

Caracterización de Compuestos Volátiles Responsables del Aroma dos variedades
de Cafés Arábicas de Puerto Rico

Por

Susie - Ling Meletich Sepúlveda

Tesis sometida en cumplimiento parcial de los requisitos para el grado de

MAESTRO EN CIENCIAS

En

CIENCIA Y TECNOLOGÍA DE ALIMENTOS

UNIVERSIDAD DE PUERTO RICO

MAYAGÜEZ CAMPUS

2016

Aprobado por:

Fernando Pérez, Ph.D.
Miembro, Comité Graduado

Fecha

José A. Dumas, Ph.D.
Miembro, Comité Graduado

Fecha

María L. Plaza Delestre, Ph.D.
Presidente, Comité Graduado

Fecha

Cristina D. Pomales García, Ph.D.
Representante de Estudios Graduados

Fecha

Leyda Ponce de León, Ph.D.
Coordinadora, Programa de Ciencia y
Tecnología de Alimentos

Fecha

ABSTRACT

The attributes of greater quality and importance of coffee drinks are the aroma, flavor, color and body. To obtain a high performance coffee we must ensure their quality. This requires analysis of coffee characteristics and how these help identify a high quality coffee. Of all these characteristics, the coffee aroma is the main factor in the decision of purchase of the consumers.

The objective of this research was to identify the volatile components and compounds responsible for the aroma of roasted Borbón and Caturra coffee beans to enable their objective classification of cultivation on altitude as a high quality coffee. Evaluation also included the development of these volatile components. Solid phase microextraction was used to obtain these volatile components. Gas chromatography coupled to mass spectrometry was used for the separation and identification of volatile components. Gas chromatography coupled to an olfactometry port was used for the identification of the aromatic compounds.

A total of 56 volatile compounds were identified for the two varieties at different altitudes. During the analysis of the aromatic components, 19 compounds were identified for both varieties and altitudes. In conclusion, the coffee samples analyzed for each of the varieties and altitudes showed differences between them in terms of chemical composition. It was found that some compounds that are present in a variety more than in other, but the altitudes evaluated not determine the development of volatile compounds.

RESUMEN

Los atributos de calidad de mayor importancia en las bebidas de café son el aroma, sabor, color y cuerpo. Para obtener un café de alto rendimiento debemos asegurarnos de su calidad. Esto requiere analizar las características del café y cómo éstas ayudan en la identificación de un café de alta calidad. De todas estas características, el aroma del café es el principal factor en la decisión de compra por los consumidores.

El objetivo de esta investigación fue identificar los componentes volátiles y los componentes responsables del aroma, de los granos tostados de café Borbón y Caturra, de los que permite la clasificación objetiva como un café de alta calidad. Se evaluó, además si la altura de la siembra tiene un efecto en el desarrollo de estos componentes volátiles. Para la extracción de los componentes volátiles se utilizó la técnica de micro-extracción en fase sólida. La cromatografía de gas acoplada a espectrometría de masas se utilizó para la separación e identificación de los componentes volátiles. Cromatografía de gas acoplado a un puerto de olfatometría se utilizó para la identificación de los compuestos aromáticos.

Un total de 56 compuestos volátiles fueron identificados para las dos variedades en las diferentes alturas. Durante el análisis de los componentes aromáticos, se identificaron 19 compuestos para ambas variedades y alturas. En conclusión, las muestras de café analizadas para cada una de las variedades y alturas mostraron diferencias entre ellas. En términos de su composición química se encontró que hay algunos compuestos que están presentes en una variedad más que en otras, pero las alturas evaluadas no son determinantes en el desarrollo de los compuestos volátiles.

Derechos de Autor Reservado©
Susie - Ling Meletich Sepúlveda
2016

DEDICATORIA

A Dios, pues a Él le debo todo lo que soy,

Gracias por sostenerme cuando estuve cansada durante este camino y

Darme fuerzas para seguir hacia adelante.

A Él sea toda la Gloria y toda la Honra por los siglos de los siglos, Amén.

AGRADECIMIENTOS

A mi directora de tesis, la Doctora María Plaza, por creer en mí desde el principio, por tu trabajo incansable, paciencia, compromiso, dedicación y apoyo. A los miembros de mi comité graduado, el Doctor Fernando Pérez y el Doctor José A. Dumas por su ayuda, disponibilidad y colaboración. A la Doctora Edna Negrón por darme la oportunidad de comenzar mis estudios graduados. A mis olfateadoras, Fátima Barreto y Marielis Robles y por ayudarme, aconsejarme, por su sacrificio y noches perdidas con este proyecto. Porque sin ustedes no lo hubiese logrado.

Gracias a todos los compañeros y amigos del laboratorio de Química de Alimentos, por apoyarme, preocuparse y animarme hasta el final. A toda la facultad y personal administrativo del Programa de Ciencia y Tecnología de Alimentos. Por su ayuda, dedicación y esfuerzo. No tan sólo conmigo, si no con todos sus estudiantes.

Al Departamento de Química, especialmente a las Doctoras Ivelisse Padilla, Aidaluz Joubert y las Profesoras Sara Delgado y Verónica Sánchez por ayudarme en mi carrera profesional, darme la oportunidad de ser instructora y haber compartido conmigo durante todos estos años. A la Doctora Edmy Ferrer y la Profesora Tamara Félix por su ayuda y colaboración.

A mis amigos y hermanos a distancia: Verónica Vélez, Germancito, Yadiel, Sergio, Umpierre, Vanessa, Madeline, Dorian, Andonella, Dragoni, Gladcilla, Erika, Villamil, Ángela y Nailea. Por ayudarme en los momentos más difíciles, por las confidencias, risas y lágrimas que hemos vivido juntos. No tengo palabras para agradecer lo que han hecho por mí ... Los extraño muchísimo.

A Romi, por sembrar en mí el amor y el interés en el área de la química.

A las segundas madres que Dios me ha regalado: Judith, Elizabeth y Rebeca. Gracias por sus consejos, oraciones y haber cuidado de mí cuando más lo necesite.

A las familias Cancel - Almodóvar y Valentín - Acevedo, por acogerme y hacerme sentir parte de ustedes. Les estoy enormemente agradecida por haberme acogido como parte de su familia.

A mi novio Tomás, por tu paciencia y amor durante estos años. Sé que no ha sido fácil.

A mi familia por sus palabras de aliento y apoyarme.

Titi Kani y abuela Sirna, gracias por cuidar de mí como mi papi lo deseaba y por mantener nuestra familia unida.

A mi amada abuela Serafina. Por todos los sacrificios que hiciste. Gracias por educarme. Nunca lo olvidare, gracias por tu legado.

A mis padres Héctor y Marlene. Que aunque no están aquí para verlo, sé que están orgullosos de mí.

Estoy segura de que no hubiese llegado hasta aquí sin ustedes... gracias por formar parte de este sueño hecho realidad. Bendiciones.

TABLA DE CONTENIDO

ABSTRACT.....	ii
RESUMEN.....	iii
DEDICATORIA	v
AGRADECIMIENTOS	vi
LISTADO DE TABLAS.....	ix
LISTADO DE FIGURAS	x
1. INTRODUCCIÓN	1
2. OBJETIVOS.....	3
2.1 Objetivos específicos	3
3. REVISIÓN LITERARIA	4
3.1. Café	4
3.1.1. Beneficios	5
3.2. Café en Puerto Rico	6
3.3. Composición aromática del café	8
3.3.1. Efecto del proceso del tostado en el aroma del café	9
3.3.1.1. Reacciones químicas en la formación de compuestos aromáticos	12
3.3.2. Compuestos volátiles del café tostado	13
3.3.2.1. Fenoles	15
3.3.2.2. Furanos	15
3.3.2.3. Pirazinas	16
3.3.2.4. Piridinas y pirroles	16
3.3.2.6 Cetonas	17
3.4. Microextracción fase sólida	17
3.5. Cromatografía de gas – Espectrometría de masas (GC/MS)	21
3.6. Cromatografía de gas – Acoplada a Olfatometría (GC/O)	23
4. MATERIALES Y MÉTODOS	30
4.1. Obtención y manejo de la materia prima	30
4.2. Proceso de Extracción de los componentes volátiles por SPME	31
4.3. Parámetros de Análisis por GC-MS	33
4.4. Análisis por olfatometria	33
5. DISCUSION Y RESULTADOS.....	36
5.1 Análisis Cualitativo de Compuestos Volátiles por GC-MS	36

5.2	Análisis de las muestras Café Borbón	39
5.3	Análisis de las muestras Café Caturra	50
5.4	Análisis Cualitativo de las muestras de GC-O	58
5.5	Análisis de las muestras Café Borbón por MS	59
5.7	Análisis de las muestras Café Borbón por GC/O	64
5.8	Análisis de las muestras Café Caturra por GC/O	66
5.9	Impresiones del aroma de algunas familias de compuestos volátiles responsables del aroma del café tostado y molido.	70
5.10	Factores a considerar para los aromas en las muestras de café	73
6.	CONCLUSIÓN	76
7.	RECOMENDACIONES	78
8.	LITERATURA CITADA.....	79
9.	APÉNDICE.....	86

LISTADO DE TABLAS

Tabla 1. Localización de las Muestras de Café por zonas.....	30
Tabla 2. Compuestos volátiles identificados en el C. arábica var. Borbón y Caturra en diferentes alturas de la isla bajo la técnica HS-SPME- GC/MS.....	37
Tabla 3. Clasificación de compuestos volátiles para café Borbón Zona Alta y ZonaBaja	39
Tabla 4. Compuestos encontrados en el café Borbón Zona Alta y Zona Baja en las distintas altitudes.....	45
Tabla 5. Compuestos identificados en café arábica variedad Borbón en zonas alta y baja reportados previamente.....	46
Tabla 6. Clasificación de compuestos encontrados en el café Borbón zona alta y baja expresadas en porciento.....	49
Tabla 7. Compuestos encontrados en el café Caturra Zona Alta y Zona Baja en las distintas altitudes.....	50
Tabla 8. Clasificación de compuestos volátiles para café Caturra Zona Alta y Zona Baja.....	52
Tabla 9. Compuestos identificados en café arábica variedad Caturra en zonas alta y baja reportados previamente.....	53
Tabla 10. Clasificación de compuestos encontrados en el café Caturra Zona Alta y Zona Baja expresadas en porciento.....	58
Tabla: 11. Clasificación de compuestos volátiles para café Borbón Zona Alta y Zona Baja.....	60
Tabla 12. Clasificación de compuestos volátiles para café Caturra Zona Alta y Zona Baja.....	62
Tabla13. Número de descriptores identificados en el café Borbón y Caturra en ambas alturas.....	70

LISTADO DE FIGURAS

Figura 1. Diagrama de ensamblaje SPME por Supelco	19
Figura 2. Porcentaje de Apreciación de los panelistas durante su adiestramiento.....	34
Figura 3. Diagrama de flujo de la metodología.....	35
Figura 4. Compuestos encontrados en el café Borbón zona alta expresadas en porcentaje.....	61
Figura 5. Compuestos encontrados en el café Borbón zona baja expresadas en porcentaje.....	62
Figura 6. Compuestos encontrados en el café Caturra zona alta expresadas en porcentaje.....	63
Figura 7. Compuestos encontrados en el café Caturra zona alta expresadas en porcentaje.....	64
Figura 8. Descriptores identificados en el café Borbón zona alta expresadas en porcentaje.....	66
Figura 9. Descriptores identificados en el café Borbón zona baja expresadas en porcentaje.....	67
Figura 10. Descriptores identificados en el café Caturra zona alta expresadas en porcentaje.....	68
Figura 11. Descriptores identificados en el café Caturra zona baja expresadas en porcentaje.....	69

1. INTRODUCCIÓN

El café, al igual que el té, es una de las bebidas de mayor consumo a nivel mundial (Kwon *et al.*, 2015). La calidad del grano del café depende de las especies y ésta es influenciada mayormente por la zona geográfica, las condiciones ambientales para su crecimiento, la composición del suelo y las condiciones de recolección y almacenamiento a las cuales el café es sometido (Bertrand *et al.*, 2003). Todas estas condiciones son necesarias para obtener un café de alta calidad. Por tal razón, es muy importante trabajar con la caracterización del grano, ya que nos ayuda a identificar los componentes que distinguen a cada especie. Además permite establecer comparaciones entre diferentes especies de café, cuáles son los componentes que definen la calidad del café.

Las dos especies de café de mayor consumo a nivel mundial son la especie Robusta (*Coffea canephora* Pierre) y Arábica (*Coffea arabica* L.). El Arábica generalmente crece en áreas montañosas a gran altura, mientras que la especie Robusta se cultiva por lo general en tierras llanas a baja altitud debido a su mayor resistencia a las enfermedades y a que contribuye a la acidez, dulzura y sabor suave (Bertrand *et al.*, 2003; Kwon *et al.*, 2015).

