lawley (tabla 23), y la Raiz más grande de Roy (tabla 24) donde se rechaza la hipótesis nula(H_0 = los vectores medios de

los cuatro grupos son iguales) y se acepta la hipótesis alterna(H_a = Al menos uno de los vectores medios es diferente de otro.)

La tabla 25, muestra las funciones de clasificación que son útiles para asignar a un grupo una muestra desconocida. En la tabla 26 se muestran el empleo de las funciones de clasificación donde las mismas muestras son asignadas a su grupo utilizando las funciones. Esta clasificación muestra que todas las muestras fueron asignadas correctamente a su grupo (región).

Es necesario continuar las investigaciones, ya que el proceso de producción del café desde la siembra a la taza, es sumamente complejo e incluye gran cantidad de variables que es preciso controlar para futuras investigaciones. Una de las variables que es preciso controlar es respecto a las variedades genéticas de las que proceden los granos, ya que en la presente investigación no se logró definir con certeza la variedad de cada muestra (anexo x). Continuar con investigaciones enfocadas a los compuestos volátiles, permitiría evaluar e implementar nuevos controles de calidad, ya que se pueden realizar en las distintas etapas de producción para evaluar o corregir aspectos que permitan potencializar las cualidades de cada café.

Como se ha indicado en otras investigaciones (*Dark y Nursten, 1985*), las diferencias encontradas entre las muestras de las distintas regiones, muestran que las condiciones de cultivo de cada región, como el clima, tipo de suelo, altura, son los factores que generan cambios en la proporción de los compuestos químicos volátiles, responsables del aroma del café. Esta información sumada a las investigaciones morfológicas de la planta y de los granos, y las condiciones de cultivo, y los perfiles de taza, permiten distinguir con más precisión y objetividad, las cualidades de los cafés de Guatemala, y contribuir a lograr los registros de denominación de origen.

10. CONCLUSIONES

- a. Aplicando técnicas de estadística multivariada (Análisis de componentes principales y análisis de discriminantes canónicos), a los resultados obtenidos por un análisis con Headspace y cromatografía de gases acoplada a espectrometría de masas, se logró caracterizar el café tostado de cuatro regiones de cultivo de Guatemala: Antigua, Cobán, Fraijanes, y Huehuetenango.
- b. Mediante el empleo de la técnica de headspace y cromatografía de gases fue posible separar los compuestos volátiles que constituyen el aroma del café tostado.
- c. Se logró la identificación de 39 compuestos químicos, constituyentes del aroma del café tostado, por comparación de los patrones de fragmentación obtenidos por el detector de espectrometría de masas contra la biblioteca NIST 02.
- d. Se clasificaron los componentes químicos identificados, encontrándose: 9 cetonas, 6 alcoholes, 5 aldehídos, 5 pirazinas, 4 ácidos carboxílicos, 3 furanos, 3 ésteres, 1 pirrol, 1 fenol, 1 piridina, 1 diazina y 1 lactona.
- e. El análisis de componentes principales aplicado a los datos de % relativo de cada componente, permitió diferenciar a los cafés de Antigua y Huehuetenango. Además permitió elegir 12 variables que contribuye a diferenciar mejor el café de las distintas regiones al aplicar un análisis discriminante canónico.

- f. El análisis de componentes principales reveló que el café de la finca El Injerto, jurisdicción de Huehuetenango, es muy particular y claramente distinguible de los otros.

- g. El análisis discriminante canónico muestra claramente que el café de las regiones Fraijanes y Cobán constituyen grupos distintos de los demás. Mientras que el café de Antigua y Huehuetenango comparten más similitud respecto a su aroma.

- h. Se obtuvo una “huella digital” cromatográfica para 7 muestras de café tostado de cuatro regiones de cultivo.

11. RECOMENDACIONES

- a. Continuar con las investigaciones de compuestos volátiles presentes en el café, incluyendo muestras de las ocho regiones de cultivo identificadas en Guatemala.
- b. Desarrollar y validar una metodología que permita cuantificar algunos compuestos volátiles en el aroma del café tostado y molido.
- c. Realizar un muestreo que priorice la selección por variedad genética del cafeto, para identificar similitudes o diferencias exactas aportadas por los diferentes medios de cultivo.
- d. Realizar el análisis de volátiles en el grano de café verde y tostado para analizar la presencia de compuestos, e identificar las variaciones exactas ocurridas en la etapa de tueste.
- e. Realizar el análisis de compuestos volátiles de manera anual, para evaluar si existen diferencias significativas entre los cafés de distintas cosechas.

12. REFERENCIAS.

1. ANACAFE. (1995). *Hombres de Café*. Asociación Nacional del Café. Guatemala.
2. ANACAFE (1991). *Manual de caficultura Guatemala*. Guatemala.
3. ANACAFÉ. (2010). *Memoria de Labores 2010*. ANACAFÉ. Guatemala.
4. ANACAFÉ. 2008. *Libro verde, cafés de Guatemala*. ANACAFÉ. Folleto. Cordinador: W. Hempstead. Guatemala.
5. ANACAFÉ. Portal Electrónico: <http://portal.anacafe.org/portal/Home.aspx?secid=5>
6. Baltes, W. y Bochmann, G. (1987). *Model Reactions on Roast Aroma Formation. 1. Reaction of Serine and Threonine with Sucrose under the Conditions of Coffee Roasting and Identification of New Coffee Aroma Compounds*. J. Agr. Food Chem. 35: 340-346.
7. Bicchi, C. P.; Panero, O. M.; Pellegrino, G. M. y Vanni, A. C. (1997). Characterization of Roasted Coffee and Coffee Beverages by Solid Phase Microextraction – Gas Chromatography and Principal Component Analysis. J. Agr. Food Chem. 45: 4680-4686.
8. Bonnländer, B. y Eggers, R. (2005). Roasting. En: *Espresso Coffee The Science of Quality*, 2da ed.; Illy, A., Viani, R., Eds.; Elsevier Academic Press: California, U.S.A. pp. 179 - 214.
9. Cafés de Guatemala.(2012) Portal electrónico: <http://www.guatemalancoffees.com/>

10. Czerny, M. y Mayer, F. (1999). *Sensory study on the character impact odorants of roasted Arabica coffee*. J. Agr. Food Chem. 47: 695-699.
11. Czerny, M. y Grosh W. (2000). *Potent Odorants of Raw Arabica Coffee. Their Changes during Roasting*. J. Agr. Food Chem. 48: 868-872.
12. Dark, S. K. y Nursten, H.E. (1985). *Volatile Components*. En: *Coffee Chemistry*; Clarke, R. J., Macrae, R., Eds.; Elsevier Applied Science Publishers: New York, U.S.A, Vol. 1, pp. 223-265.
13. Esteban-Díez I., Gonzáles-Saiz, J. Pizarro, C. (2004). *An evaluation of ortogonal signal correction methods for the characterisation of Arabica an Robusta coffee varieties by NIRS*. Analytica Chimica Acta, 514, 57-67.
14. Feldman, J. R., Ryder, W. S. y KUNG, J.T. (1969). *Importance of nonvolatile compounds for the flavor of coffee*. J. Agr. Food Chem. 17: 733-739.
15. Friedel, P., Krampfl, V. (1971). *Some Constituents of the Aroma Complex of Coffee*. J. Agr. Food Chem. 19(3): 530-532.
16. Gautschi, F., Winter, M., Flament, Y., Willhalm, B. y Stoll, M. (1967). *New Developments in Coffee Aroma Research*. J. Agr. Food Chem. 15(1): 15-23.
17. Holsher, W.; Vitzthum, O. G.; Steinhart, H.(1992). *Prenyl Alcohol-Source for Odorants in Roasted Coffee*. J. Agr. Food Chem. 40: 655-658.
18. Illy, A. y Viani, R. (1995). *Espresso Coffee. The Chemistry of Quality*. 1ra ed. Academic Press. Londres.

19. Kolb B, Ettre L. (2006). *Static Headspace-Gas Chromatography Theory and Practice*. 2nd ed. Wiley Interscience. USA,
20. Kott, L. y Ming H. (2010). *Consideraciones experimentales en la cromatografía de gases con headspace*. J. Pharmaceutical Technology. Vol8 N.3.
21. Martin M, Pablos F, Gonzales G. (2001). *Fatty acid profiles as discriminant parameters for coffee varieties differentiation*. J Talanta 54(2001) 291-297.
22. Mayer, F.; Czerny, M. y Grosch, W. (1999). *Influence of provenance and roast degree on the composition of potent odorants in Arabica coffees*. Eur Food Res Technol. 209: 242-250.
23. Mayer, F.; Czerny, M. y Grosch, W. (2000). *Sensory Study of The Character Impact Aroma Compounds of a Coffee Beverage*. Eur Food Res Technol. 211: 272-276.
24. Murota, A. (1993). *Canonical Discriminant Analysis Applied to the Headspace GC Profiles of Coffee Cultivars*. Biosci. Biotechnol. Biochem. 57:1043–1048 (1993).
25. Parliment, T. H. y Stahl, H.D. (1995). *What Makes that Coffee Smell So Good?*. Chem. Technol. 8: 38-47.
26. Polo, C. (2002) *Estadística Multivariable*. Ediciones UPC, S.L. 3ª ed.
27. Rhoades, J. W. (1960). *Analysis of the Volatile Constituents of Coffee*. J. Agr. Food Chem 8(2): 136-140.
28. Saez C, Ansorena D, Bello J, Cid C (2001) *Optimizing Headspace Temperature and Time Sampling for Identification of Volatile Compounds in Ground Roasted Arabica Coffee*. J Agr Food Chem 49:1364-1369.

29. Santos, V.(1996). *Métodos Multivariantes en bioestadística*. Ed. Centro de Estudios Ramón Areces. Madrid.
30. Skoog, D. A. y Leary, J. J. 1994. *Análisis Instrumental*. 4ta ed.; Mc Graw Hill Interamericana de España S.A. Madrid, España.
31. Tressel, R. (1989). *Formation of Flavor Components in Roasted Coffee*. En: *Thermal Generation of Aromas*; Parliment, T., McGorin, R., Ho, C. Eds.; ACS Symposium Series 409; American Chemical Society: Washington, DC, U.S.A. pp. 285-301.
32. Vitzthum, O. G. y Werkhoff, P. (1974). *Oxazoles and Thiazoles in Coffee Aroma*. *J. Food Sci.* 39: 1210-1215.
33. Wagner, R. (2001). *Historia del café de Guatemala*. Editorial Villegas. Guatemala.
34. Zambonin C, Balest L, De Benedetto, Palmisano F. (2005). *Solid-phase microextraction gas chromatography mass spectrometry and multivariate analysis for the characterization of roasted coffees*. *J Talanta* 66(2005) 261-265.

13. ANEXOS.

Anexo 1. Códigos y procedencia de las muestras.

No.	REGION	CODIGO	FINCA
1	ANTIGUA	ANT-1	LA TRAVESIA
2	ANTIGUA	ANT-2	CAPETILLO
3	ANTIGUA	ANT-3	CONCEPCION PIXCAYA
4	ANTIGUA	ANT-4	LOS CUXINALES
5	ANTIGUA	ANT-5	PUERTA VERDE
6	ANTIGUA	ANT-6	SAN AGUSTIN
7	ANTIGUA	ANT-7	SANTA CLARA Y ANEXOS
8	COBAN	COB-1	SANTA SOFIA
9	COBAN	COB-2	FLOR DEL ROSARIO
10	COBAN	COB-3	SANTA PAULA
11	COBAN	COB-4	NUEVE AGUAS
12	COBAN	COB-5	BAQUELITO
13	COBAN	COB-6	LINDA VISTA
14	COBAN	COB-7	SANTA ISABEL
15	FRAIJANES	FR1	EL RINCON
16	FRAIJANES	FR2	SANTA TERESA
17	FRAIJANES	FR3	CANDELARIA
18	FRAIJANES	FR4	LA TRINIDAD
19	FRAIJANES	FR5	SAN BERNARDO
20	FRAIJANES	FR6	SANTA BARBARA
21	FRAIJANES	FR7	EL MIRADOR
22	HUEHUETENANGO	HUE-1	LAS MACADAMIAS
23	HUEHUETENANGO	HUE-2	FLOR DE CAFÉ
24	HUEHUETENANGO	HUE-3	LA PROVIDENCIA
25	HUEHUETENANGO	HUE-4	EL PATERNAL
26	HUEHUETENANGO	HUE-5	SANTA ROSA
27	HUEHUETENANGO	HUE-6	EL INJERTO
28	HUEHUETENANGO	HUE-7	LA ESPERANZA

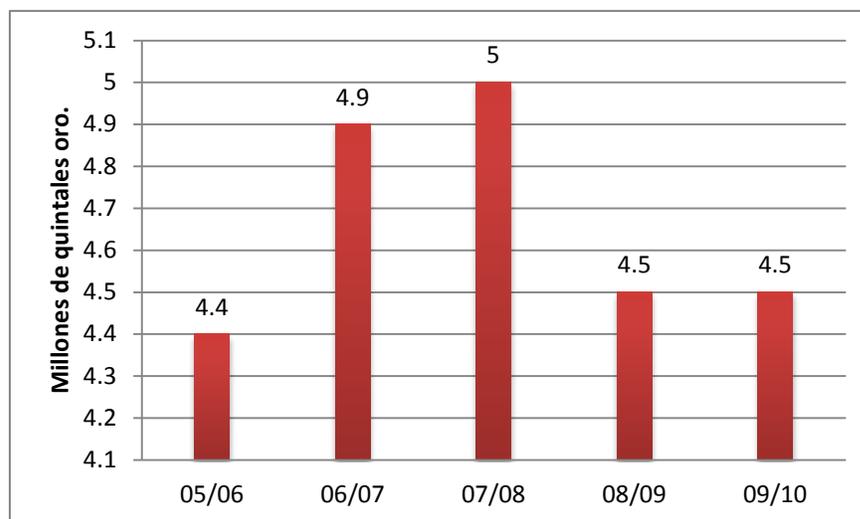
Fuente: ANACAFE. Departamento de Catación.

Anexo 2. Producción anual de café registrada hasta 1994.

Año	Producción	Año	Producción
1975/76	3024	1985/86	3948
1976/77	3447	1986/87	4273
1977/78	3657	1987/88	4178
1978/79	3688	1988/89	4471
1979/80	3583	1989/90	4140
1980/81	3857	1990/91	4176
1981/82	4214	1991/92	4381
1982/83	4116	1992/93	4413
1983/84	3979	1993/94	4691
1984/85	4274	1994/95	4400

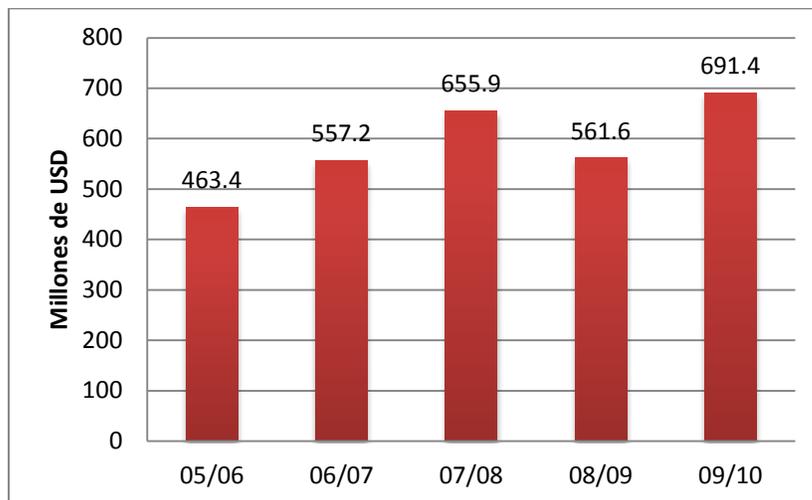
Fuente: estadística Anacafé agosto 95.

Anexo 3: Gráfica. Volumen de Exportación.
Cosecha 2005/06 2009/10



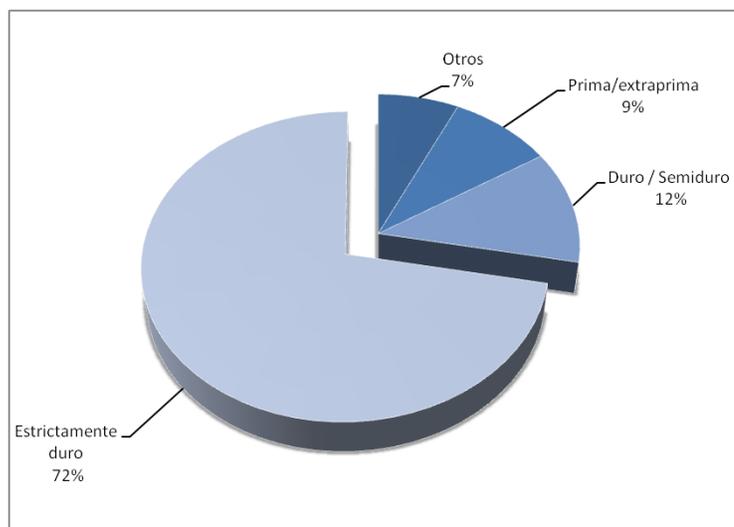
FUENTE: Anacafé. Memoria de labores 2010.

ANEXO 4: Grafica. Generación de divisas.
Cosechas 2005/06-2009/10



FUENTE: Anacafé. Memoria de labores 2010.

Anexo 5: Grafica: Tipos de Café Exportados.



FUENTE: Anacafé. Memoria de Labores 2010.

Anexo 6: Características del café: Prima lavado.

PRIMA LAVADO.			
Verde	Tostado	Aroma	Sabor
Tamaño normal pero liso y abierto, el centro es un poco pálido con un color verde aceituna. La hendidura del centro es recta.	Grano flojo y sin carácter. Color café claro y abierto en el centro.	Suave. Bastante limpio con principios de fragancia.	Sin cuerpo. Poca acidez.
Altura 2000 a 3000 pies sobre el nivel del mar			Cosecha: septiembre.
Otro: este es el tipo de café que se cotiza en la bolsa de Nueva York			

Fuente: (Anacafé, 1995)

Anexo 7: Características del café tipo: Extra prima lavado.

EXTRA PRIMA LAVADO			
Verde	Tostado	Aroma	Sabor
Tamaño normal pero liso y abierto. El centro es un poco pálido con un color verde aceituna la hendidura del centro recta.	Grano flojo y sin carácter. Color café claro y abierto en el centro.	Suave. Bastante limpio con principios de fragancia.	Sin cuerpo. Poca acidez.
Altura: 3000 a 3500 pies sobre el nivel del mar.			

Fuente: (Anacafé, 1995)

Anexo 8: Características del café tipo: Semi duro.

SEMI DURO			
Verde	Tostado	Aroma	Sabor
Color verde jade oscuro. Hendidura un poco torcida y medio abierta	Tueste claro, produce manchas pardas en la superficie del grano	Poco fragante y penetrante	Poca acidez con cuerpo delgado y un tanto flojo.
Altura: 3500 a 4000 pies sobre el nivel del mar			Cosecha: noviembre.

