



**IDENTIFICACIÓN DE COMPUESTOS VOLÁTILES Y SU RELACIÓN CON LA
CALIDAD SENSORIAL DE CAFÉS DE ESPECIALIDAD PRODUCIDOS EN LA
PROVINCIA DE CHIRIQUÍ, PANAMÁ.**



Universidad Autónoma de Chiriquí
Vicerrectoría Académica
Sistema de Bibliotecas e Información



Fecha: 12/4/24

Facultad: V.I.P

Escuela: Maestría

Se certifica que, tras llevar a cabo el proceso de análisis de originalidad y detección de similitudes en el trabajo de investigación titulado Componentes valátiles y su reacción con la Calidad sensorial Chiriquí, presentado por el/la estudiante Stephanie Miranda con número de cédula N° 2-732-728 con la asesoría del profesor DRA. Craxelly Vega Ríos; el trabajo cumple con el 91% de originalidad, de acuerdo al informe emitido por el profesor asesor.

Es importante señalar que el proceso de análisis de plagio se ha realizado utilizando la herramienta Turnitin y siguiendo procedimientos estandarizados para asegurar la precisión de los resultados.

Nota: El uso de la herramienta Turnitin fue aprobada por el Consejo Académico #5 - Sesión extraordinaria - 22 de mayo de 2023 y modificada el 6 de octubre de 2023.

Eibar Amaya
Responsable de
departamentco



Ada Chávez
Directora del
SIBIUNACHI

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE CHIRIQUÍ
VICERRECTORÍA DE INVESTIGACIÓN Y POSGRADO
PROGRAMA DE MAESTRÍA EN INVESTIGACIÓN

**IDENTIFICACIÓN DE COMPUESTOS VOLÁTILES Y SU RELACIÓN CON LA
CALIDAD SENSORIAL DE CAFÉS DE ESPECIALIDAD PRODUCIDOS EN LA
PROVINCIA DE CHIRIQUÍ, PANAMÁ.**

PRESENTADO POR:

STEPFANIE YOLANIS MIRANDA TORRES

**TESIS DE GRADUACIÓN PARA OPTAR POR EL TÍTULO DE
MAESTRÍA EN INVESTIGACIÓN**

DAVID, CHIRIQUÍ
REPÚBLICA DE PANAMÁ

2024

AGRADECIMIENTO

Agradezco primero que todo a Dios por darme la oportunidad de culminar mis estudios de maestría en investigación. A mis Padres, hermanos y sobrinos por todo su apoyo incondicional.

Agradezco al Centro de Investigación en Recursos Naturales de la Universidad Autónoma de Chiriquí por abrirme las puertas, permitirme crecer profesionalmente en todos estos años y desarrollar esta investigación, a mi asesora la Dra. Aracelly Vega por apoyarme y ser mi mentora en la investigación, siendo mi guía en cada paso profesional que doy.

Al Centro de Investigaciones Farmacognósticas de la Flora Panameña (CIFLORPAN) y a la Facultad de Ciencias Naturales, Exactas y Tecnología de la Universidad de Panamá (UP) por abrirme las puertas de sus laboratorios y permitirme realizar parte de mi investigación.

A la escuela de química de la UP por permitirme realizar la fase experimental de esta investigación en sus instalaciones en especial a mi coasesora MSc. Ana Santana quien ha sido mi guía en toda la fase experimental de este proyecto, darme su apoyo y por su cariño especial, a la profesora Lourdes Arjona por ayudarme y enseñarme la parte técnica del cromatógrafo de gas, además de sus consejos y cariño, a todos y cada uno de los profesores y técnicos de la Universidad de Panamá que de una u otra forma hicieron que mi estancia fuera muy regocijante.

A la Asociación de Cafés Especiales de Panamá (SCAP) por brindarme las muestras para el proyecto y apoyar en el proceso de catación, en especial al Dr. José

Gallardo y Dra. María Ruíz por el apoyo permanente a las investigaciones que se realizan en el Centro.

Al Dr. Pedro González Beermann, Vicerrector de Investigación y Posgrado de la UNACHI, por el apoyo y orientación en esta investigación.

Al Dr. Roberto Quiroz por el apoyo y el aporte brindado en la investigación.

A la Secretaría Nacional de Ciencia y Tecnología (SENACYT) por financiar este proyecto a través de la convocatoria de nuevos investigadores 2021 y darme la oportunidad de llevar a cabo, esta investigación.

A mis tías, Melba y Damiana; primos Bosco y Marcel por apoyarme durante mi estancia en Panamá y hacerla más agradable.

A mis compañeros de trabajo Stephany Reyes y Javier De León por su apoyo y cariño en todos estos años y a mis amigos que de una u otra manera siempre me apoyaron y creyeron en mí.

Al programa de maestría en investigación de la Vicerrectoría de Investigación y Posgrado de la UNACHI.

DEDICATORIA

Este trabajo se lo dedico a mis padres Noris Torres De Miranda y Salvador Miranda por ser mis pilares en todas las etapas de mi vida y ser quienes me inspiran a seguir adelante. A mis hermanos Lisette y Jonathan Miranda que siempre me apoyan y me aconsejan, a mis sobrinos Robson, Ayelen, Ethan, Alejandra y Jonathan por todo su amor incondicional. A todos los profesores, amigos y demás familiares que me apoyaron en esta investigación.

Tabla de contenido

1. ASPECTOS GENERALES	11
1.1 Antecedentes del problema	12
1.2 Planteamiento del problema	13
1.3 Objetivos	13
1.3.1 General	13
1.3.2 Específicos	14
1.4 Delimitación, Alcance o Cobertura	14
1.5 Restricciones y/o Limitaciones	14
2. FUNDAMENTACIÓN TEÓRICA	15
2.1 Café	16
2.1.1 Producción Nacional y Consumo	16
2.1.2 Café de Especialidad	17
2.1.3 Catación	18
2.1.4 Subasta electrónica	22
2.2 Composición volátil del Café	23
2.2.1 Formación de compuestos volátiles	23
2.2.2 Aroma del café	25
2.2.3 Compuestos volátiles mayoritarios en el café	27
2.3 Identificación de compuestos volátiles en café	29
2.3.1 Microextracción en fase sólida	29
2.3.2 Cromatografía de gas	32
2.3.3 Confirmación de compuestos volátiles	33
2.4 Análisis Multifactorial	34
3. METODOLOGÍA	36
3.1 Tipo de investigación	37
3.1.1 Justificación	37
3.2 Sujetos, entorno o fuente de información	38
3.3 Variables o Categorías de la Investigación	38
3.3.1 Definición	39
3.3.2 Operacional	39
3.4 Población	40

3.4.1	Muestra.....	40
3.5	Métodos e instrumentos de investigación.....	40
3.5.1	Tratamiento de la muestra.....	40
3.5.2	Optimización del proceso de microextracción en fase sólida	41
3.5.3	Condiciones del GC-MS.....	41
3.5.4	Identificación de compuestos volátiles	42
3.5.5	Análisis sensorial - Catación de café.....	43
3.5.6	Análisis estadístico.....	45
4.	ANÁLISIS E INTERPRETACIÓN DE RESULTADOS.....	46
4.1	Optimización del proceso de microextracción en fase sólida	47
4.2	Grupos funcionales identificados en café geisha	56
4.3	Catación de café	64
4.4	Relación de puntajes de catación con VOC's identificados	65
7.	CONCLUSIONES.....	70
8.	REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	72
9.	ANEXOS.....	81

Contenido de Tablas

Tabla 1. Descripción de atributos evaluados por el panel de catadores durante una cata de cafés	19
Tabla 2. Clasificación de cafés de especialidad de acuerdo con la puntuación obtenido por catadores.....	21
Tabla 3. Compuestos volátiles que contribuyen al aroma del café arábica.....	28
Tabla 4. Tipo de fibras más comunes disponibles en el mercado.....	30
Tabla 5. Temperatura programada utilizada en las condiciones cromatográficas establecidas.	42
Tabla 6. VOC's identificados en muestra de café comercial utilizando 4 fibras de diferentes polaridades a través de una columna Apolar SH Rxi-5HT 5% dimetilsiloxano	47
Tabla 7. VOC's identificados en muestra de café comercial utilizando 4 fibras de diferentes polaridades a través de una columna Polar Supelcowax 10 100% polietilenglicol	49
Tabla 8. Grupos funcionales identificados en 30 muestras de café geisha utilizando 2 tipos de columnas de diferentes polaridades.	56
Tabla 9. Notas medias de atributos evaluados en 16 muestras de café geisha por el panel de catadores siguiendo el protocolo de cata del SCA.	64
Tabla 10. Análisis de conglomerados multifactorial (MANOVA) de atributos sensoriales y puntaje final de cafés de especialidad	65
Tabla 11. ANOVA de VOC's que presentaron diferencia significativa intra e inter-grupo.....	67
Tabla 12. Compuestos volátiles identificados en 30 muestras de café geisha utilizando una columna apolar SH Rxi-5HT 5% dimetilsiloxano.....	82
Tabla 13. Compuestos volátiles identificados en 30 muestras de café geisha utilizando una columna polar Supelcowax 10, 100% polietilenglicol.....	87

Contenido de Figuras

Figura 1. Hoja de evaluación para cafés durante catación tomando en consideración los 10 atributos mencionados.	22
Figura 2. Principales reacciones durante el tueste del café, considerando precursores y formación de posibles grupos. Fuente: (Ribeiro et al., 2009).	25
Figura 3. Número de compuestos aromáticos identificados en una bebida de café, utilizando diversas técnicas de preparación. Fuente: (Cordoba et al., 2020)	27
Figura 4. Diagrama de extracción mediante el principio de adsorción/absorción y desorción utilizando fibras de SPME. Fuente: (Mottaleb et al., 2014).	31
Figura 5. Rampa de temperatura programada en las condiciones cromatográficas.....	42
Figura 6. Cantidad de compuestos volátiles identificados en 4 fibras de SPME de diferentes polaridades mediante GC-MS utilizando 2 columnas de diferente polaridad.....	55

Abreviatura	Significado
DVB/CAR/PDMS	Divinilbenceno/carboxeno/polidimetilsiloxano
GC	Cromatografía de Gas
HS	Espacio de cabeza
m.s.n.m	Metros sobre nivel del mar
MS	Espectrometría de masa
NIST	National Institute of Standards and Measurements
PA	Poliacrilato
PCA	Análisis de componentes principales
PDMS	Polidimetilsiloxano
PEG	Polietilenglicol - carbowax
RI	Índice de retención
rpm	Rotación por minuto
SCAP	Asociación de Cafés Especiales de Panamá
SPME	Microextracción en Fase Sólida
VOC's	Compuestos volátiles

Resumen

Los cafés de especialidad son aquellos de alta calidad que implican procedimientos estandarizados y se caracterizan principalmente por su sabor único, óptimo para mercados internacionales. Es por ello, que este estudio tiene como objetivo identificar el perfil volátil del café geisha panameño y relacionarlo con atributos sensoriales de cata. Para ello, se colectaron muestras de café geisha en diferentes regiones de la provincia de Chiriquí, evaluando 10 atributos sensoriales. La extracción del perfil volátil se llevó a cabo mediante HS-SPME utilizando fibra bipolar (DVB/CAR/PDMS) en un GC-MS. Se logró identificar más de 100 VOC's en columna Apolar y más de 200 VOC's en columna polar los cuales pertenecen a grupos funcionales como pirazina, terpenos, alcoholes, aldehídos, cetonas, ácidos grasos, en donde más del 70% de los compuestos son altamente aromáticos proporcionando así una calidad y sabor único al café vas. Geisha. Los cafés evaluados sensorialmente presentaron puntajes que indican que pertenecen a cafés de excelencia segregándose en 2 grupos, los de baja calidad con puntaje menor de 88.0 y los de alta calidad con puntajes por encima de 88.0. Además, las pirazinas presentaron mayor porcentaje de área relativa en cafés de baja calidad por lo que estos compuestos puede ser un indicativo en la calidad del café. Esta investigación contribuirá a complementar información acerca de la composición química del café de especialidad panameño, ofreciendo a los caficultores información relevante sobre la calidad de su producto lo que implica un impacto socioeconómico para este sector.

CAPÍTULO 1.
ASPECTOS GENERALES

1.1 Antecedentes del problema.

El café es la bebida social más consumida a nivel mundial, y es el producto agrícola más importante en términos financieros, después del petróleo. Actualmente la calidad del café se mide en función de su aroma y sabor, siendo este uno de los parámetros de calidad a considerar en la catación de los cafés especiales. El aroma, el cual está relacionado con la formación de compuestos químicos (volátiles) que se producen durante el proceso de tostado (Toledo et al., 2016). Se ha comprobado que el café tostado posee alrededor de 950 compuestos volátiles, de los cuales 20 a 30 pueden influir en el aroma y sabor del café (Laukaleja & Kruma, 2018)

En los últimos años se han realizado diversos estudios en donde han relacionado los compuestos volátiles (VOC's, por sus siglas en inglés) de los cafés con puntajes otorgado por jueces certificados. Brasil es uno de los países con mayor cantidad de investigaciones del rubro café en donde han desarrollado modelos, mostrando alta linealidad entre los puntajes de los atributos sensoriales otorgado por jueces y los compuestos volátiles que se encuentran en ciertos perfiles de sabor del café arábica tostado, considerando algunos compuestos como posibles marcadores de calidad en las bebidas de café (Ribeiro et al., 2009, 2012). De igual forma, Agnoletti et al., (2022) encontró una estrecha relación entre la fragancia/atributo del aroma y el puntaje de café arábica con un valor R^2 igual a 0.8503. Por otro lado, en Italia se realizó un estudio de C.arabica y C. canephora proveniente de diferentes países, donde se relacionó los compuestos volátiles, identificados con los atributos sensoriales, a través de un modelo de predicción de notas basado en el algoritmo de regresión de mínimos cuadrados

parciales (PLS), mostrando una estrecha relación ($R^2 > 0.8$) entre los olores seleccionados y las puntuaciones sensoriales (Bressanello et al., 2018).

1.2 Planteamiento del problema

En los últimos años el café de especialidad de Panamá ha sido considerado como uno de los mejores cafés del mundo debido a sus delicados aromas florales de cítricos, jazmín y sabores frutales de melocotón, durazno, entre otros, logrando precios elevados durante subastas electrónicas internacionales. El precio del café depende de su calidad certificada en catación y esta depende de su sabor y olor, a las cuales contribuyen los volátiles del café, objeto de estudio de esta propuesta. Sin embargo, el café Geisha ha sido poco estudiado y cuenta con escasa información científica. El Centro de investigación en Recursos Naturales de la UNACHI ha generado conocimiento sobre este rubro de especialidad poco estudiado en Panamá mediante la realización de investigaciones de calidad. Este estudio busca fortalecer la “Economía Competitiva” del sector productor de café, ofreciéndoles información relevante de la calidad de su producto desde una perspectiva científica a través del estudio de la composición química (compuestos volátiles). Además, se busca generar vínculos y sinergia académico-privado para futuras investigaciones y formación de recurso humano capacitado que contribuya a la innovación.

1.3 Objetivos

1.3.1 General

- Identificar compuestos volátiles en cafés de especialidad de Panamá y su relación con la calidad de taza.

1.3.2 Específicos

- Identificar compuestos volátiles presentes en cafés de especialidad de Panamá.
- Valorar los cafés de especialidad mediante el puntaje otorgado por jueces certificados por la Asociación de Cafés Especiales de Panamá (SCAP).
- Relacionar los atributos de cafés especiales con los compuestos volátiles identificados, mediante quimiometría.

1.4 Delimitación, Alcance o Cobertura

La investigación se enfocó en muestras de cafés especiales producidos en los distritos de Renacimiento, Tierras Altas y Boquete de la provincia de Chiriquí, Panamá, colectados durante el año 2022.

1.5 Restricciones y/o Limitaciones

Entre las limitaciones de la investigación se puede mencionar el tamaño de la muestra, se contaba con poca cantidad para los análisis; el tiempo de análisis de las muestras, el cual implicaba tiempo de corrida extenso en el cromatógrafo de gas y el número de muestras, al ser una gran cantidad se utilizó bastante tiempo en la fase experimental.

CAPÍTULO 2
FUNDAMENTACIÓN TEÓRICA

2.1 Café

El café pertenece a la familia de la planta Rubiaceae, del género *Coffea*, la cual comprende alrededor de 103 especies, segregados en subgéneros *Coffea* y *Baracoffea*. A su vez el subgénero *Coffea* incluye dos especies que se utilizan en la producción del café, siendo los más utilizados a nivel comercial el café arábica (*Coffea arabica*) y café robusta (*Coffea canephora*) (Mushabbab Alasmari et al., 2020). En Panamá, se producen ambas especies de café siendo las provincias de Coclé, Colón y Panamá Oeste productoras de cafés robusta, considerada esta especie como café de bajura, ya que se producen por debajo de los 900 metros sobre nivel del mar (m.s.n.m) mientras que la provincia de Chiriquí produce cafés de altura, como el café arábica, por encima de los 900 m.s.n.m.

2.1.1 Producción Nacional y Consumo

De acuerdo con datos suministrados por el INEC (Instituto Nacional de Estadística y Censo, 2023) la producción de café correspondiente al año agrícola 2022/23 se registró una cosecha de 127,600 quintales pilados con un decrecimiento del 6.8% con respecto al año agrícola 2021/22. La provincia de Chiriquí es la mayor productora de café con 89,600 quintales pilados (70.2%), seguido por la provincia de Coclé con 17,000 (13.3 %), Colón y Panamá Oeste y con 6,200 (4.9 %) y 6,000 (4.7 %) quintales pilados respectivamente. Panamá, Veraguas y la comarca Ngäbe Buglé fue donde se produjo la menor cantidad de quintales pilados con 3,900 (3.1 %); 3,400 (2.7 %) y 1,500 (1.2 %). Cabe resaltar que esos datos representan cifras preliminares de la cosecha de café en Panamá.

La cifra del consumo de café en Panamá oscila entre los 5.9 kilogramos per cápita de café por año, siendo este un consumo alto si se compara con otros países como Estados Unidos, donde su consumo per cápita es de 3.7 kilogramos (MIDA, 2022). De acuerdo con Costa, (2020) los países con mayor producción de café a nivel de Latinoamérica son Brasil, Colombia, Honduras, México, Perú, Nicaragua y Costa Rica; Panamá no es un país productor de café a gran escala. Sin embargo, en los últimos años el café de especialidad panameño (Café Geisha) se ha destacado por su alta calidad y es considerado como uno de los mejores cafés a nivel mundial (SCAP, 2023).

2.1.2 Café de Especialidad

Los cafés de especialidad son aquellos de alta calidad que implican procedimientos estandarizados, que abarcan todo el ciclo del proceso desde la elección de criterios de plantación hasta la entrega al consumidor y se caracterizan principalmente por su sabor único, óptimo para mercados internacionales (Piccino et al., 2013; Sepúlveda et al., 2016).

El crecimiento de las plantas de café arábica se da en condiciones donde la temperatura oscila entre 14 a 26 °C, las precipitaciones anuales se encuentran entre 1.000 y 2.700 mm y altitudes entre 400 a 1.200 metros sobre nivel del mar (m.s.n.m) (Ahmed et al., 2021; Toledo et al., 2016). En el caso de los cafés var. Geisha, el crecimiento de esta planta se da en altitudes que oscilan entre los 1.200 a 2.600 m.s.n.m., es por ello, que la provincia de Chiriquí es ideal para el cultivo de esta variedad, presentando condiciones fértiles de suelo en zonas que rodean el volcán Barú, pluviosidad regular y altitud adecuada que brindan una exitosa producción de granos de café de alta calidad (SCAP, 2021).

Estos granos se caracterizan principalmente por su calidad única, sabor, aroma donde su carácter es distinto y superior a los de una bebida artesanal (Agnoletti et al., 2022; Córdoba et al., 2021). La calidad del café se mide en función del sabor y aroma y para ello se evalúa estos criterios a través de una cata, (término técnico utilizado para la degustación del café) realizada oficialmente por catadores certificados, quienes utilizan terminología proporcionada en diversas ruedas de cata para añadir notas al perfil del café (Costa, 2020; Seninde & Chambers, 2020).

2.1.3 Catación

La cata es un método de análisis cuantificable utilizado para evaluar una muestra de café, desde su calidad general hasta las características individuales (Catão et al., 2022). Se evalúa la calidad de los cafés tomando en consideración la experiencia previa del catador, dichos cafés se califican con una puntuación numérica considerando 10 atributos sensoriales como fragancia y aroma, sabor, retrogusto, acidez, cuerpo, equilibrio, uniformidad, taza limpia, dulzor, defectos y total (Laukaleja & Kruma, 2018; SCA, 2018). Cada atributo se debe evaluar en una escala del 0 al 10 y la puntuación final representa la sumatoria de la puntuación individual en cada atributo. Los primeros cinco atributos de calidad se basan en la química física del sabor del café, mientras que uniformidad, taza limpia y dulzura representan la calidad de la preparación del café verde durante la cosecha y el procesamiento de los granos de café (Lingle & Menon, 2017). A continuación, se describen los atributos que los catadores toman en consideración al momento de evaluar un café.

Tabla 1. Descripción de atributos evaluados por el panel de catadores durante una cata de cafés

Atributo	Descripción
Fragancia / Aroma	La fragancia hace referencia al olor del café molido cuando aún está seco, mientras que el Aroma es el olor del café en infusión con agua caliente. Se evalúa en tres pasos en la cata: (1) oler los pozos colocados en la taza antes de verter el agua sobre el café; (2) olfateando los aromas que se desprenden al romper la corteza; y (3) oler los aromas que desprende el café.
Sabor	Representa el carácter principal del café y las primeras impresiones dadas por los primeros aromas del café. Es una impresión combinada de todas las sensaciones gustativas (papilas gustativas) y aromas retronasales que van desde la boca a la nariz. La puntuación otorgada al sabor debe tener en cuenta la intensidad, calidad y complejidad de su sabor y aroma combinados, que se experimenta al sorber enérgicamente el café en la boca, de modo que todo el paladar participe en la evaluación.
Regusto	El retrogusto se define como la duración de las cualidades positivas del sabor (gusto y aroma) que emanan de la parte posterior del paladar y permanecen después de expectorar o tragar el café. Si el retrogusto fuera corto o desagradable, se le daría una puntuación más baja.
Acidez	La acidez suele describirse como "brillante" cuando es favorable o "agria" cuando es desfavorable. En el mejor de los casos, la acidez contribuye a la vivacidad, el dulzor y el carácter de fruta fresca del café. Se experimenta y evalúa casi inmediatamente cuando el café se sorbe por primera vez en la boca. Sin embargo, una acidez demasiado intensa o dominante puede resultar desagradable, y una acidez excesiva puede no ser apropiada para el perfil de sabor de la muestra. La puntuación final marcada en la escala horizontal de tildes debe reflejar la calidad percibida por el panelista para la acidez en relación con perfil de sabor esperado en función de las características de origen y/u otros factores (grado de tueste, uso previsto, etc.).
Cuerpo	La calidad del cuerpo se basa en la sensación táctil del líquido en la boca, especialmente la percibida entre la lengua y el paladar de la boca. La mayoría de las muestras con mucho cuerpo también pueden recibir una puntuación alta en términos de calidad debido a la presencia de coloides de cerveza y sacarosa. Algunos cafés con un cuerpo más ligero también pueden tener una sensación agradable en la boca.
Balance	Indica cómo se complementan o contrastan los distintos aspectos del sabor, regusto, acidez y cuerpo entre sí. En tal caso de que la muestra no presente

	ciertos atributos aromáticos o gustativos o si algunos atributos sean excesivos, la puntuación de equilibrio se reducirá.
Uniformidad	La uniformidad se refiere a la consistencia del sabor de las diferentes tazas de la muestra degustada. Si las tazas saben diferentes, la puntuación de este aspecto no sería tan alta. Se conceden 2 puntos por cada taza que presente este atributo, con un máximo de 10 puntos si las 5 tazas son iguales.
Taza limpia	Taza limpia se refiere a la ausencia de impresiones negativas que interfieran desde la primera ingesta hasta el regusto final, lo que indica una “transparencia” de la taza. Cualquier sabor o aroma no similar al café descalificará una taza individual y se concederán 2 puntos por cada taza que muestre el atributo de Taza Limpia.
Dulzor	El dulzor se refiere a una agradable plenitud de sabor, así como cualquier dulzor evidente y su percepción es el resultado de la presencia de determinados hidratos de carbono. Lo contrario del dulzor en este contexto es los sabores agrios, astringentes o “verdes”. Esta cualidad puede no percibirse directamente como en los productos cargados de sacarosa (como los refrescos), pero afectará a otros atributos del sabor. Se concederán 2 puntos por cada taza que presente este atributo, con una puntuación máxima de 10 puntos.
Defectos	Se clasifica de dos maneras: Un sabor perceptible, pero no abrumador, que generalmente se encuentra en los aspectos aromáticos. El otro es el sabor no perceptible, por lo general en los aspectos gustativos, que es abrumador o hace la muestra sea desagradable al paladar.
Overall	El aspecto de puntuación “global” pretende reflejar la calificación holística de la muestra tal y como la percibe cada panelista. Una muestra con muchos aspectos muy agradables, pero que no esté a la altura, recibiría una puntuación inferior. Un café que cumpliera las expectativas en cuanto a su carácter y reflejara las cualidades de sabor de su origen recibiría una puntuación alta.

Fuente: (SCA, 2018)

De acuerdo con la Asociación de Cafés Especiales de América (SCA, por sus siglas en inglés), el grado de especialidad de un café se clasifica de acuerdo con el puntaje dado por el panel de catadores certificados, dentro de un proceso de catación.

En la siguiente tabla se describe la clasificación de los cafés de especialidad de acuerdo con el puntaje final obtenido:

Tabla 2. Clasificación de cafés de especialidad de acuerdo con la puntuación obtenido por catadores

Puntaje	Clasificación	
90 - 100	Sobresaliente	Especialidad
85 – 89.99	Excelente	
80 – 84.99	Muy bueno	
< 80	Por debajo de la especialidad	No especial

Fuente: (SCA, 2018)

Adicionalmente, durante la cata se proporciona información sobre descriptores sensoriales que explican las variaciones de los cafés evaluados. Entre las principales características consideradas se encuentran: floral, amargo, afrutado, verde, nuez, tostado, dulce, agrio, dulce y amaderado (Sunarharum et al., 2014). Estos descriptores sensoriales brindan información referente a factores intrínsecos y extrínsecos que puedan causar variaciones en el perfil del café como factores ambientales, proceso, almacenaje, empaçado, elaboración del café (Seninde & Chambers, 2020).