El café es el cultivo agrícola de mayor importancia social económica y ecológica de la zona montañosa de Puerto Rico (Rojas, 2005). Una de las especies de café de mayor importancia comercial en la Isla es el café Arábica (*Coffea arabica* L.), tanto por la extensión de su cultivo como por el volumen de su producción (Rojas, 2005). Esta especie cuenta con distintas variedades entre las cuales se encuentran las variedades Borbón, Caturra y Limaní.

En la actualidad, la industria de café puertorriqueño se encuentra en un proceso de recuperación debido a una crisis económica, que acompañada de problemas climáticos, afectaron la producción de café en los pasados años. El uso del café se ha ido transformando con el pasar del tiempo. Además de ser una de las bebidas de mayor demanda en la industria de alimentos, se ha convertido en el ingrediente importante para bebidas alcohólicas, cocteles, postres y refrescos; permitiendo que la industria puertorriqueña desarrolle nuevas ideas para el imperio cafetalero.

En la caracterización del grano del café se ha encontrado que ciertos compuestos químicos tales como las proteínas, carbohidratos y lípidos pueden reaccionar entre sí formando nuevos compuestos que ayudan a desarrollar las propiedades organolépticas del café. Estas reacciones se llevan a cabo durante el proceso de tostado debido a las interacciones entre los compuestos orgánicos los cuales son importantes constituyentes de la composición química del café. Como resultado de estas reacciones químicas el proceso del tostado convierte el grano verde en uno atractivo y de un buen aroma (Baggenstoss *et al.*, 2008).

Los atributos de calidad de mayor importancia en las bebidas de café son el aroma, sabor, color y cuerpo. De todas estas características, el aroma del café es el principal factor en la decisión de compra por los consumidores (Bhumiratana *et al.*, 2011; Sunarharum *et al.*, 2014). Dada la importancia del tueste en el desarrollo del aroma es muy importante que la industria sea capaz de entender el atributo del aroma que se desarrolla durante el proceso del tueste. Es importante que estos componentes responsables del aroma también estén presentes durante el proceso de molienda y perduren hasta el momento de su consumo (Bhumiratana *et al.*, 2011). Actualmente no se cuenta con investigaciones que comparen tanto la composición química como los compuestos responsables del aroma del aroma del café puertorriqueño, dependiendo de la altura en la cual se cultiva.

2. OBJETIVOS

El objetivo principal de este estudio fue identificar preliminarmente las diferencias entre las variedades de café Borbón y Caturra, y los componentes volátiles responsables del aroma de cada una de las variedades.

2.1 Objetivos específicos

1. Identificar los componentes volátiles en café de Puerto Rico utilizando la técnica de extracción conocida como Microextracción en Fase Sólida (SPME por sus siglas en inglés). Para la separación e identificación de los compuestos se utilizó la técnica analítica de Cromatografía de Gas acoplada a Espectrometría de Masas (GC/MS) por sus siglas en inglés).
2. Evaluar y comparar los componentes volátiles entre las variedades de café Borbón y Caturra utilizando la base de datos NIST.
3. Determinar el efecto de altura en el desarrollo de los componentes volátiles.
4. Realizar pruebas de olfatometría para asignar descriptores a los componentes volátiles encontrados en las variedades de café.
5. Confirmar los descriptores asignados por medio del uso de índices de retención lineal (LRI, por sus siglas en inglés).

3. REVISIÓN LITERARIA

3.1. Café

El café es uno de los productos agrícolas más consumidos en todo el mundo (El-Abassy *et al.*, 2011). En términos de valor financiero, es el producto agrícola más importante después del petróleo (Sunarharum *et al.*, 2014). Según el “Coffee World Markets and Trade”, la producción mundial de café aumentará para los años 2016 - 2017, implantando un nuevo record para el café Arábica. Esto da paso a las exportaciones mundiales y a la comercialización del mismo. Sin embargo, se espera que la producción del café Robusta sufra una disminución considerable en países como Brasil, Vietnam e Indonesia, debido a los cambios climáticos, altas temperaturas y condiciones secas para esas zonas.

El café es nativo de África (Etiopia) producido por un árbol que pertenece a la familia *Rubiaceae*. Esta es una gran familia de unos 500 géneros y más de 6000 especies, en su mayoría árboles y arbustos. Pocos son de valor comercial y algunos arbustos se utilizan como plantas ornamentales. Sólo tres especies de café son las de mayor importancia económica estas son la especie *Coffea arabica L.*, que actualmente representa cerca del 60% del comercio mundial, *C. canephora Pierre ex Froehner*, que cuenta con una gran parte del resto del comercio y, por último, *C. liberica Bull ex Hiern* que contribuye en menos de 1%. La especie económica más importante de café, *C. arabica L.*, es nativa de los bosques montañosos de Etiopía y este puede crecer en altitudes de 1,370 a 1,830 metros por encima del nivel del mar en las áreas contiguas de la Meseta Boma en el sudeste Sudán y norte de Kenia (Bigger, 2007). En general, los arbustos del café crecen en climas tropicales a altitudes de 1000 a 2000 metros sobre el nivel del mar con una temperatura anual promedio de 15 a 25 °C y humedad y sombra moderada. Pueden alcanzar

una altura de 5 a 10 metros de alto y la mayoría están adaptadas a un hábitat de bosque. Los frutos maduran de 6 a 9 meses después de que el arbusto haya florecido (Bigger, 2007).

3.1.1. Beneficios

Los alimentos pueden afectar grandemente a la salud. A través del tiempo se han desarrollado técnicas que ayudan a garantizar la seguridad y salubridad de éstos, basándose en los riesgos microbiológicos y toxicológicos que puedan presentar. El café, al igual que los alimentos, es una mezcla química compleja y está formado por más de 1000 sustancias químicas diferentes. El café se considera como una bebida funcional debido a sus capacidades como agente quelante, que son aportados por componentes fenólicos (Cheong *et al.*, 2013). También es considerado por muchos como una influencia en el comportamiento humano (Clarke & Vitzthum, 2008). Según Vignoli y colaboradores (2011), se ha demostrado el efecto positivo del café sobre la salud humana con muy poca evidencia de los riesgos por consumo moderado de café.

El café se destaca por la presencia de antioxidantes. Según Vignoli y colaboradores (2011), algunos autores han encontrado una mayor cantidad de antioxidantes en las infusiones de café instantáneo y café expreso que en vino tinto y té verde. El potencial antioxidante del café se relaciona con la presencia tanto de componentes naturales como componentes formados durante el procesamiento (Vignoli *et al.*, 2011). Entre estos se encuentran: la cafeína, ácidos clorogénicos y las melanoidinas, que son productos de la reacción de Maillard (Vignoli *et al.*, 2011).

Estudios realizados relacionados al consumo de café han demostrado los beneficios asociados a la protección en el sistema nervioso central (Risso *et al.*, 2007), ya que la cafeína actúa como un estimulante nervioso y posee propiedades neurofarmacológicas. La cafeína puede producir

algunos efectos neuroquímicos pero en bajas cantidades de consumo no causa toxicidad. Otros estudios demuestran que el consumo de café reduce significativamente el riesgo de desarrollar enfermedades del hígado (cirrosis) inducidas por la ingesta excesiva de alcohol debido al alto contenido de antioxidantes y agentes que estimulan la desintoxicación (Clarke & Vitzthum, 2008).

Durante el proceso del tostado, ocurren varios cambios químicos que afectan la actividad de los antioxidantes, tales como la activación de la reacción de Maillard y la degradación de los polifenoles. La degradación termal de los polifenoles causa una disminución en la actividad antioxidativa y está asociada a la intensidad del grado de tostado. Los cambios en la actividad antioxidante en las infusiones de café tostado están influenciados por la intensidad del proceso de tostado (Sacchetti *et al.*, 2009).

3.2. Café en Puerto Rico

En los pasados años, Puerto Rico ha sido propenso a huracanes y a problemas en la producción, tales como, la escasez de mano de obra y los bajos ingresos de los pequeños productores de café, que han afectado la cosecha de café (Borkhataria *et al.*, 2012) . A finales del siglo 20, la producción de café había incrementado debido a la dependencia de los subsidios gubernamentales. Hoy en día se mantiene como una de las industrias agrícolas de mayor importancia económica principalmente para la zona montañosa (Avilés, 2009; Rojas, 2005).

El café fue introducido a Puerto Rico, según Borkhataria y colaboradores (2012), en 1736 y fue un cultivo de gran importancia comercial para principios de la década de 1800. La producción de café en Puerto Rico comenzó a observar una expansión gradual desde mediados del siglo XIX, sin embargo, fue en la década de 1870 cuando emprendió un aumento acelerado

en su producción y venta mundial. Muy pronto, los cafetales dominaron los paisajes agrícolas del interior montañoso y las exportaciones puertorriqueñas. Para el año 1886, el valor de sus exportaciones alcanzaba los 4.7 millones de pesos españoles y representaba el 49% del valor de las exportaciones totales de la Isla. Diez años después, las exportaciones de café se reportaron 13.9 millones de pesos españoles y constituían el 77% del valor total de las exportaciones totales de la Isla. Para el 1890, Puerto Rico era el cuarto país exportador de café en Las Américas (Avilés, 2009) y para finales siglo 19, el café había reemplazado al azúcar como principal producto agrícola de Puerto Rico. En 1897 el auge cafetalero había llegado a su fin ya que los precios del producto cedieron ese año debido a la sobreproducción mundial. Por tal razón, las exportaciones del grano en 1899 sólo alcanzaron el 10% del promedio vendido en los cinco años anteriores. Por otro lado, el huracán San Ciriaco devastó gran parte de los cafetales trayendo como consecuencia la replantación de los cafetos, los cuales tardarían en obtener sus primeros frutos de 3 a 5 años aproximadamente (Rodríguez, 2000).

Las condiciones de cultivo del café tienen una gran influencia en la incidencia de plagas y enfermedades o la capacidad que tenga la planta para resistir o tolerar el daño que estas puedan causar (Bigger, 2007). Una de las principales limitaciones para la producción de café a nivel mundial es el daño ocasionado por las plagas. La principal plaga de café es *Hypothenemus hampei* (Ferrari), mejor conocida como broca (González, 2013; Bustillo, 2006; Peterson *et al.*, 2003; Vega *et al.*, 2009; Vega *et al.*, 2002).

La broca es un escarabajo endémico en África Central y tiene un impacto directo en la producción del cafetal, afectando toda la cadena de producción desde su cosecha hasta la torrefacción ocasionando pérdidas en peso, calidad y caída de las (González, 2013; Bustillo, 2006; Peterson *et al.*, 2003; Vega *et al.*, 2009; Vega *et al.*, 2002). Debido a que la mayor parte del

ciclo de vida ocurre dentro de las bayas, se dificulta su prevención por métodos químicos y no químicos (Vega *et al.*, 2009). Se informó por primera vez su presencia en el 2007 en el municipio de San Sebastián (González, 2013) y meses después se identificaron plantaciones con niveles de infestación altos en Adjuntas y Lares (González, 2013; Rivera, 2009).

Otra de las preocupaciones de la industria cafetalera es la roya. La roya es la principal enfermedad que ataca al cultivo de café Arábica en el mundo (Jackson *et al.*, 2012). es causada por el hongo *Hemileia vastatrix* Berkeley and Broome (Cristancho *et al.*, 2007; Jackson *et al.*, 2012). Causan infecciones, disminución de la fotosíntesis y mayor defoliación (Jackson *et al.*, 2012). Debido a su gran potencial epidémico es difícil de controlar por métodos convencionales basados en agroquímicos (Salazar *et al.*, 2002). Estas limitaciones causan pérdidas en el rendimiento y producción del café. Las pérdidas anuales se estiman desde 500 millones de dólares en el caso de la broca y en 1 billón de dólares para la roya (Cristancho *et al.*, 2007; Jackson *et al.*, 2012).

3.3. Composición aromática del café

El aroma u olor, seguramente es el componente más importante del café (Sunarharum *et al.*, 2014). Es analizado por catadores e investigadores que buscan mejorar este atributo para complacer las altas exigencias de los consumidores. Según Rojas (2005), la definición más aceptada para el aroma fue dada por el Consejo Oleícola Internacional en 1997, el cual lo define como “todas aquellas sensaciones agradables percibidas indirectamente por el órgano olfativo al probar alimentos o bebidas”. En cuanto a la cualidad de un aroma, se utilizan descriptores o un lexicón que asignamos a dicho olor cuando la concentración del odorante que lo origina supera el umbral de reconocimiento (Aceña, 2011). Sin embargo, esto depende de la complejidad del odorante (Aceña, 2011). Para algunos compuestos, la cualidad de su olor varía con la

concentración, lo que también implica que estos compuestos tengan varios umbrales de reconocimiento (Aceña, 2011; Goodner & Rouseff, 2011).