Fuente: (Anacafé, 1995)

Anexo 9: Características del café tipo: Duro

DURO			
Verde	Tostado	Aroma	Sabor
Grano grande, según la variedad. Corrugado, cerrado por el centro y torcido o en zig-zag. Color verde azulado	Oscuro con algunas manchas claras.	fragante	Fragante con cuerpo y acidez marcados y parejos.
Altura: 4000-4500 pies sobre el nivel del mar.			
Otros: se cata a maquina y generalmente se escoge a mano según las exigencias del mercado.			Cosecha: Diciembre

Fuente: (Anacafé, 1995)

Anexo 10: Características del café tipo: Duro fantasía.

DURO FANTASIA			
Verde	Tostado	Aroma	Sabor
Café fino con una excelente presentación. En su mayoría de variedad Típica y Bourbon. El grano	Grano semi-compacto con muy pocas	Penetrante agradable.	Buena acidez y

es azulado, cerrado o compacto.	manchas claras.		cuerpo.
Altura: 4500- 4800 pies sobre el nivel del mar.			Cosecha diciembre.

Fuente: (Anacafé, 1995)

Anexo 11: Características del café tipo: Estrictamente duro.

ESTRICTAMENTE DURO			
Verde	Tostado	Aroma	Sabor
Hendidura cerrada, en forma de zig-zag. Corrugado, con un color azulado.	Grano compacto rugoso, casi negro, con ranura cerrada.	Agradable, fragante, dulzón y limpio.	Balanceado con su acidez, cuerpo, aroma y fineza.
Altura: superior a 4800 pies sobre el nivel del mar.			Cosecha: Abril
Generalmente su destino son los mercados europeos			

Fuente: (Anacafé, 1995).

Anexo12:

Cromatogramas obtenidos del blanco y de las 28 muestras.

File D:\MSDCHEM1\DATA\Herbert\blaninno001.D

Operator DA umg

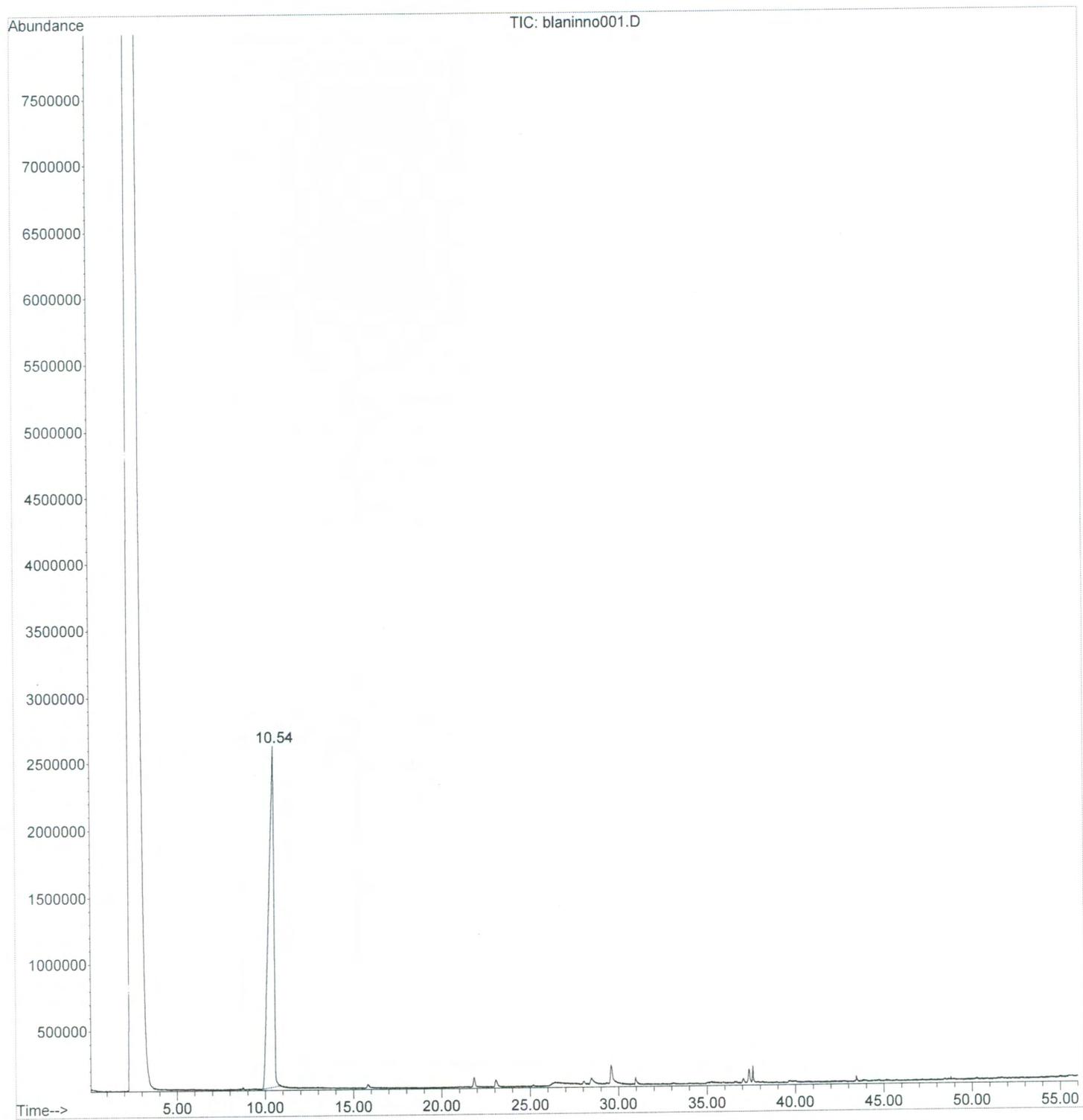
Acquired : 11 Jun 2012 13:11 using AcqMethod CAFEINNOHS.M

Instrument : GC6890-MSD5973 Inert

Sample Name: Blanco de vial con Na2SO4

Misc Info : Vial 5607

Vial Number: 1



File D:\MSDCHEM1\DATA\Herberticafeanthi007.D

Operator : DA umg

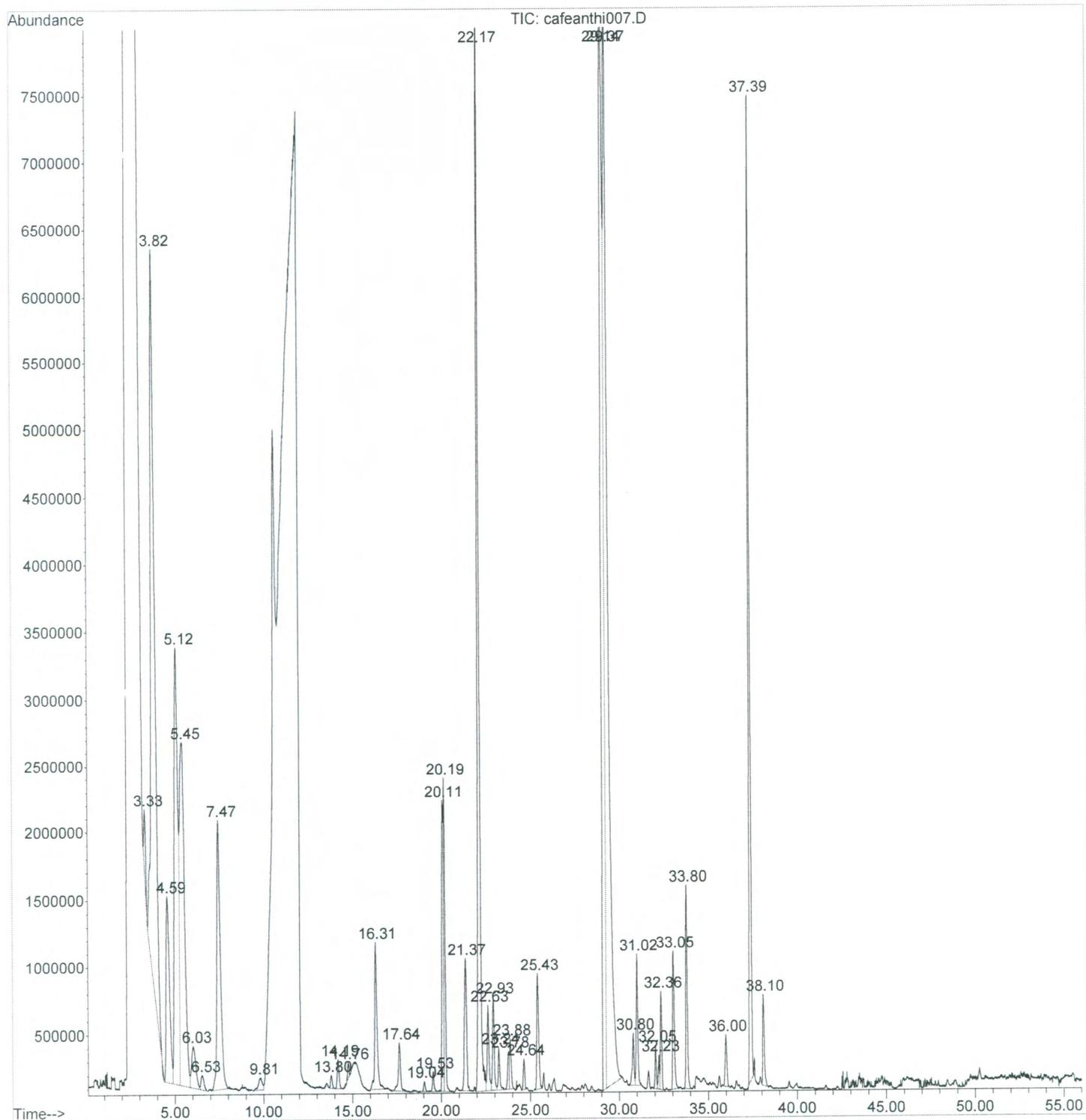
Acquired : 14 Jun 2012 9:04 using AcqMethod CAFEINNH.S.M

Instrument : GC6896-MSD5973 Inert

Sample Name : Cafe ANT-1-431

Misc Info : 056412062010404, Vial 5623

Vial Number : 1



File D:\MSDCHEM1\DATA\Herbifcafeanthi008.D

Operator DA umg

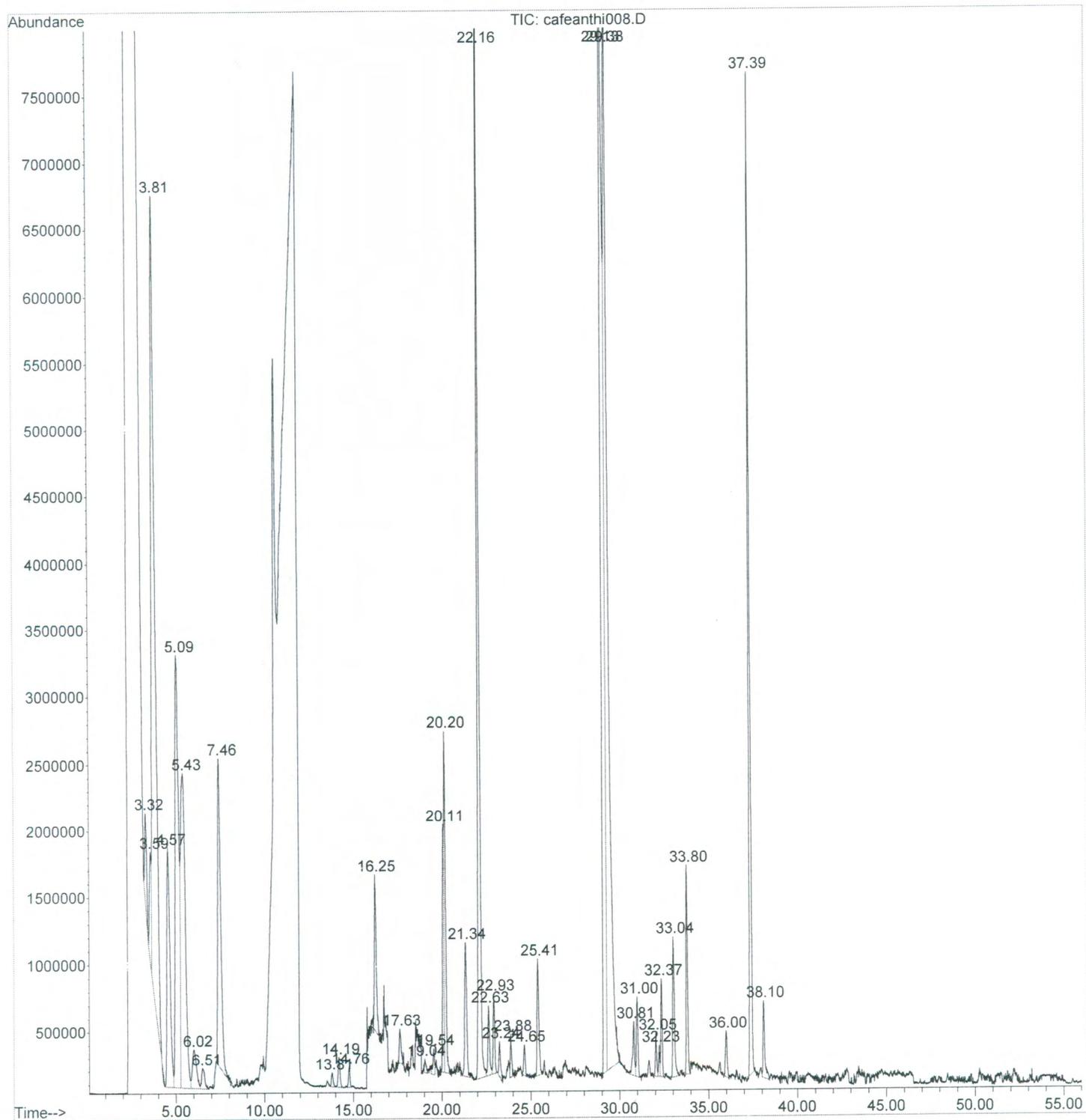
Acquired : 14 Jun 2012 10:08 using AcqMethod CAFEINNOHSM

Instrument : GC6890-MSD5973 Inert

Sample Name : Cafe ANT-2-413

Misc Info : 0565120601010404, Vial 5625

Vial Number : 2



File :D:\MSDCHEM1\DATA\Herberticafeanthi009.D

Operator : DA umg

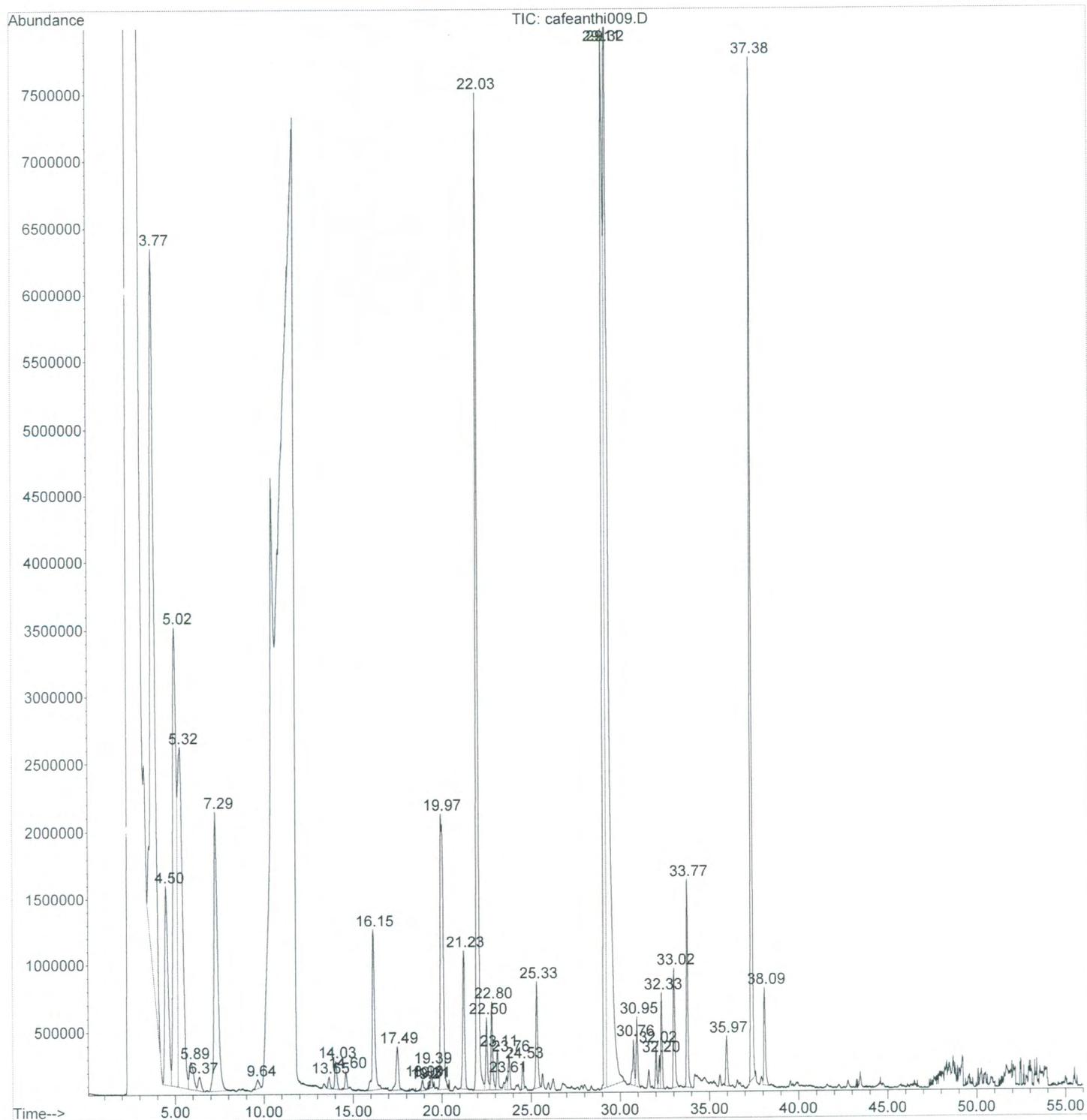
Acquired : 14 Jun 2012 13:07 using AcqMethod CAFEINNOHS.M