Cabe señalar que los cafés que presenten puntuaciones altas son seleccionados para participar en subastas electrónicas internacionales en las que los compradores de todo el mundo pueden participar para adquirir dichos cafés. El café Geisha se caracteriza por ser muy aromático y floral, con sabor dulce y de frutas cítricas, obteniendo puntajes por encima de los 90, siendo considerados como cafés sobresalientes (SCAP, 2023).



Formato de Catación de la Asociación Americana de Cafés Especiales

Nombre: _____

Fecha: _____ Mesa: _____ Sesión: _____

Clasificación:			
8.00 - Bueno	7.00 - Muy bueno	8.00 - Excelente	9.00 - Extraordinario
6.25	7.25	8.25	9.25
6.50	7.50	8.50	9.50
6.75	7.75	8.75	9.75

Muestra #	Nivel de Tueste	Puntaje: Fragrancia/Aroma	Puntaje: Sabor	Puntaje: Acidez	Puntaje: Cuerpo	Puntaje: Uniformidad	Puntaje: Taza Limpia	Puntaje: Puntaje Catador	Puntaje Total
		6 7 8 9 10	6 7 8 9 10	6 7 8 9 10	6 7 8 9 10	6 7 8 9 10	6 7 8 9 10	6 7 8 9 10	
		Seco Calidad Espuma	Puntaje: Sabor Residual	Intensidad Alta Baja	Nivel Pesado Ligero	Puntaje: Balance	Puntaje: Dulzor	Defectos (sustraer) Ligero=2 # tazas Intensidad Rechazo=4 $\square \times \square = \square$	
Notas:									Puntaje Final

Muestra #	Nivel de Tueste	Puntaje: Fragrancia/Aroma	Puntaje: Sabor	Puntaje: Acidez	Puntaje: Cuerpo	Puntaje: Uniformidad	Puntaje: Taza Limpia	Puntaje: Puntaje Catador	Puntaje Total
		6 7 8 9 10	6 7 8 9 10	6 7 8 9 10	6 7 8 9 10	6 7 8 9 10	6 7 8 9 10	6 7 8 9 10	
		Seco Calidad Espuma	Puntaje: Sabor Residual	Intensidad Alta Baja	Nivel Pesado Ligero	Puntaje: Balance	Puntaje: Dulzor	Defectos (sustraer) Ligero=2 # tazas Intensidad Rechazo=4 $\square \times \square = \square$	
Notas:									Puntaje Final

Muestra #	Nivel de Tueste	Puntaje: Fragrancia/Aroma	Puntaje: Sabor	Puntaje: Acidez	Puntaje: Cuerpo	Puntaje: Uniformidad	Puntaje: Taza Limpia	Puntaje: Puntaje Catador	Puntaje Total
		6 7 8 9 10	6 7 8 9 10	6 7 8 9 10	6 7 8 9 10	6 7 8 9 10	6 7 8 9 10	6 7 8 9 10	
		Seco Calidad Espuma	Puntaje: Sabor Residual	Intensidad Alta Baja	Nivel Pesado Ligero	Puntaje: Balance	Puntaje: Dulzor	Defectos (sustraer) Ligero=2 # tazas Intensidad Rechazo=4 $\square \times \square = \square$	
Notas:									Puntaje Final

Figura 1. Hoja de evaluación para cafés durante catación tomando en consideración los 10 atributos mencionados.

2.1.4 Subasta electrónica

El precio del café depende principalmente de sus propiedades organolépticas, las cuales son previamente certificados por un panel de catadores y solo participan los que destacan con una alta calidad en cuanto a sabor y aroma, (Wilson & Wilson, 2014). En el mundo empresarial del café la calidad es el principal vínculo existente entre los distintos interesados en el rubro del café (Santoso et al., 2021).

De acuerdo con el Observatory of Economic Complexity (OEC) en el 2022 Panamá exportó aproximadamente 42 millones de dólares en Café, convirtiéndolo en el exportador número 50 de Café en el mundo. Para el mismo año, el rubro del café fue el

producto número 17 más exportado en Panamá. Entre los principales países compradores de Café de Panamá se encuentra China Taipéi (\$7,78 M), Estados Unidos (\$5,7 M), Japón (\$5,5 M), China Taipéi (\$5,26 M), y Corea del Sur (\$4,17 M) (OEC, 2021). Para el año 2023, el café Geisha de Panamá alcanzó un récord mundial al venderse a 10 005.00 dólares el kilogramo de café en la subasta electrónica, lo que representa un impacto socioeconómico en el país (SCAP, 2023).

2.2 Composición volátil del Café

Entre los parámetros de calidad considerados en la catación de cafés de especialidad del aroma es uno de los más importantes y este se encuentra relacionado con los compuestos volátiles que se producen durante el proceso de tostado (Toledo et al., 2016). Dicha composición en el café puede verse afectada por factores como: especie y variedad del grano, condiciones ambientales, almacenamiento, tiempo y temperatura del tostado (Laukaleja & Kruma, 2019).

2.2.1 Formación de compuestos volátiles

Durante el proceso de tostado se producen cambios físicos y químicos en el café que originan la formación de los compuestos volátiles, que proporcionan sabor, color y aroma al café (Toledo et al., 2016). Entre los compuestos considerados como precursores de la formación de la composición volátil presentes en los granos de café verde se encuentran los azúcares, compuestos nitrogenados (cafeína, trigonelina, aminoácidos libres, proteína) y compuestos fenólicos (5-CQA, fenoles totales) (Girma & Sualeh, 2022), los cuales participan en reacciones complejas en el proceso de tostado como las reacciones de Maillard, la descomposición de los azúcares, la oxidación de lípidos, hidrólisis y pirólisis (Tarigan et al., 2022).

El tostado del café se da entre los 180 a 240 °C en un tiempo aproximado de 8 a 15 minutos (Sunarharum et al., 2014). El proceso de tostado se da en 3 etapas, durante la primera etapa se da un proceso de secado (20 a 160 °C) en donde los granos comienzan a hincharse y a tornarse de color amarillo. Posteriormente, se aumenta el tamaño de los granos significativamente y se forman grietas en la superficie razón por la cual los granos se tornan quebradizos (este es el primer paso para la formación de compuestos volátiles). En la siguiente etapa ocurre el tostado (160 – 190 °C) en el que se da una serie de reacciones complejas que forman los compuestos volátiles que contribuyen al aroma del café, entre ellos se da la reacción de Maillard en donde aminoácidos libres y proteínas reaccionan para reducir los azúcares (Hellwig & Henle, 2020) esta reacción es responsable de la coloración dorada y el sabor característico de una amplia variedad de alimentos cocidos, incluyendo pan tostado, carne asada, café tostado y caramelos. Por otro lado, algunos carbonil derivados de la reacción de Millard reaccionan con aminoácidos libres seguida de una heterociclización para la formación de aldehídos y cetonas (Wu et al., 2022).

A su vez ocurren reacciones de pirolisis en la parte interna del café produciendo pirazinas, aldehídos y otros compuestos volátiles que contribuyen al aroma y sabor característicos del café (Tarigan et al., 2022). Como parte de la red de reacciones de Maillard, la degradación de Strecker es de gran importancia para la formación de aldehídos en el que ocurre una desaminación y descarboxilación oxidativa del aminoácido que da lugar al aldehído de Strecker (ReCHO) también se produce alquilpirazinas que contribuyen a las notas terrosas y tostadas del aroma del café (Poisson et al., 2017).

En la etapa final de caramelización se crea el color del café (190 - 220 °C), los granos de café emiten humo, dióxido de carbono y se produce el típico aroma a café producido por los principales compuestos volátiles (Gancarz et al., 2022a; Toledo et al., 2016). Durante estas reacciones complejas se pueden producir más de mil compuestos que conforman la fracción volátil del café (Catão et al., 2022).

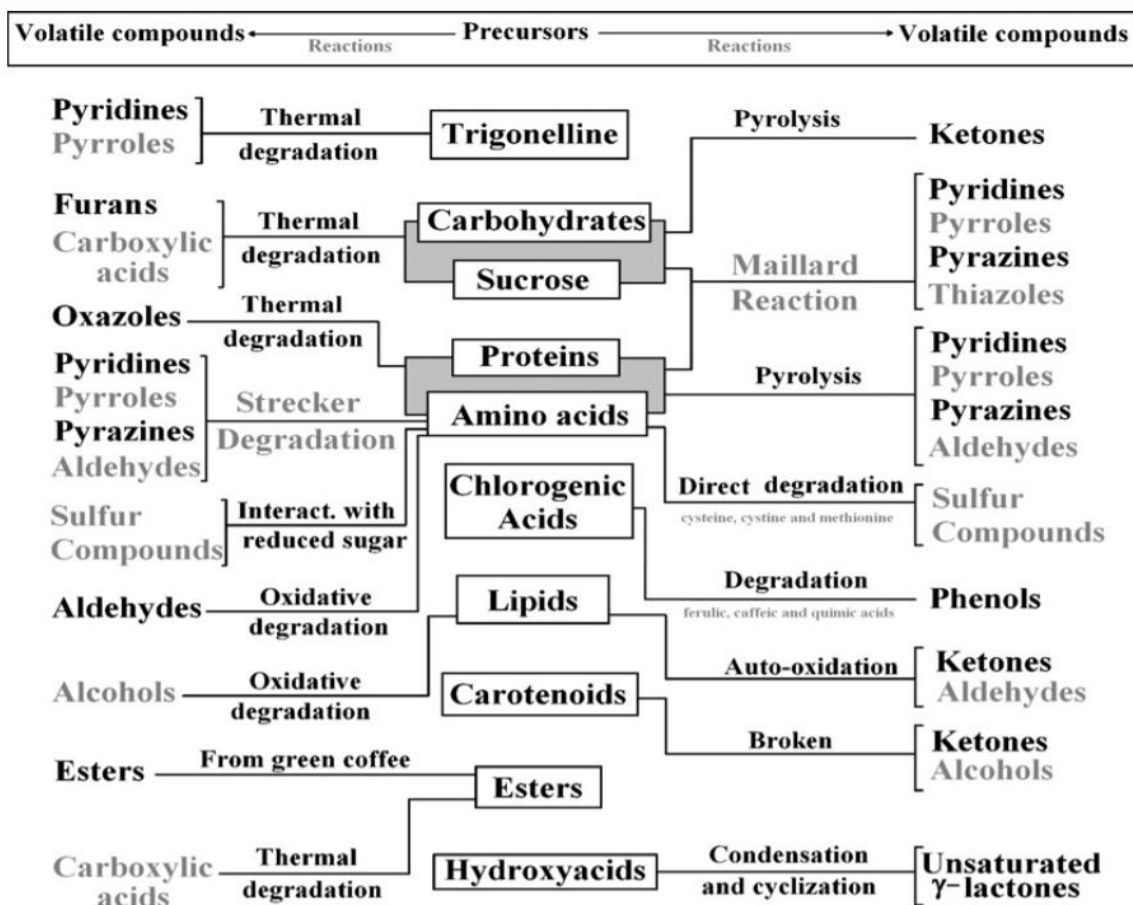


Figura 2. Principales reacciones durante el tueste del café, considerando precursores y formación de posibles grupos. Fuente: (Ribeiro et al., 2009).

2.2.2 Aroma del café

El aroma en el café se debe a diversos compuestos volátiles formados durante el proceso de tueste del café. Entre los compuestos más reportados en orden de abundancia se encuentran los siguientes grupos: furanos, pirazinas, cetonas, pirroles,

fenoles, hidrocarburos, ácidos anhidros, aldehídos, ésteres, alcoholes y compuestos sulfurados, en donde cada uno contribuye a atributos aromáticos característicos en el café (Toledo et al., 2016; Yang et al., 2016).

Cada grupo funcional proporciona aromas característicos en el café, aquellos que contengan grupos de cetonas, ésteres y aldehídos poseen atributos con aromas florales, frutales y herbales lo que le confiere aspectos positivos a la bebida (Toledo et al., 2016). De igual forma, la presencia de compuestos furanos proporcionan aromas de almendras, dulces y afrutados a la bebida (Laukaleja & Kruma, 2018). Por otro lado, las pirazinas, pirroles y piridinas son responsables de atributos aromáticos como notas de nuez, tostado y cacao (Seninde & Chambers, 2020).

En el caso de compuestos sulfurados, como los tioles, contribuyen significativamente al sabor del café proporcionando atributos como caramelo, café fresco y ahumado (Sunarharum et al., 2014). Todos estos compuestos proporcionan características y atributos únicos a cada café; por consiguiente, diferentes concentraciones de un mismo compuesto pueden dar lugar a características sensoriales diversas (Bona & Da Silva, 2016).

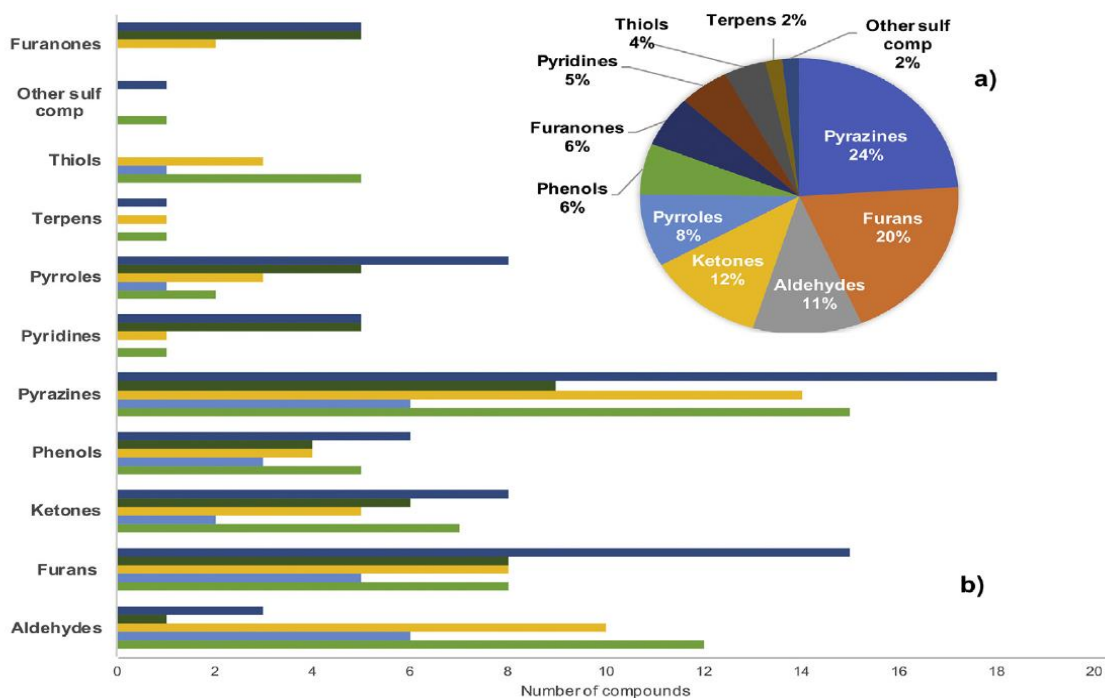


Figura 3. Número de compuestos aromáticos identificados en una bebida de café, utilizando diversas técnicas de preparación. Fuente: (Cordoba et al., 2020)

2.2.3 Compuestos volátiles mayoritarios en el café

Diversos estudios indican que se han identificado más de 1000 compuestos volátiles en el café tostado, pero se estima que solo de 30 a 50 de estos compuestos son los responsables del aroma en el café (Córdoba et al., 2020; Laukaleja & Kruma, 2018). De acuerdo con Catão et al., (2022), los compuestos furfural, 1-acetil, 1-4-dihidropiridina, 2-acetil-3metilpirazina, 5-furfural y cafeína se encuentran en mayor abundancia y presentaron una mayor contribución en el modelo para diferenciar muestras a 1 min de tostado en el que relacionaban variables del tostado con el perfil volátil a través de análisis multivariado.

Por otro lado, Agnoletti et al., (2022), en un estudio realizado para predecir la calidad del café mediante los compuestos volátiles consideraron que de los 29 compuestos identificados al menos 15 fueron importantes para la construcción del

modelo entre ellos piridina, 5-metilfurfural, 4-etil-2-metoxifenol, 2-acetil-3- metilpirazina reportados como marcadores químicos para la calidad del café.

También se han realizado estudios tomando en consideración si el procesamiento influye sobre la calidad y sabor del café. De acuerdo con Elhalis et al., (2021) la fermentación húmeda de los granos de café puede mejorar significativamente el sabor, el aroma y la calidad sensorial de la bebida de café al aumentar directamente los niveles de compuestos volátiles claves como alcoholes, ácidos orgánicos, ésteres y aldehídos.

De igual forma Varady et al., (2022), comparó los compuestos volátiles tomando en consideración los efecto del proceso natural, lavado, honey, fermentación, maceración de los granos de cafés de especialidad y observó que las mayores diferencias entre los cafés se obtuvieron entre cafés naturales y fermentados, donde la proporción relativa de los perfiles de éster etílico, ácido propanoico, ácido butanoico, 2-metil, 3-furaldehído y ácido acético fue mayor en un 65-100% por el método de fermentación anaeróbica como método natural. En la tabla 3 se muestran algunos de los compuestos volátiles mayoritarios en el café

Tabla 3. *Compuestos volátiles que contribuyen al aroma del café arábica*

No	Compuestos volátiles	Aroma descriptor	Referencia
1	Furfuril alcohol	Dulce, caramelo	1,3
2	5-metilfurfural	Caramelo, almendras tostadas	1,3
3	Furfural	Dulce, madera, caramelo	1
4	4-vinilguaiacol	Especies, madera seca, ámbar fresco	1,3,5
5	Piridina	Tostado, astringente	1,4
6	5-hidroximetilfurfural	Pequeñas cantidades: nota a caramelo, dulzor y complejidad Cantidades elevadas: sabor amargo y desagradable	1,3
7	Maltol	Notas dulces y tostado	
8	Difurfuril éter	Tostado,	1
9	2-acetil-3-metilpirazina	Nuez, amargo, leñoso	2,5
10	Ácido palmítico	Mantequilla, leche	2
11	4-hidroxi-2,5-dimetil-3(2H)-furanona (furanol)	Dulce, caramelo	3,5
12	Limoneno	cítrico	3

Fuente: (Catão et al., 2022)¹, (Agnoletti et al., 2022)², (Sunarharum et al., 2014)³, (Gancarz et al., 2022a)⁴, (Angeloni et al., 2021)⁵,

Entre las técnicas más utilizadas para el estudio de la fracción volátil en el café se encuentra la cromatografía de gas utilizando métodos de extracción que no requieren el uso de disolventes como lo es la microextracción en fase sólida (SPME).

2.3 Identificación de compuestos volátiles en café

2.3.1 Microextracción en fase sólida

Existen diversos métodos para la extracción de la fracción volátil de una muestra entre ellos la desorción térmica (TD), el espacio de cabeza estático (SHS), el espacio de cabeza dinámico (DHS), la extracción en fase sólida (SPE), la microextracción en fase sólida (SPME), la extracción magnética en fase sólida (MSPE), la extracción líquido-líquido (LLE) y la microextracción líquido-líquido dispersiva (DLLM) (Lim et al., 2023). Sin embargo, una de las más eficientes es la microextracción en fase sólida (SPME), esta técnica de pretratamiento integra la toma de muestras, la extracción, la concentración y la inyección en un solo paso, con la ventaja de que no utiliza disolventes en comparación con la SPE tradicional (Peng et al., 2022).

La SPME es una técnica que implica la absorción/adsorción y desorción de los analitos dispersos en la matriz, los cuales se adhieren a una fibra con recubrimiento fino, distribuyéndose así en la mayor parte del recubrimiento o en la superficie porosa activa hasta alcanzar un equilibrio entre ambas partes (Billiard et al., 2020). Este tipo de técnicas se puede aplicar a compuestos volátiles, semivolátiles, contaminantes ambientales y compuestos que proporcionan fragancia y sabor (SUPELCO, n.d.). Las fibras contenidas en la SPME pueden ser de diferentes recubrimientos y su funcionalidad va a depender principalmente de los compuestos de interés que se requiera evaluar y

del tipo de matriz que se analizará (Vas & Vékey, 2004). A continuación, se describen algunas de las fibras SPME más comunes en el mercado.

Tabla 4. Tipo de fibras más comunes disponibles en el mercado

<i>Recubrimiento de fibra</i>	<i>Espesor de película (µm)</i>	<i>Polaridad</i>	<i>Temperatura máxima de operación (°C)</i>	<i>Clase de compuestos analizados</i>
<i>Polidimetilsiloxano (PDMS)</i>	100	No polar	280	Volátiles
<i>PDMS</i>	30	No polar	280	No polar semivolátiles
<i>PDMS</i>	7	No polar	280	Semivolátiles medios a no polares
<i>Poliacrilato (PA)</i>	85	Polar	320	Semivolátiles polares (fenoles)
<i>Carbowax (PEG)</i>	65	Polar	265	Analitos polares (alcoholes)
<i>Carboxen-PDMS</i>	75	Bipolar	320	Gases y volátiles
<i>DVB-PDMS-Carboxen</i>	50/30	Bipolar	270	Olores y sabores

Fuente : Mottaleb et al., 2014

Cabe mencionar que, a pesar de que esta técnica tenga ventajas como bajo consumo de disolventes orgánicos, alta reproducibilidad, reutilizable y bajo consumo de energía (Billiard et al., 2020), existen algunas consideraciones importantes que se debe tomar en cuanto al momento de utilizar estas fibras como acondicionamiento previo, tiempo de extracción adecuado (mayor de 30 min), agitación constante, temperatura de extracción la cual debe ser menor de 70°C para evitar fugas de los compuestos volátiles o semivolátiles y pH de la muestra (Mottaleb et al., 2014; Vas & Vékey, 2004). Estas fibras pueden ser utilizadas en matrices acuosas y muestras sólidas.

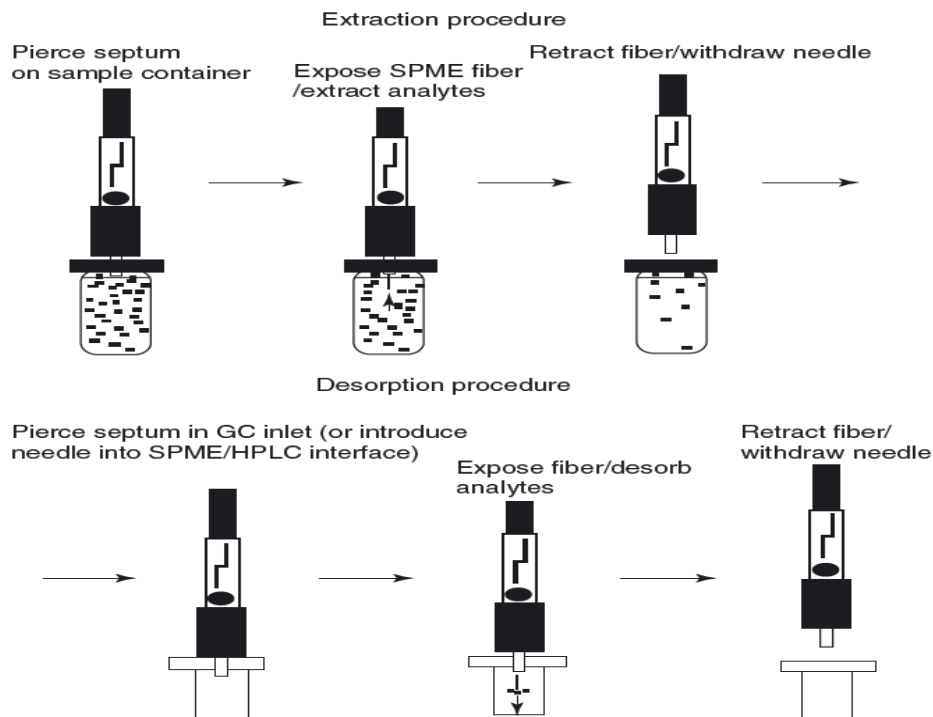


Figura 4. Diagrama de extracción mediante el principio de adsorción/absorción y desorción utilizando fibras de SPME. Fuente: (Mottaleb et al., 2014).

Los compuestos volátiles pueden ser adsorbidos por la fibra mediante 2 métodos; inmersión directa (DI-SPME, por sus siglas en inglés) cuando la fibra entra en contacto directo con la solución de la muestra. Este tipo de método facilita la extracción de los compuestos, pero puede llegar a deteriorar más rápido las fibras de SPME (Mahmud et al., 2020). Por otro lado, el método de espacio de cabeza (HS-SPME, por sus siglas en inglés) tiene como principio la transferencia de compuestos volátiles de la muestra al espacio de cabeza del recipiente, facilitando así la captación de los compuestos al momento en que la fibra entra en contacto con los vapores de la muestra (Kamgang Nzekoue et al., 2020).

SPME como técnica de extracción permite mayor identificación de grupos de compuestos volátiles en el café (Yuwono et al., 2019). Se han realizado diversos estudios utilizando esta técnica de extracción, en el que se han podido identificar 48 compuestos

volátiles de cafés procedentes de Latinoamérica (Colombia, Nicaragua, El Salvador y Panamá), Este de África e Indonesia en donde encontraron que los cafés latinoamericanos presentaban aromas dulces y a frutos rojos, debido a la presencia de grupos pirroles (Dryahina et al., 2018)

Este tipo de técnica puede ser adaptable para cromatografía líquida de alta resolución (HPLC) como para la cromatografía de gases (GC), en donde la muestra se desorbe en el sistema de entrada del equipo (Mottaleb et al., 2014). Normalmente, para el análisis de los compuestos que proporcionan fragancia y olor en el café se utiliza la cromatografía de gas.