Por tal razón, es necesario entender el aroma de un alimento y saber la composición de sus componentes volátiles tanto cualitativa como cuantitativamente. El aroma del café tostado, además del sabor, es percibido por los consumidores de muchas maneras. El aroma se percibe desde el momento en que se abre el empaque, durante la preparación y finalmente la infusión que conduce el aroma en la taza hacia la cavidad nasal y bucal. El aroma de la infusión de café representa la manifestación de los compuestos químicos volátiles y de la partición dinámica de compuestos aromáticos volátiles entre el café, agua, vapor y aire debido a la infusión de agua con el café. Todos estos mecanismos son importantes para la percepción total del aroma y cada uno, contribuye individualmente a los impulsos de los sentidos (Fisk *et al.*, 2012).

3.3.1. Efecto del proceso del tostado en el aroma del café

El café contiene diferentes compuestos químicos que aportan a la calidad del producto final, (café tostado) (El-Abassy *et al.*, 2011). Los granos contienen los precursores de sustancias volátiles del aroma que se desarrollan durante el proceso de tostado (Bhumiratana *et al.*, 2011) tales como la sacarosa, ácidos clorogénicos, proteínas e hidratos de carbono que contribuyen significativamente al aroma. Tanto la composición como los volátiles desarrollados varían dependiendo de su origen y tratamiento (Fisk *et al.*, 2012). Más de 850 compuestos de aroma se han asociado con el proceso de tueste del café (Clarke & Vitzthum, 2008). Las diferentes variedades de café, la zona geográfica, las condiciones de cultivo y los métodos de procesamiento afectan a los compuestos aromáticos únicos de cada tipo de grano (Bertrand *et al.*,

2003; Bhumiratana *et al.*, 2011). Tanto la variedad del grano de café como el proceso del tueste influyen en el aroma y el sabor. Según un estudio realizado por Bhumiratana y colaboradores (2011), las características del aroma, son afectadas por el tratamiento aplicado al grano (grado de tueste).

El proceso de tueste controla el comportamiento de los compuestos volátiles, dando lugar a una complejidad característica al aroma del café, debido a las diferentes condiciones aplicadas durante su procesamiento como por ejemplo el grado de tueste (claro, medio u oscuro) (Bhumiratana *et al.*, 2011; Liu & Kitts, 2011). El proceso de tueste puede dividirse en las siguientes etapas.

- **Deshidratación** - Durante el proceso de tueste, ocurren procesos endotérmicos y exotérmicos que inician una transferencia de calor hacia el grano de café liberando el contenido de agua dentro de los granos. La transferencia de calor puede ocurrir a través de gases, convección o conducción (Sunarharum *et al.*, 2014). Al exponer el grano de café al calor, su estructura celular se rompe, lo cual obliga a que el grano expulse la humedad y a su vez los compuestos aromáticos que se encuentran químicamente unidos en el interior del grano (Bhumiratana *et al.*, 2011). El olor del grano de café cambia de un olor parecido a guisantes a un pan recién horneado. El color también cambia de verde a amarillo y finalmente a marrón (Buffo & Cardelli-Freire, 2004).
- **Pirólisis** - A 205°C ocurre pirolisis, dando inicio a la formación de compuestos que afectan al sabor, olor y color de los granos de café como, por ejemplo dióxido de carbono que depende del grado de tueste del grano. Este gas se libera cuando el café es molido, pero en los granos se libera lentamente y esto puede ocasionar

daños en el empaque incluyendo la explosión del mismo (Buffo & Cardelli-Freire, 2004). Otros compuestos que pueden afectar lo son los ácidos, aldehídos, alcanos, alquenos, cetonas, ésteres, lactonas, fenoles, furanos, píranos, tiofenos, pirroles, oxazoles, tiazoles, piridinas, pirazinas, aceite, glicerol y compuestos azufrados (Bhumiratana *et al.*, 2011; Fisk *et al.*, 2012; Frisullo *et al.*, 2012; Sunarharum *et al.*, 2014). Estos compuestos son de gran interés, ya que proporcionan el atractivo del café, es decir, que estos compuestos en su mayoría son los responsables de las características de aroma y sabor del café.

- **Enfriamiento** - El enfriamiento rápido por medio de aire o agua se realiza para detener la parte exotérmica del proceso de tueste utilizando aire o agua (Buffo & Cardelli-Freire, 2004).

En el proceso de tostado, la cantidad de calor aplicado a los granos es un parámetro que influye en el resultado final del producto y se controla variando la temperatura y el tiempo del tostado. El color que obtiene el grano está influenciado por la intensidad de la temperatura aplicada. El grado de tueste del café se clasifica como ligero, medio y oscuro (Buffo & Cardelli-Freire, 2004). Los aromas más complejos se forman con un grado de tueste medio. En el tostado ligero se produce un aroma descrito como parecido al cacao y a nueces con un sabor dulce, mientras que un tostado oscuro da un aroma descrito como quemado y un sabor amargo (Bhumiratana *et al.*, 2011).

Debido a las diferencias en el grado de tueste, el aroma ha motivado a los investigadores a realizar pruebas para determinar la identidad de sus principales componentes (Buffo & Cardelli-Freire, 2004). Se han realizado varios estudios sobre la identificación y determinación

de compuestos volátiles responsables del aroma de las dos principales especies comerciales a nivel mundial, *Coffea arabica L.* y *Coffea canephora* (Rojas, 2005).

3.3.1.1. Reacciones químicas en la formación de compuestos aromáticos

La complejidad de los compuestos de aroma que se forman durante el proceso de tueste se debe a diferentes reacciones químicas, tales como la reacción de Maillard, la degradación de Strecker, caramelización y oxidación. Todas estas reacciones producen una mezcla compleja de compuestos aromáticos (Fisk *et al.*, 2012). A continuación, se describen algunas de las reacciones que ocurren durante el proceso de tostado (Buffo & Cardelli-Freire, 2004; Sunarharum *et al.*, 2014).

- **Reacción de Maillard (pardeamiento no enzimático)** - La formación de aromas se debe principalmente a las reacciones de los aminoácidos presentes en el grano verde de café con azúcares reductoras que se encuentran también presentes en el grano. Estas reacciones o transformaciones ocurren durante el tueste (Buffo & Cardelli-Freire, 2004).
- **Degradación de azúcares** – Las azúcares que no son volátiles como las pentosas, hexosas y disacáridos, se degradan por el calentamiento obteniendo productos con aroma a caramelo, y color oscuro. Por ejemplo: Furanol (2,5-dimetil-4-hidroxi-3-[2H]-furanona), maltol (3-hidroxi-2- metilpiran-4-ona), cicloteno, compuestos dicarbonilos como diacetilo (Rojas, 2005).
- **Degradación Strecker** – Es una reacción entre un amino ácido y un α -dicarbonilo (también conocidas como deoxiosonas, las cuales son producidas

durante la reacción de Maillard) con la formación de una aminocetona que se condensa para formar compuestos heterocíclicos o reacciona con formaldehído para formar oxazoles. Esta degradación produce compuestos derivados de los aminoácidos envueltos en la reacción.

- **Rompimiento hidroxil-** En esta reacción los amino ácidos serina y treonina pueden reaccionar con sacarosa para formar alquilpirazinas.
- **Rompimiento de prolina e hidroxiprolina** - En esta reacción uno de estos amino ácidos reacciona con productos intermediarios de la reacción de Maillard produciendo piridinas, pirroles y pirazinas.
- **Degradación de ácido N-metil-nicotínico o trigonelina** - El café contiene varios alcaloides que contribuyen al sabor amargo. Entre estos se encuentran la cafeína, la trigonelina, y paraxantina, teobromina y teofilina. Durante el tostado del café, la trigonelina se desmetila a ácido nicotínico, generando piridinas, pirroles, y compuestos bicíclicos.
- **Degradación de ácido quínico** - Juega un papel importante como antioxidante y en la formación del sabor y la formación de fenoles.

3.3.2. Compuestos volátiles del café tostado

Una de las características más importantes que ha contribuido a la alta aceptabilidad del café entre los consumidores es el aroma (Bhumiratana et al., 2011). Este envuelve más de 800 compuestos volátiles (Crews & Castle, 2007). Su composición depende de la variedad botánica del café, su elaboración, molienda, envasado y, especialmente, el proceso de tueste. La complejidad de los compuestos formados durante un tueste intermedio (claro) produce una serie

de aromas con descriptores tales como nueces, cacao y dulce. Por otro lado, un grado de tostado oscuro es responsable de los descriptores aromáticos tales como quemado, ceniza, hollín, picante y amargo. (Bhumiratana *et al.*, 2011).

Los compuestos volátiles presentes en el café se derivan de varios precursores que se encuentran en el grano verde, las reacciones químicas que ocurren durante el proceso de tostado y el almacenamiento (Buffo & Cardelli-Freire, 2004; Sunarharum *et al.*, 2014). Se ha reportado que la mayor influencia en el aroma del café se debe al grado de tueste, además de la adición de azúcar al final del proceso que puede estimular las reacciones de Maillard y la formación de compuestos volátiles (López-Galilea *et al.*, 2006).

Mayormente, durante el proceso de tostado, los granos de café se ponen en contacto con superficies calientes o con gases para elevar su temperatura y de ese modo promover los cambios físicos a la vez que se promueve la formación de sustancias químicas complejas (Sunarharum *et al.*, 2014). El proceso de tostado es muy complejo y depende de varios parámetros y procesos que influyen entre sí. Sin embargo, hay varios factores que pueden afectar el aroma del café tales como la luz, altas temperaturas, humedad y la cantidad de oxígeno que puede acelerar el desarrollo de rancidez y sabores desagradables (Clarke & Vitzthum, 2008).

La cuantificación e identificación de los compuestos responsables del aroma del café ha sido una tarea difícil, ya que se han encontrado numerosos compuestos con una amplia variedad de grupos funcionales y características odoríficas diferentes, las cuales pueden variar de acuerdo a su concentración (Clarke & Vitzthum, 2008; González *et al.*, 2011). Según investigaciones anteriores, se han encontrado que entre los compuestos de mayor aportación al aroma y al sabor del café están los fenoles, furanos, aldehídos, pirazinas, piridinas, pirroles y cetonas (López-Galilea *et al.*, 2006).

3.3.2.1. Fenoles

Se han encontrado numerosos compuestos fenólicos en el café tostado, muchos de los compuestos se derivan o están relacionados a los ácidos clorogénicos (Risso *et al.*, 2007). Los ácidos clorogénicos son una familia de ésteres formados entre ciertos ácidos trans-cinámicos (ácidos fenólicos que usualmente son los ácidos cafeicos, ferúlico y el p-cumárico) y el ácido quínico. Estos metabolitos secundarios están presentes en los granos de café verde y contribuyen a la astringencia (Buffo & Cardelli-Freire, 2004) y al sabor amargo en las infusiones (bebidas) de café. (Risso *et al.*, 2007). Los fenoles presentan aromas descritos como: quemado, astringente, medicina, especie de clavo, tabaco, ahumado, fenólico, caucho, amargo, picante, terroso y madera. Estos se encuentran en concentraciones bajas y su concentración puede incrementar dependiendo del grado de tostado del grano (Rojas, 2005; Puerta, 2011).

3.3.2.2. Furanos

Por mucho tiempo, los furanos han sido considerados como componentes volátiles normales del sabor del café (Crews & Castle, 2007). Son el grupo más abundante entre todos los compuestos volátiles presentes en el café tostado (Grosch, 2001). La formación de los furanos ocurre por degradación termal de carbohidratos (Crews & Castle, 2007; Ribeiro *et al.*, 2012; Sunarharum *et al.*, 2014). Se ha reportado que los furanos presentan aromas descritos como césped, paja, almendra, ahumado, astringente, café tostado, malta, quemado, dulce, tostado, caramelo, cuero y a frutas (Akiyama *et al.*, 2005; Cheong *et al.*, 2013; González *et al.*, 2011; López-Galilea *et al.*, 2006; Puerta, 2011; Sunarharum *et al.*, 2014).

3.3.2.3. Pirazinas

La influencia en el sabor que produce el tostado, proviene de la degradación, formación y liberación de los compuestos químicos que son producto de diferentes reacciones tales como Maillard, Strecker, degradación de amino ácidos, interacción entre productos intermediarios entre otros (Buffo & Cardelli-Freire, 2004; Sunarharum *et al.*, 2014). Las pirazinas son un producto de la reacción de Maillard y estas contribuyen al sabor y aroma a nuez presente en el café tostado. Por otro lado, otras pirazinas muestran descriptores aromático tales como tierra, moho, leña, chocolate, graso, maíz, alquitrán, pimentón, maní y rancio (Akiyama *et al.*, 2005; González, *et al.*, 2011; Puerta, 2011; Sunarharum *et al.*, 2014). Las pirazinas forman gran parte de los compuestos presentes en el café. Cuentan con concentraciones de bajo perfil olfativo y se consideran sumamente importantes por sus aportaciones al sabor.

3.3.2.4. Piridinas y pirroles

Las piridinas y los pirroles muestran impresiones de olor tales como ahumado, café quemado, tabaco, tierra, caramelo, hierbas verdes, mantequilla, maíz, cereal, aceite, medicinal, setas comestibles, grasa, nuez y verde desagradable, olor fuerte y nauseabundo (Cheong *et al.*, 2013; Puerta, 2011). Además, poseen unas notas amargas, astringentes y tostadas (Rojas, 2005).