Instrument : GC6890-MSD5973 Inert

Sample Name : Cafe ANT-3-418

Misc Info : 0566126601010404_Vial 5027

Vial Number: 1



File : D:\MSDCHEM1\DATA\Herbertcafeanthi010.D

Operator : DA umg

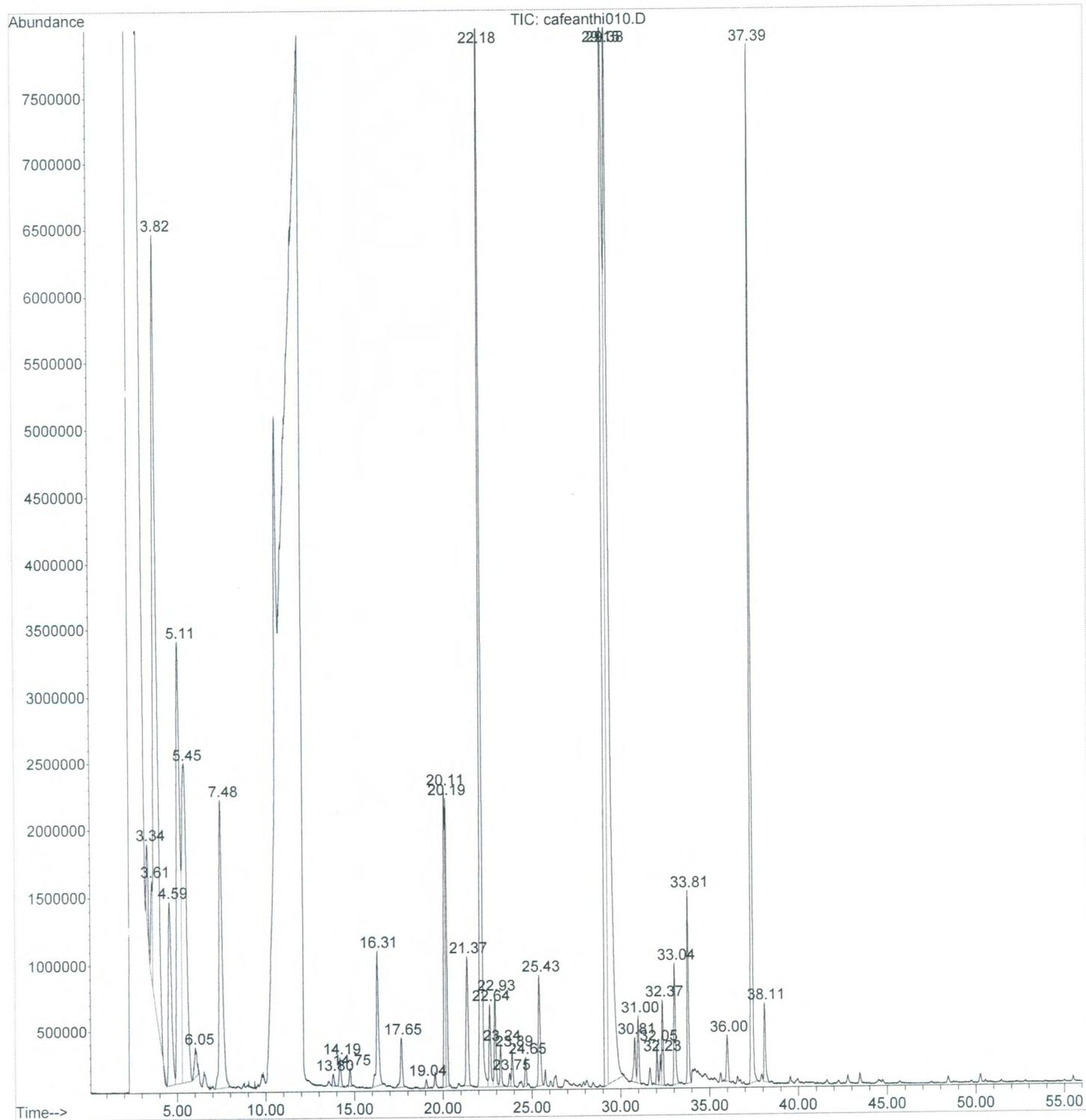
Acquired : 14 Jun 2012 14:13 using AcqMethod CAFEINNOHS.M

Instrument : GC6890-MSD5973 Inert

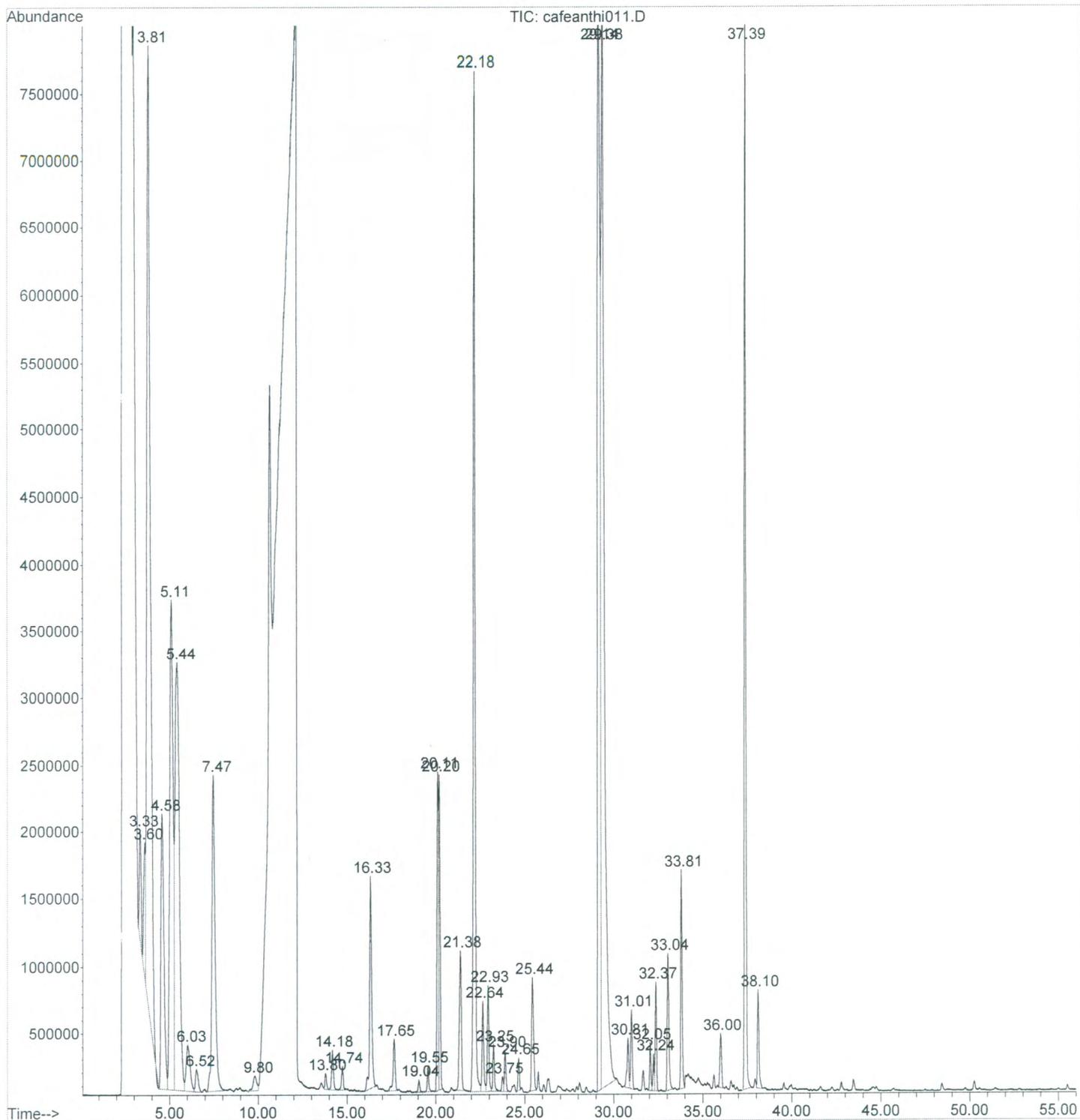
Sample Name : Cafe ANT-4-427

Misc Info : 0567120601010404, Vial 5029

Vial Number : 2



File : D:\MSDCHEM1\DATA\Herbert_Jumatufcafeanthi011.D
Operator : DA umg
Acquired : 14 Jun 2012 15:18 using AcqMethod CAFEINNOH.S.M
Instrument : GC6890-MSD5973 Inert
Sample Name: Cafe ANT-5-425
Misc Info : 0568120901010404, Vial 5031
Vial Number: 3



File : D:\MSDCHEM1\DATA\Herbert_Jsmatufcafeanthi012.D

Operator : DA umg

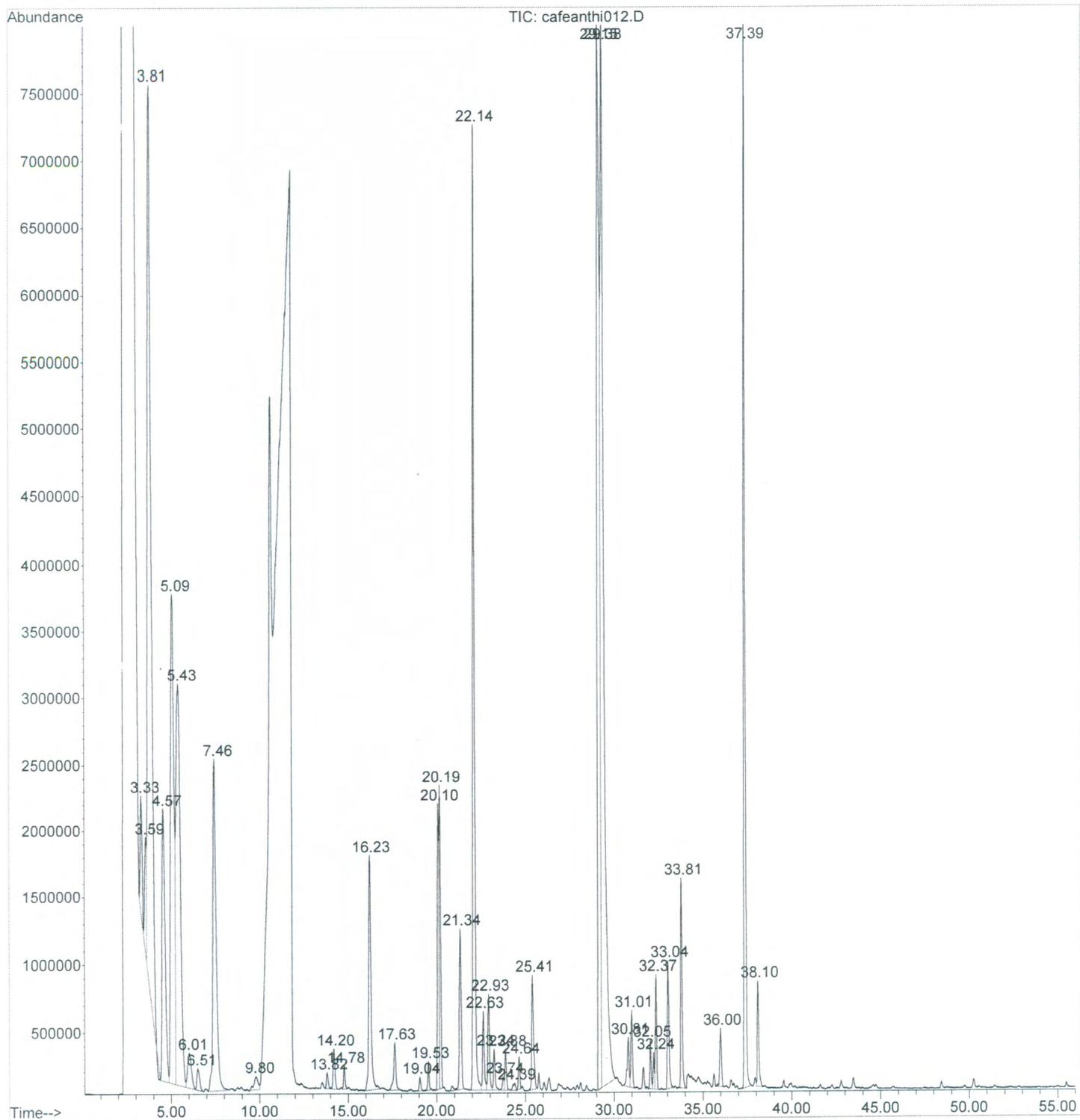
Acquired : 14 Jun 2012 16:23 using AcqMethod CAFEINNOHS.M

Instrument : GC8890-MSD5973 Inert

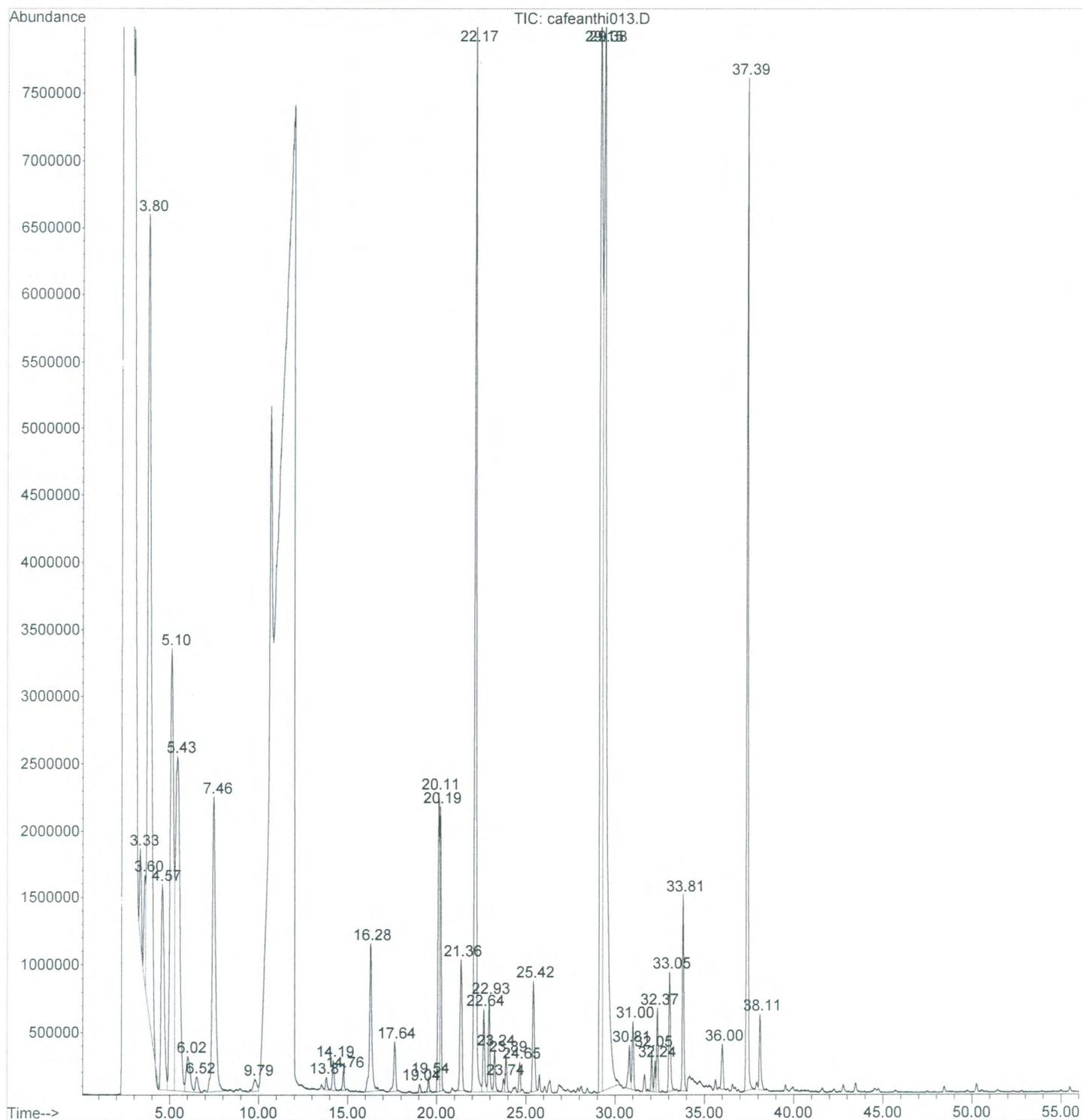
Sample Name : Cafe ANT-6-498

Misc Info : 0569120601010404, Vial 5633

Vial Number : 4



File : D:\MSDCHEM1\DATA\Herbert_Jumatuf\cafeanthi013.D
Operator : DA umg
Acquired : 14 Jun 2012 17:29 using AcqMethod CAFENNOHS.M
Instrument : GC6890-MSD5973 Inert
Sample Name : Cafe ANT-7-449
Misc Info : 0570120901010494, Vial 5635
Vial Number : 5



File D:\MSDCHEM1\DATA\Herbifac\cafecobhi001.D

Operator : DA umg

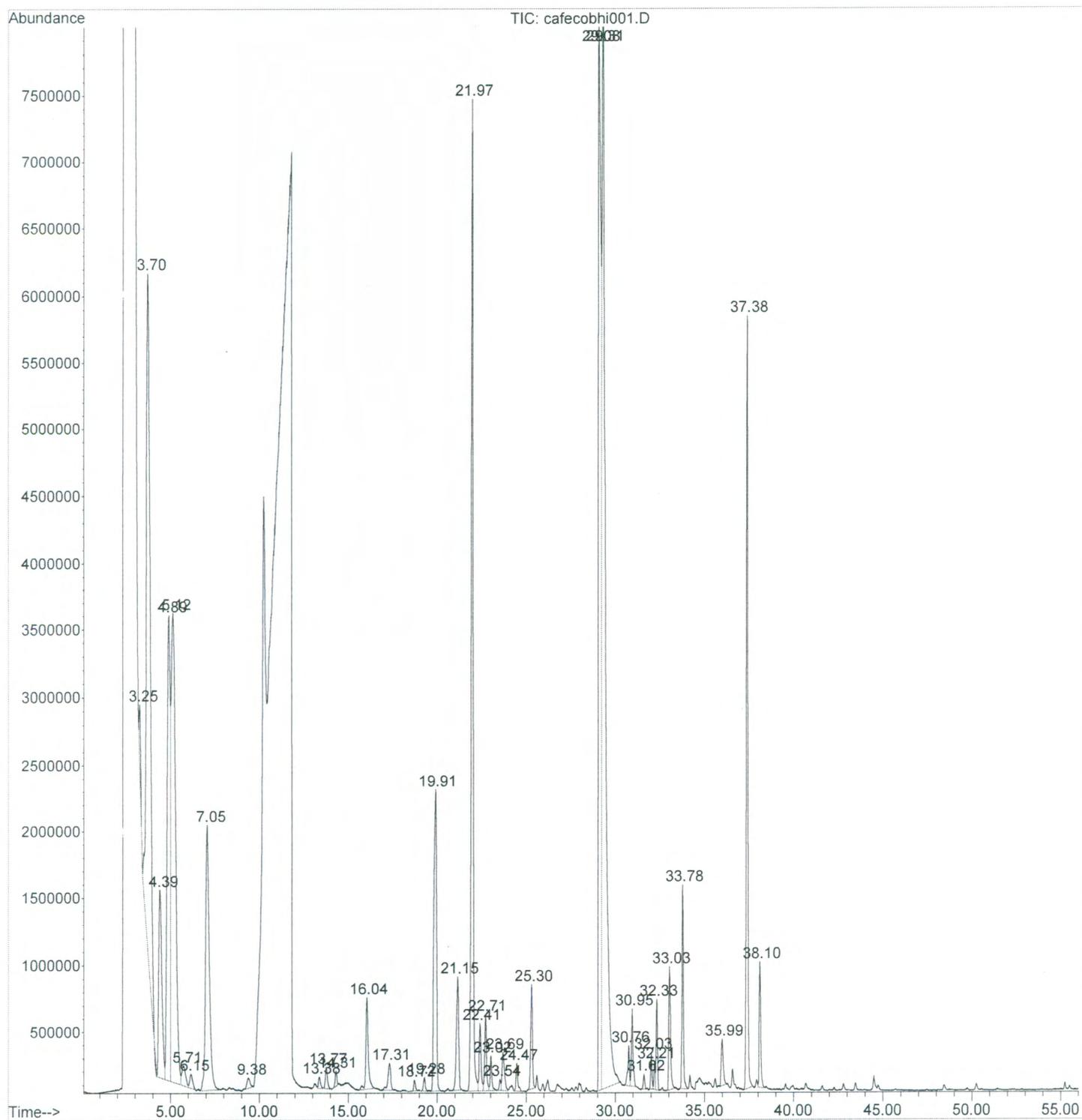
Acquired : 15 Jun 2012 18:07 using AcqMethod CAFEINNOH5.M