2.3.2 Cromatografía de gas

La cromatografía analítica de gases (GC), es una técnica de separación de componentes en una muestra con mezcla compleja con la finalidad de obtener información sobre su composición molecular. Dicha información se obtiene de un análisis cromatográfico que puede incluir tiempo de retención, alturas y áreas de los picos adecuadamente separados, como también su identidad molecular (Blumberg, 2021). La separación de los componentes se da en la columna en donde los compuestos a separar son distribuidos entre dos fases, la fase estacionaria (de gran área superficial) y fase móvil (gas acarreador) el cual pasa a través de la fase estacionaria permitiendo así, la separación de los componentes en la muestra (Yashin et al., 2017)

El equipo de cromatografía de gases puede ser acopladas con diferentes detectores como ionización de llamas (GC-FID), conductividad térmica, espectrometría de masa (GC-MS), olfactometría (GC-O), entre otros. En los últimos años se ha estado utilizando dispositivos llamados nariz electrónica, la cual a través de sensores

electrónicos captan las moléculas de la muestra, clasifica el tipo de aroma y discrimina mediante análisis estadísticos (Karakaya et al., 2020). Una vez adquiridos los datos por los sensores individuales del equipo se pueden aplicar técnicas lineales como PCA, LDA, PLS, DFA y CA, como no lineales FL, SVM y RVM (Bona & Da Silva, 2016).

2.3.3 Confirmación de compuestos volátiles

Para confirmar los compuestos volátiles que se hayan identificado mediante cromatografía de gas, se utilizan bases de datos o librerías espectrales de los compuestos de interés. Una de las más utilizadas es la NIST (National Institute of Standards and Measurements mass spectral library database, por sus siglas en inglés) la cual provee un amplio espectro de recursos de datos científicos y tecnológicos que proporcionan información relevante de los compuestos. Estas bibliotecas son muy eficaces para la identificación de los compuestos con nombres y estructuras a nivel de isómero (Margolin Eren et al., 2020). La librería ADAMS es comúnmente utilizada para la identificación de compuestos que proporcionan aroma y fragancia en alimento o plantas.

Otra manera de identificar los compuestos es a través del índice de retención (RI, por sus siglas en inglés), la cual representa un sistema estandarizado de datos de retención en cromatografía de gases basado en estándares de n-alcános como patrón interno. El índice de retención se correlaciona con la cadena de carbono de un compuesto orgánico, por lo que puede utilizarse para predecir el número relativo de carbonos y la polaridad del componente de interés (Rizky Noviandy et al., 2022)

Los métodos de cálculo del índice de retención más utilizados se basan en la ecuación desarrollada por Kováts en 1958 para condiciones isotérmicas y la ecuación

propuesta por Van Den Dool y Kratz en 1963, utilizada en el caso de condiciones de temperatura programada (d'Acampora Zellner et al., 2008). Este índice de retención se ve influenciado por diferentes parámetros del GC entre ellos el tipo de gas acarreador y el flujo, temperatura, dimensiones de la columna y el grosor de la fase estacionaria (Bizzo et al., 2023). El RI se calcula utilizando los datos de tiempo de retención y tiempo muerto, este último puede determinarse midiendo el gas inerte o por el método de la serie homóloga (Noviandy et al., 2021). Sin embargo, este método depende significativamente de la exactitud del tiempo muerto, sino afectará la precisión en el cálculo del índice de retención.

Para corroborar la identidad de un compuesto de interés en una muestra a través del tiempo de retención y un compuesto de referencia (patrón auténtico), se deben utilizar al menos dos columnas de fases estacionarias de polaridades diferentes, siendo así una confirmación inequívoca del compuesto estudiado (Bizzo et al., 2023).

En los últimos años, se han realizado investigaciones en el rubro del café abarcando estudios en campo, proceso de tostado, composición química (volátil y no volátil), relacionándolos con los atributos sensoriales compuestos volátiles en el café a través de análisis multivariados como el análisis de componentes principales (Borém et al., 2021; Fassio et al., 2017).

2.4 Análisis Multifactorial

La quimiometría es utilizada para extraer información de un conjunto de datos complejos y extensos mediante enfoques estadísticos y matemáticos (Granato et al., 2018). Los análisis multifactoriales implican el uso de múltiples variables independientes sobre una o más variables respuesta (variable dependiente). Entre los análisis

multifactoriales destacan el Análisis de Componentes Principales (PCA, por sus siglas en inglés), análisis multifactorial (MFA) y análisis de conglomerados (clúster).

El PCA es un método de análisis multivariado que evalúa la varianza de un conjunto de datos complejos con la finalidad de realizar un análisis exploratorio de los datos permitiendo así la reducción de rangos (dimensionalidad), agrupación gráfica, detección de valores atípicos y clasificación de un conjunto de datos (Geladi & Linderholm, 2020).

Por otro lado, el análisis factorial es una técnica que permite la reducción de información en donde todas las variables son analizadas en conjunto, para comprobar dimensionalidad y recabar información sobre las interrelaciones entre un conjunto de variables (Méndez Martínez et al., 2012; Shrestha, 2021). En él que se evalúa la idoneidad de los datos, extracción de factores e interpretación a través de rotación de datos varimax donde se obtienen un mejor resultado asimilando cada variable con un eje. En cuanto al análisis de conglomerados (clúster) es una técnica que se utiliza para agrupar observaciones similares en función de sus características, en donde cada característica puede considerarse una dimensión adicional de los datos (números de clúster) (Dalmaijer et al., 2022).

CAPÍTULO 3.
METODOLOGÍA

3.1 Tipo de investigación

Esta investigación es de tipo cualitativa ya que se está identificando la composición volátil presente en cafés de especialidad (Café var. Geisha) producidos en la provincia de Chiriquí, Panamá. A su vez, es de corte exploratorio por ser primera vez que se realiza este tipo de estudio en muestra de café geisha panameño en el CIRN, aportando así una base de datos de compuestos volátiles presentes en el café panameño.

3.1.1 Justificación

Todos los países a nivel mundial, incluyendo Panamá, deben reactivar su economía desmejorada por efectos del COVID-19, y el café es uno de los productos que permitiría esa reactivación en Panamá. Esto se debe a que el café, además de ser un producto de exportación también es un producto que ayudaría a la actividad turística por las conocidas características de calidad del café panameño.

Panamá, no es considerado un país productor de café a gran escala; no obstante, en los últimos años se ha reconocido la calidad del café panameño a nivel mundial. Para el año 2023, se logró vender a 10,005.00 dólares el kilogramo de un café de especialidad en la subasta electrónica, lo que representa un impacto socioeconómico positivo en el país (SCAP, 2023). Se conoce que el aroma y sabor del café están directamente relacionados con los componentes químicos que contenga. La calidad del café es verificada por un panel certificado de catadores quienes evalúan los atributos que este posea asignándole un puntaje y el precio de venta dependerá directamente del puntaje obtenido (Wilson & Wilson, 2014). Diversos estudios relacionan la calidad del café con la composición química del grano (compuestos no volátiles y volátiles) (Fassio et al., 2017;

Laukaleja & Kruma, 2018; Toledo et al., 2016). Se ha demostrado que existe una alta relación entre los componentes volátiles y la puntuación otorgada por jueces, considerando algunos de ellos como posibles marcadores de calidad (Ribeiro et al., 2009, 2012). Hasta la fecha, es poca la información que se tiene sobre este producto panameño de alta calidad; en el CIRN-UNACHI se han realizado estudios de la composición no volátil de los cafés de especialidad y un modelo para estimar la calidad sensorial de café de acuerdo con sus propiedades fisicoquímicas (Vega et al., 2018, 2021). Sin embargo, no se ha estudiado la composición volátil de los cafés de especialidad de Panamá por lo que este estudio se justifica al aportar información científica sobre la composición química del grano de café. Si se puede relacionar esta composición química con factores como variedad y tratamiento se puede sugerir al productor el uso del tratamiento más adecuado y así aumentar la calidad de su café. Además, al tener conocimiento sobre su composición se puede proponer su uso no solo como bebida sino también como suplemento alimenticio y productos cosméticos debido a su contenido de antioxidantes, dándole un valor agregado a un producto panameño beneficiando la salud y aportando al desarrollo socioeconómico del país.

3.2 Sujetos, entorno o fuente de información

Las muestras de café var. Geisha fueron suministradas por productores del SCAP (Specialty Coffee Association of Panama), procedentes de los distritos de Renacimiento, Tierras Altas y Boquete de la provincia de Chiriquí, Panamá.

3.3 Variables o Categorías de la Investigación

Para este estudio se realizó el perfil sensorial de los cafés mediante cata, evaluando los atributos del café y asignándoles una puntuación para cada muestra, el

cual fue dado por un panel de jueces certificados por el SCAP. Además, se identificaron los compuestos volátiles presentes en dichos cafés a través de técnicas especializadas de cromatografía de gas acoplada al Detector de Masas.

3.3.1 Definición

Atributos: Parámetros que se evalúan en la cata que determinan la calidad del café entre ellos fragancia y aroma, sabor, regusto, acidez, cuerpo, balance, dulzor, taza limpia, uniformidad y overall.

Puntuación: Valor numérico otorgado por el panel de evaluadores y representa la sumatoria obtenida en la puntuación de cada atributo.

Compuestos volátiles: Son todos aquellos compuestos que se presentan en estado gaseoso o que son muy volátiles a la temperatura ambiente normal y presentan bajo peso molecular

3.3.2 Operacional

Los compuestos volátiles fueron identificados a través de un cromatógrafo de gas acoplado a espectrometría de masa, marca Shimadzu modelo GC-2010 Plus (Japón) utilizando el software LabSolution GCMS solution versión 4.45 SP1. Para la identificación de los compuestos volátiles se compararon los espectros de masa con librería NIST (National Institute of Standards and Measurements mass spectral library database, por sus siglas en inglés) y librería ADAMS (MS data library Adams ver. 4). Posteriormente, los datos fueron tabulados a través de Microsoft Office Excel y el análisis estadístico se realizó con el Add-in para Excel Real Statistics.

3.4 Población

Muestras de cafés de especialidad var. Geisha producidos en diferentes fincas de los distritos de Renacimiento, Tierras Altas y Boquete de la provincia de Chiriquí, Panamá.

3.4.1 Muestra

Se analizaron 30 muestras de cafés de especialidad procedentes de diferentes fincas de los distritos de Renacimiento, Tierras Altas y Boquete de la provincia de Chiriquí, Panamá, de las cuales 16 muestras de café var. Geisha fueron evaluadas sensorialmente mediante catación.

3.5 Métodos e instrumentos de investigación

3.5.1 Tratamiento de la muestra

Para la extracción con SPME se utilizó la metodología propuesta por Caporaso et al., (2018) con algunas modificaciones; se pesó 2.500 ± 0.010 gramos de muestra de café tostado en un vial ámbar de 40 mL, se dejó por 10 min a 65°C a una agitación de 600 rpm, para equilibrar la muestra. Posteriormente, se introdujo la fibra de SPME utilizando la técnica de espacio de cabeza (HS) en el vial con la muestra preequilibrada; se dejó la fibra por durante 45 minutos a una temperatura de 65°C , con agitación constante de 600 rpm. Pasado el tiempo, los compuestos acumulados en la fibra se desorben en el puerto de inyección durante 2 minutos a una temperatura de 250°C . La inyección se realizó de forma manual y los análisis se llevaron a cabo por triplicados en cada fibra.

3.5.2 Optimización del proceso de microextracción en fase sólida

Se utilizó la microextracción en fase sólida (SPME) como técnica de extracción de los compuestos volátiles, usando 4 fases estacionarias de diferente polaridad: Fibra polar absorción: Poliacrilato (PA) 85 μm , Fibra polar absorción: Carbowax Polietilenglicol (PEG) 60 μm , Fibra no polar, absorción: Polidimetilsiloxano (PDMS) 100 μm y Fibra mixta, adsorción: Divinilbenceno/carboxeno/polidimetilsiloxano (DVB/CAR/PDMS) 50/30 μm . Las SPME pertenecen a Supelco (Bellefonte, PA, USA) de 1 cm de largo y cada una se acondicionó antes de su uso de acuerdo con las especificaciones del fabricante. Para el ensayo preliminar se utilizó una muestra de café comercial para establecer la metodología de extracción y ajuste de las condiciones cromatográficas.

3.5.3 Condiciones del GC-MS

Los compuestos volátiles del café se analizaron en un cromatógrafo de gas acoplado a espectrometría de masa, marca Shimadzu modelo GC-2010 Plus (Japón) utilizando el software LabSolution GCMS solution versión 4.45 SP1. Se utilizó la metodología propuesta por Caporaso et al., (2018) con algunas modificaciones.

La temperatura del puerto de inyección fue de 250°C, modo de inyección splitless, gas acarreador: helio grado UHPC con flujo de 0.8 mL/ min y presión 33.6 kPa. Se utilizaron 2 columnas de diferentes polaridades: columna Apolar SH Rxi-5HT 5 % dimetilsiloxano (30m x 0.25 mmID x 0.25 μm) y la columna Polar Supelcowax 10 100 % polietilenglicol (30m x 0.25 mmID x 0.25 μm).

La temperatura programada fue la siguiente:

Tabla 5. Temperatura programada utilizada en las condiciones cromatográficas establecidas.

Velocidad de temperatura (°C/min)	Temperatura (°C)	Tiempo (min)
-	40	5
2	160	5
9	230	5

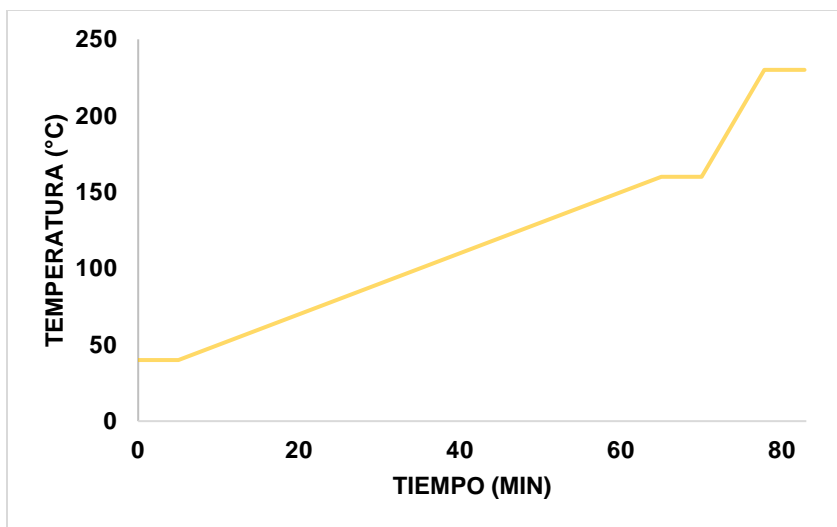


Figura 5. Rampa de temperatura programada en las condiciones cromatográficas

El tiempo total de corrida fue de 82.78 minutos. Las condiciones del detector de masa: temperatura de Ion de 225°C, temperatura de interface 275°C, el modo de adquisición de los espectros fue SCAN en un rango m/z de 35-500 uma. Las muestras se analizaron por triplicado para la columna apolar y duplicado para la columna polar.

3.5.4 Identificación de compuestos volátiles

La data del cromatograma fue analizada utilizando el software de shimadzu LabSolution GCMS solution versión 4.45 SP1. Los compuestos volátiles se identificaron comparando los espectros de masa con librería NIST (National Institute of Standards and Measurements mass spectral library database, por sus siglas en inglés) y librería ADAMS (MS data library Adams ver. 4) (Adams, 2007) tomando como criterio de aceptación los

compuestos que presentaban un porcentaje de similitud mayor del 85 %, con respecto a las librerías mencionadas.

El índice de retención (RI, por sus siglas en inglés) fue determinado utilizando un estándar de n-alcános de la marca Restek que contenía 27 hidrocarburos saturados de C7 (n-Heptano) a C33 (n-Tritriacontano) de una concentración de 100-200ug/mL en 1 mL de hexano y se comparó con RI publicados en el sitio web de la NIST. Para determinar el índice de retención de cada compuesto se utilizó la fórmula (1).

$$\text{Índice de Retención} = (100 \times z) + \left(100 * \left[\frac{Tr \text{ desconocido} - Tr (n)}{Tr (N) - Tr (n)}\right]\right) \quad (1)$$

donde,

RI: Es el índice de retención de la sustancia en estudio.

z: Representa el número de átomo de carbono del alcano lineal que antecede en el cromatograma a la sustancia de estudio.

Tr desconocido: El tiempo de retención del compuesto en estudio.

Tr(n): El tiempo de retención del alcano lineal que antecede en el cromatograma a la sustancia en estudio.

Tr(N): El tiempo de retención del alcano lineal que precede en el cromatograma a la sustancia en estudio.

3.5.5 Análisis sensorial - Catación de café

El SCAP cuenta con jueces certificados entrenados con experiencia nacional e internacional, para ello deben cumplir con un entrenamiento adecuado, tener conocimiento de la industria del café, tener las capacidades físicas para identificar aromas, sabores e intensidad, capacidad de análisis y alta disciplina. Se prepararon las

bebidas con especialista del SCAP, en donde los catadores certificados evaluaron los atributos del café y asignaron una puntuación a cada café especial.

Se evaluaron 16 cafés de especialidad procedentes de los distritos de Renacimiento, Tierras altas y Boquete. La catación o evaluación sensorial se realizó siguiendo protocolos desarrollados y estandarizados por la industria del café de especialidad a nivel global. Se aplicó el protocolo desarrollado por la SCAP para evaluar la calidad sensorial en base a un puntaje; para cafés de especialidad el puntaje debe ser superior a 80. Entre 80 y 85 la muestra se considera de muy buena calidad, entre 85 y 90 es de excelente calidad y de 90 a 100 es de calidad excepcional (SCA, 2018). El puntaje final es la suma de los puntajes individuales de los 10 atributos considerados, fragancia / aroma, sabor, regusto, acidez, cuerpo, balance, dulzor, taza limpia, uniformidad, overall; cada atributo recibió una puntuación en una escala de 0 a 10. Todas las muestras fueron tratadas bajo las mismas condiciones de tostado, molienda y preparación de la taza. Por cada café participante, se evaluó entre 8 tazas de café, en grupos de 4 tazas por mesa (2 mesas), por cada mesa se asignaron 4 jueces. Para la preparación de la bebida, se realizó según el protocolo establecido por el SCA, (2018) para ello se pesó 12 gramos de café recién molido y se adicionó 220 mL de agua a 96 °C, pasado 3 minutos los jueces rompen la taza (término utilizado por los catadores para indicar que se remueve el café que se encuentra en la superficie de la taza) y se procede a evaluar los diferentes atributos antes mencionados. Al finalizar, los jueces dialogaban la puntuación de cada café participante verificando que el nivel de dispersión sea el mínimo entre los jueces.

3.5.6 Análisis estadístico

Cada muestra analizada por GC-MS generó aproximadamente 35 VOC's en una columna apolar y 75 en una polar y a su vez cada pico cromatográfico proporcionaba información de tiempo de retención, porcentaje de área relativo y porcentaje de similitud del compuesto con librerías espectrales. Se utilizaron los valores de los atributos evaluados en el análisis sensorial de los cafés evaluados por el panel de catadores y se introdujeron en una hoja de cálculos de Microsoft office Excel para la tabulación de los datos y el análisis estadístico se realizó con el Add-in para Excel Real Statistics. Se realizó un análisis de conglomerados (ANOVA multifactorial-MANOVA) para evaluar diferencias significativas en las evaluaciones sensoriales del café. Para el análisis de conglomerados de un factor se seleccionó 16 VOC's que contribuyeran a la calidad del café de acuerdo con la literatura. Para comparar las medias se utilizó la prueba LSD de Fisher, los valores de p inferiores o iguales a 0,05 se consideraron significativos. Las comparaciones se realizaron teniendo en cuenta los VOC's de forma individual intra e Inter grupo.

CAPÍTULO 4
ANÁLISIS E INTERPRETACIÓN DE RESULTADOS

4.1 Optimización del proceso de microextracción en fase sólida

Se evaluó la eficiencia de 4 fibras de diferentes polaridades: Fibra apolar polidimetilsiloxano (PDMS), las fibras polares de poliacrilato (PA) y Carbowax de Polietilenglicol (PEG); y la fibra bipolar de Divinilbenceno/carboxeno/polidimetilsiloxano (DVB/CAR/PDMS), En La tabla 5 y 6 se muestra el perfil volátil de una muestra de café tostado comercial obtenido mediante HS-SPME-GC/MS utilizando 4 fibras y 2 columnas de polaridades diferentes como lo es la columna Apolar SH Rxi-5HT con 5 % dimetilsiloxano y la columna Polar Supelcowax 10 100 % polietilenglicol, ambas de tamaño de 30m x 0.25 mmID x 0.25 um.

Tabla 6. VOC's identificados en muestra de café comercial utilizando 4 fibras de diferentes polaridades a través de una columna Apolar SH Rxi-5HT 5% dimetilsiloxano

No	Voc's	TR	P.M	Fórmula	CAS	RI Exp	RI teórico	Área relativa (%)			
								Fibra Bipolar	Fibra PA	Fibra PEG	Fibra PDMS
1	Ácido acético	2.87	60	C ₂ H ₄ O ₂	64 - 19 - 7			12.30	15.14	18.51	5.49
2	Piridina	4.85	79	C ₅ H ₅ N	110 - 86 - 1			2.23	0.12	0.95	7.19
3	1-metil piperidina	6.29	99	C ₆ H ₁₃ N	626 - 67 - 5			0.19	-	-	-
4	2-metiltetrahidrofurano-3-ona	6.68	100	C ₅ H ₈ O ₂	3188 - 00 - 9			0.29	0.42	0.05	1.08
5	Metil pirazina	7.51	94	C ₅ H ₆ N ₂	109 - 08 - 0	811.8	826	1.92	0.26	0.58	5.02
6	Furfural	7.96	96	C ₅ H ₄ O ₂	98 - 01 - 1	819.9	834	5.59	1.98	2.03	1.57
7	2-furanmetanol	10.16	98	C ₅ H ₆ O ₂	98 - 00 - 0	859.3	851	33.69	52.38	40.99	10.15
8	Butirolactona	12.35	86	C ₄ H ₆ O ₂	96 - 48 - 0	898.7	915	0.95	-	1.40	0.55
9	2,5-dimetil pirazina	12.31	108	C ₆ H ₈ N ₂	123 - 32 - 0	901.4**	911	-	-	1.02	6.68
10	2,6-dimetil pirazina	12.70	108	C ₆ H ₈ N ₂	108 - 50 - 9	904.0	936	4.68	0.68	-	-
11	4,6-dimetil pirimidina	13.12	108	C ₆ H ₈ N ₂	1558 - 17 - 4	909.9	-	0.13	-	-	0.24
12	Ácido crotónico	14.82	100	C ₅ H ₈ O ₂	541 - 47 - 9	933.9*	953	-	0.07	-	-
13	5-metil furfural	16.20	110	C ₆ H ₆ O ₂	620 - 02 - 0	953.4	957	11.79	6.43	4.65	5.68

14	1-acetoxi-2-butanona	16.34	130	C ₆ H ₁₀ O ₃	1575 - 57 - 1	955.4*	964	-	0.39	-	-
15	2-furanmetanol acetato	18.67	140	C ₇ H ₈ O ₃	623 - 17 - 6	988.4	991	5.42	3.55	3.70	9.81
16	2-etil-3-metil pirazina	18.99	122	C ₇ H ₁₀ N ₂	15707 - 23 - 0	993.0	999	1.49	0.08	-	2.43
17	Pirrol-2-carboxaldehído	20.74	95	C ₅ H ₅ NO	1003 - 29 - 8	1017.7	1015	0.20	-	0.53	-
18	3-metil-1,2-ciclopentanodiona	21.24	112	C ₆ H ₈ O ₂	765 - 70 - 8	1023.3*	1043	-	0.45	0.90	0.45
19	1-(1H-pirrol-2-il) etanona	24.31	109	C ₆ H ₇ NO	1072 - 83 - 9	1064.2*	1063	-	0.59	1.24	1.15
20	3-etil-2,5-dimetil pirazina	24.80	136	C ₈ H ₁₂ N ₂	13360 - 65 - 1	1070.6	1078	0.83	-	-	3.57
21	Maltol	27.56	126	C ₆ H ₆ O ₃	118 - 71 - 8	1107.6	1110	5.36	1.53	6.27	5.39
22	3-etil-2-hidroxi-2-ciclopenten-1-ona	28.10	126	C ₇ H ₁₀ O ₂	21835 - 01 - 8	1114.9	1100	0.59	0.40	0.44	-
23	Acetofenona	39.18	152	C ₈ H ₈ O ₃	490 - 78 - 8	1267.5	-	2.46	3.21	2.16	-
24	p-etilguaiacol	39.49	152	C ₉ H ₁₂ O ₂	2785 - 89 - 9	1271.9	1268	0.39	0.47	-	-
25	Indol	39.95	117	C ₈ H ₇ N	120 - 72 - 9	1278.4**	1289	-	-	0.32	-
26	Difurfuril éter	41.00	178	C ₁₀ H ₁₀ O ₃	4437 - 22 - 3	1293.1	1305	0.78	0.66	0.49	-
27	2-metoxi-4-vinilfenol (viniguaiacol)	42.05	150	C ₉ H ₁₀ O ₂	7786 - 61 - 0	1308.3	1315	5.93	5.55	4.08	3.23
28	Cafeína	73.41	194	C ₈ H ₁₀ N ₄ O ₂	58 - 08 - 2	1834.3	1830	2.72	4.51	9.33	29.11
29	Ácido hexadecanoico, éster metílico	75.92	270	C ₁₇ H ₃₄ O ₂	112 - 39 - 0	1921.5	1926	0.04	0.09	0.02	0.52
30	Ácido n-hexadecanoico	76.78	256	C ₁₆ H ₃₂ O ₂	57 - 10 - 3	1962.9	1964	0.10	0.08	0.41	0.74
Total de compuestos identificados por fibra								24	23	22	20
Porcentaje de compuestos identificados por fibra (%)								80.0	76.67	73.3	66.7

El RI hace referencia al índice de retención calculado en base a los compuestos obtenidos en la fibra bipolar

* El RI calculado en base a los compuestos obtenidos en la fibra PA

**El RI calculado en base a los compuestos obtenidos en la fibra PEG

***No fue posible calcular el IR experimental de los VOC con tiempo de retención (TR) menor de 6.846 min, que corresponde al TR del primer alcano detectado (C8) del estándar de n-alcano utilizado (C7-C33).