3.3.2.5. Aldehídos

Los aldehídos se pueden encontrar en concentraciones altas en los cafés recién tostados (Rojas, 2005). Estos son productos de la degradación de Strecker, donde ocurre oxidación de los aminoácidos durante la interacción con azúcares a altas temperaturas (Aggenstoss *et al.*, 2008;

Flament, 2002). Este grupo de compuestos volátiles muestran impresiones de olor a ocre, flores, grasas, frutas, cítricos, canela, vainilla, madera, pepino, rosa, miel, Jacinto, rancio, dulce, vinoso, cocido, tostado, verde, malta, ácido, fermentado, picante, herbal, papas cocidas, quemado, y rancio (Aceña, 2011; d'Acampora *et al.*, 2008; Goodner & Rouseff, 2011; Maeztu *et al.*, 2001; Puerta, 2011).

3.3.2.6 Cetonas

Las cetonas forman parte importante de los compuestos, volátiles, representando el 21.5% de los componentes del aroma de café (Flament, 2002). El aroma de estas puede variar considerablemente, ya que muestran impresiones de olor que van desde el olor a fruta hasta lo grasoso. Otras impresiones de olor son dulces, picantes, mantecosas, azúcar quemada, mantequilla, lácteos, fruta cocinada, rosas, madera, caramelo, miel, floral, jarabe de arce y rancio (Aceña, 2011; d'Acampora *et al.*, 2008; Goodner & Rouseff, 2011; Maeztu *et al.*, 2001; Puerta, 2011).

3.4. Microextracción fase sólida

SPME

Los aromas liberados durante la molienda del café tostado y café recién colado (infusión) son particularmente atractivos y agradables. Sin embargo, debido a que estos aromas son extremadamente volátiles o son compuestos inestables, los mismos se pierden con facilidad. Para evitar esta pérdida, es necesario recolectar los compuestos volátiles en un corto período de tiempo.

Según Akiyama *et al.*, (2007), hasta la fecha, se han identificado más de 800 componentes aromáticos en estudios sobre cerveza y café molido mediante la extracción por solvente y otros métodos de muestreo. Estos aromáticos volátiles son recolectados con los métodos como purga y trampa, micro-extracción en fase sólida y muestreo directo de jeringa entre otros.

Para el análisis de las muestras, primero se debe de realizar algún método de extracción de compuestos, volátiles, ya que se debe obtener una muestra concentrada y libre de otras sustancias que puedan causar algún tipo de interferencia durante los análisis en el cromatógrafo (Bicchi *et al.*, 2011; González *et al.*, 2011; Rojas, 2005). Entre los métodos de extracción, la micro-extracción en fase sólida (SPME, por sus siglas en inglés) permite el análisis de un amplio espectro de compuestos volátiles de diferente polaridad (Peralta, 2011). Además de ser un excelente método de preparación de la muestra, ya que en el mismo paso extrae y concentra los analitos de la muestra, es un método simple, rápido, libre de solventes y relativamente económico (Bicchi *et al.*, 2011; González *et al.*, 2011; López-Galilea *et al.*, 2006). La extracción de los componentes volátiles utilizando este método se puede realizar por inmersión en la solución o por exposición al espacio de cabeza o “headspace” (HS, por sus siglas en inglés).

La técnica de micro-extracción en fase sólida por “headspace”, es utilizada para el análisis de sabores y fragancias en alimentos y bebidas. El proceso de HS-SPME consiste de dos equilibrios: (1) equilibrio de los componentes volátiles entre la muestra y el HS, (2) equilibrio entre el HS sobre la muestra y el recubrimiento de la fibra. En adición, el análisis por SPME envuelve dos pasos: extracción de los componentes volátiles presentes en la muestra y la desorción de los volátiles extraídos en un instrumento analítico.

SPME es una técnica de equilibrio, por lo que los perfiles de volátiles (recuperación de volátiles) obtenidos dependen grandemente de la composición de la muestra y del control de todos los parámetros de muestreo. Esto incluye la composición de la fase de cobertura de la fibra y su espesor. El dispositivo de SPME consta de una fibra de sílice fundida la cual tiene una longitud de 1-2 cm. Su superficie está recubierta con una fase estacionaria la cual está unida a un filamento de acero inoxidable. Esta fibra se encuentra localizada en el interior de un soporte parecido a una jeringuilla como se muestra en la siguiente Figura.

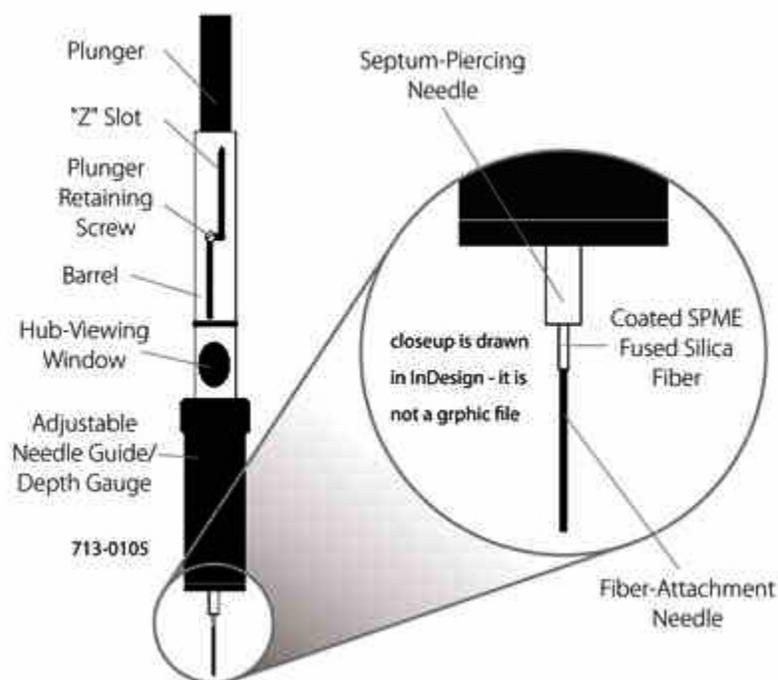


Figura1. Diagrama de Ensamblaje SPME (Sacado de: Supelco)

Existen varias fibras diferentes, las cuales están disponibles comercialmente, lo cual permite que una gran variedad de compuestos con un rango amplio de polaridades y volatilidades puedan ser analizados. Polidimetil siloxano (PDMS, por sus siglas en inglés) es una cobertura no-polar, utilizada para extraer compuestos no-polares. Los compuestos polares pueden ser

extraídos con una fase polar tal como carbowax y poliacrilato. Las fibras porosas tales como Carboxen o Divinilbenceno (DVB, por sus siglas en inglés) son buenas para compuestos de alta volatilidad y tienen diferentes espesores. Las fibras con cobertura gruesa (100 μm) son mejores para volátiles, mientras que las finas (7 μm y 30 μm) son mejores para moléculas grandes. Las fibras con múltiples fases, Carboxen/DVB/PDMS, extraen ambos tipos de compuestos (polares y no-polares) por lo que son las más utilizadas para el análisis de componentes volátiles en muestras que contienen compuestos con un amplio rango de polaridades (Sigma-Aldrich, 2016).

La ventaja del SPME es que es compatible con el sistema de Cromatografía de Gas por lo que se utiliza su puerto de inyección para realizar una inyección directa. Generalmente el método de inyección utilizado con esta técnica de extracción es “Splitless”.

La técnica de extracción consiste en colocar la muestra en un envase cerrado durante un tiempo y temperatura suficiente para alcanzar el equilibrio entre la muestra y su HS; luego la tapa es perforada a través del septo para dejar expuesta la fibra al HS el tiempo suficiente para que su fase alcance equilibrio con los aromas del HS. Esto se hace para exponer el material adsorbente a la muestra durante un período de tiempo que oscila entre 15 y 30 minutos. Se retira el material adsorbente y se saca la jeringa del vial. Luego la fibra es llevada al inyector de un cromatógrafo de gas o de un GC-MS, en donde se expone a alta temperatura para desorber los componentes extraídos dentro del inyector. En esta técnica, se separan los analitos de una muestra líquida o gaseosa hacia una fase estacionaria inmovilizada y subsecuentemente ocurre la desorción de los analitos en el puerto de inyección de un cromatógrafo de gases para su análisis (González *et al.*, 2011). La efectividad en la extracción depende de varios parámetros entre ellos el tipo de fibra, volumen de muestra, tiempo y temperatura de extracción, presencia de sales, pH

del medio, modo de extracción y desorción de los analitos en la fibra, para los cuales es necesario establecer previamente estos parámetros (Peralta, 2011).

3.5. Cromatografía de gas – Espectrometría de masas (GC/MS)

La cromatografía es una técnica de análisis en la cual los componentes de la muestra son separados mediante su distribución en dos fases, una de las cuales es estacionaria mientras la otra se mueve en una dirección definida (Olguín & Rodríguez, 2004). Está basada en la separación de analitos entre dos fases inmiscibles, la fase móvil y la fase estacionaria. La fase móvil fluye a través de la fase estacionaria que se encuentra en la columna. La elución de los analitos en la fase estacionaria ocurre según la dispersión y las interacciones entre los analitos y la columna, lo que permite que los compuestos con diferentes polaridades se separen (Petronilho *et al.*, 2014).

La muestra se inyecta en la fase móvil que es un gas de arrastre inerte. En esta fase móvil los componentes de la muestra pasan a través de la columna que se encuentra dentro de un horno. La separación de los componentes se puede llevar a cabo utilizando un método isocrático (se utiliza la misma temperatura durante la duración del análisis) o con programación de rampas de temperatura. En el caso de las rampas de temperatura, los solutos presentes en la muestra tienen diferentes afinidades a la fase estacionaria y diferentes puntos de ebullición, lo que permite su separación. Los componentes que interaccionan fuertemente con la fase estacionaria se mueven lentamente en la fase móvil, mientras los que interaccionan débilmente fluyen con mayor rapidez. (Gutiérrez & Droguet, 2002)

Para lograr el análisis de los componentes, los cromatógrafos de gases utilizan varios tipos de detectores. Entre estos se encuentran: espectrometría de masas (MS, por sus siglas en

inglés) y ionización de flama (FID, por sus siglas en inglés). Estos detectores son los más utilizados para la detección y cuantificación de componentes volátiles. El detector de ionización de flama es menos costoso en comparación al MS (Petronilho *et al.*, 2014) y es un detector no selectivo.

La cromatografía de gas, acoplada a la espectrometría de masas, es una de las técnicas analíticas más completas que existen actualmente. Ha sido ampliamente utilizada en el análisis de procesos industriales, análisis de contaminantes, control de calidad y en la industria de alimentos (Gutiérrez & Droguet, 2002; Wang *et al.*, 2013). Esta técnica puede lograr la separación e identificación de mezclas complejas en una sola operación, es apropiada para la detección de compuestos volátiles y semi-volátiles. Además, es muy adecuada para la separación de compuestos no polares debido a su excelente capacidad de resolución y separación. (Gutiérrez & Droguet, 2002; Rojas, 2005; Wang *et al.*, 2013).

Entre las cualidades del GC-MS, se encuentra la capacidad de identificación, ya que proporciona un espectro característico de cada molécula. También, permite medir las concentraciones de las sustancias de forma cuantitativa y proporciona información estructural sobre la molécula. La técnica de GC-MS puede ser aplicada a la generación de perfiles cromatográficos para diferenciar los compuestos presentes en las muestras. Una vez separados, todos los componentes individuales de una muestra pueden ser identificados utilizando el tiempo de retención de los compuestos (Gutiérrez & Droguet, 2002; Wang *et al.*, 2013) y el espectro de masas obtenido durante el análisis. Sin embargo, esta técnica no es viable para el análisis de muestras termalmente inestables; muestras, de alto peso molecular y/o de alta polaridad debido a que el pico cromatográfico se ve afectado. (Wang *et al.*, 2013).

La técnica de espectrometría de masas se basa en la fragmentación de compuestos volátiles en iones de tamaño y frecuencia predecible. Los enlaces químicos más débiles serán el lugar en donde se fragmente la molécula en iones positivos y negativos por impacto electrónico. Los iones positivos que se forman se concentran y son atraídos por placas cargadas en función de su masa. El número de iones en cada masa se cuenta y se muestra en un diagrama para cada masa. El resultado de ese diagrama es la fragmentación de los compuestos, denominado espectro de masas, el cual es característico para cada molécula (Goodner & Rouseff, 2011).