Instrument : GC6890-MSD5973 Inert

Sample Name : Cafe COB-1-123

Misc Info : 0578120601010404, Vial 5652

Vial Number : 1



File D:\MSDCHEM1\DATA\Herbert\cafecobhi002.D

Operator : DA umg

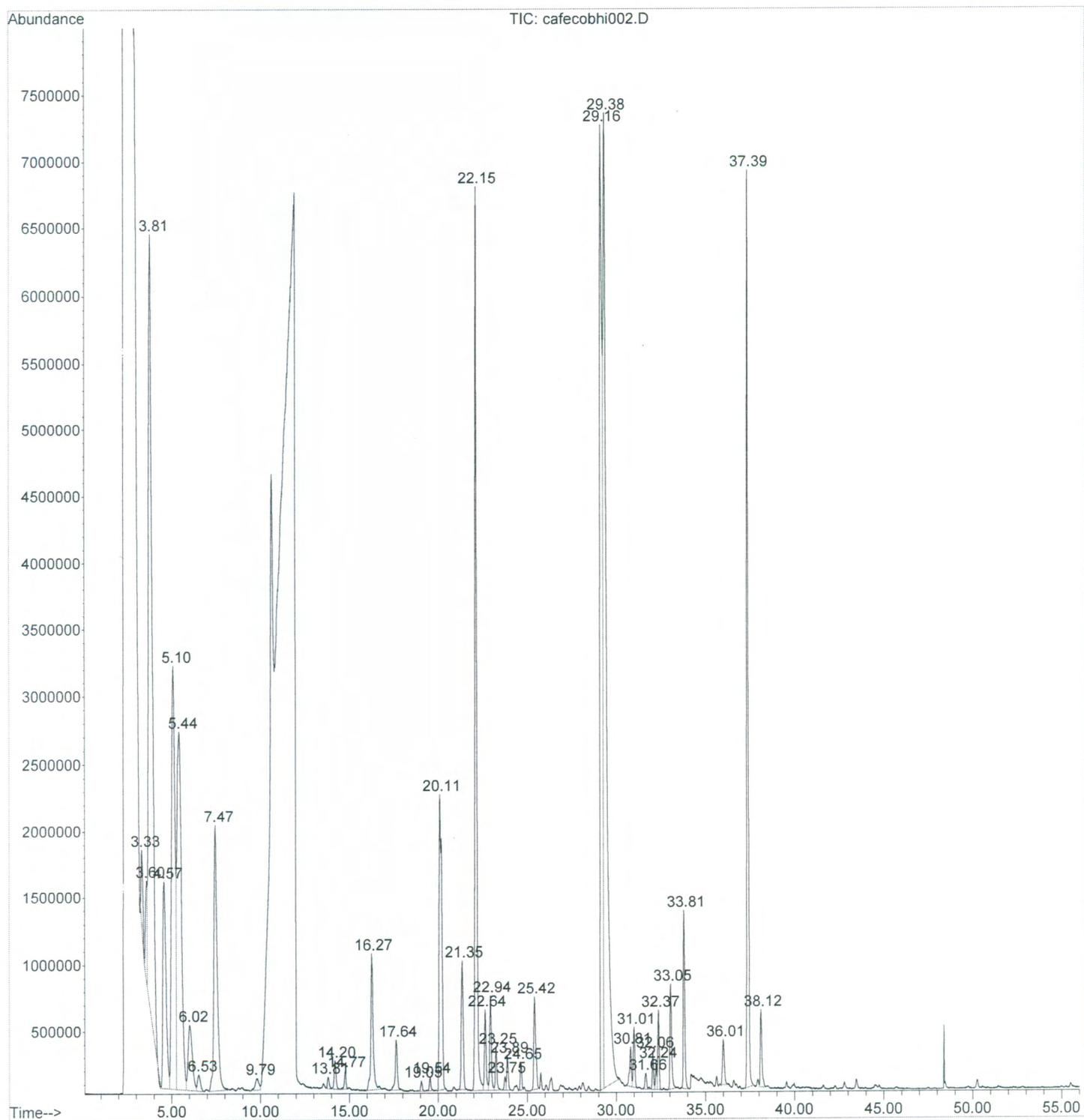
Acquired : 15 Jun 2012 19:12 using AcqMethod CAFEINNOHS.M

Instrument : GC6890-MSD5973 Inert

Sample Name: Cafe COB-2-174

Misc Info : 0579120601010404, Vial 5054

Vial Number: 2



File : D:\MSDCHEM1\DATA\Herbert\cafecobhi003.D

Operator : DA umg

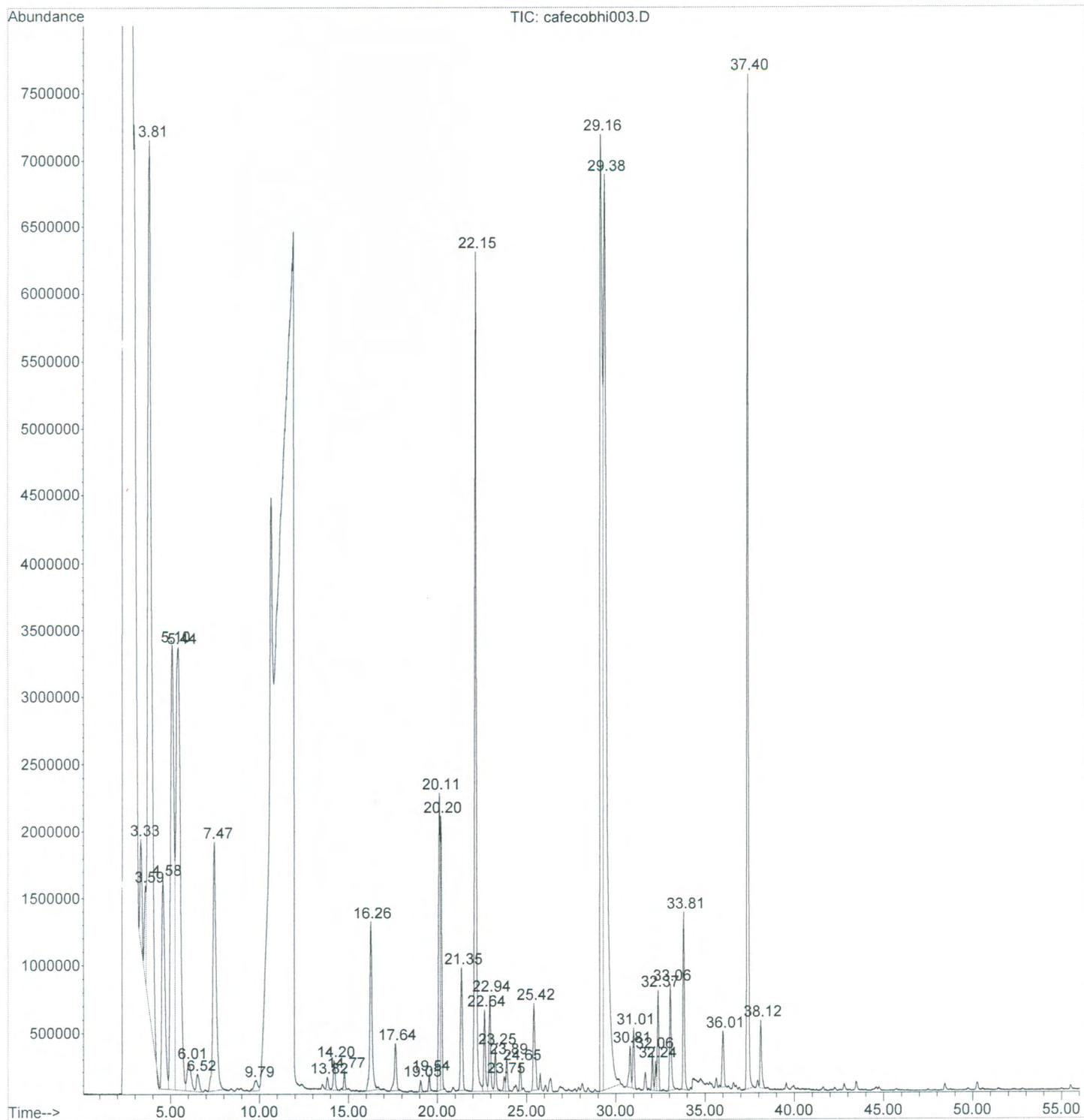
Acquired : 15 Jun 2012 20:16 using AcqMethod CAFEINNOHLS.M

Instrument : GC6890-MSD5973 Inert

Sample Name : Cafe COB-3-189

Misc Info : 058012692010404, Vial 5656

Vial Number : 3



File : D:\MSDCHEM1\DATA\Herber\cafecobhi004.D

Operator : DA umg

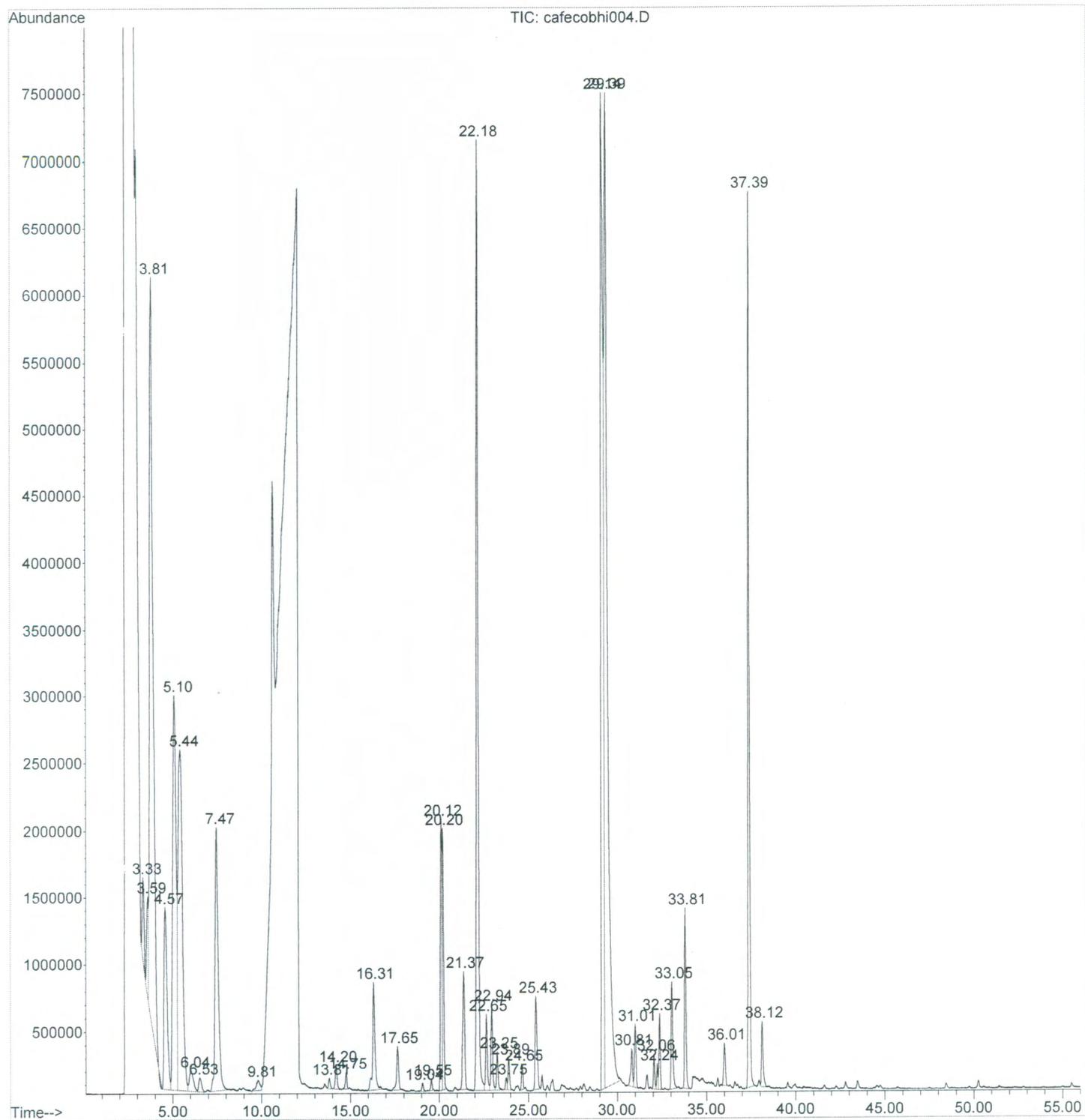
Acquired : 15 Jun 2012 21:21 using AcaMethod.CAFENNOHS.M

Instrument : GC6890-MSD5973 Inert

Sample Name : Cafe COB-4-163

Misc Info : 058120501010404, Vial 5658

Vial Number : 4



File D:\MSDCHEM1\DATA\Herbert\cafecobhi005.D

Operator DA umg

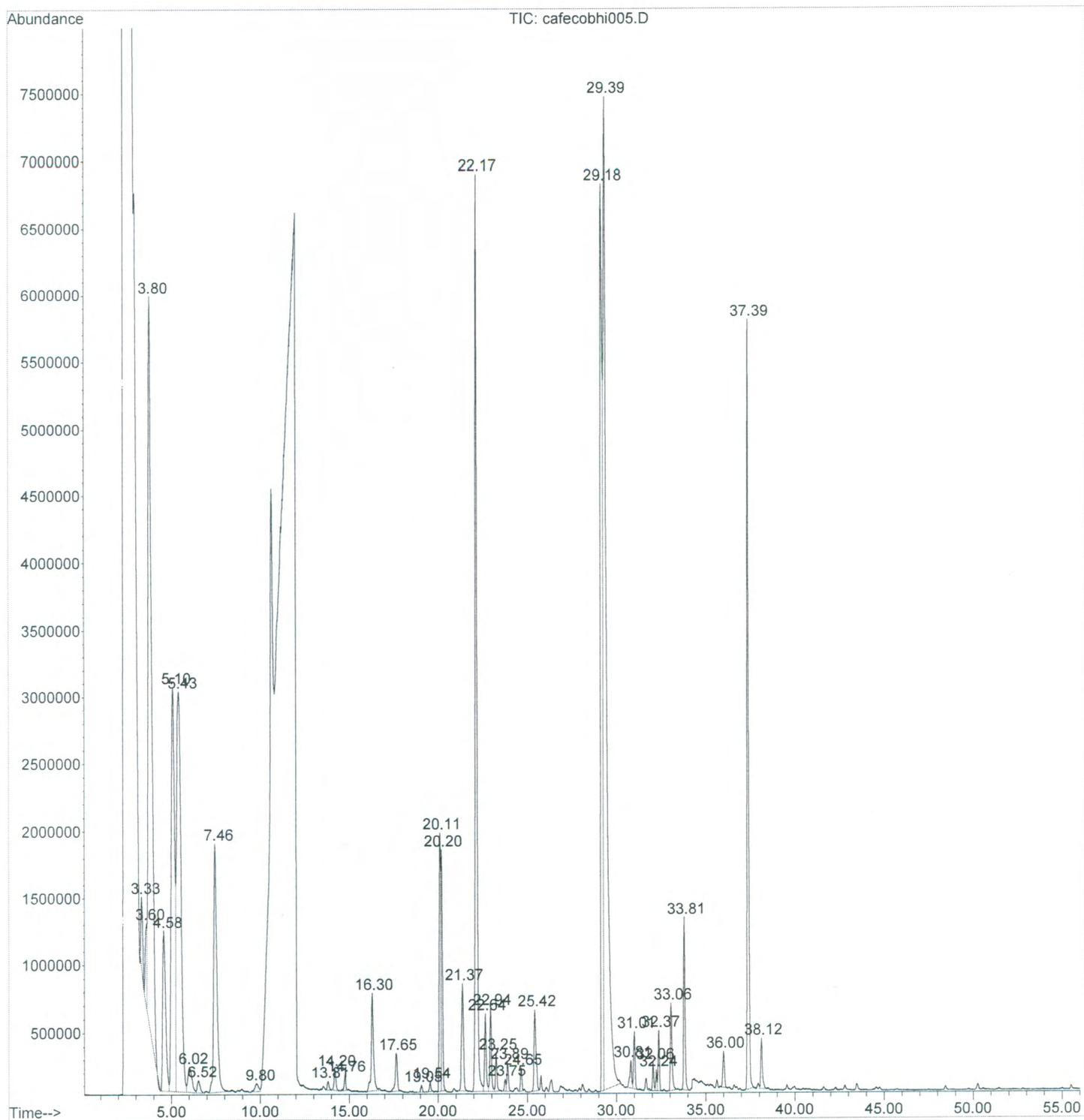
Acquired : 15 Jun 2012 22:25 Using AcqMethod CAFEINNOHS.M

Instrument : GC6890-MSD5973 Inert

Sample Name : Cafe COB-5-190

Misc Info : 0582120901010404_Vial 5660

Vial Number : 5



File D:\MSDCHEM1\DATA\Herbertifacobi006.D

Operator : DA umg

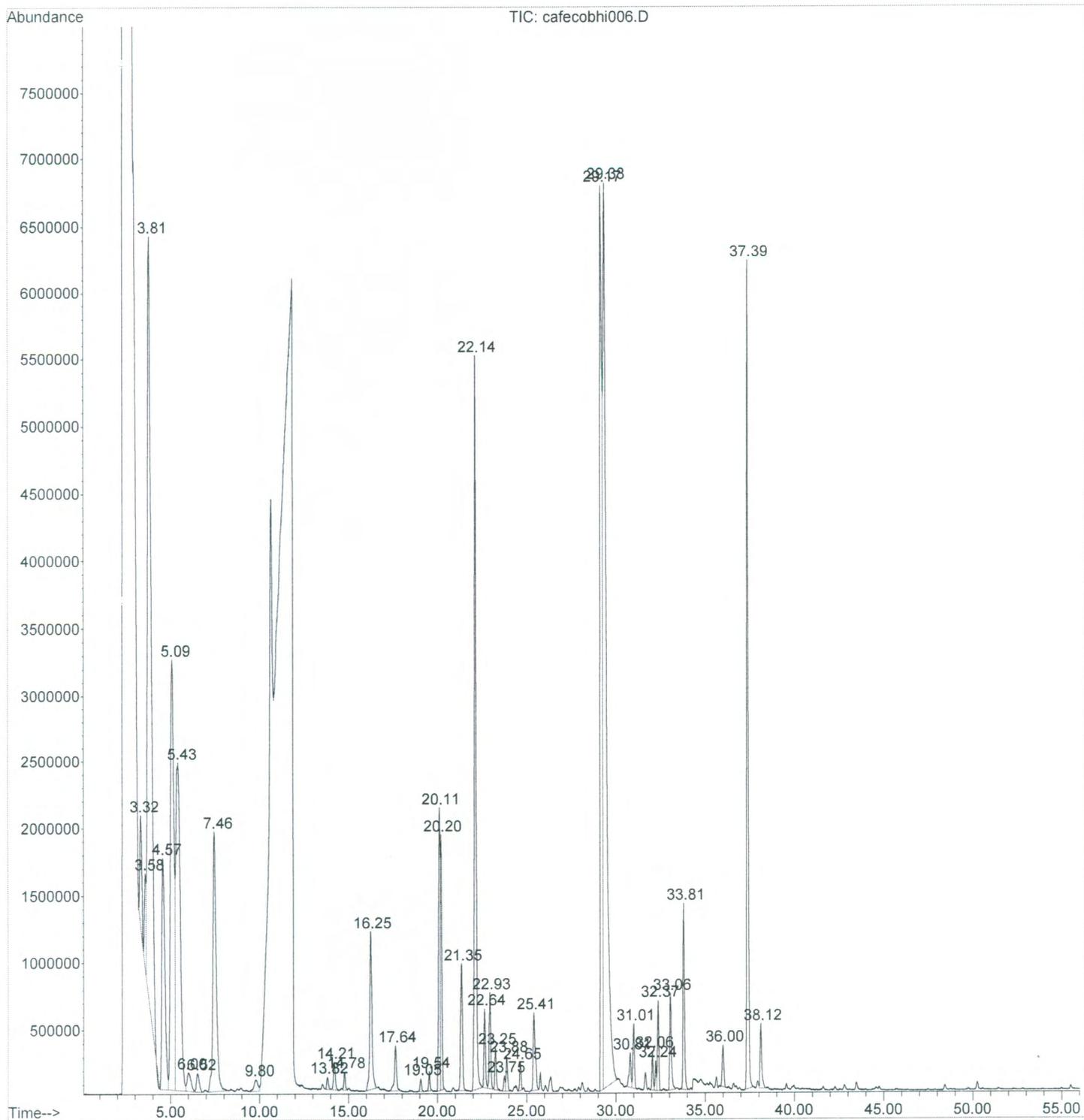
Acquired : 15 Jun 2012 23:30 using AcqMethod CAFEINNOHSM