Tabla 7. VOC's identificados en muestra de café comercial utilizando 4 fibras de diferentes polaridades a través de una columna Polar Supelcowax 10 100% polietilenglicol

No	Voc's	TR	P.M	Fórmula	CAS	RI Exp	RI teórico	área (%)			
								Fibra Bipolar	Fibra PA	Fibra PEG	Fibra PDMS
1	Alaninol	2.29	75	C ₃ H ₉ NO	78 - 91 - 1			0.03	-	-	-
2	Tetrahidrofurano	5.12	72	C ₄ H ₈ O	109 - 99 - 9			-	0.05	-	-
3	2,3 butanediona	6.10	86	C ₄ H ₆ O ₂	431 - 03 - 8	1016*		-	0.07	-	-
4	1-metil piperidina	6.17	99	C ₆ H ₁₃ N	626 - 67 - 5	1017.9	1020	0.30	-	0.14	-
5	1-metil-3 piperideína	8.21	97	C ₆ H ₁₁ N	694 - 55 - 3	1062.3	1030	0.53	-	-	-
6	2,3 pentanediona	9.25	100	C ₅ H ₈ O ₂	600 - 14 - 6	1084.8	1076	0.21	0.03	-	-
7	2,3 hexanediona	12.95	114	C ₆ H ₁₀ O ₂	3848 - 24 - 6	1145.8	1143	0.01	-	-	-
8	1-metil-1H-pirrol	13.18	81	C ₅ H ₇ N	96 - 54 - 8	1149.4	1153	0.05	0.03	-	-
9	1,1'-metilenbis-piperidina	13.63	182	C ₁₁ H ₂₂ N ₂	880 - 09 - 1	1156.2	-	0.03	-	-	-
10	β-mirceno	14.65	136	C ₁₀ H ₁₆	123 - 35 - 3	1171.8	1169	0.03	-	-	-
11	Piridina	15.14	79	C ₅ H ₅ N	110 - 86 - 1	1179.3	1176	4.85	2.19	3.19	6.75
12	Pirazina	17.24	80	C ₄ H ₄ N ₂	289 - 95 - 2	2157.7	-	-	0.28	0.20	0.42
13	2-pentil-furano	18.87	138	C ₉ H ₁₄ O	3777 - 69 - 3	1233.9	1239	0.01	-	-	-
14	2-furfuril metil éter	19.42	112	C ₆ H ₈ O ₂	13679 - 46 - 4	1241.7	1247	0.13	0.05	-	-
15	3-metil-3-buten-1-ol	20.04	86	C ₅ H ₁₀ O	763 - 32 - 6	1250.5	1263	0.01	0.06	-	-
16	α-ocimeno	20.20	136	C ₁₀ H ₁₆	502 - 99 - 8	1252.8	1239	0.03	-	-	-
17	Metil pirazina	20.60	94	C ₅ H ₆ N ₂	109 - 08 - 0	1258.5	1267	7.05	4.61	3.45	8.06
18	Acetoína	22.31	88	C ₄ H ₈ O ₂	513 - 86 - 0	1283.0	1289	0.39	1.04	0.53	0.31
19	Acetilcarbinol	23.37	74	C ₃ H ₆ O ₂	116 - 09 - 6	1298.1	1296	2.01	2.29	2.20	0.69
20	2,5-dimetil pirazina	24.23	108	C ₆ H ₈ N ₂	123 - 32 - 0	1310.8	1318	3.40	1.37	0.93	4.54
21	2,6-dimetil pirazina	24.68	108	C ₆ H ₈ N ₂	108 - 50 - 9	1317.3	1325	4.14	1.52	0.99	5.08
22	Etil pirazina	25.12	108	C ₆ H ₈ N ₂	13925 - 00 - 3	1323.7	1334	1.23	0.47	0.25	1.65
23	2,3-dimetil pirazina	25.79	108	C ₆ H ₈ N ₂	5910 - 89 - 4	1333.6	1344	0.34	0.10	0.12	0.57
24	Tetrametil oxirano	25.97	100	C ₆ H ₁₂ O	5076 - 20 - 0	1336.2	-	0.08	0.15		-
25	2-metil-3 hexanona	26.73	114	C ₇ H ₁₄ O	3848 - 24 - 6	1347.3**		-	-	0.05	-
26	Butirato de vinilo	26.76	114	C ₆ H ₁₀ O ₂	123 - 20 - 6	1347.7	-	0.12	0.09	-	0.17

27	3-etil piridina	27.92	107	C ₇ H ₉ N	536 - 78 - 7	1364.7	1378	0.15	-	0.05	0.31
28	2-etil-6-metil pirazina	28.51	122	C ₇ H ₁₀ N ₂	13925 - 03 - 6	1373.3	1382	1.57	0.63	0.53	3.90
29	2-etil-5-metil pirazina	28.85	122	C ₇ H ₁₀ N ₂	13360 - 64 - 0	1378.3	1385	1.22	0.43	0.22	1.89
30	2,3,5-trimetil pirazina	29.67	122	C ₇ H ₁₀ N ₂	14667 - 55 - 1	1390.3	1401	2.35	0.65	0.19	3.15
31	2,6-dietil pirazina	31.77	136	C ₈ H ₁₂ N ₂	13067 - 27 - 1	1421.3	1436	0.21	0.07	-	2.72
32	3-etil-2,5-dimetil pirazina	32.48	136	C ₈ H ₁₂ N ₂	13360 - 65 - 1	1431.7	1446	2.13	0.58	0.17	0.64
33	2,3-dimetil-5-etil pirazina	33.52	136	C ₈ H ₁₂ N ₂	15707 - 34 - 3	1447.1	1460	0.49	0.15	0.06	-
34	2-metil-6-propil pirazina	33.79	136	C ₈ H ₁₂ N ₂	29444 - 46 - 0	1451.0	1464	0.06	-	-	-
35	Furfural	34.21	96	C ₅ H ₄ O ₂	98 - 01 - 1	1457.2	1454	5.26	4.41	4.55	2.28
36	Acetoxiacetona	34.55	116	C ₅ H ₈ O ₃	592 - 20 - 1	1462.3** *	1469	-	-	-	3.93
37	1,2-etanodiol diacetato	34.69	146	C ₆ H ₁₀ O ₄	111 - 55 - 7	1464.3	-	3.33	4.06	4.95	-
38	Ácido acético	35.26	60	C ₂ H ₄ O ₂	64 - 19 - 7	1472.8	1480	0.98	1.78	1.28	-
39	3,5-dietil-2-metil pirazina	35.62	150	C ₉ H ₁₄ N ₂	18138 - 05 - 1	1478.0** *	1474	-	-	-	0.54
40	1-(2-furanil)-etanona	36.64	110	C ₆ H ₆ O ₂	1192 - 62 - 7	1493.1	1501	3.03	-	1.87	1.90
41	1-(acetiloxi)-2-butanona	38.66	130	C ₆ H ₁₀ O ₃	1575 - 57 - 1	1525.5	1526	1.40	1.20	0.95	0.97
42	2-furanmetanol acetato	39.11	140	C ₇ H ₈ O ₃	623 - 17 - 6	1532.9	1542	7.73	6.77	5.10	4.97
43	5 metil furfural	41.09	110	C ₆ H ₆ O ₂	620 - 02 - 0	1565.1	1562	7.88	6.06	4.97	3.97
44	1-metil-1H-pirrol-2-carboxaldehído	43.64	109	C ₆ H ₇ NO	1192 - 58 - 1	1606.9	1626	0.75	0.65	0.28	-
45	Butirolactona	44.09	86	C ₄ H ₆ O ₂	96 - 48 - 0	1614.6	1626	2.42	3.47	2.77	0.89
46	2-Acetil-1-metil pirrol	45.73	123	C ₇ H ₉ NO	932 - 16 - 1	1642.0	1660	0.68	0.41	-	0.30
47	2-furanmetanol	46.81	98	C ₅ H ₆ O ₂	98 - 00 - 0	1660.2	1664	15.52	31.55	37.69	11.35
48	2-Metil-5-(metiltio) furano	47.67	162	C ₁₀ H ₁₀ O ₂	13678 - 51 - 8	1674.5	1659	0.30	-	-	-
49	1H-pirrol, 1-(2-furanilmetil)-	56.03	147	C ₉ H ₉ NO	1438 - 94 - 4	1821.4** *	1833	-	-	-	0.95
50	Mequinol	57.75	124	C ₇ H ₈ O ₂	150 - 76 - 5	1853.1	-	-	0.51	0.33	-
51	o-guaiacol	57.79	124	C ₇ H ₈ O ₂	90 - 05 - 1	1853.8	1862	0.38	-	-	-

52	3-etil-2-hidroxi-2-ciclopenten-1-one,	59.61	126	C ₇ H ₁₀ O ₂	21835 - 01 - 8	1887.4	1891	0.56	0.68	0.28	-
53	Maltol	63.32	126	C ₆ H ₆ O ₃	118 - 71 - 8	1958.2	1965	4.11	4.59	5.07	3.11
54	Etanona, 1-(1h-pirrol-2-il)-	63.60	109	C ₆ H ₇ NO	1072 - 83 - 9	1963.6	1971	1.61	2.27	1.76	0.50
55	4-hidroxi-3-metilacetofenona	65.15	150	C ₉ H ₁₀ O ₂	876 - 02 - 8	1993.4	-	0.36	-	-	-
56	1H-pirrol-2-carboxaldehído	66.35	95	C ₅ H ₅ NO	1003 - 29 - 8	2014.8	2028	1.80	2.34	2.08	-
57	p-etilguaiaicol	66.80	152	C ₉ H ₁₂ O ₂	2785 - 89 - 9	2022.7	2033	1.08	0.55	-	-
58	2-Metoxi-4-vinilfenol	74.54	150	C ₉ H ₁₀ O ₂	7786 - 61 - 0	2194.9	2203	6.22	5.84	-	1.87
59	Cafeína	79.04	194	C ₈ H ₁₀ N ₄ O ₂	58 - 08 - 2	2320.5** *	-	-	1.51	7.07	21.69
60	3-piridinol	79.23	95	C ₅ H ₅ NO	109 - 00 - 2	2431.9	-	0.87	2.01	2.04	-
61	Indol	79.64	117	C ₈ H ₇ N	120 - 72 - 9	2455.1	2455	0.28	0.40	0.23	-
62	5-hidroximetil furfural	80.75	126	C ₆ H ₆ O ₃	67 - 47 - 0	2513.6	2513	0.44	0.44	0.58	-
Total de compuestos identificados por fibra								53	46	36	31
Porcentaje de compuestos identificados por fibra (%)								85.5	74.2	58.1	46.4

El RI calculado en base a los compuestos obtenidos en la fibra bipolar

Los RI teóricos de color amarillo están basados en columnas de 60 m de largo

* El RI calculado en base a los compuestos obtenidos en la fibra PA

**El RI calculado en base a los compuestos obtenidos en la fibra PEG

***El RI calculado en base a los compuestos obtenidos en la fibra PDMS

**** No fue posible calcular el IR experimental de los VOC con tiempo de retención (TR) menor de 5.343 min, que corresponde al TR del primer alcano detectado (C8) del estándar de n-alcano utilizado (C7-C33).

Para el análisis de los compuestos volátiles se evaluaron 4 fibras de diferentes polaridades; la fibra de polidimetilsiloxano (PDMS), revestimiento de fibra más común de carácter no polar; las fibras polares de poliacrilato (PA) y Carbowax de Polietilenglicol (PEG) que actúan bajo el principio de absorción en el que los analitos presentes se absorben dentro del recubrimiento de la fibra y la fibra de Divinilbenceno/carboxeno/polidimetilsiloxano (DVB/CAR/PDMS) que contiene revestimientos mixtos, los cuales extraen los compuestos mediante adsorción, en el que los analitos permanecen en la superficie de la fibra (Billiard et al., 2020). En el proceso se utilizó una muestra de café comercial, manteniendo las condiciones de extracción como temperatura, agitación y tiempo constante en cada fibra.

En la tabla 5 se muestran los datos de una muestra de café obtenidos utilizando la columna Apolar SH Rxi-5HT en la que se identificaron un total de 30 compuestos volátiles (VOC's) utilizando las 4 fibras de SPME. Se observó que la fibra bipolar de DVB/CAR/PDMS, captó mayor cantidad de compuestos con un 80% (24 VOC's) de compuestos volátiles identificados, seguida de las fibras polares PA con un 76.67 % (23 VOC's) y PEG con 73.3 % (22 VOC's) y, por último, la fibra apolar con un 66.7 % (20 VOC's). De acuerdo con Vas & Vékey (2004) el tipo de recubrimiento de fibra afecta la selectividad de la extracción de los compuestos. Aquellos de carácter polar se adhieren con mayor facilidad cuando se utilizan fibras polares, mientras que las fibras apolares captan mayor cantidad de compuestos apolares y en el caso de la fibra bipolar combina las propiedades de tres revestimientos de diferentes polaridades, lo que permite una mayor captación de VOC's de diferente volatilidad, estructura, peso molecular y polaridad (Kamgang Nzekoue et al., 2020).

Para los VOC's el 2-furametanol fue el compuesto mayoritario en las fibras mixta, PA y PEG con porcentaje de área relativa de 33.69 %, 52.38 % y 40.99 % respectivamente, utilizando la columna apolar. Esta medida de porcentaje de área representa el porcentaje del área del pico de cada compuesto con respecto al área del pico total del cromatograma de GC/MS (Demianová et al., 2022). Para la fibra apolar de PDMS el compuesto con mayor porcentaje de área relativa fue la cafeína con 29.11 %, ambos compuestos son de carácter polar de bajo peso molecular, los cuales se adhieren con facilidad al recubrimiento de las fibras. Las fibras polares como la PA y PEG favorecen a la extracción de compuestos polares semivolátiles como fenoles y alcoholes, la PDMS es selectiva para compuestos volátiles y las fibras mixtas son selectivas para compuestos que dan olores y sabores en alimentos (Mottaleb et al., 2014; Vas & Vékey, 2004).

En la tabla 6 se muestran los datos de una muestra de café obtenidos utilizando la columna Polar Supelcowax 10 100 % polietilenglicol, en ésta se logró identificar un total de 62 compuestos volátiles siendo la fibra bipolar la que captó mayor cantidad de compuestos haciendo un total de 85.5 % (53 VOC's) de compuestos volátiles identificados, seguida de las fibras polares PA con un 74.2 % (46 VOC's) y PEG con 58.1 % (36 VOC's) y la fibra apolar solamente captó 46.4 % (31 VOC's). Los compuestos que presentaron mayor porcentaje de área relativa para las fibras mixta, PA y PEG fueron el 2-furametanol con 15.52 %, 31.55 % y 37.69 % respectivamente, mientras que para la PDMS el área del VOC's mayoritaria fue la cafeína con 21.69 %.

Las fibras PA poseen un revestimiento moderadamente polar permitiendo la extracción de una amplia gama de analitos, tanto polares como no polares. En

comparación con otras fibras (como PDMS y PEG) la PA es más rígida por lo que la migración dentro y fuera del revestimiento es lenta (Shirey, 2012). La PEG por otro lado, es la fibra con revestimiento con mayor polaridad existente, por lo que tiende a ser más selectivos hacia los analitos polares. Los VOC's presentes en el café en su mayoría son de carácter polar por lo que las 3 fibras antes mencionadas presentan una gran captación de dichos compuestos (mayor del 50 % de VOC's identificados). La PDMS por su parte, no presenta gran afinidad por los analitos polares, por lo que fue la fibra con menor cantidad de VOC's identificados.

Cabe mencionar que todos los compuestos presentados en la tabla 6 y 7 presentaban similitud con librerías espectrales NIST y ADAMS (Adams, 2007), por encima del 85 % y su índice de retención experimental (RI) era menor del 5 % de error con el RI teórico, lo que permite la confirmación del compuesto de interés.

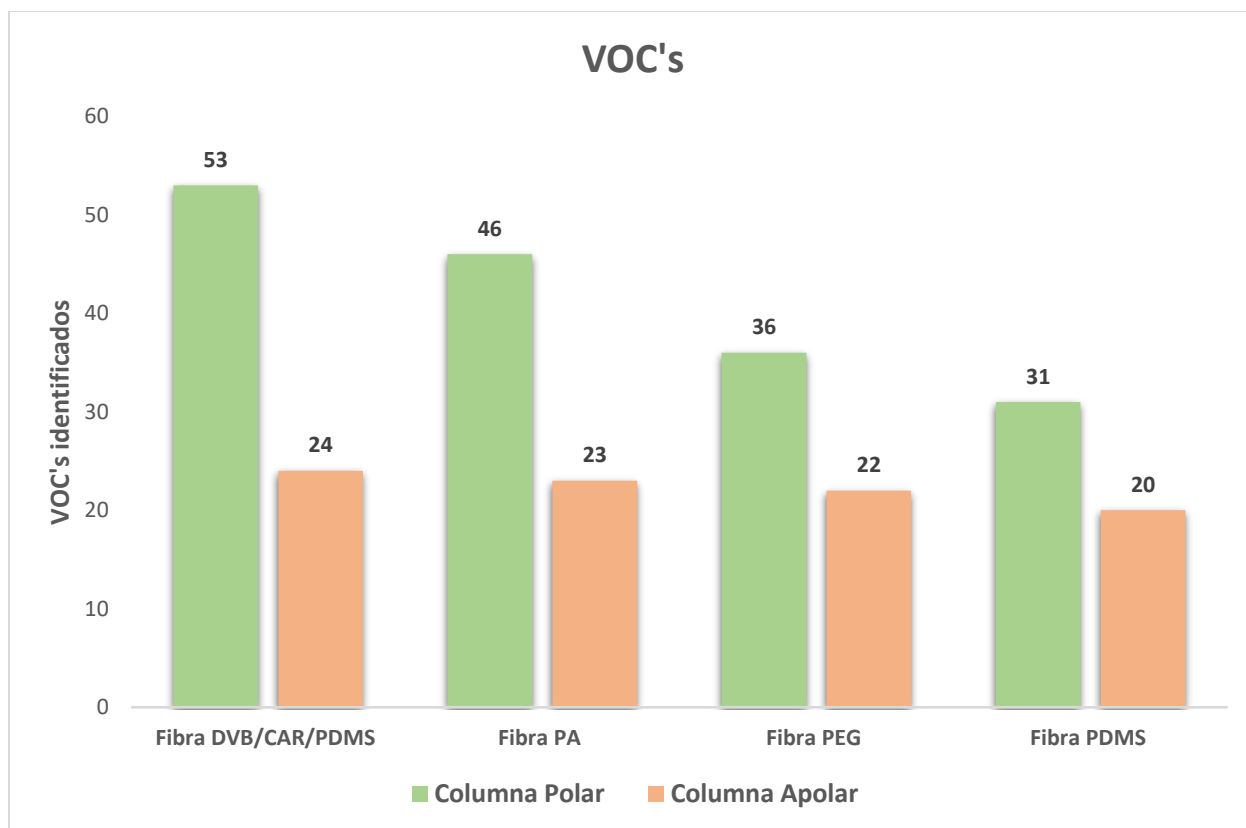


Figura 6. Cantidad de compuestos volátiles identificados en 4 fibras de SPME de diferentes polaridades mediante GC-MS utilizando 2 columnas de diferente polaridad.

En cuanto al orden de cantidad de VOC's que se lograron identificar la fibra bipolar obtuvo mayor VOC's seguida de la PA, PEG y PDMS para ambas columnas, lo que indica que el comportamiento de la fibra se mantiene similar en cuanto al orden de VOC's captados en una muestra de café tostado independientemente del tipo de columna que se utilice (figura 6). Sin embargo, al utilizar una columna polar se obtiene mayor cantidad de compuestos volátiles y los picos presentan mejor resolución, lo que concuerda con estudios realizados por Frost et al., (2022) y Piccino et al., (2013) quienes evaluaron VOC's en café tostado por GC-MS, con 2 tipos de columnas (Polar y apolar) obteniendo mejores resultados con las columnas polares.

La elección del recubrimiento de la fibra SPME depende principalmente de la naturaleza de los analitos que se quiera analizar. En el caso de los recubrimientos mixtos

como la fibra DVB/CAR/PDMS es una opción adecuada para extraer una amplia gama de compuestos volátiles de matrices complejas debido a la combinación de dos tipos diferentes de partículas de adsorción, DVB y CAR (polar), unidas a la PDMS (apolar) (Hernández et al., 2019). La elección de la fibra se realizó basada en la cantidad de compuestos identificados, siendo la fibra bipolar la que mejor se adapta para este estudio de VOC's en café tostado.

4.2 Grupos funcionales identificados en café geisha

Se identificó un total de 108 VOC's mediante una columna apolar y 207 VOC's en una columna polar en 30 muestras de café geisha analizados (16 muestras de café fermentado, 8 lavado y 6 con proceso). Los compuestos se agruparon de acuerdo con el grupo funcional al que pertenecen, dando así un total de 29 grupos funcionales entre ellos pirazina, monoterpenos, aldehídos, alcoholes, cetonas, ésteres, aromáticos heterocíclicos, entre otros, como se presenta en la tabla 8. La información completa de los VOC's identificados en cada columna se encuentra detallado en la sección de anexos en la tabla 12 y 13 de este estudio.

Tabla 8. Grupos funcionales identificados en 30 muestras de café geisha utilizando 2 tipos de columnas de diferentes polaridades.

No	Grupo funcional	Cantidad de compuestos	
		Columna Apolar ^a	Columna Polar ^b
1	Monoterpenos	17	27
2	Pirazinas	16	23
3	Compuestos aromáticos	1	17
4	Ácidos grasos	9	13
5	Cetonas	10	12
6	Aldehídos	4	11
7	Éster	5	10
8	Alcanos	1	10
9	Heterocíclicos N	6	12
10	Furanos	8	10

11	Sesquiterpenos	6	9
12	Alcoholes	4	9
13	Aromáticos heterocíclicos	-	4
14	Lactonas	4	7
15	Ácidos orgánicos	5	5
16	Fenoles	3	4
17	Diacetonas	-	4
18	Amidas	-	3
19	Alquenos	1	3
20	Éteres	2	3
21	Acetatos	1	2
22	Metoxibencenos	1	2
23	Pirrolidonas	1	2
24	Aminas	-	1
25	Organosulfurado	-	1
26	Hidrocarburo aromático	-	1
27	Diterpeno	-	1
28	Pirrol	-	1
29	Glicoles	2	-
Compuestos totales		108	207

^a Columna Apolar SH Rxi-5HT con 5% dimetilsiloxano 30m x 0.25 mm ID x 0.25 μ m.

^b Columna Polar Supelcowax 10 100% polietilenglicol 30m x 0.25 mm ID x 0.25 μ m.

Terpenos (monoterpenos, sesquiterpenos y diterpenos)

Los terpenos son compuestos aromatizantes de gran diversidad estructural con intensas impresiones olfativas y se clasifican según su estructura química basada en el número de isoprenos presentes: en hemiterpenos (5 carbonos), monoterpenos (10 carbonos), sesquiterpenos (15 carbonos) y diterpenos (20 carbonos) (Sommer et al., 2022). En las 30 muestras de café geisha analizadas los monoterpenos fueron el grupo de mayor cantidad de VOC's (27) que se logró identificar en una columna polar, mientras que en una columna apolar se identificaron 18 VOC's, entre ellos limoneno, linalool, α -ocimeno que otorgan características cítricas, floral y afrutados (Piccino et al., 2013; Seninde & Chambers, 2020). Otros compuestos como geraniol, α -Terpineol, α -tujol y damasceno proporcionan olores florales, herbales y frutas dulces al café (Bressanello et

al., 2018; Zakidou et al., 2021). En el café var. Geisha, el linalool fue el compuesto que presentó mayor porcentaje de área y estuvo presente en la mayoría de las muestras analizadas, lo cual concuerda con Santamaría et al., (2023), quienes evaluaron 8 muestras de café geisha de Panamá y obtuvieron este compuesto en la mayoría de los cafés analizados y en mayor concentración dentro del grupo de los terpenos. Se identificaron varios compuestos sesquiterpenos como β -sesquifelandreno, α -curcumeno y α -farneseno que proporcionan características herbales y maderables (TSGM, 2021); el cariofileno es uno de los sesquiterpenos volátil más común que proporcionan olores de clavo de olor, especias y dulce, además de actuar como defensa contra la herbivoría de insectos (Góngora et al., 2020). Los compuestos β -sesquifelandreno y α -curcumeno fueron los que presentaron mayor porcentaje de área relativa dentro del grupo de los sesquiterpenos.

Compuestos Heterocíclicos N - Pirazinas

Los compuestos heterocíclicos son aquellos compuestos cíclicos que tienen en el anillo un elemento diferente al carbono ya sea nitrógeno, oxígeno o azufre; entre los compuestos heterocíclicos nitrogenados se incluyen las piridinas, pirroles, pirazinas, furanos, piranona, lactonas y derivados de tiopeno. Las pirazinas son el segundo grupo de compuestos de mayor abundancia en el café tostado y que contribuyen con el 25 a 39 % de las características aromáticas del café (Zakidou et al., 2021). Las pirazinas y demás compuestos heterocíclicos nitrogenados se forman al descomponerse la trigonelina y proteínas, mediante reacciones de Millard durante el tostado del café (Seninde & Chambers, 2020; Tarigan et al., 2022).

De acuerdo con Laukaleja & Kruma, (2018) los cafés de especialidad tienen una cantidad superior de pirazinas que proporcionan cualidades positivas al café; para este estudio se identificaron 16 VOC's en una columna apolar y 23 en una polar, entre los cuales metil-pirazina, 2,5-dimetilpirazina, 2,6-dimetilpirazina y 3-etil-2,5-dimetil-pirazina presentaron mayores porcentajes de área relativa dentro de este grupo funcional. De acuerdo con Mortzfeld et al., (2020) existen 7 compuestos n-alquilpirazinas considerados compuestos claves que presentan fuertes propiedades olfatorias en el café entre las que se encuentran la 2-etil-3metilpirazina, 2,5-dimetilpirazina, 2,6-dimetilpirazina, 2,3-dimetilpirazina y 2,3,5-trimetilpirazina. De acuerdo con Yuwono et al., (2019) estos compuestos proporcionan notas de nuez, afrutado, chocolate y tostado al café.