El espectro de masas se puede comparar con otros espectros analizados en investigaciones anteriores o de fuentes comerciales que se encuentran en bibliotecas o base de datos tales como los son John Wiley & Sons, Inc. y NIST (National Institute of Standards and Technology). No todos los compuestos volátiles se encuentran en las bibliotecas o bases de datos. Además, las equivocaciones en la identificación utilizando la base de datos pueden ser posibles dado que algunos compuestos (especialmente los terpenos) presentan espectros similares. Por tal razón, el valor del índice de retención lineal también se utiliza para confirmar la identidad de los picos cromatográficos de interés. La coincidencia de la fragmentación del MS y el valor del índice de retención lineal, se considera una identificación y confirmación sólida. De no utilizar los valores del índice de retención para comparar los espectros se considera una identificación preliminar (Goodner & Rouseff, 2011).

3.6. Cromatografía de gas – Acoplada a Olfatometría (GC/O)

La sensibilidad del sistema olfatorio permite a los organismos detectar e identificar cientos de moléculas de compuestos generalmente orgánicos (Aceña *et al.*, 2011; Firestein, 2001; Van Ruth, 2001). El olfato, es el primer sentido que desarrollan los seres humanos, pero para el resto de los animales, detectar compuestos en el ambiente es crucial para su supervivencia

(Aceña, 2011; Firestein, 2001). Los animales utilizan el olfato como el sensor del medioambiente, ya que es el primer sentido que usan para encontrar su comida, detectar a sus presas, identificar a sus depredadores o para detectar o identificar territorios (Firestein, 2001).

Un olor es capaz de estimular una respuesta anatómica al entrar en contacto con el sistema sensorial humano. Por ejemplo el sentido del olfato permite detectar la presencia de algunas sustancias químicas en el aire o ambiente, que se asocian con situaciones de riesgo o de alerta (Brattoli *et al.*, 2011). Además el olfato se relaciona estrechamente con las zonas cerebrales que regulan y controlan la memoria y las emociones, ya que al percibir un estímulo aromático nuestra memoria se traslada a las situaciones que asociamos con ese aroma u olor (Aceña, 2011; Bartsch *et al.*, 2015; Brattoli *et al.*, 2011).

Cuando olemos algún alimento, los receptores olfatorios provocan una sensación que percibimos cuando los vapores aromáticos se introducen por las fosas nasales. Cuando un alimento es llevado a la cavidad bucal, este presenta más olor. Esto se debe a que liberan muchas moléculas volátiles en el proceso de masticación (Aceña, 2011; d'Acampora *et al.*, 2008). Estas moléculas llegan a la cavidad nasal (via retronasal) y el olor que estas generan al llegar a la mucosa olfativa se le conoce como aroma (Aceña, 2011; Roberts *et al.*, 2000; Van Ruth, 2001).

Cada ser humano posee un número elevado de diversos receptores olfatorios (Aceña, 2011; Van Ruth, 2001). Sin embargo, nuestro sistema olfatorio muestra un amplio poder de discriminación, ya que es capaz de detectar un gran número de espectros odorantes, esto se debe a la selectividad de sus receptores olfativos (Aceña *et al.*, 2010; Aceña, 2011)

La nariz humana es un detector altamente sensible y muy selectivo (Chin & Marriott, 2014; Delahunty *et al.*, 2006; Goodner & Rouseff, 2011). Teóricamente, esta posee un límite de

sensibilidad de detección de olores de 10^{-19} moles (Goodner & Rouseff, 2011). La utilización de la nariz como detector de aromas es lo que se conoce como Olfatometría. La capacidad de detección de la nariz humana, al ser utilizada en el puerto de detección de olfatometría (ODP, por sus siglas en inglés) tiene sus limitaciones en la identificación de muchos compuestos en comparación con la mayoría de los instrumentos de detección diseñados con ese fin (Goodner & Rouseff, 2011). Sin embargo, es el detector de predilección para identificar los aromas (Goodner & Rouseff, 2011), ya que es más sensitiva que un detector más convencional (Aceña *et al.*, 2011; Delahunty *et al.*, 2006).

Aunque existe una amplia variedad de olores (Aceña *et al.*, 2010; Aceña, 2011; d'Acampora *et al.*, 2008), para los científicos no ha sido impedimento a la hora de clasificarlos (Aceña, 2011). Muchas veces se debe recurrir a cualidades como por ejemplo la sensación que produce a los otros sentidos o a cualquier criterio cultural (Aceña, 2011). Aunque hay palabras que definen los olores básicos tales como: floral, mentolado, ect. (Aceña, 2011) en el siglo XVIII, Linneo estableció las siguientes categorías para clasificar los olores:

- (a) aromáticos - laurel
- (b) fragantes - jazmín, lis y tila
- (c) ambrosianos - ámbar y almizcle
- (d) aliáceos - ajo
- (e) caprílicos - olor a cabro o algunos ácidos grasos de cadena corta
- (f) narcóticos - solanáceas
- (g) fétidos - plantas pútridas

Luego en el siglo XVIII, Zwaardemaker propuso dos nuevas categorías, los olores etéreos (frutas muy maduras) y los olores empireumáticos (café, pan tostado y el tabaco) (Aceña, 2011).

El aroma que expide un alimento, muchas veces es responsable de la primera impresión que causa en los consumidores (Aceña, 2011). Los compuestos volátiles liberados de los alimentos, depende del tipo de producto, materia prima, zona geográfica y del proceso de producción y elaboración (Aceña, 2011; Plutowska & Wardencki, 2008; Van Ruth, 2001). Las propiedades organolépticas de los alimentos tienden a ser valoradas en el ámbito comercial (Lara, 2005). Por tal razón, el análisis de la composición aromática de los alimentos es muy importante y constituye uno de los principales retos para la industria de alimentos. El aroma está compuesto por un gran número de compuestos volátiles y dada la complejidad que muestran las matrices alimentarias y las características de los analitos, la cromatografía de gases se muestra como la técnica idónea para el análisis de estos compuestos (Aceña, 2011); destacándose entre esta técnica la cromatografía de gases con detección olfatométrica, en la que se emplea la nariz humana como detector cromatográfico en paralelo con otro detector (Aceña *et al.*, 2011; Van Ruth, 2001).

Esta técnica consiste en utilizar un cromatógrafo de gas para separar los analitos volátiles, generalmente con una columna capilar de pared recubierta “open tubular coated capillary column”, un puerto de detección de olor “sniffing port” en paralelo a un detector de masas (Aceña *et al.*, 2011; Aceña, 2011; Chin & Marriott, 2014; d’Acampora *et al.*, 2008; Goodner & Rouseff, 2011; Plutowska & Wardencki, 2008.). De esta manera se combinan tanto la respuesta instrumental como la sensorial. Sin embargo, sólo una parte de estos volátiles muestran olor y

contribuyen al aroma, por lo que la evaluación de las cualidades aromáticas tan sólo puede realizarse empleando la nariz humana (Aceña, 2011; Chin & Marriott, 2014).

La Cromatografía de gases acoplada a Olfatometría (GC/O) es una técnica que combina la separación de cromatografía de gases (GC) con la selectividad y sensibilidad de la nariz humana (Aceña *et al.*, 2011; Aceña, 2011; Chin & Marriott, 2014; d'Acampora *et al.*, 2008; Goodner & Rouseff, 2011; Plutowska & Wardencki, 2008). Este método, nos permite identificar y caracterizar el olor de un compuesto con la actividad aromática en una mezcla de componentes volátiles (Aceña *et al.*, 2011; Aceña *et al.*, 2010; Van Ruth, 2001). Además de que emplea la participación de panelistas “sniffers” para distinguir olores y atribuir descriptores de olor a los compuestos analizados (Chin & Marriott, 2014; Delahunty *et al.*, 2006; Goodner & Rouseff, 2011; Plutowska & Wardencki, 2008; Van Ruth, 2001).

Aunque la técnica de GC/O puede diferenciar entre las sustancias volátiles que tienen actividad aromática y las que no se debe tener en consideración que este equipo no proporciona resultados de cómo los compuestos aromáticos interactúan entre sí o con la matriz alimentaria (Aceña, 2011; d'Acampora *et al.*, 2008; Goodner & Rouseff, 2011; Plutowska & Wardencki, 2008; Van Ruth, 2001).

Las identificaciones preliminares de estos compuestos aromáticos por lo general, se obtienen comparando el tiempo de retención con los descriptores sensoriales que son asignados por los olfateadores (Goodner & Rouseff, 2011). Las identificaciones provisionales pueden ser confirmadas cuando se comparan los tiempos de retención y las características sensoriales con estándares (Goodner & Rouseff, 2011). Además, también se emplea la espectrometría de masas para la confirmación e identificación de los compuestos (Goodner & Rouseff, 2011).

Para identificar los compuestos volátiles con actividad aromática en las muestras de alimentos se pueden utilizar varios tipos de detectores, entre estos se encuentran el de espectrometría de masas (MS por sus siglas en inglés) y el de ionización de flama (FID por sus siglas en inglés) (Aceña *et al.*, 2011; Delahunty *et al.*, 2006; Goodner & Rouseff, 2011). Los cromatogramas del detector FID no representan el aroma de los alimentos (Goodner & Rouseff, 2011). Algunos de los volátiles producen una baja respuesta al FID o al MS, mientras que otros compuestos se encuentran en concentraciones muy altas con poca o ninguna actividad aromática (Goodner & Rouseff, 2011).

Existen varios tipos de diseños de olfatómetros que han sido desarrollados para la evaluación de los compuestos volátiles de actividad aromática que eluyen por la columna, pero en todos estos diseños ocurre la humidificación del aire que se agrega a los efluentes de la columna (Chin & Marriott, 2014; Goodner & Rouseff, 2011; Van Ruth, 2001). Algunos diseños también permiten la adición de un “neutral make-up gas” para cambiar la velocidad completa de la mezcla de gases ya que incide en la nariz del evaluador “sniffer” (Aceña *et al.*, 2011; Goodner & Rouseff, 2011). El propósito de la humidificación del aire es la refrigeración de los gases calientes que eluyen del horno de la columna del GC y evitar la deshidratación de los conductos nasales durante la inhalación del evaluador “sniffer” (Aceña *et al.*, 2011; Goodner & Rouseff, 2011; Van Ruth, 2001).

A pesar de ser una técnica muy útil, hay que considerar una serie de requisitos a la hora de llevar a cabo la evaluación, ya que el ambiente puede influir en que el panelista cometa errores de percepción (Goodner & Rouseff, 2011). Factores como las distracciones, los ruidos, olores extraños o condiciones de análisis poco confortables deben evitarse. Se recomienda realizar el análisis olfatométrico en una habitación aislada y tranquila, y que cuente con un buen

sistema de ventilación para evitar la entrada de olores extraños (Aceña *et al.*, 2011; Delahunty *et al.*, 2006; Goodner & Rouseff, 2011).

Como parte del procedimiento se requiere que el tiempo de evaluación no exceda de 30 minutos (Goodner & Rouseff, 2011). Algunos diseños de olfatómetros requieren una posición cerca del GC, frente al puerto de olfateo “sniffing port” y esto resulta un poco incómodo para el panelista, ya que regularmente hay que estar de pie y esto puede causar distracción durante el tiempo de evaluación, por tal razón, los panelistas deben asumir una posición cómoda preferiblemente sentados, para que puedan estar alerta y centrar su atención exclusivamente en la detección y descripción del aroma (Aceña, 2011; Goodner y Rouseff, 2011). Asimismo, se debe considerar la sensibilidad de los panelistas, ya que cada ser humano tiene un umbral de detección distinto para cada compuesto, y los rangos de percepción pueden variar entre analistas. Otro factor a considerar lo es la anosmia, una condición en la que las personas aunque no hayan perdido el olfato, son incapaces de detectar el olor de algunos compuestos (Aceña, 2011; Lemogne, *et al.*, 2015).

4. MATERIALES Y MÉTODOS

4.1. Obtención y manejo de la materia prima

En este trabajo se analizaron muestras de café arábica (*Coffea arabica* L.) variedades Borbón y Caturra (Tabla 1). Se recolectó un almud de café en cada una de cuatro fincas diferentes, localizadas a una altura de 500 pies o más a nivel del mar en los pueblos de Jayuya, San Sebastián y Adjuntas, entre los meses de mayo a junio (años 2011 y 2012). Estos almudes fueron transportados a la Estación Experimental Agrícola de la Universidad de Puerto Rico, Recinto Universitario de Mayagüez, localizada en Adjuntas, en donde se llevó a cabo el beneficiado. Los granos de café fueron secados al sol siguiendo el protocolo establecido para la evaluación de catadores externos (Proyecto FIDA 8).