Instrument : GC6890-MSD5973 Inert

Sample Name: Cafe COB-6-135

Misc Info : 0583120601010404, Vial 5662

Vial Number: 6



File D:\MSDCHEM1\DATA\Herbert\cafecobhi007.D

Operator : DA umg

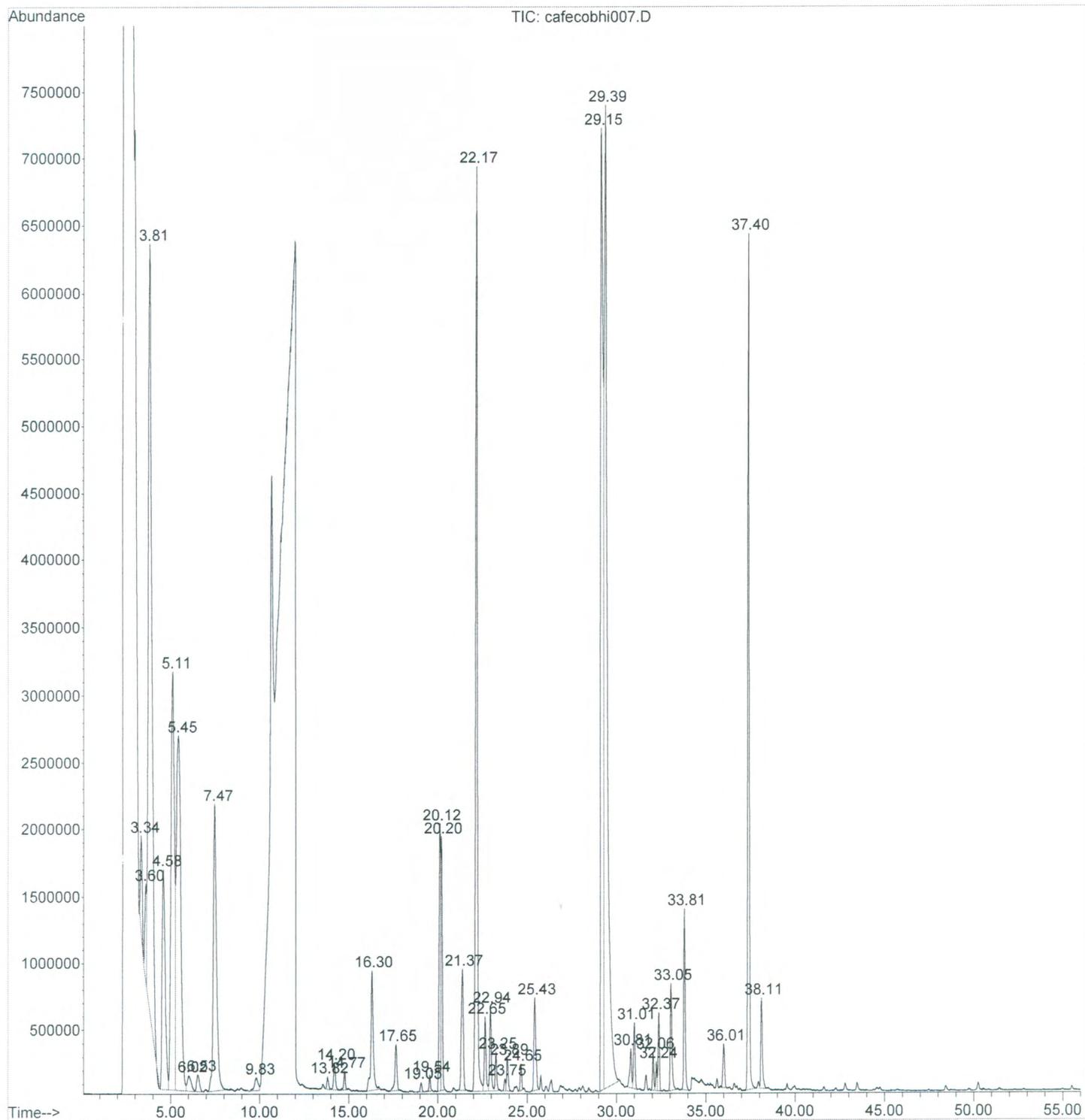
Acquired : 16 Jun 2012 09:35 using AcqMethod CAFEINNOHS.M

Instrument : GC6890-MSD5973 Inert

Sample Name : Cafe COB-7-139

Misc Info : 0594120601010404_Vial 5664

Vial Number : 7



File D:\MSDCHEM1\DATA\Herbert_IsmatulcafeFri001.D

Operator : DA umg

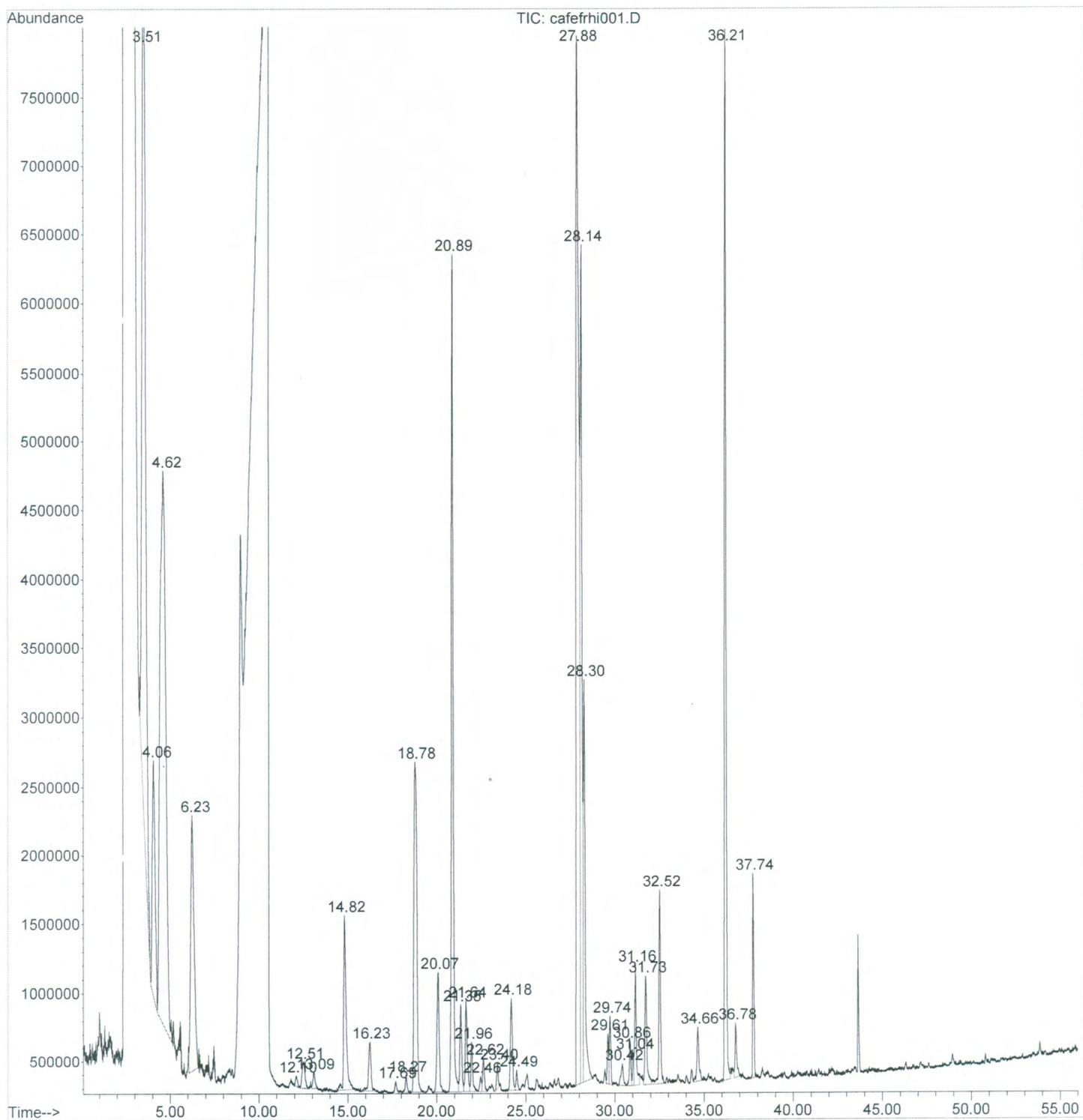
Acquired : 21 Aug 2012 9:23 using AcqMethod CAFEINNOHS.M

Instrument : GC6890-MSD5973 Inert

Sample Name : Cafe FR-1-321

Misc Info : 0730120706010404, Vial 5860

Vial Number : 1



File: D:\MSDCHEM1\DATA\Herber_Lumafu\cafe\frhi002.D

Operator: DA umg

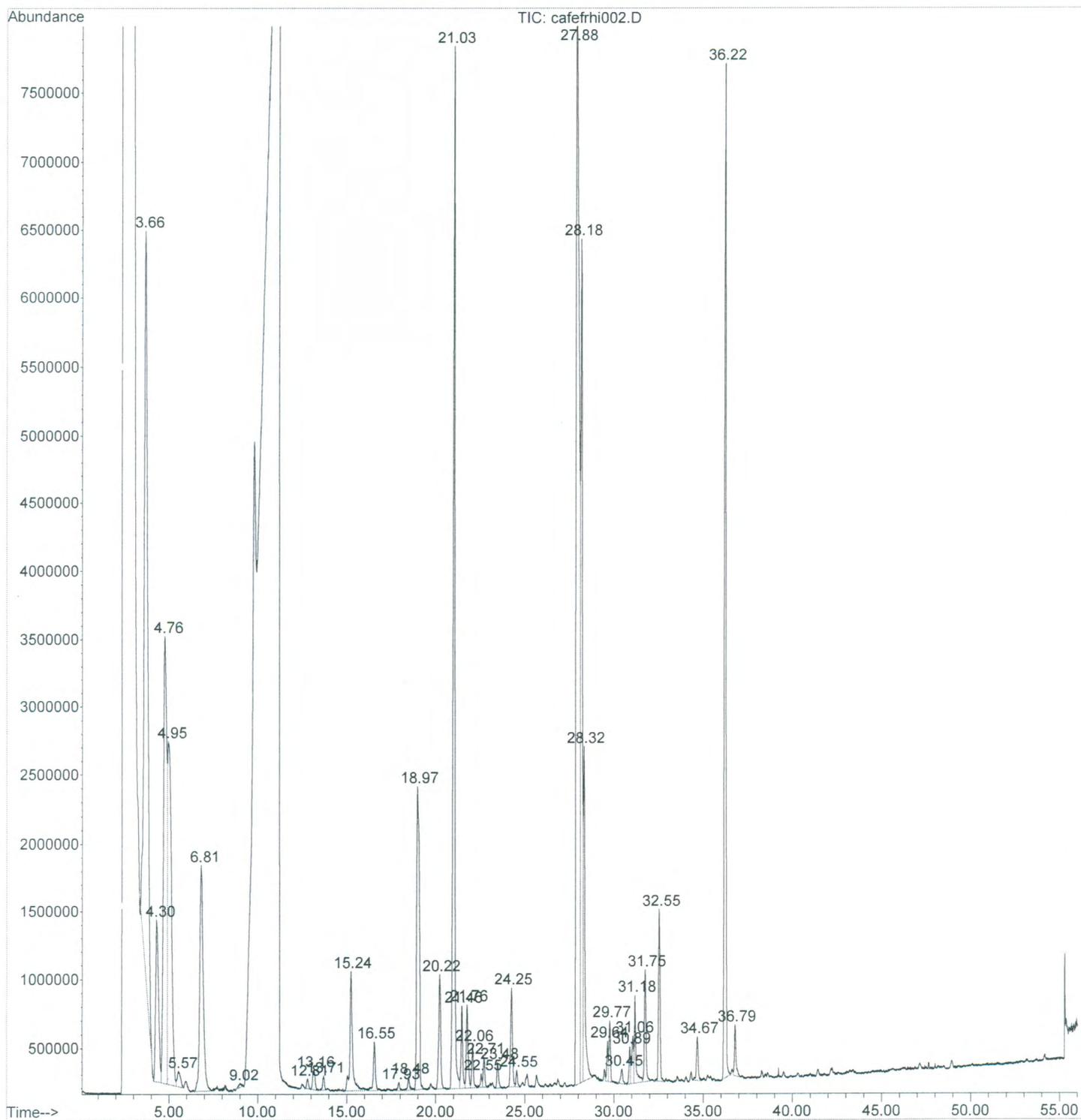
Acquired: 21 Aug 2012 10:28 using AcqMethod CAFENNOHS.M