Por otro lado, El 2-acetil-3-metilpirazina fue identificado al utilizar una columna apolar y en un estudio de Agnoletti et al., (2022) indicó que la presencia de esta pirazina contribuía a la predicción de atributos sensoriales como fragancia/aroma, equilibrio y overall. Sin embargo, las pirazinas no siempre proporcionan fragancias favorables algunos compuestos como 5H-5-metil-6,7-dihidrociclopentapirazina, 3-etil-2,5-dimetil-Pirazina, 2-etil-5-metilpirazina identificados en este estudio proporcionan características terrosas consideradas como descriptores negativos en el café (Toledo et al., 2016).

La cafeína fue el VOC's mayoritarios dentro del grupo de los heterocíclicos N y se considera que contribuye al amargor y cuerpo de la bebida (Barbosa, Francisco, et al., 2019). Este compuesto obtuvo un porcentaje de área relativo en una columna apolar de 5.79 %, mientras que en la columna polar fue de 0.37 %. De acuerdo con Reyes-Contreras et al., (2012), en una columna apolar la cafeína hay una elución completa del

compuesto debido a que existe mayor interacción de fase estacionaria-compuestos de interés.

Las piridinas se forman de la degradación de azúcares como trigonelina y presentan un olor a planta y sabor amargo que indica su presencia en alimentos (Gancarz et al., 2022b). Compuestos como piridina, 1H-Pirrol-2-carboxaldehído, 1-(1H-pirrol-2-il)-Etanona, indol fueron identificados dentro de este grupo los cuales aportan características de tostado, quemado, hongo, rancio (Bressanello et al., 2018; Elhalis et al., 2021). Los pirroles se forman por la reacción de aldosas con alquilaminas, en la que intervienen azúcares reductores y aminoácidos por condensación de glucosa y alanina, o de glucosa y prolina o hidroxiprolina (Dippong et al., 2022).

Aldehídos y Cetonas

Las cetonas representan el 20 % de compuestos volátiles que aportan al aroma del café tostado y su formación se da durante la pirolisis, en la etapa final del tostado del café (Dippong et al., 2022; Mahmud et al., 2020). Estos compuestos proporcionan características florales, frutales y acidez agradable al café y se ha reportado que algunos de estos compuestos son indicadores de calidad del café (Laukaleja & Kruma, 2018). Se identificaron 10 compuestos que pertenecen al grupo de las cetonas usando una columna apolar y 12 en una columna polar; de estos compuestos la 3,3-dimetil-2-Butanona, acetofenona, acetol, 2,3-Pentanediona y furaneol fueron identificados dentro de este grupo, las cuales proporcionan notas dulces, caramelo, mantequilla y afrutados (Sunarharum et al., 2014; Yang et al., 2016). De acuerdo con Caporaso et al., (2018) el furaneol, 2,3-butanodiol y 1-hidroxi-2-butanone se encuentran en mayor concentración en cafés arábica.

Los aldehídos son compuestos formados durante la degradación oxidativa de aminoácidos al interaccionar con azúcares a altas temperaturas (degradación de Strecker) y durante la interacción de aminoácidos y polifenoles en presencia de polifenoloxidasas a temperaturas normales (Angeloni et al., 2021). Estos aldehídos generados son importantes para la formación de compuestos aromáticos como alcoholes superiores y ésteres, mediante la actividad del alcohol deshidrogenasa (Bressani et al., 2020). Se logró identificar en el caso de los aldehídos 4 compuestos en la columna apolar y 11 en la polar, entre ellos benzaldehído, nonanal, pentanal, 5-Acetoximetil-2-furaldehído, 2-metilbutanal que proporcionan características como almendrado, afrutado, chocolitoso y dulces (Dippong et al., 2022; Yang et al., 2016). Los aldehídos al igual que las cetonas representan entre 1 % a 6 % de los compuestos presentes en el café y aportan características positivas al café tostado (Zakidou et al., 2021).

Ésteres

Los ésteres son compuestos que se encuentran asociados a atributos positivos en el café (Toledo et al., 2016). La formación de estos compuestos se da en el tostado del café al reaccionar ácidos carboxílicos con alcoholes mediante reacciones de Millard y contribuyen con los olores frutales, florales y herbales del café. En este estudio se identificaron 5 ésteres utilizando una columna apolar y 10 en una columna polar entre los que se pueden mencionar Acetato de etilo, Isobutil lactato, Salicilato de metilo, Furfuril pentanoato entre otros; la mayoría de estos ésteres identificados tenían un porcentaje de área relativa menor de 1 %.

Furanos

Los furanos son éteres cíclicos que se forman principalmente de los carbohidratos como glucosa, fructosa y lactosa que sufren reacciones de pardeamiento durante las reacciones de Millard (Dippong et al., 2022), a su vez mediante oxidación de ácidos grasos poliinsaturados, descomposición de ácido ascórbico a altas temperaturas; degradación térmica de aminoácidos como serina y cisteína a glicolaldehído y acetaldehído para posteriormente sufrir condensación aldólica para formar furanos (Batoool et al., 2021; Kim et al., 2021). Los furanos son los compuestos junto al grupo de las pirazinas que se encuentran en mayor proporción en el café tostado y brindan gran parte del aroma del café (Petisca et al., 2013; Vezzulli et al., 2023).

En este estudio se lograron identificar 8 compuestos del grupo furano en una columna apolar y 10 en una columna polar; entre los VOC's de mayor área relativa se encuentran 2-furametanol, 5-metil furfural y furfural con áreas entre 8-15 % en columna polar y de 12-21% en columna apolar, lo cual concuerda con lo reportado por Zakidou et al., (2021) quien menciona estos tres compuestos como mayoritarios en 10 muestras de café arábica procedentes de Suramérica, América Central e Indonesia en donde los furanos representaban entre el 25-41% del café tostado. Estos compuestos contribuyen a olores característicos como caramelo, pan tostado, dulce, almendras (Dippong et al., 2022; Seninde & Chambers, 2020).

Ácidos grasos

Los lípidos se encuentran entre un 8 -17 % en el café tostado, en donde la fracción lipídica son responsables de gran parte del aroma del café (Böger et al., 2021). En este estudio se identificaron 10 VOC's en una columna apolar y 13 en la polar, entre los cuales

se encuentran el ácido palmítico, linoleico, mirístico y el ácido 3-metilbutanoico-etiléster los cuales proporcionar características dulces, afrutadas y cerosas al café de acuerdo con The Good Scents Company, (2021). Estos compuestos presentaron porcentaje de área relativo menos del 2 % en este estudio.

Ácidos orgánicos y fenoles

La acidez y el dulzor percibido sensorialmente por los catadores se encuentra relacionado con los ácidos orgánicos en el café, como el ácido acético, málico, cítrico, láctico, fórmico, así como también los ácidos clorogénicos y quínico (Demianová et al., 2022; Poisson et al., 2017). Se logró identificar en este estudio 4 VOC's en una columna apolar y 5 en una columna polar entre los cuales se encuentran ácido acético, isovalérico y Ácido 3-metil-butanoico a los cuales se les atribuye que aportan olores como vinagre, cebolla, agrio y fermentado (Caporaso et al., 2018; Elhalis et al., 2021; Seninde & Chambers, 2020). En el caso de los fenoles se identificaron 3 compuestos en la columna apolar y 4 en la polar, siendo el 4-vinilguaiacol el compuesto mayoritario dentro de este grupo, concordando con estudios de Dippong et al., (2022) y Catão et al., (2022), este último indica en su estudio que este es uno de los compuestos con aroma fuerte a especias, cedro, ámbar fresco y cacahuete tostado que contribuyen a diferenciar muestras de café.

Otros compuestos

Compuestos que pertenecen a grupos funcionales como aminas, amidas, éter, alquenos, organosulfurados fueron identificados en pequeñas cantidades en este estudio.

4.3 Catación de café

Se realizó la evaluación sensorial de los cafés geisha a través del proceso de catación donde se evaluaron 10 atributos entre ellos fragancia / aroma, sabor, regusto, acidez, cuerpo, balance, dulzura, taza limpia, uniformidad, overall. A continuación, se detallan los datos de catación de 16 muestras de café geisha con proceso fermentado.

Tabla 9. Notas medias de atributos evaluados en 16 muestras de café geisha por el panel de catadores siguiendo el protocolo de cata del SCA.

No.	Fragancia/ Aroma	Sabor	Regust o	Acidez	Cuerpo	Equilibrio	Uniformid ad	Taza Limpia	Dulzor	General	Defecto	Puntaje final
1	8.50	8.42	8.47	8.42	8.36	8.75	10	10	10	8.53	0.00	89,44
2	8.39	8.36	8.31	8.44	8.39	8.58	10	10	10	8.25	0.00	88,72
3	8.31	8.44	8.33	8.42	8.36	8.64	10	10	10	8.31	0.00	88,81
4	8.36	8.25	8.17	8.28	8.31	8.39	10	10	10	8.08	0.00	87,83
5	8.17	8.08	8.14	8.33	8.33	8.44	10	10	10	8.14	0.00	87,64
6	8.39	8.36	8.25	8.33	8.33	8.58	10	10	10	8.28	0.00	88,53
7	8.31	8.39	8.31	8.42	8.36	8.67	10	10	10	8.33	0.00	88,78
8	8.50	8.44	8.33	8.61	8.56	8.58	10	10	10	8.36	0.00	89,39
9	8.44	8.39	8.31	8.47	8.39	8.67	10	10	10	8.44	0.00	89,11
10	8.42	8.39	8.28	8.33	8.47	8.50	10	10	10	8.31	0.00	88,69
11	8.47	8.14	8.31	8.42	8.19	8.50	10	10	10	8.42	0.00	88,44
12	8.53	8.31	8.25	8.47	8.28	8.61	10	10	10	8.44	0.00	88,89
13	8.42	8.47	8.39	8.53	8.42	8.64	10	10	10	8.42	0.00	89,28
14	8.56	8.47	8.42	8.53	8.33	8.64	10	10	10	8.42	0.00	89,36
15	8.16	8.13	8.03	8.16	8.22	8.22	10	10	10	7.97	0.00	86,88
16	8.07	7.89	7.89	8.11	8.00	8.25	10	10	10	8.00	0.00	86,21

El puntaje de las muestras de café var. Geisha estuvo en un rango de 86.21 a 89.44 de acuerdo con el SCA clasifica estos cafés dentro de la categoría de especialidad

como excelente. Todas las muestras fueron tratadas bajo las mismas condiciones de tostado, molienda y preparación razón por la cual atributos como uniformidad total, taza limpia y dulzor obtuvieron puntuación máxima teniendo así un impacto positivo en la puntuación final (Catão et al., 2022). El aroma es uno de los atributos que contribuyen a la calidad del café en el caso de la fragancia representa el olor de los granos secos y el aroma que implica el olor cuando se infunde agua caliente, se valoraron en un rango de 8.07 a 8.56.

El sabor atributo que representa la complejidad, intensidad y la calidad de la combinación de todos los demás atributos y se encuentra positivamente correlacionado (0.64) con el dulzor, se valoró en un rango de 7.89 a 8.47 (Mendonça de Carvalho et al., 2016). La acidez representa la vivacidad del café, este atributo presentó valores entre 8.11 a 8.61 es uno de los atributos más importantes en la calidad sensorial del café, junto al dulzor, cuerpo y el aroma (Bressani et al., 2020; Figueiredo et al., 2015). Las muestras evaluadas no presentaron defectos, atributo que indica si las muestras presentan cualidades desagradables al paladar, que puedan restar puntos en la calificación final.

4.4 Relación de puntajes de catación con VOC's identificados

Se realizó un análisis de conglomerados (MANOVA) tomando en consideración los atributos sensoriales y el puntaje final de catación otorgado por jueces certificados por el SCAP, además se ajustaron los datos estandarizando el puntaje final de las muestras.

Tabla 10. Análisis de conglomerados multifactorial (MANOVA) de atributos sensoriales y puntaje final de cafés de especialidad

<i>Muestra</i>	<i>Total</i>	<i>Z total</i>	<i>Cluster</i>
1	89.44	1.02	2
2	88.72	0.24	2

3	88.81	0.33	2
4	87.83	-0.72	1
5	87.64	-0.93	1
6	88.53	0.03	2
7	88.78	0.30	2
8	89.39	0.96	2
9	89.11	0.66	2
10	88.69	0.21	2
11	88.44	-0.06	2
12	88.89	0.42	2
13	89.28	0.84	2
14	89.36	0.93	2
15	86.88	-1.76	1
16	86.21	-2.47	1
Mean	88.50		
STDEV	0.93		

Las muestras evaluadas durante la catación obtuvieron puntajes en un rango de 86.88 a 89.44 siendo así considerados como cafés de excelencia según la clasificación de cafés de especialidad del SCA (SCA, 2018). Se aplicó un análisis de conglomerados (cluster) para agrupar observaciones similares en función de los atributos y puntaje final de las muestras. En la tabla 10 se muestra que los datos se dividen en 2 grupos: grupo 1 muestras 4, 5, 15 y 16 (4 muestras en total) cuyo puntaje final fue menor de 88.0 siendo considerados como cafés de menos calidad y grupo 2 muestras 1, 2, 3, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13 y 14 (12 muestras en total) quienes obtuvieron puntajes por encima de 88.0 considerados como de mayor calidad dentro del grupo de cafés analizados. De igual forma, se estandarizaron los datos del puntaje final obteniendo así las muestras del grupo 1 con valores negativos indicando que se encuentran en un rango de -0.72 a -2.47 por debajo de la desviación estándar de la media (88.50), mientras que los del grupo 2 (excepto la muestra 11 con calor de z -0.06) se encuentran por arriba de la desviación estándar de la media. Cabe destacar que todas las muestras analizadas representan

café de excelencia; sin embargo, la diferencia en su calidad radica en la composición química que posee cada café (Agnolletti et al., 2022; Barbosa, Scholz, et al., 2019).

Para determinar cuáles de los compuestos volátiles identificados presentaba diferencia significativa con respecto a la calidad del café se aplicó el análisis de ANOVA de un factor, para ello se tomó en cuenta 16 compuestos volátiles que de acuerdo con la literatura contribuyen a la calidad del café, además se consideraron los compuestos con mayor porcentaje de área relativa obtenido en cada columna (Agnolletti, 2021). Para la columna polar se consideraron los siguientes VOC's metil pirazina, 2,5-dimetil pirazina, 2,6-dimetil pirazina, trimetil pirazina, 3-etil-2,5-dimetil pirazina, furfural, 2-acetilfurano, 2-furanmetanol acetato, linalool, 5 -metil furfural, 2-furanmetanol, 1-(6-metil-2-pirazinil)-1-etanona, geraniol, maltol, 2-metoxi-4-vinilfenol y 5-Hidroximetil furfural.

Mientras que para la columna apolar se consideró el ácido acético, 2-metiltetrahidrofurano-3-ona, metil pirazina, furfural, 2-furanmetanol, 5 -metil furfural, 2-furanmetanol acetato, 2-etil-3-metil pirazina, 3-etil-2,5-dimetil pirazina, linalool, 2-acetil-3-metil pirazina, 5-Hidroximetil furfural, geraniol, 5-acetoximetil-2-furaldehído, 2-metoxi-4-vinilfenol y cafeína. Siendo así, 22 VOC's seleccionados entre ambas columnas.

Tabla 11. ANOVA de VOC's que presentaron diferencia significativa intra e inter-grupo

VOC's	Media	Desviacion estándar	Columna	F	p value	Eta-sq	RMSSE	Omega Sq
Trimetil pirazina	2.211	0.206	Polar	7.842	0.014	0.359	1.143	0.300
3-etil-2,5-dimetil pirazina	2.582	0.772	Polar	7.230	0.018	0.341	1.098	0.280
1-(2-furanil) etanona	2.849	1.306	Polar	3.365	0.088	0.194	0.749	0.129
1-(6-metil-2-pirazinil)-1-etanona	1.377	1.936	Polar	5.127	0.040	0.268	0.924	0.205

<i>Metil pirazina</i>	2.075	1.146	Apolar	5.069	0.041	0.266	0.919	0.203
<i>3-etil-2,5-dimetil pirazina</i>	0.793	0.125	Apolar	13.538	0.002	0.492	1.502	0.439
<i>2-acetil-3-metil pirazina</i>	1.053	0.295	Apolar	8.173	0.013	0.369	1.167	0.310

En la tabla 11 se muestran los VOC's que presentaron diferencia significativa ($p < 0.05$) con respecto al puntaje de catación y entre e intra-grupos siendo el trimetil pirazina, 3-etil-2,5-dimetil pirazina, 1-(2-furanil) etanona y 1-(6-metil-2-pirazinil)-1-etanona los VOC's que presentaron diferencia al utilizar una columna polar. Mientras que, en la columna apolar fueron la metil pirazina, 3-etil-2,5-dimetil pirazina y 2-acetil-3-metil pirazina quienes presentaron diferencia. Cabe resaltar que casi todos los compuestos pertenecen al grupo de las pirazina, estos compuestos se producen durante el proceso de tostado específicamente durante la reacción de Millard, pirolisis y degradación de Strecker (Hellwig & Henle, 2020; Ribeiro et al., 2009).

Un estudio realizado por Toci & Farah, (2014) indican que la concentración de pirazinas depende de un exceso de aminoácidos que al reaccionar con los azúcares en la reacción de Millard aumentan la formación de compuestos heterocíclicos como las pirazinas, lo que podría ayudar a explicar la diferencia entre cafés de buena y baja calidad. Cabe destacar que, las pirazinas son uno de los grupos más abundantes en el café y tienen un impacto sobre la calidad de este (Agnoletti et al., 2022).

Los compuestos que pertenecen al grupo de las pirazinas de la tabla 11 presentaron una media de porcentaje de área relativa mayor en los cafés de menor calidad (grupo 1), mientras que en los cafés de mayor calidad (grupo 2) el porcentaje de área fue menor. Este porcentaje de área relativo representa el porcentaje del área del pico de cada compuesto con respecto al área del pico total del cromatograma de GC/MS

(Demianová et al., 2022) por lo que, es un indicativo de la concentración de los VOC's presente en el café. Estos datos concuerdan con un estudio realizado por Toci et al., (2020) en donde indicaron que las pirazinas y los compuestos fenólicos predominaron entre los compuestos con mayor concentración en los cafés de baja calidad. Lo que indica que la presencia y/o concentración de algunos compuestos pertenecientes a las pirazinas puede llegar a ser indicativos de cafés de baja y alta calidad.

CAPÍTULO 5
CONCLUSIONES

Conclusiones

En esta investigación se logró concluir los siguientes puntos:

1. La técnica de extracción utilizando SPME es un método sencillo y rápido que permite gran captación de compuestos volátiles en una muestra de café

2. La fibra bipolar de DVB/CAR/PDMS y la columna polar son ideales para estudios de la composición volátil en café ya que al tener revestimiento de carácter polar y apolar permite una mayor captación de VOC's.

3. Se logró identificar más de 200 compuestos volátiles en cafés geisha producidos en la provincia de Chiriquí, siendo más del 70% de los compuestos identificados altamente aromáticos los cuales brindan esa calidad única al café geisha panameño.

4. El número VOC's encontrados en mayor proporción pertenecían a grupos funcionales de las pirazinas, terpenos y compuestos aromáticos los cuales proporciona notas frutales, florales, cítricas a los cuales se les atribuye que otorgan cualidades positivas al café.

5. Los cafés evaluados sensorialmente presentaron puntajes que indican que pertenecen a cafés de excelencia segregándose en 2 grupos, los de baja calidad con puntaje menor de 88.0 y los de alta calidad con puntajes por encima de 88.0.

6. Los VOC' del grupo de las pirazinas con mayor porcentaje de área relativa predominan en cafés de baja calidad. Por lo que la presencia y/o concentración de estos compuestos puede ser un indicativo en la calidad del café.

7. Esta investigación sienta las bases para futuras investigaciones de la composición volátil del café geisha panameño.

CAPÍTULO 6
REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Se utilizó el gestor de referencia Mendeley Reference Manager 2.110.2

- Adams, R. P. (2007). *Essential Oil Components by chromatography/quadrupole mass spectrometry*. (4). Diablo Analytical.
- Agnoletti, B. Z., Folli, G. S., Pereira, L. L., Pinheiro, P. F., Guarçoni, R. C., da Silva Oliveira, E. C., & Filgueiras, P. R. (2022). Multivariate calibration applied to study of volatile predictors of arabica coffee quality. *Food Chemistry*, 367. <https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2021.130679>
- Ahmed, S., Brinkley, S., Smith, E., Sela, A., Theisen, M., Thibodeau, C., Warne, T., Anderson, E., Van Dusen, N., Giuliano, P., Ionescu, K. E., & Cash, S. B. (2021). Climate Change and Coffee Quality: Systematic Review on the Effects of Environmental and Management Variation on Secondary Metabolites and Sensory Attributes of *Coffea arabica* and *Coffea canephora*. In *Frontiers in Plant Science* (Vol. 12). Frontiers Media S.A. <https://doi.org/10.3389/fpls.2021.708013>
- Angeloni, S., Mustafa M, A., Abouelenein, D., Alessandrini, L., Acquaticci, L., Kamgang Nzekoue, F., Petrelli, R., Sagratini, G., Vittori, S., Torregiani, E., & Caprioli, G. (2021). Characterization of the Aroma Profile and Main Key Odorants of Espresso Coffee. *Molecules*, 26(3856). <https://doi.org/https://doi.org/10.3390/molecules26133856>
- Barbosa, M. de S. G., Francisco, J. S., dos Santos Scholz, M. B., Kitzberger, C. S. G., & Benassi, M. de T. (2019). Dynamics of sensory perceptions in arabica coffee brews with different roasting degrees. *Journal of Culinary Science and Technology*, 17(5), 453–464. <https://doi.org/10.1080/15428052.2018.1489321>
- Barbosa, M. de S. G., Scholz, M. B. dos S., Kitzberger, C. S. G., & Benassi, M. de T. (2019). Correlation between the composition of green Arabica coffee beans and the sensory quality of coffee brews. *Food Chemistry*, 292, 275–280. <https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2019.04.072>
- Batool, Z., Xu, D., Zhang, X., Li, X., Li, Y., Chen, Z., Li, B., & Li, L. (2021). A review on furan: Formation, analysis, occurrence, carcinogenicity, genotoxicity and reduction methods. In *Critical Reviews in Food Science and Nutrition* (Vol. 61, Issue 3, pp. 395–406). Bellwether Publishing, Ltd. <https://doi.org/10.1080/10408398.2020.1734532>
- Billiard, K. M., Dershem, A. R., & Gionfriddo, E. (2020). Implementing Green Analytical Methodologies Using Solid-Phase Microextraction: A Review. In *Molecules (Basel, Switzerland)* (Vol. 25, Issue 22). NLM (Medline). <https://doi.org/10.3390/molecules25225297>
- Bizzo, H. R., Brilhante, N. S., Nolvachai, Y., & Marriott, P. J. (2023). Use and abuse of retention indices in gas chromatography. In *Journal of Chromatography A* (Vol. 1708). Elsevier B.V. <https://doi.org/10.1016/j.chroma.2023.464376>
- Blumberg, L. M. (2021). Theory of gas chromatography. In *Gas Chromatography* (pp. 19–97). Elsevier. <https://doi.org/10.1016/b978-0-12-820675-1.00026-5>
- Böger, B. R., Mori, A. L. B., Viegas, M. C., & Benassi, M. T. (2021). Quality attributes of roasted Arabica coffee oil extracted by pressing: Composition, antioxidant activity, sun protection factor and other physical and chemical parameters. *Grasas y Aceites*, 72(1). <https://doi.org/10.3989/GYA.1144192>

- Bona, E., & Da Silva, R. S. D. S. F. (2016). Coffee and the Electronic Nose. In *Electronic Noses and Tongues in Food Science* (pp. 31–38). Elsevier Inc. <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-800243-8.00004-4>
- Borém, F. M., Abreu, G. F. de, Alves, A. P. de C., Santos, C. M. dos, & Teixeira, D. E. (2021). Volatile compounds indicating latent damage to sensory attributes in coffee stored in permeable and hermetic packaging. *Food Packaging and Shelf Life*, 29(May). <https://doi.org/10.1016/j.foodres.2021.100705>
- Bressanello, D., Liberto, E., Cordero, C., Sgorbini, B., Rubiolo, P., Pellegrino, G., Ruosi, M. R., & Bicchi, C. (2018). Chemometric Modeling of Coffee Sensory Notes through Their Chemical Signatures: Potential and Limits in Defining an Analytical Tool for Quality Control. *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, 66(27), 7096–7109. <https://doi.org/10.1021/acs.jafc.8b01340>
- Bressani, A. P. P., Martinez, S. J., Sarmento, A. B. I., Borém, F. M., & Schwan, R. F. (2020). Organic acids produced during fermentation and sensory perception in specialty coffee using yeast starter culture. *Food Research International*, 128. <https://doi.org/10.1016/j.foodres.2019.108773>
- Caporaso, N., Whitworth, M. B., Cui, C., & Fisk, I. D. (2018). Variability of single bean coffee volatile compounds of Arabica and robusta roasted coffees analysed by SPME-GC-MS. *Food Research International*, 108, 628–640. <https://doi.org/10.1016/j.foodres.2018.03.077>
- Catão, A. A., Mateus, N. de S., Garcia, C. da C., da Silva, M. C., Novaes, F. J. M., Alves, S., Marriott, P. J., & da Silva, A. I. (2022). Coffee-roasting variables associated with volatile organic profiles and sensory evaluation using multivariate analysis. *Applied Food Research*, 2(2). <https://doi.org/10.1016/j.afres.2022.100223>
- Cordoba, N., Fernandez-Alduenda, M., Moreno, F. L., & Ruiz, Y. (2020). Coffee extraction: A review of parameters and their influence on the physicochemical characteristics and flavour of coffee brews. In *Trends in Food Science and Technology* (Vol. 96, pp. 45–60). Elsevier Ltd. <https://doi.org/10.1016/j.tifs.2019.12.004>
- Córdoba, N., Moreno, F. L., Osorio, C., Velásquez, S., Fernandez-Alduenda, M., & Ruiz-Pardo, Y. (2021). Specialty and regular coffee bean quality for cold and hot brewing: Evaluation of sensory profile and physicochemical characteristics. *LWT*, 145. <https://doi.org/10.1016/j.lwt.2021.111363>
- Costa, B. D. R. (2020). Brazilian specialty coffee scenario. In *Coffee Consumption and Industry Strategies in Brazil: A Volume in the Consumer Science and Strategic Marketing Series* (pp. 51–64). Elsevier. <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-814721-4.00003-2>
- d'Acampora Zellner, B., Bicchi, C., Dugo, P., Rubiolo, P., Dugo, G., & Mondello, L. (2008). Linear retention indices in gas chromatographic analysis: A review. In *Flavour and Fragrance Journal* (Vol. 23, Issue 5, pp. 297–314). <https://doi.org/10.1002/ffj.1887>
- Dalmajer, E. S., Nord, C. L., & Astle, D. E. (2022). Statistical power for cluster analysis. *BMC Bioinformatics*, 23(1). <https://doi.org/10.1186/s12859-022-04675-1>
- Demianová, A., Bobková, A., Lidiková, J., Jurčaga, L., Bobko, M., Belej, L., Kolek, E., Poláková, K., Iriondo-DeHond, A., & Dolores del Castillo, M. (2022). Volatiles as chemical markers suitable for