Tabla 1. Localización de las Muestras de Café por Zonas

Pueblo	Finca	Altura (pies)
Borbón Zona Alta		
Jayuya	1	2,051
Adjuntas	2	1,995
Adjuntas	3	1,885
Caturra Zona Alta		
Adjuntas	2	1,985
Adjuntas	4	1,935
Jayuya	1	1,730
Borbón Zona Baja		
San Sebastián	5	574
San Sebastián	6	518
Caturra Zona Baja		
San Sebastián	7	580

(1) Finca de Rubén Atienza, (2) Estación Experimental Agrícola, (3) Finca Joaquín Santiago, (4) Finca Fito Serrano, (5) Finca Rubén Ramírez (6) Finca Audeliz Padua, (7) Finca Miguel Olavarría

Luego de seleccionar los granos café libre de daño, se trasladaron al Laboratorio de café, localizado en la Estación Experimental Agrícola de Adjuntas, donde fueron mantenidas en reposo por treinta días en cámara, para evitar el sabor herbáceo del café (siguiendo el protocolo de “coffee book”). Las muestras fueran transportadas al Laboratorio de Química Agroambiental donde fueron empacadas al vacío y congeladas hasta su análisis. Se tostaron aproximadamente 250 gramos de café, siguiendo el mismo protocolo del Proyecto FIDA 8 al grado número 54 de tueste. Luego del tueste los granos fueron almacenados y transportados en bolsas plásticas, selladas herméticamente al vacío al laboratorio de Química de Alimentos, del Centro de Investigación y Tecnología Agroindustrial de la Universidad de Puerto Rico, Recinto de Mayagüez. Las muestras fueron almacenadas a una temperatura de $-80\text{ }^{\circ}\text{C}$ hasta el momento del análisis.

4.2. Proceso de Extracción de los componentes volátiles por SPME

Las muestras de café tostado fueron molidas previo a la extracción de los componentes volátiles. En un molinillo de café eléctrico (Costum Grind Hands – Free Coffee Grinder Platinum” (Hamilton Beach modelo 80365). El café fue molido a un tamaño de partícula fina, similaral que se utiliza para maquinas tipo expreso de vapor o bombeo. Para llevar a cabo la extracción de los componentes volátiles presentes en el café se pesaron aproximadamente 5.000 ± 0.002 gramos de muestra, los cuales fueron transferidos cuantitativamente a un frasco de vidrio “vial”, de 40 mL color ámbar con un tapón de rosca y con “septum” de silicona. Luego que la muestra fue transferida al vial, este fue sumergido en un baño de María a $40 \pm 2\text{ }^{\circ}\text{C}$ (Díaz, 2014). Para la extracción de los componentes volátiles de la muestra, se utilizó la técnica de Microextracción en Fase Sólida (SPME, por sus siglas en inglés). Previo a la extracción, se estableció

un tiempo de equilibrio para la muestra en donde se dejó equilibrar por un periodo de 5 minutos mientras el “vial” se encontraba sumergido en el baño de María. Este periodo de reposo permitió que ocurriera un equilibrio entre los componentes volátiles encontrados en la muestra y el “headspace” sobre la misma.

La fibra que se utilizó para la extracción de los componentes volátiles está compuesta por una cubierta de 50/30 μm Divinilbenceno /Carboxen/ Polidimetilsiloxano (DVB/CAR/PDMS), Supelco®. Esta es una fibra de tipo bipolar que atrapa los analitos de diferentes polaridades o estructuras como lo son sabores y aromas (González *et al.*, 2011; Vas & Vékey, 2004). Con una temperatura máxima de operación de 270 °C. Su cubierta funciona como una esponja que atrapa y concentra los analitos por medio de la absorción y puede ser reutilizada varias veces dependiendo de la matriz de la muestra a la que es expuesta (González *et al.*, 2011; Vas & Vékey, 2004). Previo a la extracción, la fibra fue acondicionada utilizando las recomendaciones del fabricante. En este caso, la aguja fue introducida en el puerto de inyección, el cual se encontraba a una temperatura de 270 °C y fue expuesta durante 60 minutos.

Luego de varias pruebas, se determinó que el tiempo de exposición debe ser por un periodo de 15 minutos. Además, para llevar a cabo la extracción, la jeringuilla de SPME fue insertada a través del septo de silicona de la tapa del vial y luego fue expuesta al “HS”. Durante este tiempo los analitos que se encuentran en el “HS”, son adsorbidos en la superficie de la fibra (Díaz, 2014). Este procedimiento fue realizado para cada una de las muestras de café molido en cuadruplicado. Luego de cada extracción, se insertó la aguja en el puerto de inyección del cromatógrafo de gas, donde se llevó a cabo la desorción termal de los compuestos adsorbidos por la fibra (Rojas, 2005).

4.3. Parámetros de Análisis por GC-MS

La composición química de las muestras de café extraídas del “HS” se analizó por cromatografía de gas acoplada a un detector de espectrometría de masas (GC-MS). El equipo utilizado fue un cromatógrafo de gas, GC (Agilent 7890A) acoplado a un MSD (Agilent 5975C), operado en el modo de inyección “splitless” con una rampa de temperatura que inició a 35 °C de 0 a 5 minutos. La rampa de temperatura utilizada fue de 5 °C por, minuto, hasta llegar a 265 °C. La temperatura final del horno fue mantenida por un periodo de 5 minutos. La separación de los componentes volátiles extraídos de la muestra fue realizada utilizando dos tipos de columnas capilares de diferente polaridades: una Columna Carbowax®: 30 m x 0.32 mm i.d. x 0.25- μ m y un Columna HP-5MS® de 30 m x 0.25 mm i.d. x 0.25- μ m. Para las muestras analizadas por olfatometría se utilizó sólo la columna HP-5MS® descrita previamente.

4.4. Analisis por olfatometría

El éxito del análisis por olfatometría depende de la uniformidad de los descriptores provistos por las personas que llevarán a cabo el análisis. Es por esto, que una parte importante de este análisis envuelve el adiestramiento de las personas que servirán como “sniffers” u olfateadores. El adiestramiento permite que las personas que actuaran como detectores de los aromas puedan estar relacionados con los descriptores utilizados para los compuestos que pueden estar presente en las muestras. Previo al análisis por olfatometría, se adiestraron tres “sniffers” u olfateadores para evaluar y describir los diferentes aromas de las muestras de café. Con este propósito, se utilizaron 14 estándares preparados a diferentes concentraciones. Los compuestos utilizados fueron los de mayor importancia en el café tostado. Las diferentes soluciones fueron rotuladas con números y letras aleatoriamente. Cada uno de los panelistas describió e identificó

la intensidad del olor y el aroma. Durante la evaluación de los estándares se utilizaron unas tiras olfativas. El adiestramiento de los panelista envolvió un total de 12 sesiones. Cada sesión tuvo una duración de 30 minutos. La determinación del total de secciones a realizar se basó en la consistencia de los descriptores provista por los olfateadores como se observa en la Figura 2.

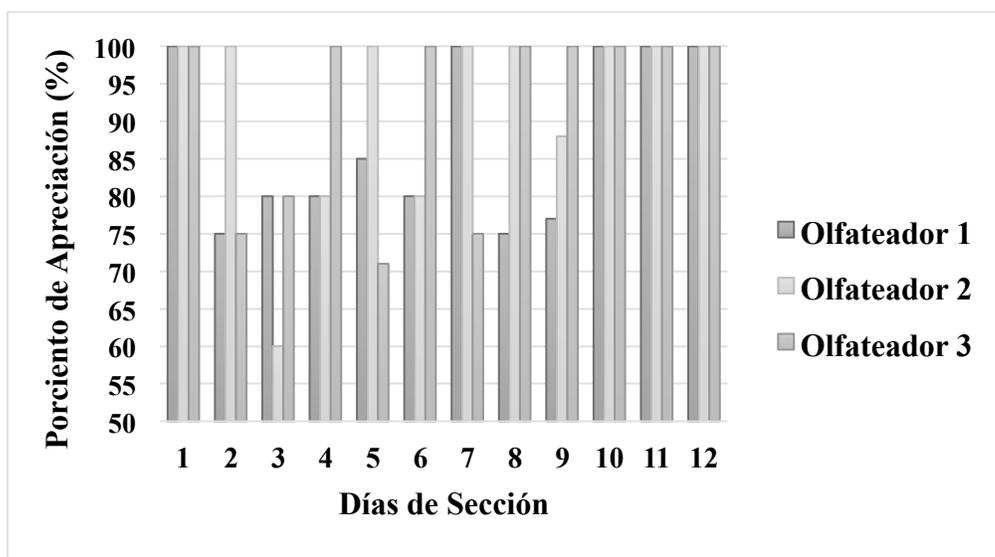


Figura 2. Porcentaje de Apreciación de los Panelistas Durante su Adiestramiento

Para el análisis de los compuestos volátiles con actividad aromática presentes en las muestras de café se utilizó el puerto de Detección Olfatométrico (ODP por sus siglas en inglés). El ODP permite la detección de compuestos utilizando la nariz humana una vez estos eluyen del cromatógrafo de gases. El eluyente se divide en el puerto de salida de la columna, de manera que llega simultáneamente al puerto olfatométrico donde se encuentra la nariz del analista “snifer” y la otra parte va hacia el detector. Durante este análisis se utilizó el Detector de Ionización de Flama (FID por sus siglas en inglés). Por otro lado, el ODP cuenta con un sistema de reconocimiento de voz que permite grabar la evaluación del panelista. Esto permitió asignar los descriptores a los picos e identificar los tiempos de retención a los cuales cada compuesto fue percibido. Las muestras fueron analizadas dos veces por cada “sniffer”. La identificación

preliminar se realizó mediante la comparación de los descriptores y sus índices de retención lineal con los reportados en base de datos.

Los índices de retención lineal para cada compuesto fueron calculados construyendo una gráfica de tiempo de retención vs índice de retención lineal para una serie de alcanos. Para esto, se utilizó una solución estándar de alcanos $C_8 - C_{20}$ (Supelco, Cat No. 04070) en hexano la cual fue analizada mediante inyección directa de 5 micro-litros en el puerto de inyección del cromatógrafo de gas. La separación de estos compuestos se llevó a cabo utilizando el mismo programa de temperatura utilizado para analizar las muestras de café. En la Figura 3 se muestra un diagrama de flujo a modo de resumen de la metodología utilizada.



Figura 3. Diagrama de flujo de la Metodología Utilizada Durante la Investigación

5. DISCUSION Y RESULTADOS

5.1 Analisis Cualitativo de Compuestos Volátiles por GC-MS

En investigaciones anteriores se han identificado más de 800 compuestos volátiles en café tostado y solamente una pequeña fracción de estos compuestos volátiles contribuye al aroma del mismo (Deibler *et al.*, 1998; Mondello *et al.*, 2005; López-Galilea *et al.*, 2006; Fisk *et al.*, 2012; González-Sánchez *et al.*, 2011; Puerta, 2011; Sunarharum *et al.*, 2014). Estos compuestos pertenecen a las familias de los pirroles, pirazinas, aldehídos, cetonas, furanos, píranos, fenoles, piridinas, lactonas y ésteres, entre otros (Deibler *et al.*, 1998; Mondello *et al.*, 2005; López-Galilea *et al.*, 2006; González-Sánchez *et al.*, 2011; Puerta, 2011; Fisk *et al.*, 2012; Sunarharum *et al.*, 2014).

La mayoría de estos compuestos han sido reportados previamente en investigaciones tanto en café puertorriqueño como en otras variedades de café de otras partes del mundo. Se ha encontrado que el aroma del café es el resultado de la combinación de diferentes factores. Estos factores se le atribuyen a la ubicación geográfica, las condiciones, climatológicas, condiciones del suelo, el proceso de la torrefacción entre otros (Deibler *et al.*, 1998; Akiyama *et al.*, 2005; Mondello *et al.*, 2005; López-Galilea *et al.*, 2006; González-Sánchez *et al.*, 2011; Fisk *et al.*, 2012; Sunarharum *et al.*, 2014).

Durante la primera parte del análisis se evaluaron las muestras de café Arábica (*Coffea arábica* L.) variedades Borbón y Caturra de 7 fincas del centro de la isla localizadas a diferentes alturas. El análisis se basó en el perfil de los compuestos volátiles que contribuyen al aroma. Se utilizó la técnica de microextracción en fase sólida (SPME) para extraer y analizar su composición química. Las muestras se analizaron por cromatografía de gas acoplada a un detector selectivo de masas (GC-MS) utilizando dos tipos de columnas capilares de diferente polaridad: columna Carbowax® y columna HP-5MS. En la Tabla 2 se observa la identificación de 56 compuestos responsables de la composición de volátiles de las variedades Borbón y Caturra para ambas zonas (Alta y Baja). Entre estos se encuentran pirroles, pirazinas, cetonas, furanos, píranos, fenoles, piridinas y lactonas (Tabla 2).