Instrument: GC6890-MSD5973 Inert

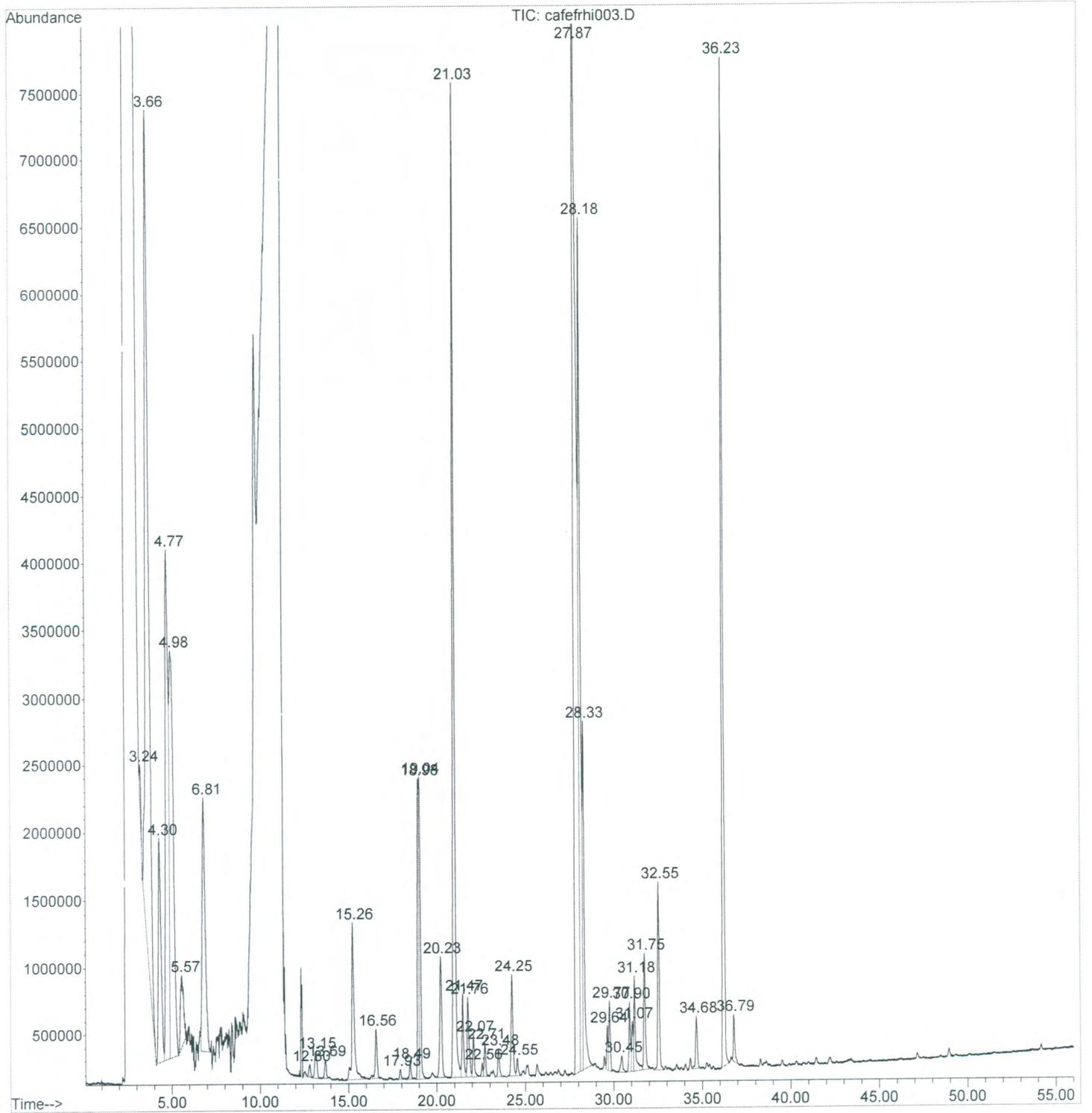
Sample Name: Cafe FR-2-345

Misc Info: 0731120796010494, Vial 5862

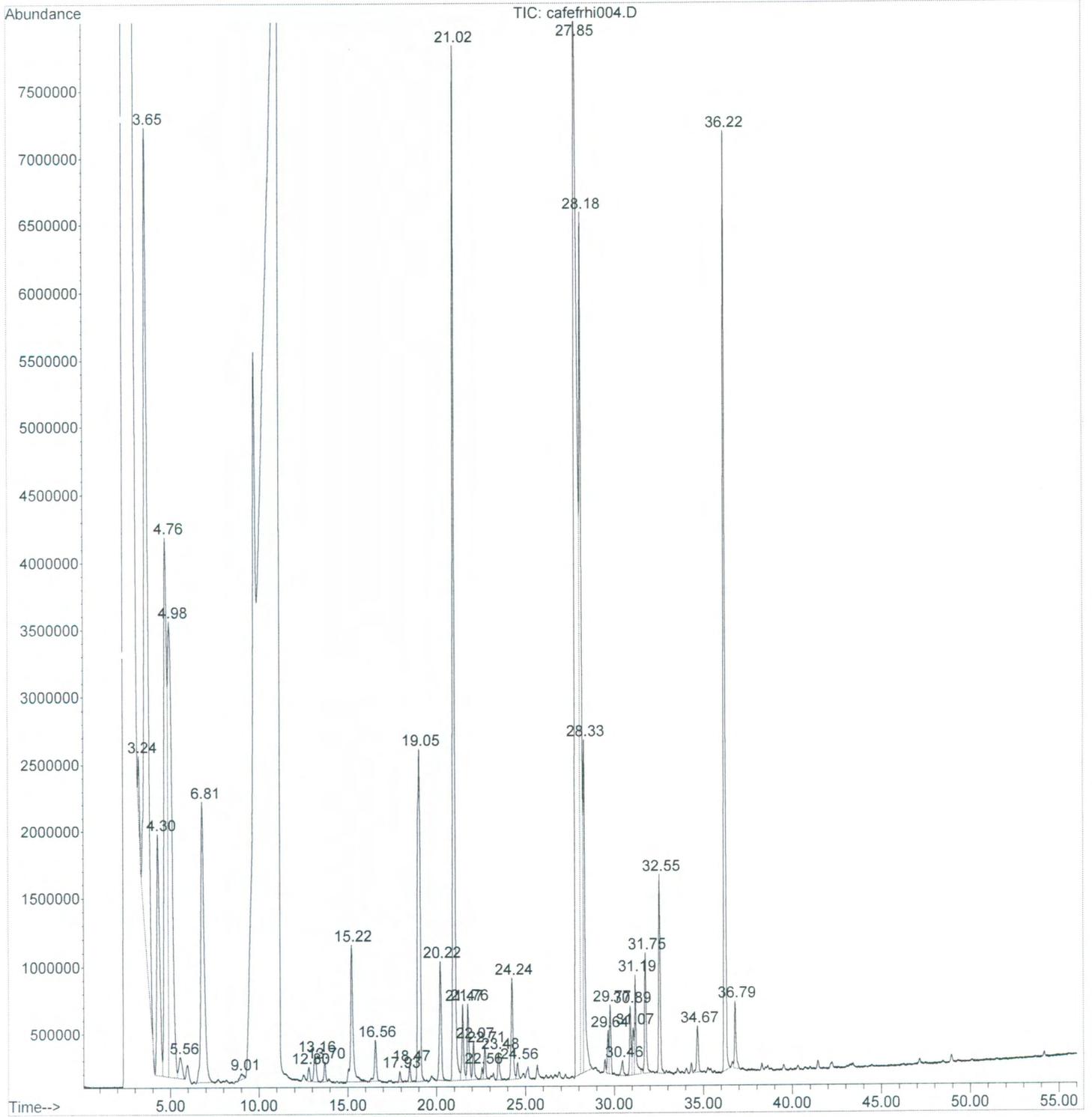
Vial Number: 2



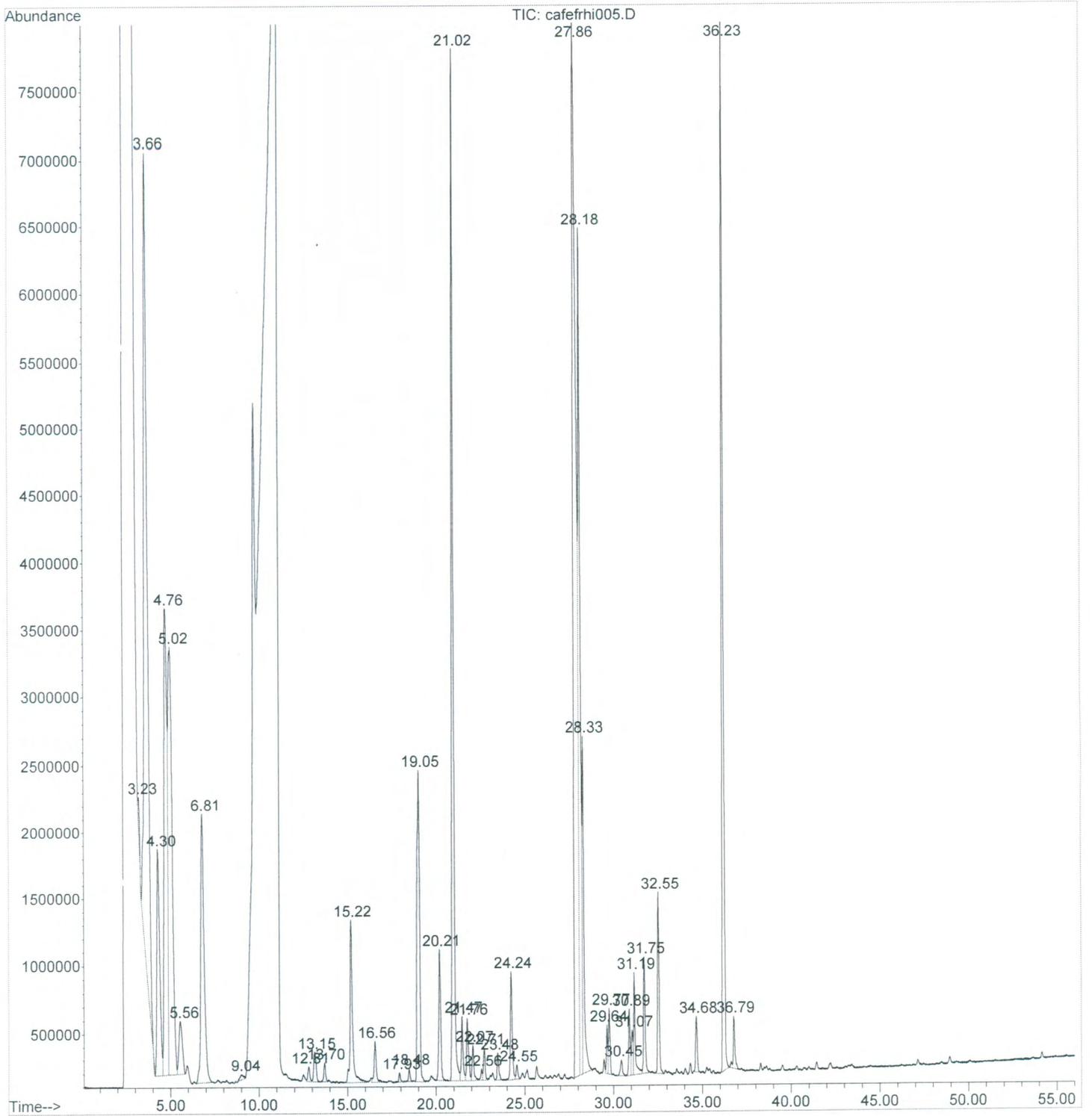
File : D:\MSDCHEM1\DATA\Herbert_tumatu\cafe\cafe003.D
Operator : DA umg
Acquired : 21 Aug 2012 11:33 using AcqMethod CAFEINNOHS.M
Instrument : GC6890-MSD5973 Inert
Sample Name: Cafe FR-3-378
Misc Info : 0732120796010404, Vial 5864
Vial Number: 3



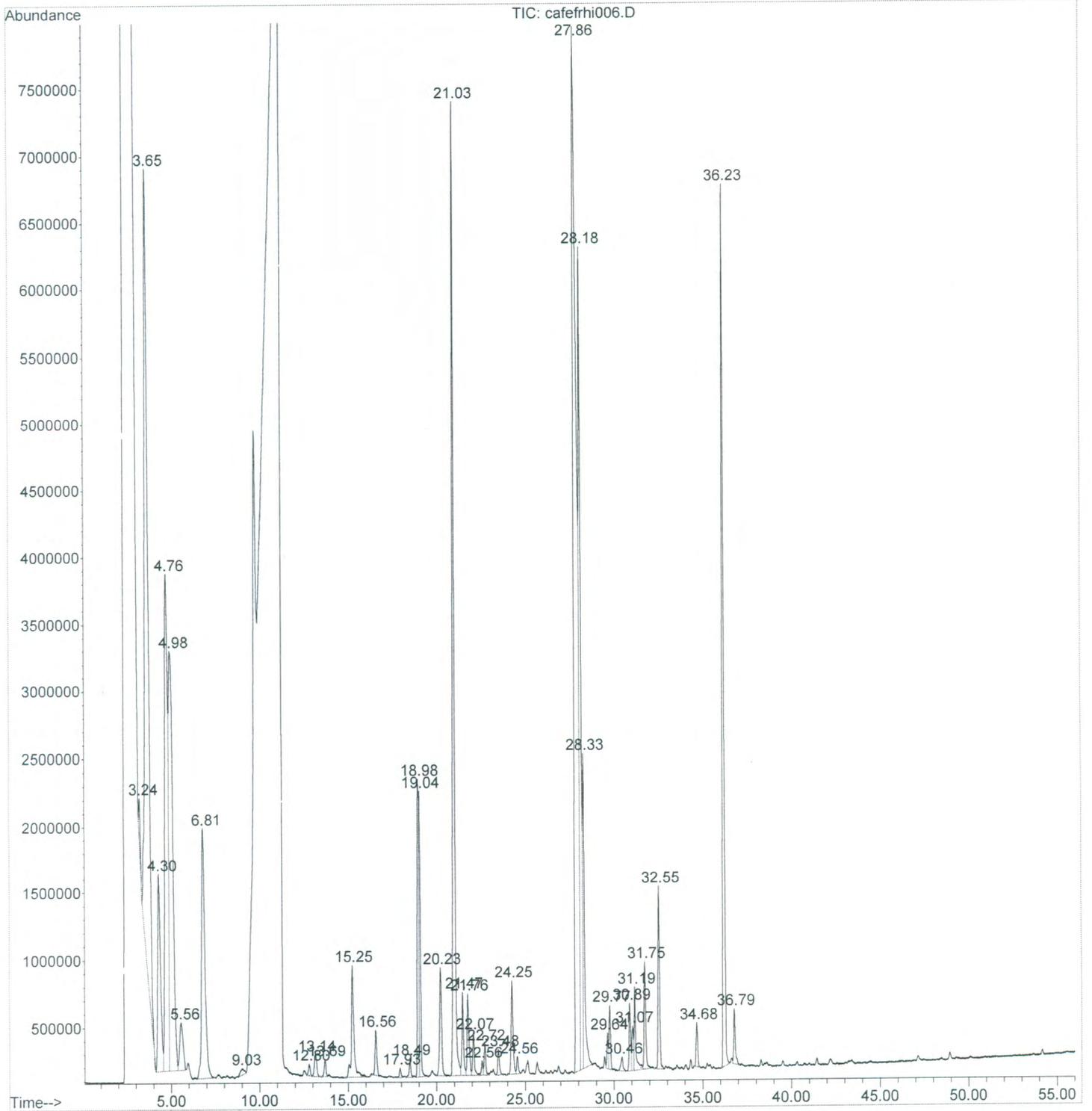
File : D:\MSDCHEM1\DATA\Herbert_Ismatulcafehri004.D
Operator : DA umg
Acquired : 21 Aug 2012 12:39 using AcqMethod CAFEINNH5.M
Instrument : GC5890-MSD5973 Inert
Sample Name : Cafe FR-4-394
Misc Info : 0733120706010404, Vial 5866
Vial Number : 4



File : D:\MSDCHEM1\DATA\Herbert_Ismatu\cafe\frhi005.D
Operator : DA umg
Acquired : 21 Aug 2012 13:44 using AcqMethod CAFERNOHS.M
Instrument : GC6890-MSD5973 Inert
Sample Name: Cafe FR-S-320
Misc Info : 0734120706010404, Vial 5868
Vial Number: 5



File : D:\MSDCHEM1\DATA\Herbert_jumatulcafe\h006.D
Operator : DA umg
Acquired : 21 Aug 2012 14:50 using AcqMethod CAFEINNOHS.M
Instrument : GC6890-MSD5973 Inert
Sample Name : Cafe FR-6-338
Misc Info : 0735120706010404, Vial 5870
Vial Number : 6



File : D:\MSDCHEM1\DATA\Herbert_Ismatulcafehri007.D

Operator : DA umg

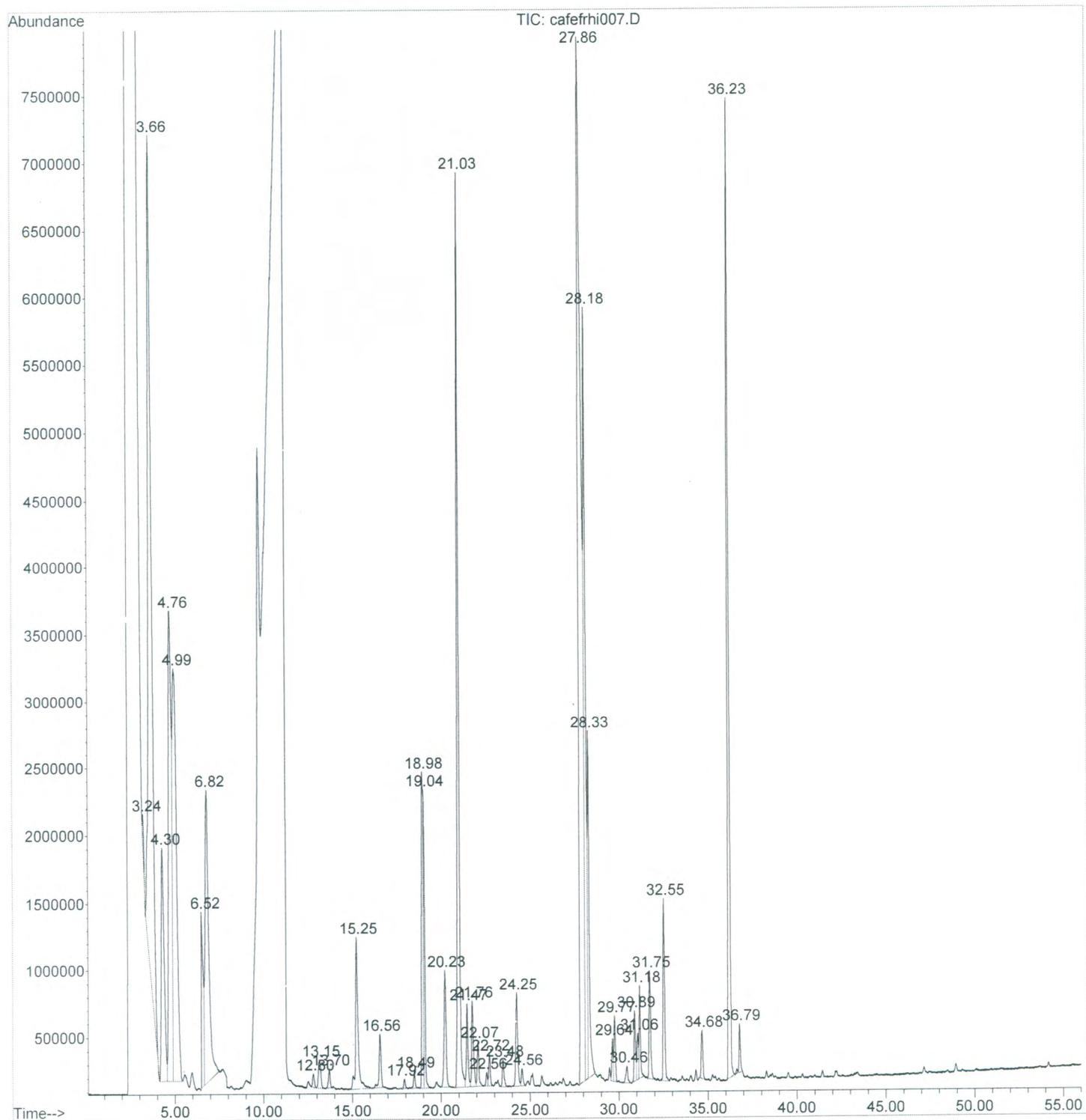
Acquired : 21 Aug 2012 15:55 using AcqMethod CAFEINNOHS.M