- identification of the geographical origin of green *Coffea arabica* L. *Food Control*, 136. <https://doi.org/10.1016/j.foodcont.2022.108869>
- Dippong, T., Dan, M., Kovacs, M. H., Kovacs, E. D., Levei, E. A., & Cadar, O. (2022). Analysis of Volatile Compounds, Composition, and Thermal Behavior of Coffee Beans According to Variety and Roasting Intensity. *Foods*, 11(19). <https://doi.org/10.3390/foods11193146>
- Dryahina, K., Smith, D., & Španěl, P. (2018). Quantification of volatile compounds released by roasted coffee by selected ion flow tube mass spectrometry. *Rapid Communications in Mass Spectrometry*, 32(9), 739–750. <https://doi.org/10.1002/rcm.8095>
- Elhalis, H., Cox, J., Frank, D., & Zhao, J. (2021). The role of wet fermentation in enhancing coffee flavor, aroma and sensory quality. *European Food Research and Technology*, 247(2), 485–498. <https://doi.org/10.1007/s00217-020-03641-6>
- Fassio, L. O., Malta, M. R., Liska, G. R., Alvarenga, S. T., Sousa, M. M. M., Farias, T. R. T., & Pereira, R. G. F. A. (2017). Sensory Profile and Chemical Composition of Specialty Coffees from Matas de Minas Gerais, Brazil. *Journal of Agricultural Science*, 9(9), 78. <https://doi.org/10.5539/jas.v9n9p78>
- Figueiredo, L. P., Borem, F. M., Ribeiro, F. C., Giomo, G., Taveira, J. H. da S., & Malta, M. R. (2015). Fatty acid profiles and parameters of quality of specialty coffees produced in different Brazilian regions. *African Journal of Agricultural Research*, 10(35), 3484–3493. <https://doi.org/10.5897/ajar2015.9697>
- Frost, S. C., Walker, P., Orians, C. M., & Robbat, A. (2022). The Chemistry of Green and Roasted Coffee by Selectable 1D/2D Gas Chromatography Mass Spectrometry with Spectral Deconvolution. *Molecules*, 27(16). <https://doi.org/10.3390/molecules27165328>
- Gancarz, M., Dobrzański, B., Malaga-Toboła, U., Tabor, S., Combrzyński, M., Ćwikła, D., Strobel, W. R., Oniszczyk, A., Karami, H., Darvishi, Y., Żytek, A., & Rusinek, R. (2022a). Impact of Coffee Bean Roasting on the Content of Pyridines Determined by Analysis of Volatile Organic Compounds. *Molecules*, 27(5). <https://doi.org/10.3390/molecules27051559>
- Gancarz, M., Dobrzański, B., Malaga-Toboła, U., Tabor, S., Combrzyński, M., Ćwikła, D., Strobel, W. R., Oniszczyk, A., Karami, H., Darvishi, Y., Żytek, A., & Rusinek, R. (2022b). Impact of Coffee Bean Roasting on the Content of Pyridines Determined by Analysis of Volatile Organic Compounds. *Molecules*, 27(5). <https://doi.org/10.3390/molecules27051559>
- Geladi, P., & Linderholm, J. (2020). Principal Component Analysis. In *Comprehensive Chemometrics: Chemical and Biochemical Data Analysis, Second Edition: Four Volume Set* (Vol. 2, pp. 17–37). Elsevier. <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-409547-2.14892-9>
- Girma, B., & Sualeh, A. (2022). A Review of Coffee Processing Methods and Their Influence on Aroma. *International Journal of Food Engineering and Technology*, 6(1), 7. <https://doi.org/10.11648/j.ijfet.20220601.12>
- Góngora, C. E., Tapias, J., Jaramillo, J., Medina, R., Gonzalez, S., Casanova, H., Ortiz, A., & Benavides, P. (2020). Evaluation of Terpene-Volatile Compounds Repellent to the Coffee Berry Borer,

- Hypothenemus hampei (Ferrari) (Coleoptera: Curculionidae). *Journal of Chemical Ecology*, 46(9), 881–890. <https://doi.org/10.1007/s10886-020-01202-5>
- Granato, D., Putnik, P., Kovačević, D. B., Santos, J. S., Calado, V., Rocha, R. S., Cruz, A. G. Da, Jarvis, B., Rodionova, O. Y., & Pomerantsev, A. (2018). Trends in Chemometrics: Food Authentication, Microbiology, and Effects of Processing. *Comprehensive Reviews in Food Science and Food Safety*, 17(3), 663–677. <https://doi.org/10.1111/1541-4337.12341>
- Hellwig, M., & Henle, T. (2020). Maillard Reaction Products in Different Types of Brewing Malt. *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, 68(48), 14274–14285. <https://doi.org/10.1021/acs.jafc.0c06193>
- Hernandes, K. C., Souza-Silva, É. A., Assumpção, C. F., Zini, C. A., & Welke, J. E. (2019). Matrix-compatible solid phase microextraction coating improves quantitative analysis of volatile profile throughout brewing stages. *Food Research International*, 123, 75–87. <https://doi.org/10.1016/j.foodres.2019.04.048>
- Instituto Nacional de Estadística y Censo. (2023). *COSECHA DE CAFÉ EN LAS PRINCIPALES PROVINCIAS Y COMARCA INDÍGENA DE LA REPÚBLICA: AÑOS AGRÍCOLAS 2018/19 A 2022/23*. https://www.inec.gob.pa/publicaciones/Default3.aspx?ID_PUBLICACION=1204&ID_CATEGORIA=4&ID_SUBCATEGORIA=12
- Kamgang Nzekoue, F., Angeloni, S., Caprioli, G., Cortese, M., Maggi, F., Marconi, U. M. B., Perali, A., Ricciutelli, M., Sagratini, G., & Vittori, S. (2020). Fiber-Sample Distance, An Important Parameter to Be Considered in Headspace Solid-Phase Microextraction Applications. *Analytical Chemistry*, 92(11), 7478–7484. <https://doi.org/10.1021/acs.analchem.9b05386>
- Karakaya, D., Ulucan, O., & Turkan, M. (2020). Electronic Nose and Its Applications: A Survey. In *International Journal of Automation and Computing* (Vol. 17, Issue 2, pp. 179–209). Chinese Academy of Sciences. <https://doi.org/10.1007/s11633-019-1212-9>
- Kim, Y. J., Choi, J., Lee, G., & Lee, K. G. (2021). Analysis of furan and monosaccharides in various coffee beans. *Journal of Food Science and Technology*, 58(3), 862–869. <https://doi.org/10.1007/s13197-020-04600-5>
- Laukaleja, I., & Kruma, Z. (2018). Quality of Specialty Coffee: Balance between aroma, flavour and biologically active compound composition: Review. *Research for Rural Development*, 1(December 2018), 240–247. <https://doi.org/10.22616/rrd.24.2018.038>
- Laukaleja, I., & Kruma, Z. (2019). Influence of the roasting process on bioactive compounds and aroma profile in specialty coffee: a review. *FOODBALT. 13th Baltic Conference on Food Science and Technology" FOOD, NUTRITION, WELL-BEING*, 7–12. <https://doi.org/10.22616/foodbalt.2019.002>
- Lim, Y. M., Swamy, V., Ramakrishnan, N., Chan, E. S., & Kesuma, H. P. (2023). Volatile organic compounds (VOCs) in wastewater: Recent advances in detection and quantification. In *Microchemical Journal* (Vol. 195). Elsevier Inc. <https://doi.org/10.1016/j.microc.2023.109537>
- Lingle, T. R., & Menon, S. N. (2017). Cupping and Grading-Discovering Character and Quality. In *The Craft and Science of Coffee* (pp. 181–203). Elsevier Inc. <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-803520-7.00008-6>

- Mahmud, M. M. C., Shellie, R. A., & Keast, R. (2020). Unravelling the relationship between aroma compounds and consumer acceptance: Coffee as an example. *Comprehensive Reviews in Food Science and Food Safety*, 19(5), 2380–2420. <https://doi.org/10.1111/1541-4337.12595>
- Margolin Eren, K. J., Elkabets, O., & Amirav, A. (2020). A comparison of electron ionization mass spectra obtained at 70 eV, low electron energies, and with cold EI and their NIST library identification probabilities. *Journal of Mass Spectrometry*, 55(12). <https://doi.org/10.1002/jms.4646>
- Méndez Martínez, C., Alonso, M., & Sepúlveda, R. (2012). Metodología de investigación y lectura crítica de estudios Introducción al análisis factorial exploratorio. In *Rev. Colomb. Psiquiat* (Vol. 41, Issue 1).
- Mendonça de Carvalho, A., Costa de Rezende, J., Teruel Rezende, T., Dominghetti Ferreira, A., Machado Rezende, R., Nazareno Guimaraes Mendes, A., & Rodrigues Carvalho, G. (2016). Relationship between the sensory attributes and the quality of coffee in different environments. *African Journal of Agricultural Research*, 11(38), 3607–3614. <https://doi.org/10.5897/ajar2016.11545>
- MIDA. (2022, September 29). *Se prevé un incremento en la producción de café en Chiriquí*. <https://mida.gob.pa/se-preve-un-incremento-en-la-produccion-de-cafe-en-chiriqui/?csrt=9904806078787252617>
- Mortzfeld, F. B., Hashem, C., Vranková, K., Winkler, M., & Rudroff, F. (2020). Pyrazines: Synthesis and Industrial Application of these Valuable Flavor and Fragrance Compounds. In *Biotechnology Journal* (Vol. 15, Issue 11). Wiley-VCH Verlag. <https://doi.org/10.1002/biot.202000064>
- Mottaleb, M. A., Meziani, M. J., & Islam, M. R. (2014). Solid-Phase Microextraction and its Application to Natural Products. In *Encyclopedia of Analytical Chemistry* (pp. 1–23). Wiley. <https://doi.org/10.1002/9780470027318.a9905>
- Mushabbab Alasmari, K., Abu Zeid, I., & al-attar, A. (2020). Coffee Arabica in Saudi Arabia: An Overview. *International Journal of Pharmaceutical and Phytopharmacological Research*, 10(4), 71–78. www.eijppr.com
- Noviandy, T. R., Maulana, A., Sasmita, N. R., Suhendra, R., Muslem, Idroes, G. M., Paristiowati, M., Helwani, Z., Yandri, E., Rahimah, S., Muhammad, Irvanizam, & Idroes, R. (2021). The implementation of K-Means clustering in kovats retention index on gas chromatography. *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering*, 1087(1), 012051. <https://doi.org/10.1088/1757-899x/1087/1/012051>
- Observatory of Economic Complexity (OEC). (2021). *Cafe en Panama* . <https://oec.world/es/profile/bilateral-product/coffee/reporter/pan>
- Peng, S., Huang, X., Huang, Y., Huang, Y., Zheng, J., Zhu, F., Xu, J., & Ouyang, G. (2022). Novel solid-phase microextraction fiber coatings: A review. *Journal of Separation Science*, 45(1), 282–304. <https://doi.org/10.1002/jssc.202100634>
- Petisca, C., Pérez-Palacios, T., Farah, A., Pinho, O., & Ferreira, I. M. P. L. V. O. (2013). Furans and other volatile compounds in ground roasted and espresso coffee using headspace solid-phase microextraction: Effect of roasting speed. *Food and Bioprocess Processing*, 91(3), 233–241. <https://doi.org/10.1016/j.fbp.2012.10.003>

- Piccino, S., Boulanger, R., Descroix, F., Shum, A., & Sing, C. (2013). Aromatic composition and potent odorants of the “ specialty coffee ” brew “ Bourbon Pointu ” correlated to its three trade classifications. *Food Research International*. <https://doi.org/10.1016/j.foodres.2013.07.034>
- Poisson, L., Blank, I., Dunkel, A., & Hofmann, T. (2017). The Chemistry of Roasting-Decoding Flavor Formation. In *The Craft and Science of Coffee* (pp. 273–309). Elsevier Inc. <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-803520-7.00012-8>
- Reyes-Contreras, C., Domínguez, C., & Bayona, J. M. (2012). Determination of nitrosamines and caffeine metabolites in wastewaters using gas chromatography mass spectrometry and ionic liquid stationary phases. *Journal of Chromatography A*, *1261*, 164–170. <https://doi.org/10.1016/j.chroma.2012.05.082>
- Ribeiro, J. S., Augusto, F., Salva, T. J. G., & Ferreira, M. M. C. (2012). Prediction models for Arabica coffee beverage quality based on aroma analyses and chemometrics. *Talanta*, *101*, 253–260. <https://doi.org/10.1016/j.talanta.2012.09.022>
- Ribeiro, J. S., Augusto, F., Salva, T. J. G., Thomaziello, R. A., & Ferreira, M. M. C. (2009). Prediction of sensory properties of Brazilian Arabica roasted coffees by headspace solid phase microextraction-gas chromatography and partial least squares. *Analytica Chimica Acta*, *634*(2), 172–179. <https://doi.org/10.1016/j.aca.2008.12.028>
- Rizky Noviandy, T., Maulana, A., Reandy Sasmita, N., Suhendra, R., Irvanizam, I., Muslem, M., Mauer Idroes, G., Yusuf, M., Sofyan, H., Fuadi Abidin, T., & Idroes, R. (2022). THE PREDICTION OF KOVATS RETENTION INDICES OF ESSENTIAL OILS AT GAS CHROMATOGRAPHY USING GENETIC ALGORITHM-MULTIPLE LINEAR REGRESSION AND SUPPORT VECTOR REGRESSION. In *Journal of Engineering Science and Technology* (Vol. 17, Issue 1).
- Santamaría, N., Meléndez, F., Arroyo, P., Calvo, P., Sánchez, F., Lozano, J., & Sánchez, R. (2023). Olfactory Evaluation of Geisha Coffee from Panama Using Electronic Nose. *Chemosensors*, *11*(11), 559. <https://doi.org/10.3390/chemosensors11110559>
- Santoso, I., Mustaniroh, S. A., & Choirun, A. (2021). Methods for quality coffee roasting degree evaluation: A literature review on risk perspective. *IOP Conference Series: Earth and Environmental Science*, *924*(1). <https://doi.org/10.1088/1755-1315/924/1/012058>
- SCA. (2018). *A Specialty Coffee Association Resource Protocols and Best Practices*.
- SCAP. (2021). *Specialty Coffee Association of Panama*. <http://scap-panama.com/2021/09/22/geisha-de-panama-impone-nuevo-record-mundial-en-subasta-electronica-del-bop/>
- SCAP. (2023, September 6). *Panamá lidera en precio las subastas electrónicas de café de especialidad*. <http://scap-panama.com/2023/09/07/panama-lidera-en-precio-las-subastas-electronicas-de-cafe-de-especialidad/>
- Seninde, D. R., & Chambers, E. (2020). Coffee Flavor: A Review. *Beverages*, *6*(44), 1–25. <https://doi.org/10.3390/beverages6030044>

- Sepúlveda, W. S., Chekmam, L., Maza, M. T., & Mancilla, N. O. (2016). Consumers' preference for the origin and quality attributes associated with production of specialty coffees: Results from a cross-cultural study. *Food Research International*. <https://doi.org/10.1016/j.foodres.2016.03.039>
- Shrestha, N. (2021). Factor Analysis as a Tool for Survey Analysis. *American Journal of Applied Mathematics and Statistics*, 9(1), 4–11. <https://doi.org/10.12691/ajams-9-1-2>
- Sommer, S., Lang, L. M., Drummond, L., Buchhaupt, M., Fraatz, M. A., & Zorn, H. (2022). Odor Characteristics of Novel Non-Canonical Terpenes. *Molecules*, 27(12). <https://doi.org/10.3390/molecules27123827>
- Sunarharum, W. B., Williams, D. J., & Smyth, H. E. (2014). Complexity of coffee flavor: A compositional and sensory perspective. In *Food Research International* (Vol. 62, pp. 315–325). Elsevier Ltd. <https://doi.org/10.1016/j.foodres.2014.02.030>
- SUPELCO. (n.d.). *Bulletin 923*.
- Tarigan, E. B., Wardiana, E., Hilmi, Y. S., & Komarudin, N. A. (2022). The changes in chemical properties of coffee during roasting: A review. *IOP Conference Series: Earth and Environmental Science*, 974(1). <https://doi.org/10.1088/1755-1315/974/1/012115>
- The Good Scents Company. (2021). *TGSC Information System*. <https://www.thegoodscentscompany.com/allodor.html>
- Toci, A. T., Azevedo, D. A., & Farah, A. (2020). Effect of roasting speed on the volatile composition of coffees with different cup quality. *Food Research International*, 137. <https://doi.org/10.1016/j.foodres.2020.109546>
- Toci, A. T., & Farah, A. (2014). Volatile fingerprint of Brazilian defective coffee seeds: Corroboration of potential marker compounds and identification of new low quality indicators. *Food Chemistry*, 153, 298–314. <https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2013.12.040>
- Toledo, P. R. A. B., Pezza, L., Pezza, H. R., & Toci, A. T. (2016). Relationship Between the Different Aspects Related to Coffee Quality and Their Volatile Compounds. *Comprehensive Reviews in Food Science and Food Safety*, 15(4), 705–719. <https://doi.org/10.1111/1541-4337.12205>
- TSGM. (2021). *Odor Type Listing*.
- Varady, M., Tauchen, J., Frankova, A., Kloucek, P., & Popelka, P. (2022). Effect of method of processing specialty coffee beans (natural, washed, honey, fermentation, maceration) on bioactive and volatile compounds. *LWT*, 172, 114245. <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S002364382201180X>
- Vas, G., & Vékey, K. (2004). Solid-phase microextraction: A powerful sample preparation tool prior to mass spectrometric analysis. In *Journal of Mass Spectrometry* (Vol. 39, Issue 3, pp. 233–254). <https://doi.org/10.1002/jms.606>
- Vega, A., De León, J. A., Reyes, S. M., & Gallardo, J. M. (2021). Modelo matemático para determinar la correlación entre parámetros fisicoquímicos y la calidad sensorial de café Geisha y Pacamara de

- Panamá. *Informacion Tecnologica*, 32(1), 89–100. <https://doi.org/10.4067/S0718-07642021000100089>
- Vega, A., De León, J. A., Reyes, S. M., & Miranda, S. Y. (2018). Componentes Bioactivos de Diferentes Marcas de Café Comerciales de Panamá. Relación entre Ácidos Clorogénicos y Cafeína. *Información Tecnológica*, 29(4), 43–54. <https://doi.org/10.4067/s0718-07642018000400043>
- Vezzulli, F., Lambri, M., & Bertuzzi, T. (2023). Volatile Compounds in Green and Roasted Arabica Specialty Coffee: Discrimination of Origins, Post-Harvesting Processes, and Roasting Level. *Foods*, 12(3). <https://doi.org/10.3390/foods12030489>
- Wilson, A. P., & Wilson, N. L. W. (2014). The economics of quality in the specialty coffee industry: Insights from the Cup of Excellence auction programs. *Agricultural Economics*, 45(S1), 91–105. <https://doi.org/10.1111/agec.12132>
- Wu, H., Lu, P., Liu, Z., Sharifi-Rad, J., & Suleria, H. A. R. (2022). Impact of roasting on the phenolic and volatile compounds in coffee beans. *Food Science and Nutrition*, 10(7), 2408–2425. <https://doi.org/10.1002/fsn3.2849>
- Yang, N., Liu, C., Liu, X., Degn, T. K., Munchow, M., & Fisk, I. (2016). Determination of volatile marker compounds of common coffee roast defects. *Food Chemistry*, 211, 206–214. <https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2016.04.124>
- Yashin, A., Yashin, Y., Xia, X., & Nemzer, B. (2017). Chromatographic Methods for Coffee Analysis: A Review. *Journal of Food Research*, 6(4), 60. <https://doi.org/10.5539/jfr.v6n4p60>
- Yuwono, S. S., Hanasasmita, N., Sunarharum, W. B., & Harijono. (2019). Effect of different aroma extraction methods combined with GC-MS on the aroma profiles of coffee. In *IOP Conference Series: Earth and Environmental Science* (Vol. 230, Issue 1). <https://doi.org/10.1088/1755-1315/230/1/012044>
- Zakidou, P., Plati, F., Matsakidou, A., Varka, E. M., Blekas, G., & Paraskevopoulou, A. (2021). Single origin coffee aroma: From optimized flavor protocols and coffee customization to instrumental volatile characterization and chemometrics. *Molecules*, 26(15). <https://doi.org/10.3390/molecules26154609>

CAPÍTULO 7

ANEXOS

Anexo 1. Tablas con información completa de VOC's identificados en columnas polar y apolar.

Tabla 12. Compuestos volátiles identificados en 30 muestras de café geisha utilizando una columna apolar SH Rxi-5HT 5% dimetilsiloxano

N ^o ^a	grupo funcional	VOC's	TR	PM	fórmula	#Cas	IR exp ^b	IR teórico ^c	Similitud (%)	área ^d (%)
30	acetato	2-furanmetanol acetato	18.58	140	C ₇ H ₈ O ₃	623 - 17 - 6	987.0	991	94	3.75
84	ácido graso	Ácido hexanoico éster hexílico	46.96	200	C ₁₂ H ₂₄ O ₂	6378 - 65 - 0	1381.4	1382	89	0.32
99	ácido graso	1-decanol 2-hexil-	66.70	242	C ₁₆ H ₃₄ O	2425 - 77 - 6	1700.0	-	89	0.03
100	ácido graso	Ácido mirístico	71.85	256	C ₁₆ H ₃₂ O ₂	124 - 06 - 1	1792.1	1796	91	0.04
103	ácido graso	Ácido hexadecanoico, éster metílico	75.90	270	C ₁₇ H ₃₄ O ₂	112 - 39 - 0	1920.6	1926	96	0.18
104	ácido graso	Ácido n-hexadecanoico	76.73	256	C ₁₆ H ₃₂ O ₂	57 - 10 - 3	1960.3	1964	90	0.03
105	ácido graso	Ácido palmítico	77.28	284	C ₁₈ H ₃₆ O ₂	628 - 97 - 7	1987.1	1993	93	0.70
106	ácido graso	Ácido linoleico	80.33	280	C ₁₈ H ₃₂ O ₂	60 - 33 - 3	2138.8	2140	87	0.06
107	ácido graso	Ester etílico del ácido linoleico	80.34	308	C ₂₀ H ₃₆ O ₂	544 - 35 - 4	2139.1	2140	90	0.03
108	ácido graso	Ácido linolelaídico	80.36	294	C ₁₉ H ₃₄ O ₂	2566-97-4	2140.1	-	90	0.02
1	Ácido orgánico	Ácido acético	2.81	60	C ₂ H ₄ O ₂	64 - 19 - 7	-	-	96	16.54
4	Ácido orgánico	Ácido propanoico	4.18	74	C ₃ H ₆ O ₂	107 - 88 - 0	-	-	89	0.09
18	Ácido orgánico	Ácido isovalérico	12.09	102	C ₅ H ₁₀ O ₂	503 - 74 - 2	894.1	888	84	0.42
19	Ácido orgánico	Ácido 2-metil-butanoico	12.05	102	C ₅ H ₁₀ O ₂	116-53-0	893.3	846	88	0.63
26	Ácido orgánico	Ácido 3-metilo crotonico	14.65	100	C ₅ H ₈ O ₂	541 - 47 - 9	931.6	953	88	0.03
98	alcano	2-metil hexadecano	64.15	240	C ₁₇ H ₃₆	1560 - 92 - 5	1662.7	1666	86	0.09
10	alcohol	Isobutilmetilcarbinol	6.43	102	C ₆ H ₁₄ O	108-11-2	-	-	87	0.03
11	alcohol	2-butanol	6.51	74	C ₄ H ₁₀ O	78 - 92 - 2	-	-	89	0.08
39	alcohol	Etilhexanol	21.59	130	C ₈ H ₁₈ O	104-76-7	1027.9	1029	93	0.40
65	alcohol	2-fenoxietanol	35.10	138	C ₈ H ₁₀ O ₂	122-99-6	1210.3	1191	86	0.26
28	aldehído	Benzaldehído	15.70	106	C ₇ H ₆ O	100-52-7	946.4	960	83	0.04