Tabla 2. Compuestos volátiles identificados en el C. arábica var. Borbón y Caturra en diferentes alturas de la isla bajo la técnica HS-SPME- GC/MS

Compuestos	Borbón		Caturra	
	Zona Alta	Zona Baja	Zona Alta	Zona Baja
Pirroles				
1-metil-1H-pirrol	X			
1-(2-furanilmetil)-1H-pirrol	X	X	X	
1H-pirrol-2-carboxaldehído	X	X	X	X
1-metil- 1H-pirrol-2-carboxaldehído	X	X	X	X
2-[N-Aziridil]metilpirrol	X			
1-(1H-pirrol-2-yl)-etanona	X	X	X	X
1-(1-metil-1Hpirrol-2-yl)-etanona	X	X	X	X
Furanos				
2,2'-bisfurano	X			
5-metilfurfural	X	X	X	X
2-furanmetanol	X	X	X	X
Acetato de furfurilo	X	X	X	X
Propionato de furfurilo			X	
3,5-dimetilfuran-2(5H)-ona	X			X
4,5-dihidro-2-metilfuran-3(2H)-ona				X
2-Metiltetrahidrofuran-3-ona	X	X	X	X
Acetato de 5-formilfurfurilo			X	
2-Acetilfurano	X	X	X	X
Furfuril metil éter	X			
Difurfuril éter	X	X		
Sulfuro de metilo furfurílico	X		X	
2-Metilfurano	X	X	X	X
3-Metilfurano	X	X	X	
2-Furaldehído	X	X	X	X
Furfurilformato	X	X		
Pirazinas				
5-metil-6,7-dihidro-(5H)-ciclopentapirazina	X			
2,5-dimetilpirazina	X	X	X	X
2,6-dimetilpirazina	X	X	X	X
2,3-dimetilpirazina	X	X	X	X
2-etil-3,5-dimetilpirazina	X	X	X	X
2-etil-3-metilpirazina	X	X	X	X
2-etil-5-metilpirazina	X	X	X	X
2-etil-6-metilpirazina	X	X	X	X
3-etil-2,5-dimetilpirazina	X	X	X	X

Tabla 2. Compuestos volátiles identificados en el C. arábica var. Borbón y Caturra en diferentes alturas de la isla bajo la técnica HS-SPME- GC/MS

Compuestos	Borbón		Caturra	
	Zona Alta	Zona Baja	Zona Alta	Zona Baja
Pirazinas				
Etenilpirazina	X			
Etilpirazina	X	X	X	X
2-metilpirazina	X	X	X	X
2,3,5-trimetilpirazina	X	X	X	X
Piridinas				
N-acetil-4(H)-piridina	X	X	X	
Piridina	X	X	X	X
1-metil-1,2,3,4-tetrahidropiridina		X		
3-etilpiridina	X			
Fenoles				
4-vinil-2-metoxifenol	X	X	X	X
2',5'-Dihidroxi-acetofenona	X			
2-metoxifenol	X	X	X	X
4-etil-2-metoxifenol	X	X	X	
Cetonas				
2-metil-5-propionilfurano	X			
2,3-pentanodiona	X	X	X	X
Damascenona	X			
1-Acetoxyacetona	X	X	X	X
1-Hidroxi-2-propanona.	X	X	X	X
4-acetilpirazol		X		
Píranos				
Dihidro-2H-piran-3(4H)-ona			X	
3-hidroxi-2-metil-4H-piran-4-ona (maltol)	X	X	X	
Lactonas				
Dihidro-2(3H)-furanona	X	X	X	X
5-heptildihidro-2(3H)-furanona	X			
Ésteres				
Propionato de etilo	X			

5.2 Análisis de las muestras Café Borbón

En las muestras de Café Borbón Zona Alta se obtuvieron un total de 50 compuestos. Entre estos se encuentran pirroles, pirazinas, cetonas, furanos, píranos, fenoles, piridinas, lactonas y ésteres. Para el café Borbón Zona Baja se obtuvieron un total de 38 compuestos: incluyendo pirroles, pirazinas, cetonas, furanos, píranos, fenoles, piridinas y lactonas (Tabla 3).

De los compuestos identificados, los de mayor número fueron las pirazinas. Este grupo está compuesto por 2,5-dimetilpirazina, 2,6-dimetilpirazina, 2,3-dimetilpirazina, 2-etil-3,5-dimetilpirazina, 2- etil-3-metilpirazina, 2- etil -5- metilpirazina, 2-etil-6-metilpirazina, 3- etil -2,5- dimetilpirazina, etilpirazina, metilpirazina y trimetilpirazina para un total de 11pirazinas.

Tabla 3. Clasificación de compuestos volátiles para café Borbón Zona Alta y Zona Baja

Clasificación	Zona Alta	Zona Baja
Pirroles	7	5
Pirazinas	13	11
Cetonas	5	4
Furanos	14	10
Píranos	1	1
Fenoles	4	3
Piridinas	3	3
Lactonas	2	1
Ésteres	1	0
Total	50	38

En la mayoría de las muestras analizadas, fueron detectadas las siguientes pirazinas: 2,5-dimetilpirazina, 2,6-dimetilpirazina, 2,3-dimetilpirazina, 2- etil-3-metilpirazina, 2- etil -5- metilpirazina, 2-etil-6-metilpirazina, etilpirazina y trimetilpirazina estuvieron presentes en casi todas las muestras analizadas. Sin embargo, 3- etil -2,5- dimetilpirazina y metilpirazina fueron identificadas en la mayoría de las muestras. Estas se identificaron en las muestras provenientes de tres fincas, localizadas entre los pueblos de Jayuya y Utuado localizadas entre 2,051, y 1,885 pies de altura. La 2-etil-3,5-dimetilpirazina fue identificada en una sola muestra, proveniente de una Finca en Adjuntas a una altura de 1,995 pies.

Según Rojas (2005), estos compuestos fueron identificados anteriormente en café de Puerto Rico, en los pueblos de: Jayuya, Adjuntas y San Sebastián a 3,000, 1,800 y 480 pies de altura, respectivamente. Los compuestos 2,5-dimetilpirazina, 2,6-dimetilpirazina, 2,3-dimetilpirazina, etilpirazina, 2-etil-6-metilpirazina, 2-etil-3,5-dimetilpirazina y metilpirazina fueron identificados en las muestras de café *C. arábica* variedades Borbón y Limaní. Además se identificaron en muestras de café *C. canephora* variedad Robusta sembrados en los pueblos de Jayuya, Adjuntas y San Sebastián a las mismas alturas.

El compuesto 3- etil -2,5- dimetilpirazina se encontró en muestras de café Borbón y Limaní en el pueblo de Jayuya a una altura de 3,000 pies y en el pueblo de San Sebastián a una altura de 480 pies (Rojas, 2005). Sin embargo, en la variedad Robusta se identificó en los tres pueblos y alturas. No se reportó en las muestras de café Borbón el 2-etil -5- metilpirazina, pero se encontró en muestras de Limaní y Robusta sembrados en los pueblos de Adjuntas Jayuya y San Sebastián (Rojas, 2005). Para trimetilpirazina se reportaron en las muestras de Borbón solamente en la zona de Adjuntas, mientras que

para las muestras de Limaní se reportaron en las tres altitudes. También fue reportado en la variedad Robusta pero solamente en la zona baja de San Sebastián. La 2- etil-3-metilpirazina sólo se ha reportado en la variedad Borbón a las alturas de San Sebastián y Jayuya mientras que en la variedad Robusta sólo se identificó en las muestras de Jayuya.

Otro compuesto que ha sido reportado previamente en café de Puerto Rico variedad Borbón zona alta es etenilpirazina. La etenilpirazina fue reportada en las muestras de Adjuntas y Jayuya, además también fueron detectados en las variedades Limaní y Robusta a las mismas alturas (Rojas, 2005). En comparación con las muestras obtenidas de nuestro análisis, la etenilpirazina también se encontró en las muestras analizadas provenientes de las fincas de Adjunta y Jayuya. Por otro lado, se identificó al 5-metil-6,7-dihidro-(5H)-ciclopentapirazina en las muestras provenientes de la Estación Experimental de Adjuntas. Este fue reportado previamente por Rojas (2005) pero en zonas bajas en las variedades Borbón y Limaní. No obstante en la variedad Robusta fue reportado en ambas zonas.

En el grupo de los furanos se identificaron un total de 10 compuestos en ambas altitudes. En la identificación de los furanos se obtuvo: 5-metil-2-furanocarboxaldehído, 2-furanometanol, acetato de furfurilo, dihidro-2-metil-3(2H)-furanona, 2-acetilfurano, difurfuril éter, 2-metilfurano, 3-metilfurano, 2-furaldehído y furfurilformato. Estos compuestos fueron identificados en las muestras que corresponden a las fincas de Adjuntas y Jayuya para café Borbón zona alta. Se encontró que el 5-metilfurfural, 2-furanometanol, 2-acetilfurano, difurfuril éter, 2-metilfurano, 2-furaldehído, furfurilformato se han reportado previamente en muestras de café *C. arábica* var. Borbón, *C. arábica* var. Limaní y *C. canephora* var. Robusta obtenidos en los pueblos de Jayuya, Adjuntas y San

Sebastián a unas alturas de 3,000, 1,800 y 480 pies respectivamente (Rojas, 2005). Sin embargo, estos compuestos sólo se identificaron en las muestras analizadas para Borbón en ambas zonas (Tabla 3) en los pueblos de Adjuntas, Jayuya y San Sebastián. Mientras que el 2-metilfurano se identificó solamente para Borbón zona alta.

Por otro lado, sólo se identificaron en la zona alta a 5-metilfurfural y 3,5-dimetilfuran-2(5H)-ona, estas sólo se identificaron en las muestras pertenecientes a Jayuya. Furfuril metil éter y sulfuro de metilo furfurílico se identificaron en las muestras pertenecientes la Estación Experimental de Adjuntas y a Jayuya.

Otros de los compuestos identificados en menor número de las muestras fueron 5 pirroles, 3 cetonas, 3 fenoles, 2 piridinas y por último 1 lactona. Entre los pirroles se encontró a 1-(2-furanilmetil)-1H-pirrol solamente en las muestras analizadas de Jayuya y en la finca de Joaquín Santiago en Adjuntas. Rojas (2005) identificó este compuesto en las variedades Borbón zona alta mientras que en Caturra y Robusta los identifico en ambas altitudes. El 1H-pirrol-2-carboxaldehído y 1-H-pirrol-2-carbox aldehído, 1-metil fueron identificados en las muestras de Adjuntas y Jayuya, coincidiendo con Rojas (2005). El 1-(1H-pirrol-2-yl)-etanona fue identificado en Adjuntas y en Jayuya, coincidiendo con Rojas, 2005. Sin embargo, 1-(1-metil-1H-pirrol-2-yl)-etanona fue identificada solamente Jayuya y en Adjuntas en la finca de Joaquín Santiago. Esta también fue identificada por Rojas, 2005 en ambas alturas. Los compuestos identificados sólo en muestras de Borbón zona alta fueron 1-metil-1H-pirrol y el 2-[N-Aziridil] metilpirrol. La 1-metil-1H-pirrol fue identificada en las tres fincas. De acuerdo a Rojas este compuesto fue identificado en las tres zonas además de estar presente en las variedades Borbón, Caturra, Limaní y Robusta. Entre las cetonas identificadas se

encuentran: 2,3-pentanodiona, 1-acetoxiacetona, 4-acetilpirazol, damascenona, 2-metil-5-propionilfurano, y 1-hidroxi-2-propanona.

La 2,3-pentanodiona, 1-acetiloxi-2-propanona, y 1-hidroxi-2-propanona fueron identificadas para ambas alturas, mientras que damascenona y 2-metil-5-propionilfurano sólo se identificaron en las muestras de zona alta y por último la 4-acetilpirazol identificada en las zonas bajas. Rojas, 2005 encontró a 2,3-pentanodiona en muestras de café Borbón, Caturra, Limaní y Robusta de ambas zonas y a damascenona, y 2-metil-5-propionilfurano, en muestras de la zona alta y baja pero sólo en las variedades Limaní y Robusta. Tanto 1-acetoxiacetona y 1-hidroxi-2-propanona que no se han reportado previamente en café de Puerto Rico, pero si se han reportado en la identificación de compuestos volátiles en café Arábica (Akiyama *et al.*, 2008; Akiyama *et al.*, 2003; Cheong *et al.*, 2013; Maeztu *et al.*, 2001; Sanz *et al.*, 2001).

Dentro de la clasificación de fenoles, el 4-vinil-2-metoxifenol se identificó en las muestras de las dos alturas. El 2-metoxifenol se identificó en las muestras de la zona alta y por último, el 4-etil-2-metoxifenol que sólo se identificó en las muestras de café provenientes del área de Jayuya. Rojas (2005) identifico el 2-metoxifenol y a 4-vinil-2-metoxifenol en las muestras de café Borbón, Limaní y Robusta sembrados en los pueblos de Adjuntas, Jayuya y San Sebastián. Pero el 4-etil-2-metoxifenol sólo se reportó en las muestras de café Robusta sembrados en el pueblo de San Sebastián donde la altura es más baja. Otro compuesto fenólico que se identificó sólo en las muestras de Borbón zona alta en los diferentes pueblos fue 2',5'-dihidroxi-acetofenona. Este también ha sido reportado anteriormente en café de Puerto Rico por Rojas (2005) en las diferentes alturas en las muestras de café Borbón, Limaní y Robusta.