Instrument : GC6890-MSD5973 Inert

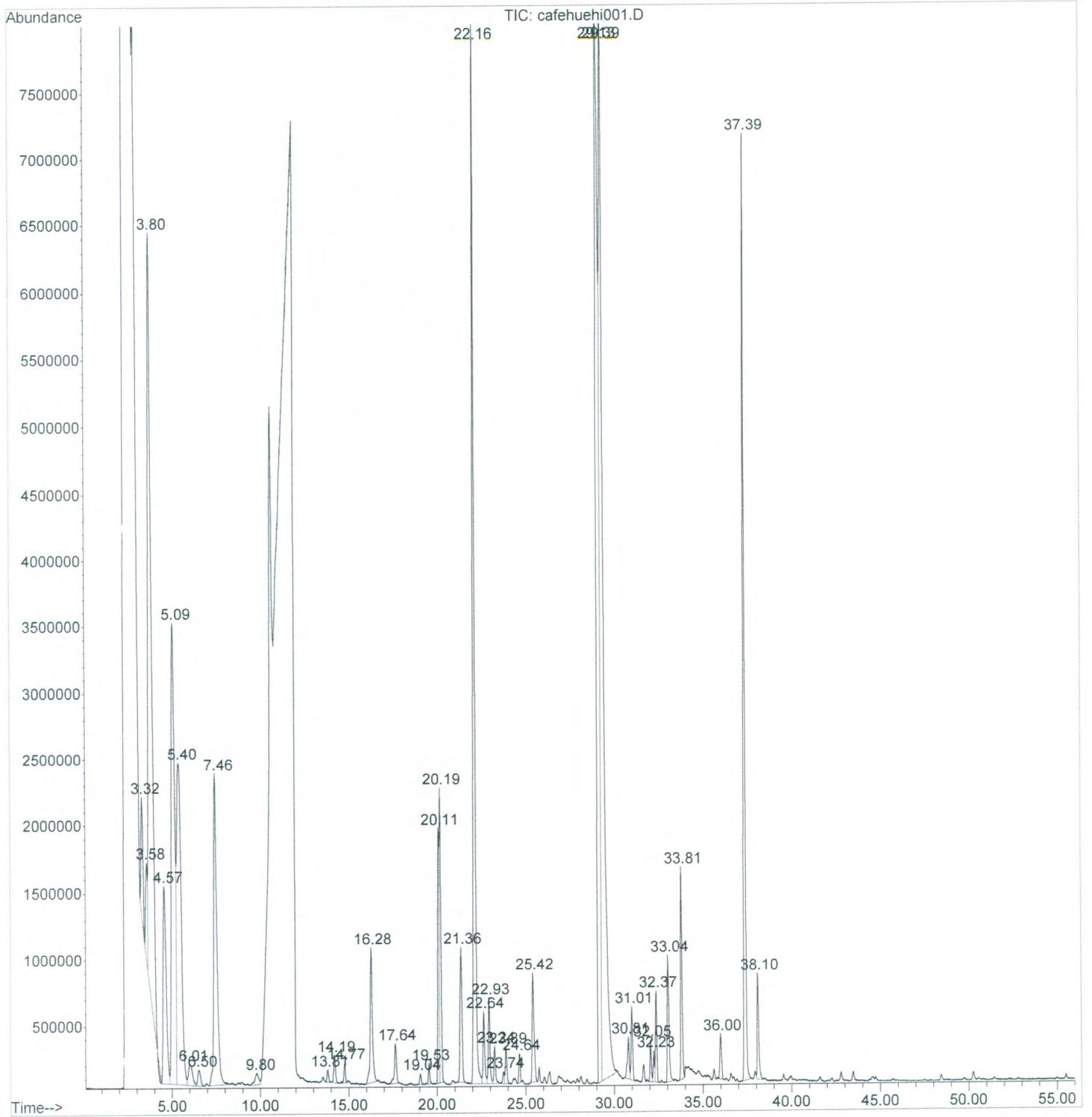
Sample Name : Cafe FR-7-347

Misc Info : 0736120706010404, Vial 5872

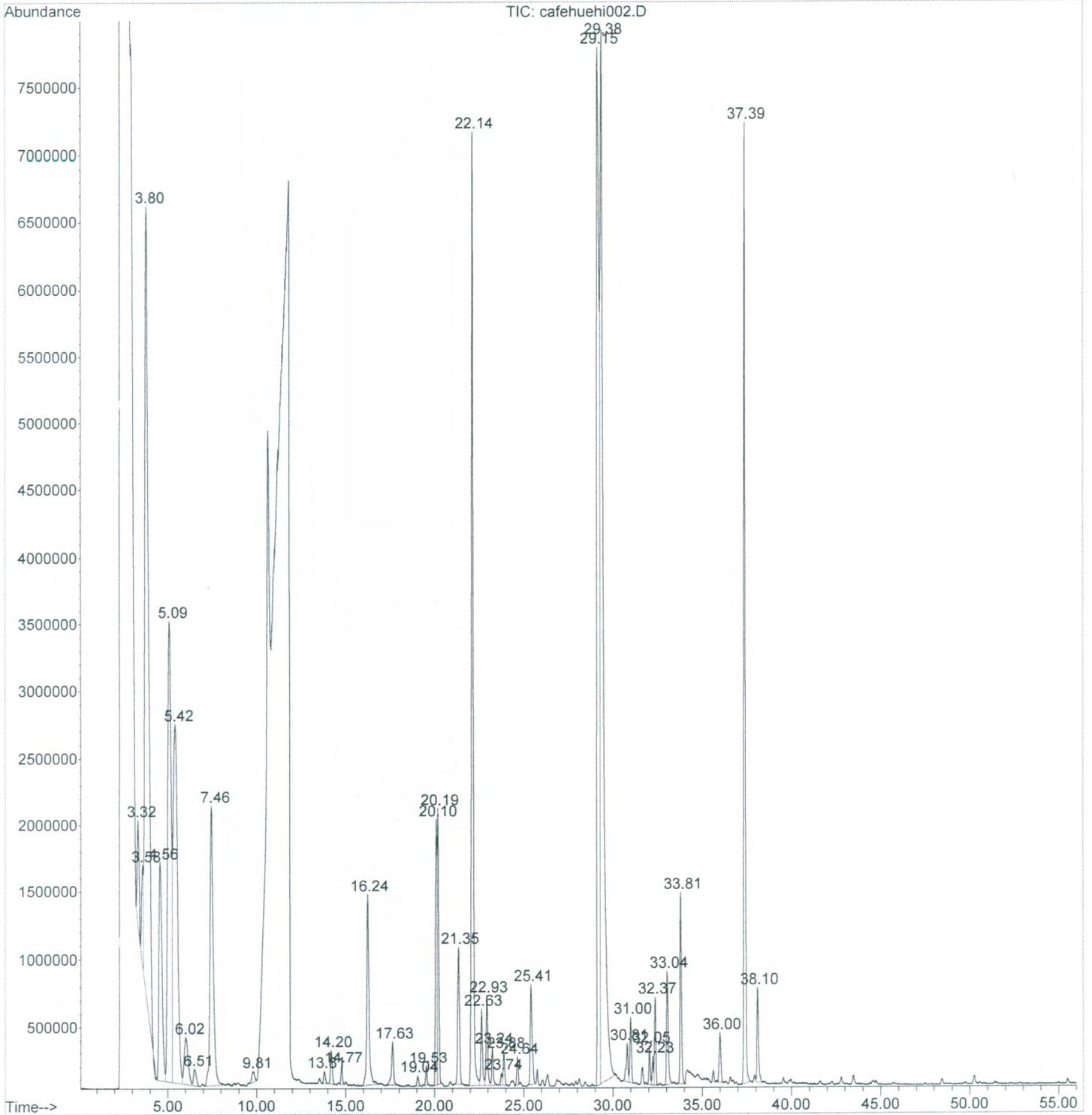
Vial Number : 7



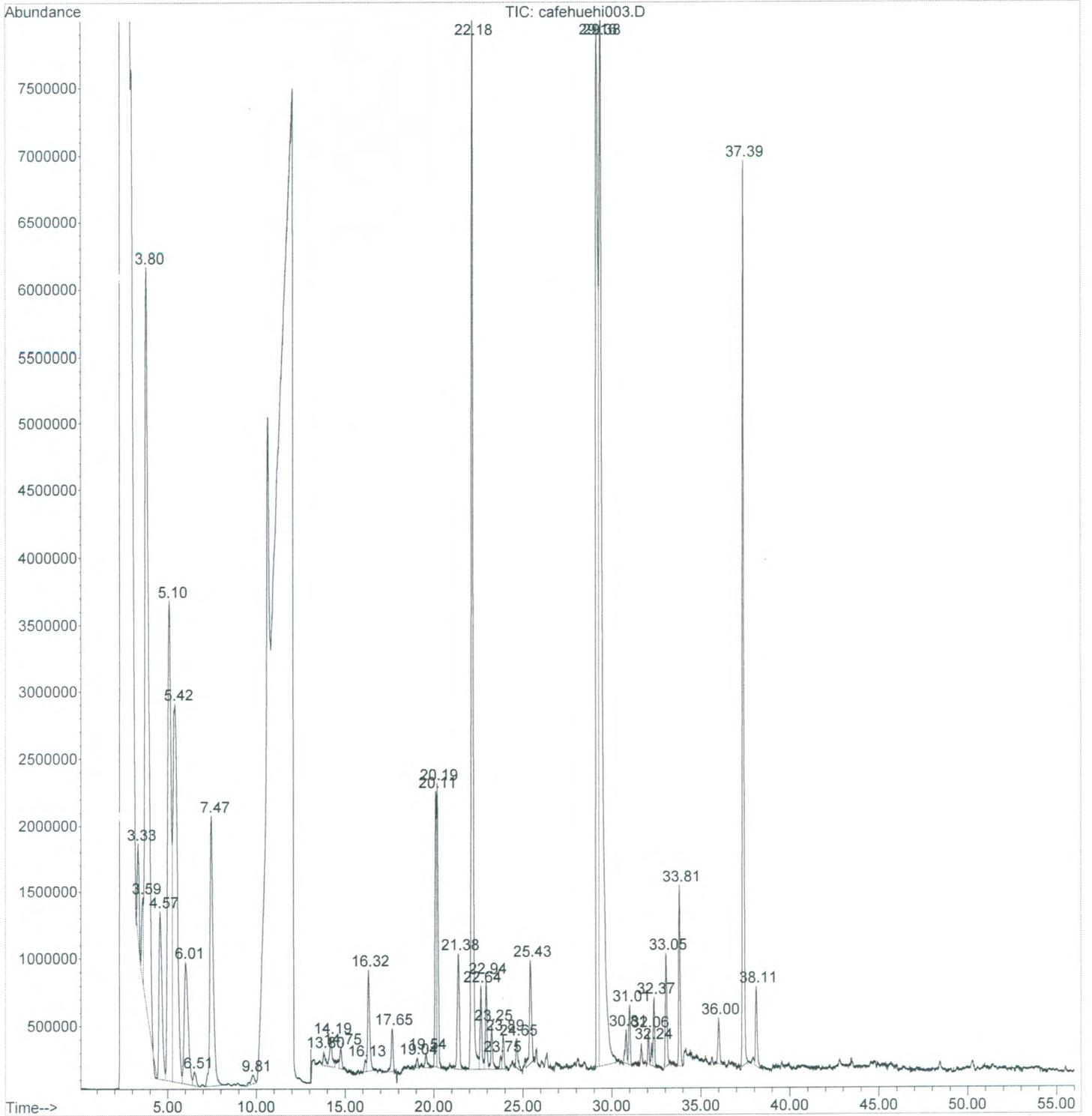
File D:\MSDCHEM1\DATA\Herberticafehuehi001.D
Operator : DA umg
Acquired : 14 Jun 2012 18:34 using AcqMethod CAFEINNOHS.M
Instrument : GC6890-MSD5973 Inert
Sample Name : Cafe HUE-1-289
Misc Info : 0571120901010404_Vial 5637
Vial Number : 6



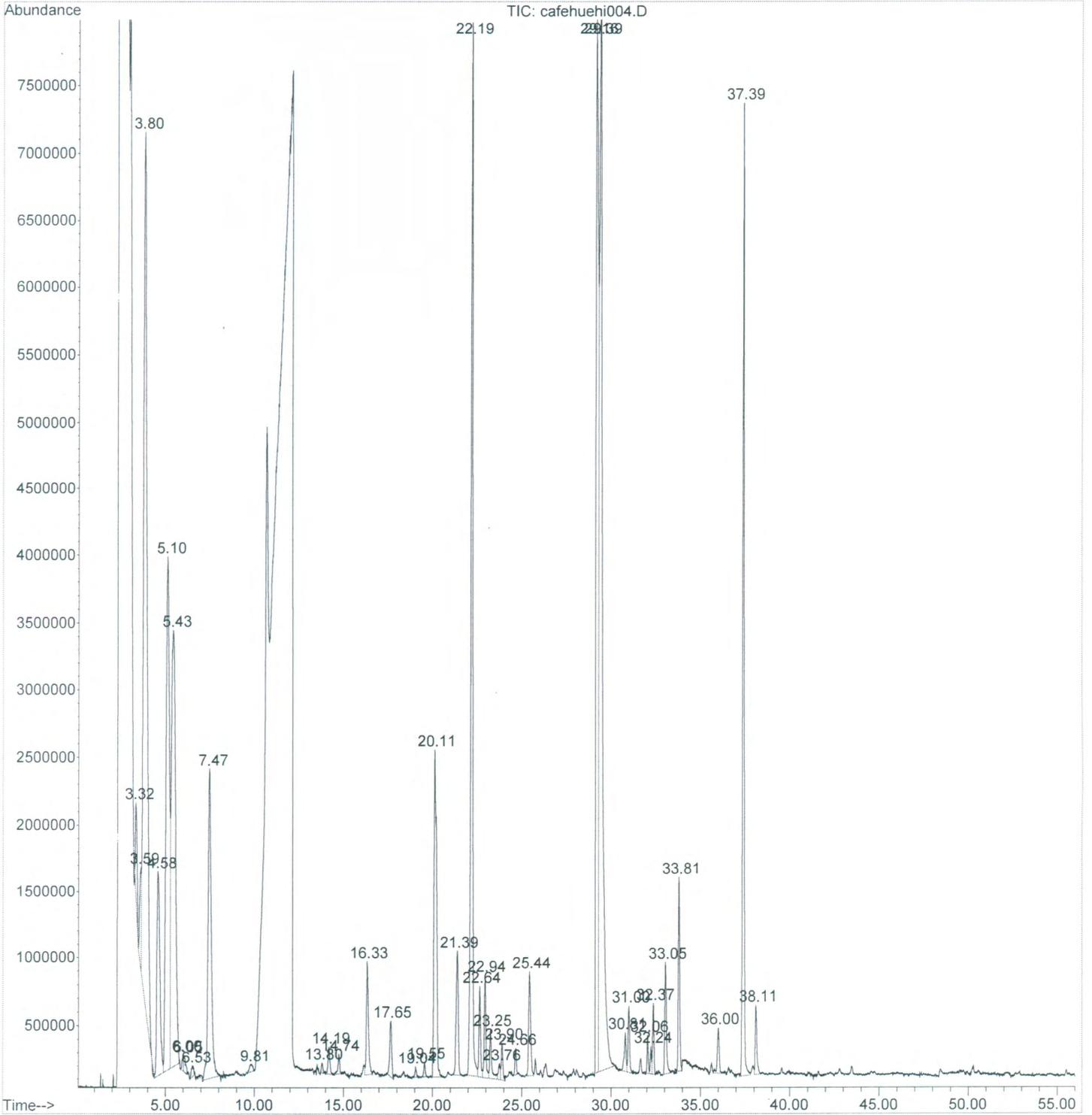
File : D:\MSDCHEM1\DATA\Herbert\cafehuehi002.D
Operator : DA umg
Acquired : 14 Jun 2012 19:40 using AcqMethod CAFEINNOHS.M
Instrument : GC6890-MSD5973 In...
Sample Name : Cafe HUE-2-256
Misc Info : 0572120601010404, Vial 5639
Vial Number: 7



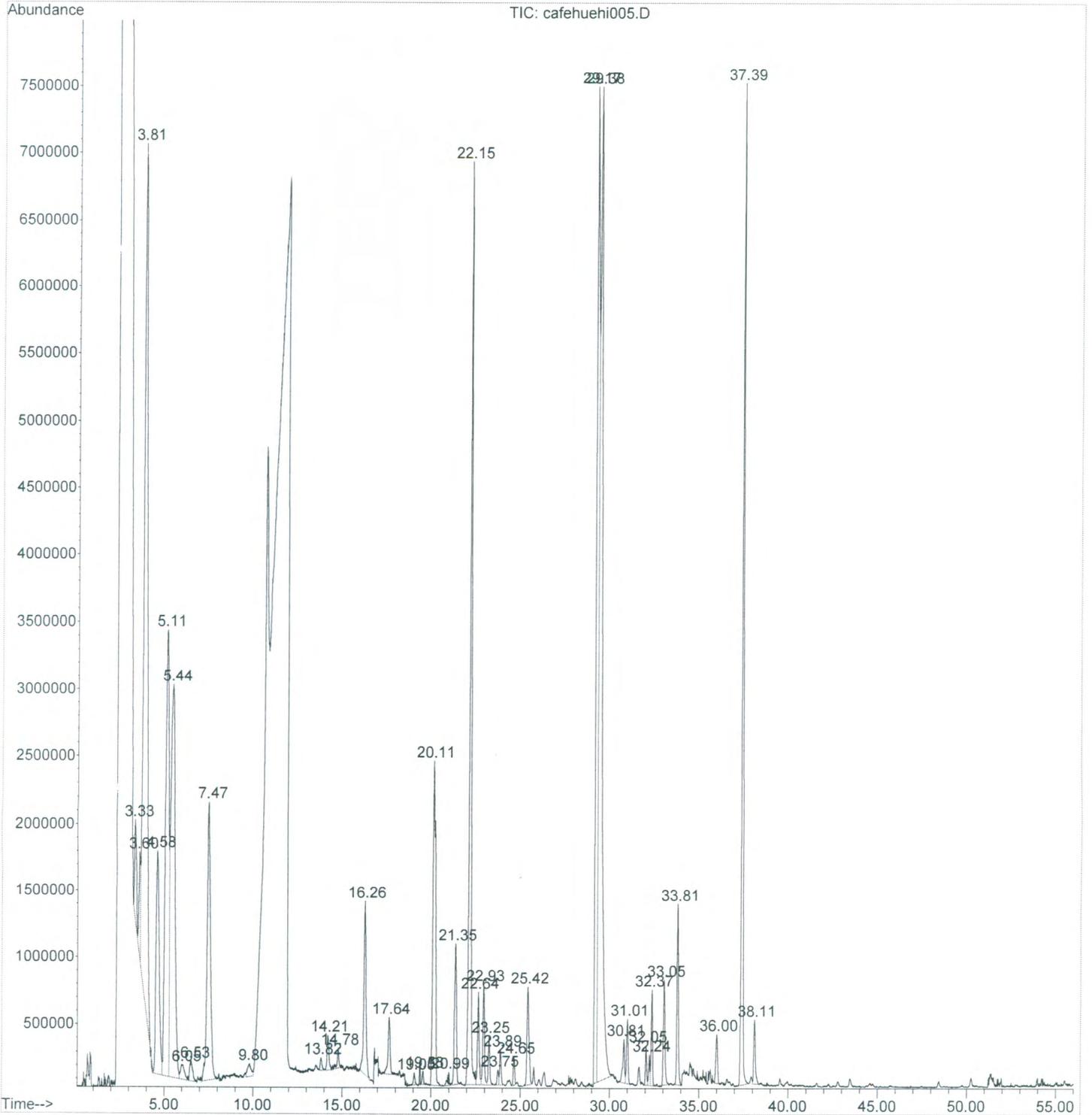
File : D:\MSDCHEM1\DATA\Herberticafehueh003.D
Operator : DA umg
Acquired : 14 Jun 2012 20:45 using AcqMethod CAFEINNOHS.M
Instrument : GC8890-MSD5973 Inert
Sample Name: Cafe HUE-3-245
Misc Info : 0573120601010404, Vial 5641
Vial Number: 8



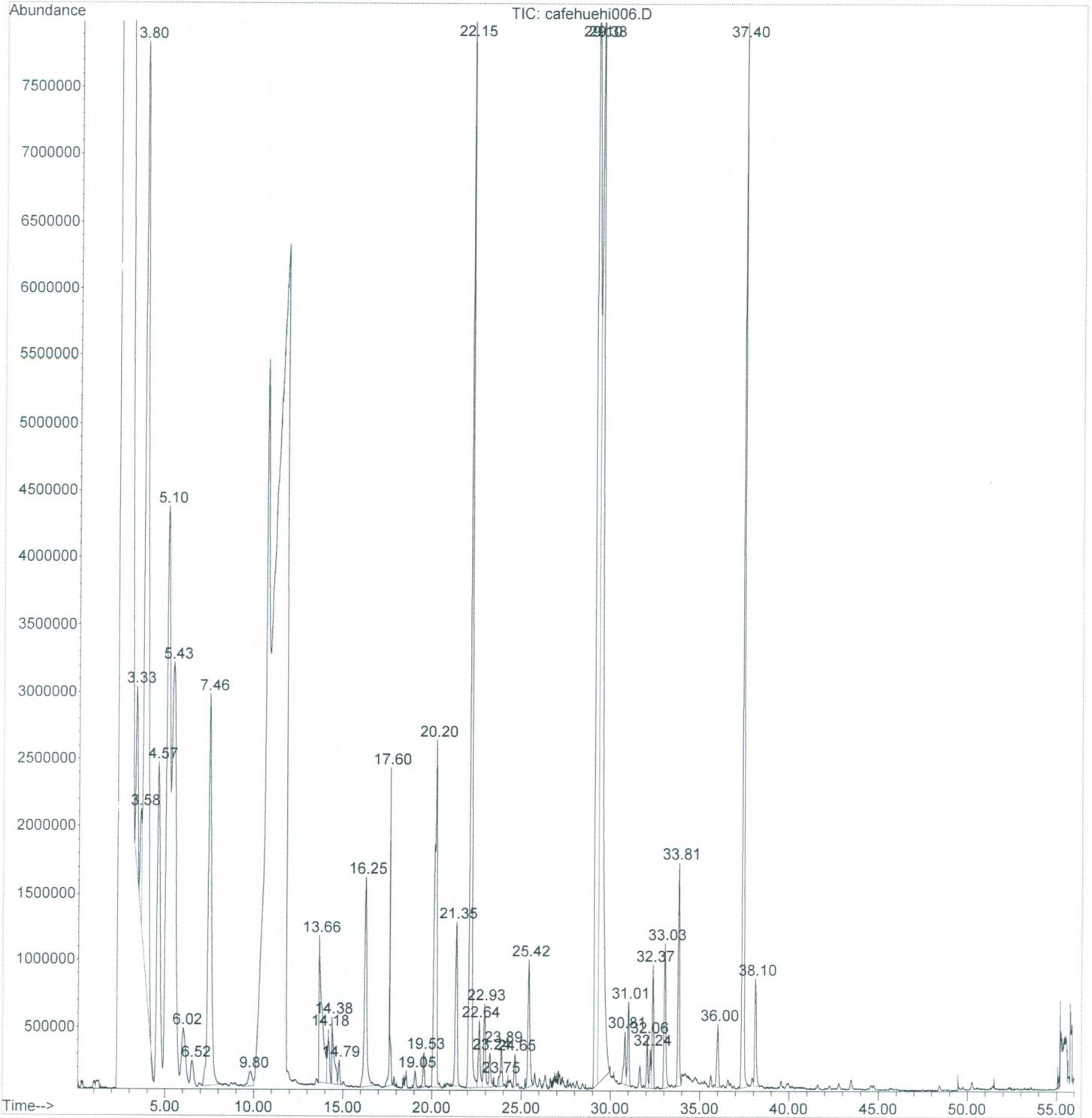
File : D:\MSDCHEM1\DATA\Herbert\cafehuehi004.D
Operator : DA umg
Acquired : 14 Jun 2012 21:51 using AcqMethod CAFERNOHSM
Instrument : GC8890-MSD5973 Inert
Sample Name: Cafe HJE-4-284
Misc Info : 0574120501019404, Vial 5643
Vial Number: 9