57	aldehído	(6z)-6-nonenal	30.73	140	C ₉ H ₁₆ O	2277 - 19 - 2	1150.6	1101	84	0.12
70	aldehído	Citral	38.82	152	C ₁₀ H ₁₆ O	5392-40-5	1262.6	1240	90	0.60
78	aldehído	5-acetoximetil-2-furaldehído	41.24	168	C ₈ H ₈ O ₄	10551 - 58 - 3	1296.4	1304	89	1.07
93	alqueno	2,2-dimetiltetradecano	55.47	226	C ₁₆ H ₃₄	59222 - 86 - 5	1519.1	-	85	0.20
2	cetona	2,3-pentanediona	3.41	100	C ₅ H ₈ O ₂	600 - 14 - 6	-	-	90	0.69
3	cetona	2-pentanona	3.42	86	C ₅ H ₁₀ O	107-87-9	-	-	86	0.47
7	cetona	1-hidroxi-2 butanona	5.21	88	C ₄ H ₈ O ₂	5077 - 67 - 8	-	-	90	0.04
12	cetona	2-hidroxi-3 pentanona	6.56	102	C ₅ H ₁₀ O ₂	5704 - 20 - 1	-	-	89	0.04
37	cetona	3-metil-1,2 ciclopentanodiona	20.99	112	C ₆ H ₈ O ₂	765 - 70 - 8	1020.0	1043	86	0.85
47	cetona	Furaneol	24.99	128	C ₆ H ₈ O ₃	3658 - 77 - 3	1073.2	1071	86	0.29
52	cetona	3-etil-2-hidroxi-2- ciclopenten-1-ona	27.88	126	C ₇ H ₁₀ O ₂	21835 - 01 - 8	1111.8	1100	93	0.46
72	cetona	Etanona, 1-(2,5- dihidroxifenil)	39.00	152	C ₈ H ₈ O ₃	490 - 78 - 8	1265.0	-	88	1.18
75	cetona	Acetofenona	39.10	152	C ₈ H ₈ O ₃	490 - 78 - 8	1266.42	-	88	1.94
81	cetona	3,4-dimetoxiestireno	45.38	164	C ₁₀ H ₁₂ O ₂	6380 - 23 - 0	1357.8	1367	86	0.83
94	compuesto aromático	Naftaleno	55.72	204	C ₁₅ H ₂₄	483 - 76 - 1	1523.1	1521	87	0.26
45	éster	Ácido 2-furancarboxílico, éster metílico	24.66	126	C ₆ H ₆ O ₃	611 - 13 - 2	1068.8	984	86	0.43
66	éster	Furfuril pentanoato	35.23	182	C ₁₀ H ₁₄ O ₃	36701 - 01 - 6	1212.1	-	86	0.05
82	éster	Acetato de 4- <i>terc</i> - butilciclohexilo	45.64	198	C ₁₂ H ₂₂ O ₂	32210 - 23 - 4	1361.8	1346	89	0.07
96	éster	2,2,4-trimetil-1,3-pentanodiol diisobutirato	59.90	286	C ₁₆ H ₃₀ O ₄	6846 - 50 - 0	1589.4	1587	87	0.12
10 2	éster	Hexahidrofarnesil acetona	73.74	268	C ₁₈ H ₃₆ O	502 - 69 - 2	1844.69	1846	88	0.02
13	éter	Éter isopropílico glicídico	6.58	88	C ₆ H ₁₂ O ₂	4016-14-2	-	-	88	0.03
77	éter	Furfuril éter	40.96	178	C ₁₀ H ₁₀ O ₃	4437 - 22 - 3	1292.60	1292	82	0.39
71	fenoles	2-acetilresorcinol	38.99	152	C ₈ H ₈ O ₃	699 - 83 - 2	1264.9	-	89	1.27
80	fenoles	2-metoxi-4-vinilfenol	41.97	150	C ₉ H ₁₀ O ₂	7786 - 61 - 0	1307.1	1315	92	13.38
89	fenoles	Fenol, 2,4-bis(1,1- dimetiletil)-	55.11	206	C ₁₄ H ₂₂ O	96 - 76 - 4	1513.4	1513	93	0.28

14	furano	2-metiltetrahidrofurano-3-ona	6.67	100	C ₅ H ₈ O ₂	3188 - 00 - 9	-	-	90	1.29
16	furano	Furfural	7.98	96	C ₅ H ₄ O ₂	98 - 01 - 1	820.4	834	95	16.81
17	furano	2-furanmetanol	9.76	98	C ₅ H ₆ O ₂	98 - 00 - 0	852.3	851	97	12.21
21	furano	2-acetilfurano	12.40	110	C ₆ H ₆ O ₂	1192 - 62 - 7	899.5	910	90	0.19
29	furano	5-metil furfural	16.10	110	C ₆ H ₆ O ₂	620 - 02 - 0	952.1	957	95	21.32
35	furano	1-(2-furanil)- 1-propanona	19.35	124	C ₇ H ₈ O ₂	3194-15-8	998.0	1005	85	0.05
53	furano	1-(5-metil-2-furanil)- 1-propanona	28.43	138	C ₈ H ₁₀ O ₂	10599 - 69 - 6	1119.3	1151	85	0.21
68	furano	5-hidroximetilfurfural	36.45	126	C ₆ H ₆ O ₃	67 - 47 - 0	1229.2	1233	88	4.67
8	Glicol	1,3-butanodiol	6.00	90	C ₄ H ₁₀ O ₂	107 - 88 - 0	-	-	86	0.14
9	Glicol	2,3-butanodiol	6.39	90	C ₄ H ₁₀ O ₂	513 - 85 - 9	-	-	93	0.09
6	Heterocíclico N	Piridina	4.82	79	C ₅ H ₅ N	110-86-1	-	-	90	0.02
36	Heterocíclico N	1H-pirrol-2-carboxaldehído	20.48	95	C ₅ H ₅ NO	1003 - 29 - 8	1014.1	1015	85	0.24
40	Heterocíclico N	1-etil-1h-pirrol-2-carboxaldehído	22.16	123	C ₇ H ₉ NO	2167 - 14 - 8	1035.5	1067	87	0.29
43	Heterocíclico N	1-(1H-pirrol-2-il)-etanona	23.94	109	C ₆ H ₇ NO	1072 - 83 - 9	1059.2	1063	90	0.56
76	Heterocíclico N	Indol	40.32	117	C ₈ H ₇ N	120-72-9	1283.5	1289	86	0.32
10 1	Heterocíclico N	Cafeína	73.36	194	C ₈ H ₁₀ N ₄ O ₂	58 - 08 - 2	1832.5	1840	97	5.79
20	lactona	Butirolactona	12.18	86	C ₄ H ₆ O ₂	96 - 48 - 0	895.6	915	87	0.45
27	lactona	2,5-dimetil-3(2h)-furanona	14.98	112	C ₆ H ₈ O ₂	62873 - 16 - 9	936.2	1074	85	0.11
50	lactona	Maltol	27.20	126	C ₆ H ₆ O ₃	118 - 71 - 8	1102.6	1110	84	1.05
56	lactona	4H-piran-4-ona, 2,3-dihidro-3,5-dihidroxi-6-metil	30.16	144	C ₆ H ₈ O ₄	28564 - 83 - 2	1142.9	1154	87	2.36
63	metoxibenceno	Estragol	33.64	148	C ₁₀ H ₁₂ O	140 - 67 - 0	1190.2	1195	96	5.75
38	monoterpeno hidrocarbonado	Limoneno	21.22	136	C ₁₀ H ₁₆	138 - 86 - 3	1022.9	1030	87	0.14
41	monoterpeno oxigenado	β-ocimeno	22.82	136	C ₁₀ H ₁₆	3338 - 55 - 4	1044.3	1043	90	0.33
42	monoterpeno oxigenado	α-ocimeno	22.82	136	C ₁₀ H ₁₆	502 - 99 - 8	1044.3	1052	87	0.43
44	monoterpeno oxigenado	Óxido de <i>cis</i> -linalool	24.42	170	C ₁₀ H ₁₈ O ₂	5989 - 33 - 3	1065.6	1075	86	0.25

48	monoterpeno oxigenado	Óxido de trans-linalol (furanóide)	25.59	170	C ₁₀ H ₁₈ O ₂	34995 - 77 - 2	1081.2	1086	88	0.20
49	monoterpeno oxigenado	Linalool	26.72	154	C ₁₀ H ₁₈ O	78 - 70 - 6	1096.3	1098	95	2.11
55	monoterpeno oxigenado	Alcanfor	29.31	152	C ₁₀ H ₁₆ O	464 - 48 - 2	1131.3	1139	89	0.52
60	monoterpeno oxigenado	<i>L</i> - α -terpineol	33.25	154	C ₁₀ H ₁₈ O	10482 - 56 - 1	1184.9	1192	91	0.60
61	monoterpeno oxigenado	α -terpineol	33.27	154	C ₁₀ H ₁₈ O	98-55-5	1185.2	1180	91	1.13
64	Monoterpeno oxigenado	Carvomentenal	34.85	152	C ₁₀ H ₁₆ O	29548 - 14 - 9	1206.9	1217	86	0.19
67	monoterpeno oxigenado	<i>cis</i> -geraniol	36.09	154	C ₁₀ H ₁₈ O	106 - 25 - 2	1224.2	1226	89	1.03
69	monoterpeno oxigenado	Geraniol	38.06	154	C ₁₀ H ₁₈ O	106 - 24 - 1	1251.9	1256	94	0.98
73	monoterpeno oxigenado	α -tujol	37.40	154	C ₁₀ H ₁₈ O	513-23-5	1242.6	1165	85	0.58
74	monoterpeno oxigenado	2,6-dimethyl-2,6-octadien-1-ol	37.95	154	C ₁₀ H ₁₈ O		1250.3	-	86	0.06
83	monoterpeno oxigenado	Damascenona	46.62	190	C ₁₃ H ₁₈ O	23726-93-4	1376.3	1388	86	0.47
86	monoterpeno oxigenado	<i>trans</i> -geranilacetona	51.00	194	C ₁₃ H ₂₂ O	3796 - 70 - 1	1446.2	1452	88	0.12
87	monoterpeno oxigenado	<i>cis</i> -geranilacetona	51.01	194	C ₁₃ H ₂₂ O	3879-26-3	1444.1	1445	90	0.21
5	Pirazina	Pirazina	4.27	80	C ₄ H ₄ N ₂	290 - 37 - 9	-	-	89	0.05
15	Pirazina	Metil pirazina	7.49	94	C ₅ H ₆ N ₂	109 - 08 - 0	811.6	826	94	2.52
22	Pirazina	2,5 dimetilpirazina	12.59	108	C ₆ H ₈ N ₂	123 - 32 - 0	903.0	913	93	4.33
23	Pirazina	2,6 dimetilpirazina	12.65	108	C ₆ H ₈ N ₂	108 - 50 - 9	903.22	936	85	2.35
24	Pirazina	Etilo pirazina		108	C ₆ H ₈ N ₂	13925-00-3	905.3	915	90	0.36
25	Pirazina	4,6 dimetilpirazina	13.06	108	C ₆ H ₈ N ₂	1558 - 17 - 4	909.1	-	86	0.07
31	Pirazina	2-etil-6-metil pirazina	18.65	122	C ₇ H ₁₀ N ₂	13925 - 03 - 6	988.1	986	94	0.53
32	Pirazina	2-etil-5-metil pirazina,	18.85	122	C ₇ H ₁₀ N ₂	13360-64-0	991.0	985	87	1.91
33	Pirazina	2-etil-3-metil pirazina	18.87	122	C ₇ H ₁₀ N ₂	15707 - 23 - 0	991.3	999	84	1.70
34	Pirazina	2,3,5-trimetil pirazina	19.01	122	C ₇ H ₁₀ N ₂	14667 - 55 - 1	993.2	1005	91	0.26

46	Pirazina	3-etil-2,5-dimetil pirazina	24.77	136	C ₈ H ₁₂ N ₂	13360 - 65 - 1	1070.2	1078	90	0.82
51	Pirazina	2-acetil-3-metil pirazina	27.53	136	C ₇ H ₈ N ₂ O	23787 - 80 - 6	1107.1	1080	88	1.24
54	Pirazina	5h-5-metil-6,7-dihidrociclopenta pirazina	28.99	134	C ₈ H ₁₀ N ₂	23747 - 48 - 0	1126.9	1157	85	0.18
58	Pirazina	3,5-dietil-2-metil pirazina	30.75	150	C ₉ H ₁₄ N ₂	18138-05-1	1150.8	1156	88	0.22
59	Pirazina	2-metil-5-(1-propenil)-pirazina	32.94	134	C ₈ H ₁₀ N ₂	18217-82-8	1180.6	-	89	0.26
62	Pirazina	4-metilpirrolo[1,2-a] pirazina	33.54	132	C ₈ H ₈ N ₂	64608 - 60 - 2	1188.8	-	89	0.13
79	Pirrolidona	Piracetam	41.49	142	C ₆ H ₁₀ N ₂ O ₂	7491-74-9	1299.9	-	87	0.37
85	sesquiterpeno hidrocarbonado	Cariofileno	49.22	204	C ₁₅ H ₂₄	87-44-5	1415.9	1423	86	0.45
90	sesquiterpeno hidrocarbonado	α -curcumeno	53.19	202	C ₁₅ H ₂₂	644-30-4	1478.3	1485	97	4.86
91	sesquiterpeno hidrocarbonado	Zingibereno	54.06	204	C ₁₅ H ₂₄	495-60-3	1492.0	1493	90	0.86
92	sesquiterpeno hidrocarbonado	α -farneseno	54.87	204	C ₁₅ H ₂₄	502 - 61 - 4	1509.5	1511	93	1.94
95	sesquiterpeno hidrocarbonado	β -sesquifelandreno	55.81	204	C ₁₅ H ₂₄	20307-83-9	1524.5	1525	96	2.34
97	sesquiterpeno oxigenado	Tumerona	63.62	216	C ₁₅ H ₂₀ O	1803155-67-7	1653.4	1680	85	0.25

^a Orden de elución de los compuestos volátiles en la columna apolar SH Rxi-5HT 5% dimetilsiloxano

^b No fue posible calcular el IR experimental de los VOC con tiempo de retención (TR) menor de 6.846 min, que corresponde al TR del primer alcano detectado (C8) del estándar de n-alcano utilizado (C7-C33).

^c Los valores de IR teórico fueron obtenidos de la NIST Chemistry WebBook

^d Los valores de área se encuentran normalizados y representan el triplicado de una muestra

^e Los datos de los espectros fueron obtenidos a través de base de datos NIST y ADAMS

Tabla 13. Compuestos volátiles identificados en 30 muestras de café geisha utilizando una columna polar Suplecowax 10, 100% polietilenglicol

No ^a	Grupo químico	VOC's	TR	PM	fórmula	#Cas	IR exp ^b	IR teórico ^c	Similitud (%)	Área ^d (%)
92	Acetato	1,2-Etanodiol diacetato	34.62	146	C ₆ H ₁₀ O ₄	111 - 55 - 7	1463.3	-	87	2.96
105	Acetato	2-Furanmetanol acetato	38.91	140	C ₇ H ₈ O ₃	623 - 17 - 6	1529.5	1542	91	7.22
12	ácido graso	Ácido 2-metilbutanoico etil éster	8.73	130	C ₇ H ₁₄ O ₂	7452 - 79 - 1	1073.6	1073	95	0.08
14	ácido graso	Ácido 3-metilbutanoico etil éster	9.45	130	C ₇ H ₁₄ O ₂	108 - 64 - 5	1073.6	1073	94	0.235
62	ácido graso	Ácido láctico, éster etílico	26.40	118	C ₅ H ₁₀ O ₃	97 - 64 - 3	1342.5	1347	89	0.125
64	ácido graso	Butirato de vinilo	26.67	114	C ₆ H ₁₀ O ₂	123 - 20 - 6	1346.4	-	90	0.05
77	ácido graso	Caproato de butilo	30.86	172	C ₁₀ H ₂₀ O ₂	626 - 82 - 4	1407.8	1420	93	0.09
79	ácido graso	Ácido butanoico, éster hexílico	31.06	172	C ₁₀ H ₂₀ O ₂	2639 - 63 - 6	1410.8	1414	86	0.11
103	ácido graso	Ácido propanoico, éster etílico	38.60	100	C ₅ H ₈ O ₂	105-38-4	1524.4	-	85	0.74
114	ácido graso	Ácido hexanoico, éster hexílico	43.48	200	C ₁₂ H ₂₄ O ₂	6378 - 65 - 0	1604.2	1608	94	0.155
126	ácido graso	Ácido succínico, éster dietílico	47.48	174	C ₈ H ₁₄ O ₄	123-25-1	1671.4	1677	92	0.22
153	ácido graso	ácido β-metilcrotónico	55.57	100	C ₅ H ₈ O ₂	541 - 47 - 9	1813.0	1776	93	0.185
169	ácido graso	Ácido bencenopropanoico, éster etílico	58.88	178	C ₁₁ H ₁₄ O ₂	2021 - 28 - 5	1873.9	1854	90	0.06
196	ácido graso	Ácido palmítico	75.88	284	C ₁₈ H ₃₆ O ₂	628 - 97 - 7	2252.8	2253	89	0.225
207	ácido graso	Linoleato de etilo	81.04	308	C ₂₀ H ₃₆ O ₂	544-35-4	2527.4	2510	90	0.075
40	Ácidos orgánicos	Ácido 2-butenicoico, 3-metil éster etílico	18.43	128	C ₇ H ₁₂ O ₂	638 - 10 - 8	1227.6	1217	91	0.075
55	Ácidos orgánicos	Ácido isovalérico	23.12	172	C ₁₀ H ₂₀ O ₂	659 - 70 - 1	1294.0	-	87	0.01
91	Ácidos orgánicos	Ácido acético	34.60	60	C ₂ H ₄ O ₂	64 - 19 - 7	1463.0	1463	86	1.835
115	Ácidos orgánicos	Ácido 4-hidroxitbutanoico	43.89	104	C ₄ H ₈ O ₃	591 - 81 - 1	1611.1	-	93	1.355

130	Ácidos orgánicos	Ácido 3-metil-butanoico	48.22	102	C ₅ H ₁₀ O ₂	503 - 74 - 2	1683.8	1680	88	1.325
9	alcano	Heptano, 2,2,4,6,6-pentametil-	5.36	170	C ₁₂ H ₂₆	13475 - 82 - 6	-	-	95	0.07
31	alcano	2-metil-undecano	14.04	170	C ₁₂ H ₂₆	7045 - 71 - 8	1188.7	1155	91	0.035
45	alcano	5-butilnonano	20.08	184	C ₁₃ H ₂₈	17312 - 63 - 9	1251.2	-	90	0.09
54	alcano	5-metil-5-propilnonano	23.03	184	C ₁₃ H ₂₈	17312 - 75 - 3	1293.3	-	88	0.035
63	alcano	5-metil-tetradecano	26.57	212	C ₁₅ H ₃₂	25117 - 32 - 2	1344.9	-	92	0.095
69	alcano	3,8-dimetil-decano	27.85	170	C ₁₂ H ₂₆	17312 - 55 - 9	1363.7	-	88	0.02
70	alcano	2-metil-tetradecano	27.87	212	C ₁₅ H ₃₂	1560 - 95 - 8	1363.9	1483	93	0.13
86	alcano	4-metil-tetradecano	33.86	212	C ₁₅ H ₃₂	25117 - 24 - 2	1452.0	1457	93	0.145
87	alcano	2-metil-tetradecano	33.86	212	C ₁₅ H ₃₂	1560 - 95 - 8	1452.1	1483	95	0.125
122	alcano	2-metil-hexadecano	46.33	240	C ₁₇ H ₃₆	1560 - 92 - 5	1652.1	1654	92	0.12
8	Alcohol	Etanol	4.71	46	C ₂ H ₆ O	64 - 17 - 5	-	-	97	0.29
21	Alcohol	2-metil-1-Pentanol	12.31	102	C ₆ H ₁₄ O	105 - 30 - 6	1136.0	-	89	0.07
22	Alcohol	2-etil-1-Butanol	12.31	102	C ₆ H ₁₄ O	97 - 95 - 0	948.1	1291	87	0.055
56	Alcohol	Acetol	23.29	75	C ₃ H ₆ O ₂	116 - 09 - 6	1297.0	1303	98	1.395
61	Alcohol	2-butil-1-Octanol	26.36	186	C ₁₂ H ₂₆ O	3913 02 8	1341.8	1848	92	0.065
81	Alcohol	2-etil-1-dodecanol	32.94	214	C ₁₄ H ₃₀ O	19780 - 33 - 7	1438.5	-	90	0.205
96	Alcohol	Etilhexanol	36.02	130	C ₈ H ₁₈ O	104 - 76 - 7	1484.1	1492	96	1.52
108	Alcohol	2,3-Butanodiol	41.52	90	C ₄ H ₁₀ O ₂	513 - 85 - 9	1572.2	1583	93	0.615
199	Alcohol	1-Hexadecanol	78.28	242	C ₁₆ H ₃₄ O	36653 - 82 - 4	2377.6	2363	90	0.235
3	Aldehído	Acetaldehído	2.33	44	C ₂ H ₄ O	75 - 07 - 0	-	-	97	0.06
6	Aldehído	pentanal	4.09	86	C ₅ H ₁₀ O	110 - 62 - 3	-	-	87	0.115
7	Aldehído	2-metil-Butanal	4.29	86	C ₅ H ₁₀ O	96 - 17 - 3	-	-	92	0.105
15	Aldehído	Hexanal	10.05	100	C ₆ H ₁₂ O	66-25-1	1101.6	1085	91	0.05
75	Aldehído	Nonanal	29.51	142	C ₉ H ₁₈ O	124-19-6	1387.9	1396	94	0.1
100	Aldehído	Benzaldehído	37.47	106	C ₇ H ₆ O	100 - 52 - 7	1506.1	1529	87	0.125
117	Aldehído	2-Furancarboxaldehído	44.82	124	C ₇ H ₈ O ₂	23074 - 10 - 4	1626.8	1641	88	0.135
148	Aldehído	Cumaldehído	52.89	148	C ₁₀ H ₁₂ O	122 - 03 - 2	1765.2	1760	94	0.06
151	Aldehído	2,4-Decadienal	54.79	152	C ₁₀ H ₁₆ O	25152 - 84 - 5	1798.6	1809	87	0.125
161	Aldehído	2-Furanacroleína	57.35	122	C ₇ H ₆ O ₂	623 - 30 - 3	1845.7	1839	89	0.115
173	Aldehído	α-etilideno bencenoacetaldehído	61.21	146	C ₁₀ H ₁₀ O	4411 - 89 - 6	1917.6	1907	88	0.215
17	alqueno	2,3,6-trimetil, 1,5-heptadieno	11.57	138	C ₁₀ H ₁₈	33501 - 88 - 1	1124.8	-	92	0.08
24	alqueno	4-metil-decano	12.33	156	C ₁₁ H ₂₄	2847 - 72 - 5	1136.3	-	86	0.075
32	alqueno	4-metil-1-Undeceno	14.28	168	C ₁₂ H ₂₄	74630 - 39 - 0	1166.1	-	90	0.025
1	amida	1,2-Propanodiamina	2.08	74	C ₃ H ₁₀ N ₂	78 - 90 - 0	-	-	89	0.135

2	amida	2-Amino-N-metilpropanamida	2.08	87	C ₄ H ₁₀ N ₂ O	70875 - 70 - 6	-	-	88	0.285
192	amida	Caprolactama	73.62	113	C ₆ H ₁₁ NO	105 - 60 - 2	2168.2	-	91	0.115
93	Amina	N-acetilalanina	34.62	131	C ₅ H ₉ NO ₃	97 - 69 - 8	1463.3	-	85	4.855
28	Aromático Heterocíclico	1-metilpirrol	13.07	81	C ₅ H ₇ N	96 - 54 - 8	1147.6	1153	93	0.015
34	Aromático Heterocíclico	Piridina	15.06	79	C ₅ H ₅ N	110 - 86 - 1	1178.0	1169	96	0.345
129	Aromático Heterocíclico	1-(6-metil-2-pirazinil)-1-etanona	47.78	136	C ₇ H ₈ N ₂ O	22047 - 26 - 3	1676.4	1688	86	1.525
176	Aromático Heterocíclico	2-Metilquinoxalina	62.59	144	C ₉ H ₈ N ₂	7251 - 61 - 8	1944.3	-	87	0.27
20	Cetona	3-Penten-2-ona	12.20	84	C ₅ H ₈ O	3102 - 33 - 8	1134.3	1122	87	0.035
23	Cetona	acetilciclopropano	12.33	84	C ₅ H ₈ O	765 - 43 - 5	1136.3	-	87	0.045
27	cetona	2,4-dimetil-3-pentanona	12.97	114	C ₇ H ₁₄ O	565 - 80 - 0	1146.1	-	90	0.01
52	Cetona	Acetoína	22.21	88	C ₄ H ₈ O ₂	513 - 86 - 0	1281.6	1289	97	0.145
101	Cetona	2-Ciclopenten-1-ona, 2,3-dimetil-	38.29	110	C ₇ H ₁₀ O	1121 - 05 - 7	1519.3	1524	88	0.025
102	Cetona	3,3-dimetil-2-butanona	38.55	100	C ₆ H ₁₂ O	75 - 97 - 8	1523.6	-	87	1.105
112	Cetona	Acetil piridina	42.42	121	C ₇ H ₇ NO	1122 - 62 - 9	1586.8	1586	86	0.395
155	Cetona	Corilona	55.96	112	C ₆ H ₈ O ₂	80 - 71 - 7	1820.0	1839	93	1.81
170	Cetona	3-etil-2-hidroxi- 2-Ciclopenten-1-ona	59.43	126	C ₇ H ₁₀ O ₂	21835 - 01 - 8	1884.1	1891	95	0.58
171	Cetona	trans-furfurilideneacetona	59.93	136	C ₈ H ₈ O ₂	41438 - 24 - 8	1893.2	1890	91	0.285
180	Cetona	4-hidroxi-3-metilacetofenona	65.04	150	C ₉ H ₁₀ O ₂	876 - 02 - 8	1991.3	-	93	0.245
185	Cetona	Furaneol	67.24	128	C ₆ H ₈ O ₃	3658 - 77 - 3	2030.2	2030	85	1.92
37	Compuesto aromático	o-Etilmetilbenceno	18.01	120	C ₉ H ₁₂	611-14-3	1221.5	1249	87	0.045
38	Compuesto aromático	Mesitileno	18.16	120	C ₉ H ₁₂	108 - 67 - 8	1223.7	1221	90	0.035
39	Compuesto aromático	m-Etiltolueno	18.16	120	C ₉ H ₁₂	620 - 14 - 4	1223.7	1228	88	0.03
65	Compuesto aromático	2-etil-p-xileno	26.96	134	C ₁₀ H ₁₄	1758 - 88 - 9	1350.6	1364	85	0.025
140	Compuesto aromático	Naftaleno	50.31	128	C ₁₀ H ₈	91 - 20 - 3	1719.7	1719	93	1.87
159	Compuesto aromático	(1-butilheptil)benceno	56.57	232	C ₁₇ H ₂₈	4537 - 15 - 9	1831.3	1828	88	0.22