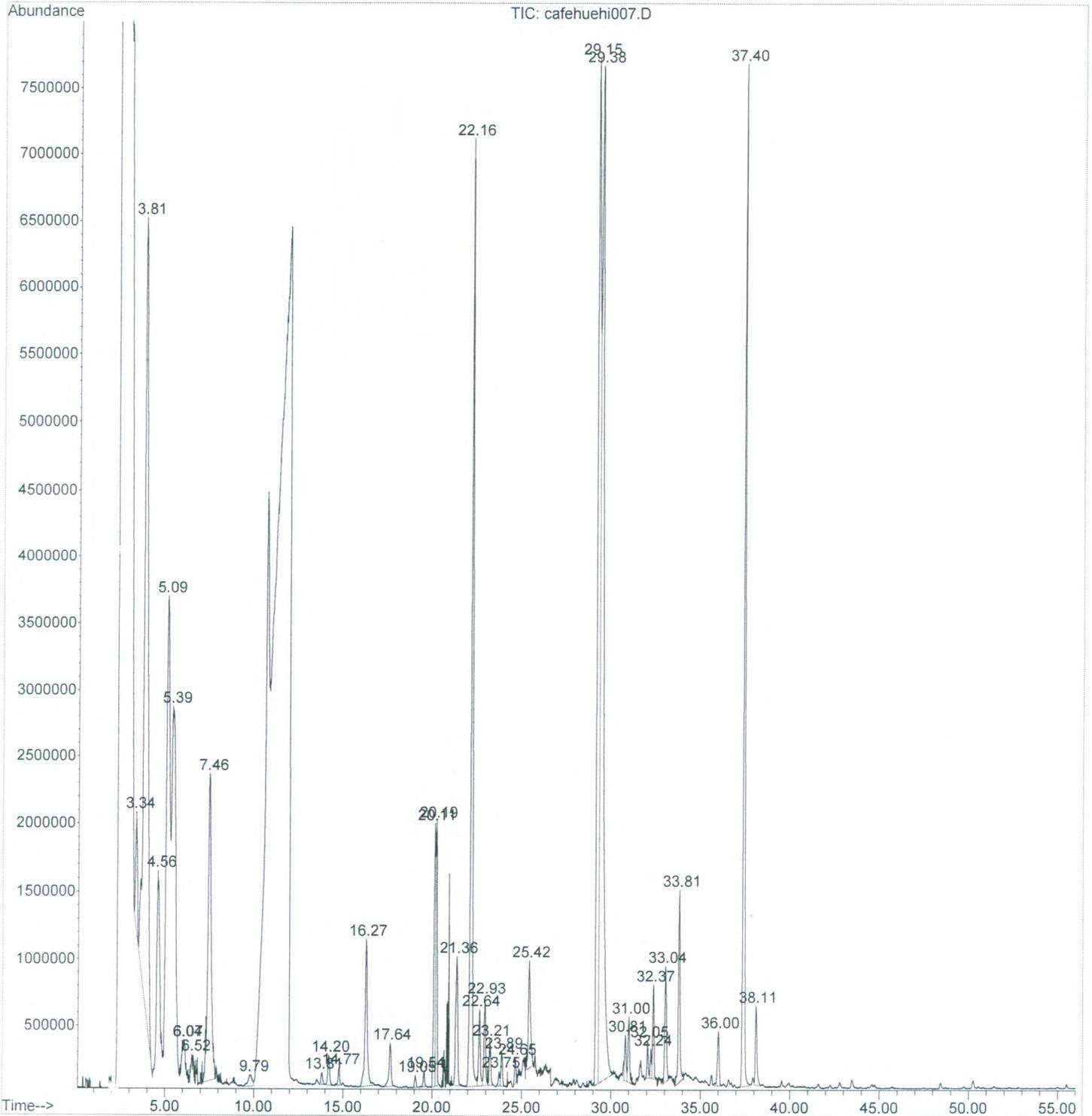
File : D:\MSDCHEM1\DATA\Herberticafehuehi005.D
Operator : DA umg
Acquired : 14 Jun 2012 22:56 using AcqMethod CAFEINNOHS.M
Instrument : GC6890-MSD5973 Inert
Sample Name: Cafe HUE-5-268
Misc Info : 0575120501010404, Vial 5645
Vial Number: 10



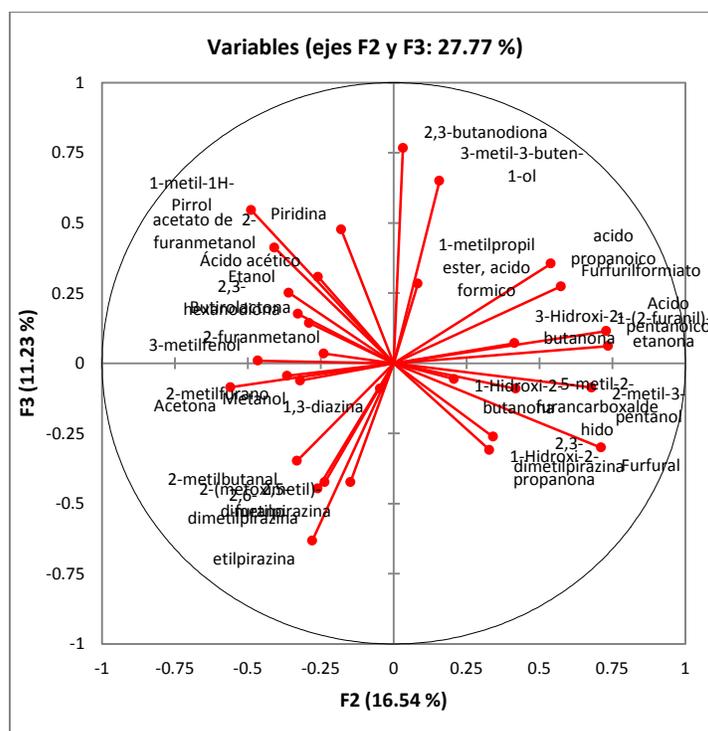
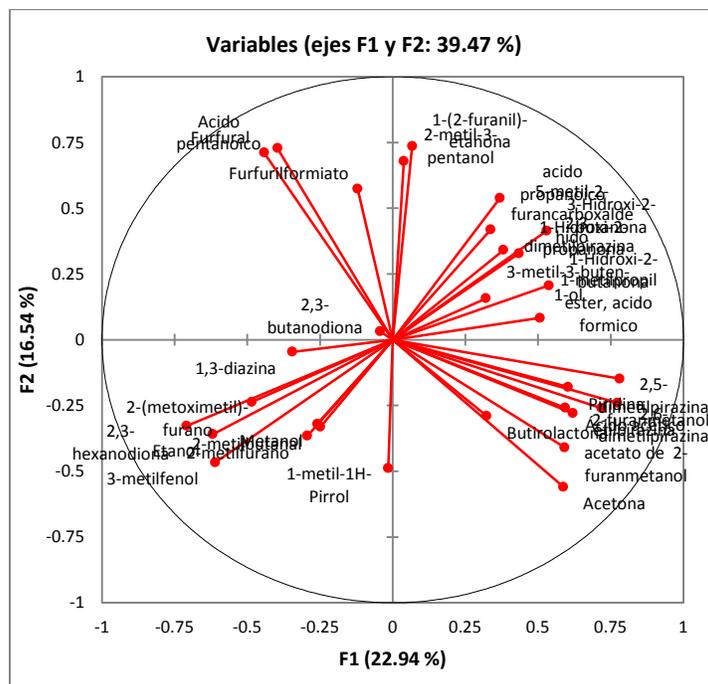
File :D:\MSDCHEM1\DATA\Herb\cafehu006.D
Operator : DA umg
Acquired : 15 Jun 2012 00:01 using AcqMethod CAFEINNOHS.M
Instrument : GC6890-MSD5973 Inert
Sample Name: Cafe HJE-6-250
Misc Info : 0576120601010404, Vial 5647
Vial Number: 11



File : D:\MSDCHEM1\DATA\Herbert\cafehuehi007.D
Operator : DA umg
Acquired : 15 Jun 2012 1:07 using AcqMethod CAFENNOHS.M
Instrument : GC6890-MSD5973 Inert
Sample Name: Cafe HUE-7-251
Misc Info : 0577120601010404, Vial 5649
Vial Number: 12



Anexo 12 (b): Círculos de correlaciones del ACP.



Anexo 12 (c): Contribuciones de las variables (%)

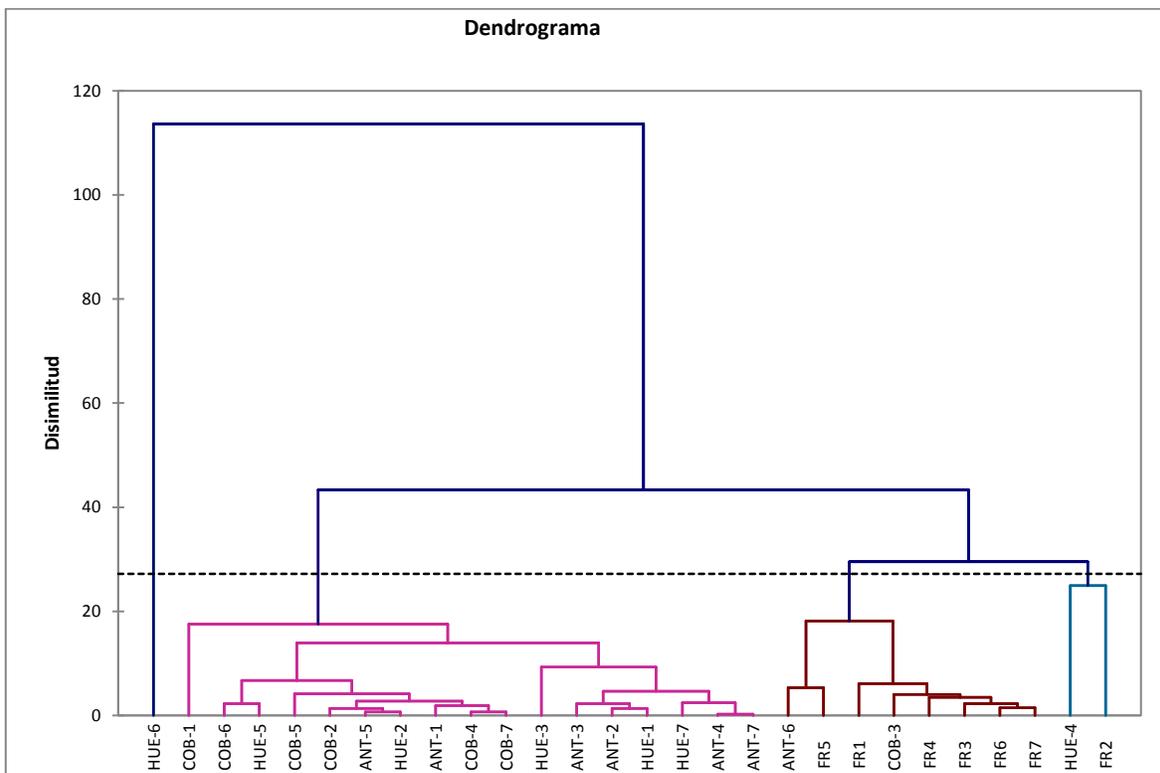
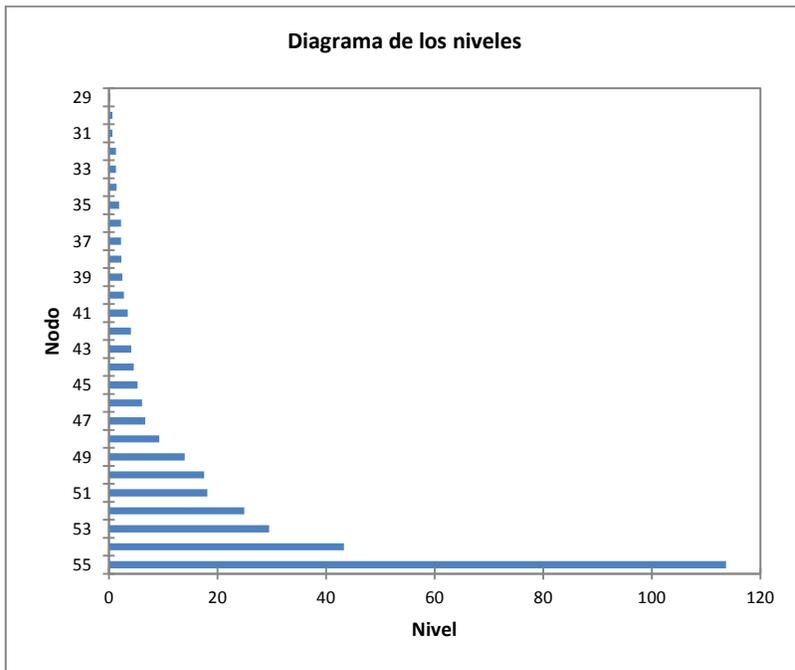
	F1	F2	F3
Acetona	4.693	5.915	0.204
2-metilfurano	1.175	2.520	0.056
Metanol	0.915	1.937	0.106
2-metilbutanal	0.843	2.082	3.364
Etanol	5.222	2.444	1.755
2,3-butanodiona	0.026	0.019	16.348
2,3-hexanodiona	6.855	2.032	0.861
1-metil-1H-Pirrol	0.003	4.519	8.299
3-metilfenol	5.076	4.109	0.002
Piridina	4.962	0.611	6.332
1,3-diazina	1.622	0.040	0.224
2-(metoximetil)-furano	3.199	1.056	5.008
3-metil-3-buten-1-ol	1.402	0.467	11.752
3-Hidroxi-2-butanona	3.826	3.246	0.141
1-Hidroxi-2-propanona	2.577	2.036	2.652
2,5-dimetilpirazina	8.312	0.416	5.001
2,6-dimetilpirazina	7.030	1.279	5.530
etilpirazina	5.231	1.476	11.134
2,3-dimetilpirazina	1.979	2.199	1.911
2-metil-3-pentanol	0.020	8.711	0.210
1-metilpropil ester, acido formico	3.492	0.129	2.237
1-Hidroxi-2-butanona	3.934	0.805	0.087
Ácido acético	4.801	1.268	2.642
Furfural	2.663	9.557	2.508
Furfurilformiato	0.198	6.214	2.087
1-(2-furanil)-etanona	0.062	10.234	0.104
acetato de 2-furanmetanol	4.765	3.167	4.730
acido propanoico	1.853	5.491	3.511
5-metil-2-furancarboxaldehido	1.552	3.317	0.229
Butirolactona	1.421	1.586	0.573
2-furanmetanol	8.151	1.090	0.034
Acido pentanoico	2.139	10.028	0.367

Anexo 12 (d): Cosenos cuadrados de las variables.

	F1	F2	F3
Acetona	0.344	0.313	0.007
2-metilfurano	0.086	0.133	0.002
Metanol	0.067	0.102	0.004
2-metilbutanal	0.062	0.110	0.121
Etanol	0.383	0.129	0.063
2,3-butanodiona	0.002	0.001	0.587
2,3-hexanodiona	0.503	0.108	0.031
1-metil-1H-Pirrol	0.000	0.239	0.298
3-metilfenol	0.373	0.217	0.000
Piridina	0.364	0.032	0.228
1,3-diazina	0.119	0.002	0.008
2-(metoximetil)-furano	0.235	0.056	0.180
3-metil-3-buten-1-ol	0.103	0.025	0.422
3-Hidroxi-2-butanona	0.281	0.172	0.005
1-Hidroxi-2-propanona	0.189	0.108	0.095
2,5-dimetilpirazina	0.610	0.022	0.180
2,6-dimetilpirazina	0.516	0.068	0.199
etilpirazina	0.384	0.078	0.400
2,3-dimetilpirazina	0.145	0.116	0.069
2-metil-3-pentanol	0.001	0.461	0.008
1-metilpropil ester, acido formico	0.256	0.007	0.080
1-Hidroxi-2-butanona	0.289	0.043	0.003
Ácido acético	0.352	0.067	0.095
Furfural	0.195	0.506	0.090
Furfurilformiato	0.015	0.329	0.075
1-(2-furanil)-etanona	0.005	0.542	0.004
acetato de 2-furanmetanol	0.350	0.168	0.170
acido propanoico	0.136	0.291	0.126
5-metil-2-furancarboxaldehido	0.114	0.176	0.008
Butirolactona	0.104	0.084	0.021
2-furanmetanol	0.598	0.058	0.001
Acido pentanoico	0.157	0.531	0.013

Los valores en negrita corresponden para cada variable al factor para lo cual el coseno cuadrado es el mayor. Mientras mas elevado es el coseno cuadrado, más vinculada esta la variable al eje.

Analisis Jerarquico de Clusters.



Resultados por clase:

Clase	1	2	3	4
Objetos	17	8	2	1
Suma de los pesos	17	8	2	1
Varianza intracase	1.866	0.504	3.050	0.000
Distancia mínima al centroide	0.270	0.349	1.235	0.000
Distancia media al centroide	1.085	0.636	1.235	0.000
Distancia máxima al centroide	3.318	0.971	1.235	0.000
	ANT-1	ANT-6	HUE-4	HUE-6
	ANT-2	COB-3	FR2	
	ANT-3	FR1		
	ANT-4	FR3		
	ANT-5	FR4		
	ANT-7	FR5		
	COB-1	FR6		
	COB-2	FR7		
	COB-4			
	COB-5			
	COB-6			
	COB-7			
	HUE-1			
	HUE-2			
	HUE-3			
	HUE-5			
	HUE-7			



Herbert Alejandro Ismatul Rejopachí
Autor



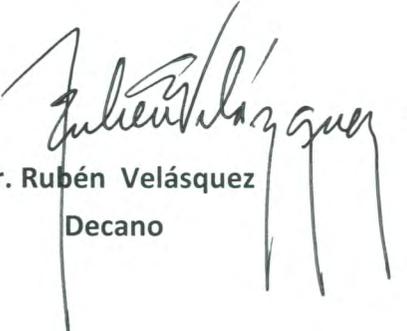
Dr. Francisco Pérez Sabino.
Asesor



Lic. Eduardo Robles
Revisor



Licda. Nohemi Orozco
Directora



Dr. Rubén Velásquez
Decano