166	Compuesto aromático	Diisobutirato de 2,2,4-trimetil-1,3-pentanodiol	58.63	286	C ₁₆ H ₃₀ O ₄	6846 - 50 - 0	1869.0	-	88	0.29
167	Compuesto aromático	Alcohol de bencilo	58.62	108	C ₇ H ₈ O	100 - 51 - 6	1869.2	1866	91	0.3
168	Compuesto aromático	(1-etilnonil)benceno	58.78	232	C ₁₇ H ₂₈	4536 - 87 - 2	1872.0	1873	89	0.05
172	compuesto aromático	Alcohol feniletílico	60.36	122	C ₈ H ₁₀ O	60 - 12 - 8	1901.3	1909	92	0.08
174	Compuesto aromático	(1-pentilheptil)-Benceno	61.54	246	C ₁₈ H ₃₀	2719 - 62 - 2	1923.9	1918	91	0.325
175	Compuesto aromático	(1-butiloctil)-Benceno	61.96	246	C ₁₈ H ₃₀	2719 - 63 - 3	1932.1	1928	90	0.485
184	Compuesto aromático	1,2-Dimetoxi-4-vinilbenceno	67.14	164	C ₁₀ H ₁₂ O ₂	6380 - 23 - 0	2028.5	2014	93	0.165
187	Compuesto aromático	<i>m</i> -Cresol	70.70	108	C ₇ H ₈ O	108 - 39 - 4	2090.2	2068	89	0.065
188	Compuesto aromático	(1-etilundecil)benceno	70.28	260	C ₁₉ H ₃₂	4534 - 52 - 5	2082.9	2079	88	0.235
193	Compuesto aromático	Eugenol	73.58	164	C ₁₀ H ₁₂ O ₂	97 - 53 - 0	2167.0	2167	90	0.125
200	Compuesto aromático	Coumaran	78.69	120	C ₈ H ₈ O	496 - 16 - 2	2400.9	-	89	0.265
10	diacetona	2,3-Butanediona	5.99	86	C ₄ H ₆ O ₂	431 - 03 - 8	1014.0	989	94	0.15
13	diacetona	2,3-Pentanediona	9.14	100	C ₅ H ₈ O ₂	600-14-6	1082.4	1076	95	0.17
26	diacetona	2,3-Hexanediona (Acetilbutirilo)	12.81	114	C ₆ H ₁₀ O ₂	3848 - 24 - 6	1143.6	1143	94	0.015
29	diacetona	3,4-Hexanediona	13.38	114	C ₆ H ₁₀ O ₂	4437 - 51 - 8	1152.4	1151	88	0.015
68	diterpeno hidrocarbonado	Fitano	27.39	282	C ₂₀ H ₄₂	638 - 36 - 8	1357.0	-	91	0.505
4	éster	1-Propen-2-ol acetato	2.97	100	C ₅ H ₈ O ₂	108 - 22 - 5	-	-	91	0.125
5	éster	Acetato de etilo	3.91	88	C ₄ H ₈ O ₂	141 - 78 - 6	-	-	97	0.675
19	éster	1-pirrolidinacetato de etilo	11.95	157	C ₈ H ₁₅ NO ₂	22041 - 19 - 6	1130.6	-	89	0.01
25	éster	1-Butanol, 3-metil-, acetato	12.29	130	C ₇ H ₁₄ O ₂	123 - 92 - 2	1135.8	1127	94	0.15
67	éster	Isobutil lactato	27.16	146	C ₇ H ₁₄ O ₃	585 - 24 - 0	1353.6	1455	87	0.15
104	éster	2-Butanona, 1-(acetiloxi)-	38.87	130	C ₆ H ₁₀ O ₃	1575 - 57 - 1	1528.9	1526	95	0.275
125	éster	Acetato de 4-terc-butilciclohexilo	47.23	198	C ₁₂ H ₂₂ O ₂	32210 - 23 - 4	1667.1	-	87	0.03

147	éster	Salicilato de metilo	52.59	152	C ₈ H ₈ O ₃	119 - 36 - 8	1759.9	1741	90	0.11
164	éster	Ácido propanoico, éster 2-metil-, 3-hidroxi-2,4,4-trimetilpentilo	58.23	216	C ₁₂ H ₂₄ O ₃	74367 - 34 - 3	1861.9		91	1.36
191	éster	Alcohol cinamílico	72.95	176	C ₁₁ H ₁₂ O ₂	103 - 54 - 8	2148.6	2153	86	0.08
43	éter	Furfuril metil éter	19.33	112	C ₆ H ₈ O ₂	13679 - 46 - 4	1240.4	1247	88	0.26
66	éter	Glicidil metil éter	27.06	88	C ₄ H ₈ O ₂	930 - 37 - 0	1352.2	-	87	0.23
190	éter	Etanol, 2-fenoxi-	72.70	138	C ₈ H ₁₀ O ₂	122-99-6	2141.5	2103	92	0.68
30	Fenol	<i>p</i> -Cresol	13.95	108	C ₇ H ₈ O	106 - 44 - 5	1161.0	2038	88	0.235
183	Fenol	<i>p</i> -Etil guaiacol	66.74	152	C ₉ H ₁₂ O ₂	2785 - 89 - 9	2021.7	2047	87	0.195
194	Fenol	2-Metoxi-4-vinilfenol	74.52	150	C ₉ H ₁₀ O ₂	7786 - 61 - 0	2191.2	2203	86	6.565
198	Fenol	2,4-di- <i>terc</i> -butilfenol	77.24	206	C ₁₄ H ₂₂ O	96-76-4	2318.2	2316	94	0.305
41	Furano	2-pentil furano	18.88	138	C ₉ H ₁₄ O	3777 - 69 - 3	1234.0	1239	89	0.01
48	Furano	2-metiltetrahidrofurano-3-ona	20.59	100	C ₅ H ₈ O ₂	3188 - 00 - 9	1261.0	1260	94	1.07
88	Furano	Furfural	34.09	96	C ₅ H ₄ O ₂	98 - 01 - 1	1455.4	1454	90	8.18
98	Furano	2-acetilfurano	36.50	110	C ₆ H ₆ O ₂	1192 - 62 - 7	1491.1	1501	91	3.715
107	Furano	5 metil furfural	40.94	110	C ₆ H ₆ O ₂	620 - 02 - 0	1562.7	1562	90	10.525
111	Furano	2,2'-Bifuran	42.39	134	C ₈ H ₆ O ₂	5905 - 00 - 0	1586.5	1614	87	0.36
123	Furano	2-furanmetanol	46.59	98	C ₅ H ₆ O ₂	98 - 00 - 0	1656.4	1664	93	13.325
128	Furano	2-metil-5-(metiltio)furano	47.59	162	C ₁₀ H ₁₀ O ₂	13678 - 51 - 8	1673.2	1655	90	0.1
165	Furano	Metil-3(2-furil) acroleína	58.26	136	C ₈ H ₈ O ₂	108576 - 21 - 2	1862.6		85	0.325
206	Furano	5-hidroximetil furfural	80.67	126	C ₆ H ₆ O ₃	67 - 47 - 0	2509.6	2509	97	1.515
53	heterocíclico N	2,7-dimetil oxepina	22.59	122	C ₈ H ₁₀ O	1487 - 99 - 6	1287.1	-	88	0.125
11	Heterocíclico N	1-metil-1,2,3,6-tetrahidropiridina	8.49	97	C ₆ H ₁₁ N	694 - 55 - 3	1068.2	-	94	0.15
138	Heterocíclico N	N-acetil-4(H)-piridina	49.81	123	C ₇ H ₉ NO	67402 - 83 - 9	1710.9	-	86	0.545
149	Heterocíclico N	3-Piridinol acetato	53.03	137	C ₇ H ₇ NO ₂	17747 - 43 - 2	1767.6	-	85	0.195
156	Heterocíclico N	1H-Pirrol, 1-(2-furanilmetil)	56.02	147	C ₉ H ₉ NO	1438 - 94 - 4	1821.3	1838	85	1.075
178	Heterocíclico N	Etanona, 1-(1H-pirrol-2-il)	63.46	109	C ₆ H ₇ NO	1072 - 83 - 9	1960.9	1971	96	1.415
179	Heterocíclico N	4(1H)-quinazolinona	64.18	146	C ₈ H ₆ N ₂ O	491 - 36 - 1	1974.8	-	85	0.86
181	Heterocíclico N	1H-pirrol-2-carboxaldehído	66.19	95	C ₅ H ₅ NO	1003 - 29 - 8	2012.1	2028	97	2.255
189	Heterocíclico N	1-metil-1H-pirrol-2-carboxaldehído	71.02	109	C ₆ H ₇ NO	1192 - 58 - 1	2095.7	-	92	0.965
201	Heterocíclico N	Cafeína	78.85	194	C ₈ H ₁₀ N ₄ O ₂	58 - 08 - 2	2409.8	-	90	0.37
202	Heterocíclico N	3-piridinol	79.13	95	C ₅ H ₅ NO	109-00-2	2425.4	-	98	0.6

203	Heterocíclico N	Indol	79.57	117	C ₈ H ₇ N	120 - 72 - 9	2449.9	2446	95	0.225
51	hidrocarburo aromático	Mesitileno	21.67	120	C ₉ H ₁₂	108 - 67 - 8	1273.9	1221	90	0.28
97	Lactonas	2,5-dimetil-3(2H)-furanona	36.07	112	C ₆ H ₈ O ₂	62873 - 16 - 9	1484.8	-	85	0.655
116	Lactonas	Butirolactona	44.02	86	C ₄ H ₆ O ₂	96 - 48 - 0	1613.3	1650	90	1.49
177	Lactonas	Maltol	63.04	126	C ₆ H ₆ O ₃	118 - 71 - 8	1952.8	1965	97	2.34
186	Lactonas	2(3H)-Furanona, 5-acetildihidro	68.53	128	C ₆ H ₈ O ₃	29393 - 32 - 6	2052.6	-	89	1.02
197	Lactonas	3,5-dihidroxi-6-metil-2,3-dihidro-4H-piran-4-ona	76.37	144	C ₆ H ₈ O ₄	28564 - 83 - 2	2275.1	2275	92	0.3
204	Lactonas	5-hidroximetildihidrofurano-2-ona	80.35	116	C ₅ H ₈ O ₃	32780-06-6	2496.0	-	88	0.075
205	Lactonas	(S)-(+)-2',3'-Dideoxiribonolactona	80.41	116	C ₅ H ₈ O ₃	32780 - 06 - 6	2496.1	-	92	0.145
124	Metoxibenceno	Estragol	46.82	148	C ₁₀ H ₁₂ O	140 - 67 - 0	1660.3	1677	86	33.925
162	Metoxibenceno	Mequinol	57.66	124	C ₇ H ₈ O ₂	150 - 76 - 5	1851.5	-	87	0.375
152	Monoterpeno	β-Damascenona	55.28	190	C ₁₃ H ₁₈ O	23726 - 93 - 4	1807.5	1823	89	0.31
16	Monoterpeno hidrocarbonado	2,6-Dimethyl-2-cis-6-octadiene	11.46	138	C ₁₀ H ₁₈	2609 - 23 - 6	1123.0	-	93	0.105
18	Monoterpeno hidrocarbonado	β-Felandreno	11.80	136	C ₁₀ H ₁₆	555 - 10 - 2	1128.2	1198	86	0.015
33	Monoterpeno hidrocarbonado	β-Mirceno	14.54	136	C ₁₀ H ₁₆	123 - 35 - 3	1170.1	1169	96	0.445
35	Monoterpeno hidrocarbonado	Limoneno	16.24	136	C ₁₀ H ₁₆	5989 - 27 - 5	1196.0	1193	89	0.465
42	Monoterpeno hidrocarbonado	(E)- β-Ocimeno	19.03	136	C ₁₀ H ₁₆	3779 - 61 - 1	1236.2	1250	88	0.06
44	Monoterpeno hidrocarbonado	γ-terpineno	19.43	136	C ₁₀ H ₁₆	99-85-4	1241.8	1244	89	0.315
46	Monoterpeno hidrocarbonado	β-cis-ocimeno	20.09	136	C ₁₀ H ₁₆	3338 - 55 - 4	1251.2	1240	95	0.31
49	Monoterpeno hidrocarbonado	β-Cimeno	21.07	134	C ₁₀ H ₁₄	535 - 77 - 3	1265.4	1264	94	0.76
50	Monoterpeno hidrocarbonado	Terpinolen	21.67	136	C ₁₀ H ₁₆	586 - 62 - 9	1273.9	1278	92	0.19
71	Monoterpeno hidrocarbonado	2,4,6-Octatrieno, 2,6-dimetil-, (E,Z)-	28.04	136	C ₁₀ H ₁₆	7216 - 56 - 0	1366.4	-	94	0.07

118	Monoterpeno hidrocarbonado	Mentol	45.08	156	C ₁₀ H ₂₀ O	15356 - 70 - 4	1631.1	-	87	0.19
89	monoterpeno oxigenado	Óxido de trans-linalol (furanóide)	34.44	170	C ₁₀ H ₁₈ O ₂	34995 - 77 - 2	1460.7	1458	87	0.205
90	monoterpeno oxigenado	Óxido de linalol	34.52	170	C ₁₀ H ₁₈ O ₂	5989 - 33 - 3	1461.9	1460	89	1.41
106	monoterpeno oxigenado	Linalol	39.76	154	C ₁₀ H ₁₈ O	78 - 70 - 6	1543.3	1554	95	1.68
127	monoterpeno oxigenado	Citral	47.52	152	C ₁₀ H ₁₆ O	106 - 26 - 3	1672.0	1666	91	0.605
131	monoterpeno oxigenado	Acetato de α-terpinilo	48.22	196	C ₁₂ H ₂₀ O ₂	80 - 26 - 2	1683.8	1688	91	0.095
133	monoterpeno oxigenado	α-terpineol	48.49	154	C ₁₀ H ₁₈ O	98 - 55 - 5	1688.3	1693	95	0.71
135	monoterpeno oxigenado	Formiato de geranilo	49.07	182	C ₁₁ H ₁₈ O ₂	105 - 86 - 2	1698.0	1686	87	0.085
136	monoterpeno oxigenado	Acetato de cis-geranilo	49.09	196	C ₁₂ H ₂₀ O ₂	141 - 12 - 8	1698.4	1725	85	0.09
143	monoterpeno oxigenado	Acetato de geranilo	52.07	196	C ₁₂ H ₂₀ O ₂	105 - 87 - 3	1750.7	1725	93	0.155
150	monoterpeno oxigenado	cis-Geraniol	54.55	154	C ₁₀ H ₁₈ O	106 - 25 - 2	1794.3	1800	96	0.4
154	monoterpeno oxigenado	Anetol	55.69	148	C ₁₀ H ₁₂ O	104 - 46 - 1	1815.2	1817	92	0.28
157	monoterpeno oxigenado	2,7-dimetil-2,6-octadien-1-ol	56.38	154	C ₁₀ H ₁₈ O	22410 - 74 - 8	1827.9	-	89	0.06
158	monoterpeno oxigenado	2,6-dimetil-octa-2,6-dien-1-ol	56.35	154	C ₁₀ H ₁₈ O		1827.3	-	90	0.14
160	monoterpeno oxigenado	Geraniol	57.21	154	C ₁₀ H ₁₈ O	106 - 24 - 1	1843.1	1849	89	1.67
163	monoterpeno oxigenado	Safrol	58.22	162	C ₁₀ H ₁₀ O ₂	94-59-7	1861.7	1874	85	0.225
145	organosulfurado	1-(3-tienil) etanona	52.69	126	C ₆ H ₆ OS	1468 - 83 - 3	1761.5	1771	89	0.035
36	Pirazina	Pirazina	17.25	80	C ₄ H ₄ N ₂	290-37-9	1210.6	1209	97	0.095
47	Pirazina	metilpirazina	20.47	94	C ₅ H ₆ N ₂	109 - 08 - 0	1256.7	1267	96	6.49
57	Pirazina	2,5-dimetilpirazina	24.10	108	C ₆ H ₈ N ₂	123 - 32 - 0	1308.8	1318	97	3.76
58	Pirazina	2,6-dimetilpirazina	24.56	108	C ₆ H ₈ N ₂	108 - 50 - 9	1315.6	1325	97	3.46
59	Pirazina	etilpirazina	25.01	108	C ₆ H ₈ N ₂	13925 - 00 - 3	1322.1	1334	94	1.28
60	Pirazina	2,3-dimetilpirazina	25.70	108	C ₆ H ₈ N ₂	5910 - 89 - 4	1332.2	1344	97	0.74

72	Pirazina	2-etil-6-metilpirazina	28.40	122	C ₇ H ₁₀ N ₂	13925 - 03 - 6	1371.7	1382	96	1.92
73	Pirazina	2-etil-5-metilpirazina	28.74	122	C ₇ H ₁₀ N ₂	13360 - 64 - 0	1376.7	1385	95	1.62
74	Pirazina	2,3,5-trimetilpirazina	29.52	122	C ₇ H ₁₀ N ₂	14667 - 55 - 1	1388.1	1401	92	2.45
76	Pirazina	N-propilpirazina	30.57	122	C ₇ H ₁₀ N ₂	18138 - 03 - 9	1403.5	1428	88	0.045
78	Pirazina	Vinilpirazina	31.91	106	C ₆ H ₆ N ₂	4177 - 16 - 6	1423.3	1434	92	0.075
80	Pirazina	3-etil-2,5-dimetilpirazina,	32.35	136	C ₈ H ₁₂ N ₂	13360 - 65 - 1	1429.9	1446	93	2.795
82	Pirazina	2,3-Dietilpirazina	33.16	136	C ₈ H ₁₂ N ₂	15707 - 24 - 1	1441.2	1458	91	0.02
83	Pirazina	2,5-Dietilpirazina	33.39	136	C ₈ H ₁₂ N ₂	13238 - 84 - 1	1445.2	1425	85	0.01
84	Pirazina	2,6-Dietilpirazina	33.43	136	C ₈ H ₁₂ N ₂	13067 - 27 - 1	1445.7	1436	92	0.56
85	Pirazina	2-metil-6-propil-pirazina,	33.72	136	C ₈ H ₁₂ N ₂	29444 - 46 - 0	1450.0	1464	94	0.075
94	Pirazina	2-metil-6-vinilpirazina,	35.29	120	C ₇ H ₈ N ₂	13925 - 09 - 2	1473.2	1488	86	0.23
95	Pirazina	3,5-dietil-2-metilpirazina,	35.62	150	C ₉ H ₁₄ N ₂	18138 - 05 - 1	1478.2	1474	87	0.665
99	Pirazina	2,3,5-trimetil-6-etilpirazina	36.87	150	C ₉ H ₁₄ N ₂	17398 - 16 - 2	1496.6	1501	93	0.215
110	Pirazina	(1-metiletilenil)-pirazina	41.95	120	C ₇ H ₈ N ₂	38713 - 41 - 6	1579.2	1543	86	0.285
113	Pirazina	5H-5-metil-6,7-dihidrociclopentapirazina	43.14	134	C ₈ H ₁₀ N ₂	23747 - 48 - 0	1598.7	1616	90	0.165
120	Pirazina	2,3-Dimetil-5-isopentilpirazina	45.90	178	C ₁₁ H ₁₈ N ₂	18450 - 01 - 6	1645.0	1646	94	0.12
134	Pirazina	2-metil-5-(1-propenil)pirazina	48.75	134	C ₈ H ₁₀ N ₂	18217 - 82 - 8	1692.6	-	85	0.31
119	pirrol	2-acetil-1-metilpirrol	45.62	123	C ₇ H ₉ NO	932 - 16 - 1	1640.1	1660	93	0.53
132	Pirrolidona	1-etil-2-pirrolidinona	48.23	113	C ₆ H ₁₁ NO	2687 - 91 - 4	1683.9	-	91	0.235
182	Pirrolidona	2-pirrolidinona	66.55	85	C ₄ H ₇ NO	616 - 45 - 5	2018.4	2020	94	0.11
109	Sesquiterpeno hidrocarbonado	Cariofileno	41.87	204	C ₁₅ H ₂₄	87 - 44 - 5	1577.9	1592	93	0.48
121	Sesquiterpeno hidrocarbonado	Humuleno	46.21	204	C ₁₅ H ₂₄	6753 - 98 - 6	1650.0	1649	87	0.045
137	Sesquiterpeno hidrocarbonado	Zingibereno	49.72	204	C ₁₅ H ₂₄	495-60-3	1709.4	1713	86	0.89
139	Sesquiterpeno hidrocarbonado	β-Bisaboleno	50.08	204	C ₁₅ H ₂₄	495 - 61 - 4	1715.6	1720	92	1.415
141	Sesquiterpeno hidrocarbonado	Delta-Cadineno	51.53	204	C ₁₅ H ₂₄	483 - 76 - 1	1741.3	1751	91	0.095
142	Sesquiterpeno hidrocarbonado	α-farneseno	51.66	204	C ₁₅ H ₂₄	502 - 61 - 4	1743.5	1747	95	1.36
144	Sesquiterpeno hidrocarbonado	β-Sesquifelandreno	52.54	204	C ₁₅ H ₂₄	20307 - 83 - 9	1758.9	1767	95	4.465

146	Sesquiterpeno hidrocarbonado	Curcumeno	52.87	202	C ₁₅ H ₂₂	644 - 30 - 4	1764.8	1770	96	8.39
195	Sesquiterpeno oxigenado	Turmerona	75.82	216	C ₁₅ H ₂₀ O	532 - 65 - 0	2250.1	-	88	0.1

^a Orden de elución de los compuestos volátiles en la columna polar Supelcowax 10, 100% polietilenglicol

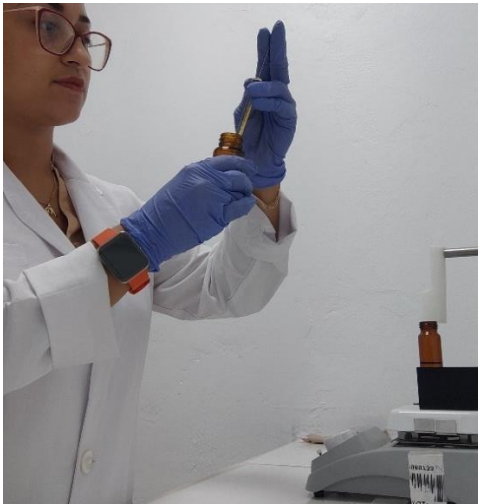
^b No fue posible calcular el IR experimental de los VOC con tiempo de retención (TR) menor de 5.343 min, que corresponde al TR del primer alcano detectado (C8) del estándar de n-alcano utilizado (C7-C33).

^c Los valores de IR teórico fueron obtenidos de la NIST Chemistry WebBook

^d Los valores de área se encuentran normalizados y representan el triplicado de una muestra

^e Los datos de los espectros fueron obtenido a través de base de datos NIST y ADAMS

Anexo 2. Fotos del proyecto





Panamá, 16 de abril de 2024

Señores,

Universidad Autónoma de Chiriquí

E. S. M.

Estimados señores,

Yo Migdalía de Rodríguez, con cédula de
identidad 6-50-2384, Licenciada idónea de Español, certifico
que el trabajo de Stephanie V. Miranda G., con cédula de
identidad personal 2-732-728, titulado:

Identificación de compuestos volátiles y su re-
lación con la calidad sensorial de cafés de
especialidad producidos en la provincia de
Chiriquí, Panamá.

_____ . Cumple con
los requisitos de Ortografía, Redacción y Sintaxis, que debe reunir el mismo.

Código de diploma: 120435

Atentamente,

Migdalía de Rodríguez.

Licenciada en Español

Adjunto diploma y copia de cédula

REPÚBLICA DE PANAMÁ
TRIBUNAL ELECTORAL

**Migdalia
Diaz Santamaria de Rodriguez**



NOMBRE USUAL:

FECHA DE NACIMIENTO: 01-JUL-1960

LUGAR DE NACIMIENTO: HERRERA, OCÚ

SEXO: F

TIPO DE SANGRE:

EXPEDIDA: 28-SEP-2022

EXPIRA: 28-SEP-2037

6-50-2384



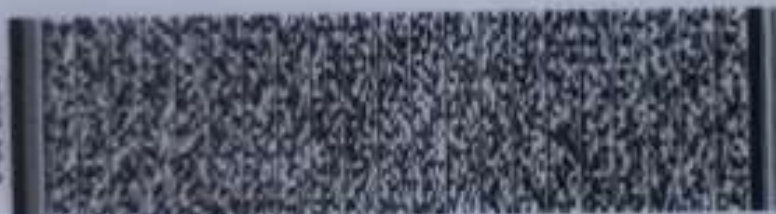
Migdalia de Rodriguez

TE TRIBUNAL
ELECTORAL


TRIBUNAL NACIONAL DE ELECCIONES



6-50-2384



A7186N10199

UNIVERSIDAD DE PANAMÁ

LA FACULTAD DE

Ciencias De La Educación

EN VIRTUD DE LA POTESTAD QUE LE CONFIEREN LA LEY Y EL ESTATUTO UNIVERSITARIO,
HACE CONSTAR QUE

UNIVERSIDAD
Migdalia Diaz S.
PANAMÁ

HA TERMINADO LOS ESTUDIOS Y CUMPLIDO CON LOS REQUISITOS
QUE LE HACEN ACREEDOR AL TÍTULO DE

**Profesora de Educación Media
con Especialización en Español**

Y EN CONSECUENCIA SE LE CONCEDE TAL GRADO CON TODOS LOS DERECHOS,
HONORES Y PRIVILEGIOS RESPECTIVOS, EN TESTIMONIO DE LO CUAL SE LE EXPIDE
ESTE DIPLOMA EN LA CIUDAD DE PANAMÁ, A LOS **diecisiete**
DÍAS DEL MES DE **septiembre** DEL AÑO DOS MIL **cuatro**.



REPUBLICA DE PANAMÁ
MINISTERIO DE EDUCACIÓN
Dirección Regional de Panamá Centro
Panamá, Panamá, el 18 de noviembre de 2004
Nombre del Destatario del Diploma
MIGDALIA DIAZ S.
Firma del Destatario
Firma del Registrador

Secretario General
Diploma 120435
Identificación Personal
6-50-2064

[Signature]
Decano

[Signature]
Rector