Por otro lado, se obtuvieron dos piridinas el n-acetil-4(H)-piridina y piridina. Se identificó el n-acetil-4(H)-piridina en la zona alta de Borbón. Mientras que la piridina se identificó en las tres fincas de zona alta de igual manera esto sucedió en las muestras de café Borbón zona baja. En adición se pudo identificar a 3-etilpiridina sólo en las muestras de café zona alta en Jayuya. Esto coincide con las investigación de Rojas, 2005 en la cual se encontraron estas piridinas en las zonas altas y bajas de las fincas de San Sebastián, Adjuntas y Jayuya.

Los compuestos presentes en menor cantidades incluyeron 1 pirano, y 1 lactona. El pirano, maltol, fue identificado en las fincas de la Estación Experimental y en Jayuya. Según Rojas (2005), fue identificado sólo en las muestras que corresponden a los pueblos de Adjuntas y Jayuya en las variedades Borbón y Limaní coincidiendo con el análisis de esta investigación. La dihidro-2(3H)-furanona y fue identificada en las muestras de Adjuntas y Jayuya. Según Rojas (2005), la dihidro-2(3H)-furanona fue identificada en las zonas de Adjuntas, Jayuya y San Sebastián en las variedades de café Borbón, Caturra, Limaní y Robusta.

Otra lactona identificada en las muestras de café Borbón zona alta fue 5-heptildihidro-2(3H)-furanona la cual se identificó en una sola de las muestras en el café proveniente de la zona de la Estación Experimental de Adjuntas. Rojas 2005 la identificó en las variedades Borbón, Caturra y Limaní en las zonas de San Sebastián y Adjuntas. Finalmente el único éster que se identificó en las muestras de Borbón fue el propionato de etilo, en zona alta. Este compuesto no ha sido reportado previamente en muestras de café puertorriqueño, pero si en investigaciones anteriores de aroma en café (Kipkorir et al., 2015).

En términos generales se puede apreciar que en las muestra de café Borbón analizadas de la zona baja, la finca localizada a menor altitud presentó una mayor cantidad de compuestos que las muestras procedentes de las finca con mayor altura (Tabla 4). Para las muestras de zona baja, se identificaron un total de 38 compuestos volátiles en la finca de Audeliz Padua mientras que para la finca de Rubén Ramírez se identificaron un total de 32 compuestos a 518 y 574 pies de altura respectivamente. Por otro lado, las muestras de café de la zona alta mostraron lo opuesto a las muestras de la zona baja. Ya que a mayor altitud más cantidad de compuestos se identificaron. El resultado fue que las muestra provenientes de Jayuya obtuvieron un total de 44 compuestos, seguido por la Estación Experimental de Adjuntas con 39 compuestos y en último lugar la finca de Joaquim Santiago con 37 compuestos a unas alturas de 2,051, 1,995 y 1,885 pies altura respectivamente.

En términos de porcentaje, el grupo que obtuvo el mayor porcentaje que los otros compuestos fue el de los furanos. Estos obtuvieron un porcentaje mayor en ambas zonas con un 28.0 % en la zona alta y con 26.3 % en las zona baja. Luego le siguen las pirazinas con un 28.9% en las muestras de zona baja y 26.0% en la zona alta. Los pirroles y las cetonas mostraron entre 14.0 % y 10 % respectivamente. Los fenoles y piridinas representaron el 8% y el 7 % . Lactonas, píranos y ésteres representaron los compuestos minoritarios presentes en ambas alturas con menos de un 4.0%. Comparando estas resultados se puede observar que existe diferencia entre las alturas y la composición química del café Borbón.

Tabla 4. Compuestos encontrados en el café Borbón zona alta y baja en las distintas altitudes.

Compuestos	Borbón Zona Alta			Borbón Zona Baja	
	Jayuya	Adjuntas	Adjuntas	San Sebastián	San Sebastián
	1 2,051 pies	2 1,995 pies	3 1,885 pies	5 574 pies	6 518 pies
Pirroles	6	5	6	5	5
Pirazinas	11	13	10	10	11
Cetonas	4	4	3	3	4
Furanos	13	9	11	8	10
Píranos	1	1	1	1	1
Fenoles	4	3	3	3	3
Piridinas	3	2	2	2	3
Lactonas	1	2	1	1	1
Esteres	1	0	0	0	0
Total	44	39	37	33	38

No obstante, el café de la zona alta contiene compuestos de la familia de los esterres que no se identificaron en las muestras de la zona baja. Por otro lado, se identificaron dos compuestos que no se detectaron las muestras de Borbón zona alta la piridina, 1-metil-1, 2, 3,4-tetrahidropiridina y el 4-acetilpirazol. Ninguna de ellas se ha reportado previamente en muestras de café. Sin embargo, el 4-acetilpirazol ha sido reportada en muestras de “berryactus” bayas de cactus, aportando descriptores aromáticos a fenol, tostado, café (Vázquez-Cruz *et al.*, 2012).

Tabla 5. Compuestos Identificados en Café Arábica Variedad Borbón en Zonas Alta y Baja Reportados Previamente

Compuestos	Zona Alta	Zona Baja	Reportados Previamente
Pirazinas			
5-metil-6,7-dihidro-(5H)-ciclopentapirazina	X		7,20,23,21
2,5-dimetilpirazina	X		2,3,4,5,7,8,13,15,14,18,20,21,22
2,6-dimetilpirazina	X	X	3,4,5,7,8,22,13,15,14,16,21
2,3-dimetilpirazina	X		3,14,5, 7,12,13,8,15,18,19,21,22
2-etil-3,5-dimetilpirazina	X	X	1,19,2,23,4,5,21,9,11,13,16,20,22
2-etil-3-metilpirazina	X		7,13,14,21,22
2-etil-5-metilpirazina	X	X	3,4,5,7,8,13,22, 15,21
2-etil-6-metilpirazina	X	X	2,13,12,3,5,7,8,15,18,21,22
3-etil-2,5-dimetilpirazina	X	X	4,5,7,20,21,11
2-metilpirazina	X	X	2,3,4,5,7,8,12,16,15,21,22, 13,14
2,3,5-trimetilpirazina	X	X	1,21,15,6,8,23,9,11,16,18
Etilpirazina	X	X	3,4,13,5,16,8,22,15,12,14,18,20,21
Furanos			
5-metilfurfural	X		2,3,4,5,7,12,14,13,15,16,18,20,21,21,22
2-furanmetanol	X		16,2,3,4,5,7,8,12,15,14,18,21,22,
Acetato de furfurilo	X		2,3,4,5,7,8,12,15,14,18,21,22,
Propionato de furfurilo	X	X	3,5,21
3,5-dimetilfuran-2(5H)-ona	X		5
2-Metiltetrahidrofuran-3-ona	X		3,4,5,7,22,8,15,20,13,30
Acetato de 5-formilfurfurilo	X	X	24, 25,26,27,28
2-acetilfurano	X	X	2,3,5,8,13,14,15,22,21
Sulfuro de metilo furfurílico	X	X	8,7,13,22
3-metilfurano	X		7,22
2-furaldehído	X	X	2,21,22,5,8,11,13,14,15,16,18,20,23
2,2'-bisfurano	X		7,12,16,18,21

Tabla 5. Compuestos Identificados en Café Arábica Variedad Borbón en Zonas Alta y Baja Reportados Previamente (cont.).

Compuestos	Zona Alta	Zona Baja	Reportados Previamente
Furfuril metil éter	X		3,7,21,22,20
Difurfuril éter	X	X	3,5,8,21
Furfurilformato	X	X	2,3,5,7,8,12,14, 18,20,21,22
Pirroles			
1-metil-1H-pirrol	X		1,3,4,5,7,12,14,15,22,20,21
1-(2-furanilmetil)-1H-pirrol	X	X	4,5,7,13,12,22,21,21
1H-pirrol-2-carboxaldehído	X	X	2,3,4,5,8,14,15,21,
1-metil- 1H-pirrol-2-carboxaldehído	X	X	2,4,5,7,13,14,15, 18,21,22
1-(1H-pirrol-2-yl)-etanona	X	X	2,3,8,13,14,15,16,18,21,24
1-(1-metil-1Hpirrol-2-yl)-etanona	X	X	7,8,14,15,16, 18,21
Cetonas			
2,3-pentanodiona	X	X	1,2,4,5,7,8,11, 12,13,14,18, 19,20,21,22,23
1-acetoxiacetona	X	X	8,22
1-hidroxi-2-propanona	X	X	4,5,7,8, 22,
Damascenona	X		17,23,20,2,5,19,6,9, 10,13,21
Fenoles			
4-vinil-2-metoxifenol	X	X	1,2,3,4,5,6,9,8,10,13,15,16, 17,18,19,20,21,23
2-metoxifenol	X	X	11,8,129,2,3,13,4,14,15,57,18,19,20,23,21,22
4-etil-2-metoxifenol	X	X	2,3,5,6,8,9,10,13,16,17,18,19,20,23, 21
Piridinas			
Piridina	X	X	1.2.3.4.5,7,8,12,13,14,15,16,20,21,22
N-acetil-4(H)-piridina	X	X	14,21
3-etilpiridina	X		5,12,14,16,18,21,22
Píranos			
Maltol		X	8,11,15,18,21

Tabla 5. Compuestos Identificados en Café Arábica Variedad Borbón en Zonas Alta y Baja Reportados Previamente (*cont.*).

Lactonas			
Dihidro-2(3H)-furanona	X	X	7,14,15,8,22,18,21
5-heptildihidro-2(3H)-furanona	X		3,4,5,7,22,8,15,20,13,30

(1) Baggenstoss *et al.*, 2008, (2) Akiyama *et al.* 2007, (3) Akiyama *et al.*, 2005, (4) Akiyama *et al.*, 2003, (5) Akiyama *et al.*, 2008, (6) Buffo & Cardelli-Freire, 2004, (7) Sanz *et al.*,2001, (8) Cheong *et al.*, 2013, (9) Deibler *et al.*,1998, (10) Peralta, 2011, (11) Fisk *et al.*, 2012, (12) González *et al.*, 2011, (13) López-Galilea *et al.*, 2006, (14) Mondello *et al.*, 2005, (15) Moon & Shibamoto, 2009, (16) Ortega *et al.*, 2007, (17) Puerta, 2011, (18) Ribeiro *et al.*,2012, (19) Semmelroch & Grosch, 1995, (20) Sunarharum *et al.*,2014, (21) Rojas, 2005, (22) Maeztu *et al.*, 2001, (23) Clarke & Vitzthum, 2008, (24) Vazquez-Cruz *et al.*, 2012, (25) Muratore *et al.*, 2006, (26) Hillmann *et al.*, 2012, (27) Guerrero *et al.*, 2007, (28) Pereira *et al.*, 2011, (29) Conde *et al.*,2009, (30) Roberts *et al.*, 2000.

Tabla 6. Clasificación de Compuestos Encontrados en el Café Borbón Zona Alta y Baja Expresadas en Porciento.

Compuestos	Borbón Zona Alta	Borbón Zona Baja
Pirroles	14.0	13.2
Pirazinas	26.0	28.9
Cetonas	10.0	10.5
Furanos	28.0	26.3
Píranos	2.0	2.6
Fenoles	8.0	7.9
Piridinas	6.0	7.9
Lactonas	4.0	2.6
Esteres	2.0	0.0
Total	100.0	99.9

5.3 Analisis de las muestras Café Caturra

Las muestras de café analizadas para la zona alta fueron recolectadas en las fincas de Estación Experimental Agrícola localizada en Adjuntas, en la finca de Fito Serrano (Adjuntas) y en el pueblo de Jayuya a 1,985, 1,935 y 1,730 pies de altura respectivamente. Las muestras de la zona baja fueron recolectadas en la finca de Martín Olavarría en San Sebastián a 580 pies de altura (Tabla 7).

Tabla 7. Compuestos encontrados en el café Caturra zona alta y baja en las distintas altitudes.

Compuestos	Caturra Zona Alta			Caturra Zona Baja
	Adjuntas 2 1,985 pies	Adjuntas 4 1,935 pies	Jayuya 1 1,730 pies	San Sebastián 7 580 pies
Pirroles	5	4	5	4
Pirazinas	11	9	10	11
Cetonas	3	3	3	3
Furanos	10	6	8	9
Píranos	2	1	1	1
Fenoles	3	2	3	2
Piridinas	1	1	2	1
Lactonas	1	0	1	1
Total	38	26	33	32

En las muestras de Café Caturra Zona Alta se obtuvo un total máximo de 38 compuestos entre estos se encuentran: pirroles, pirazinas, cetonas, furanos, píranos, fenoles, piridinas y lactonas. Mientras que para el café Caturra Zona Baja se obtuvo un total de 32 compuestos como se muestra en la tabla 7.

De los 56 compuestos identificados en las variedades de café Borbón y Caturra a diferentes alturas; sólo 30 compuestos fueron identificados en común en ambas zonas para la variedad Caturra. De los compuestos identificados, los de mayor número fueron las pirazinas y los furanos seguido por los pirroles, cetonas, fenoles, píranos, piridinas y lactonas. Dejando así sólo ocho compuestos característicos de la zona alta. Mientras que la zona baja contó solamente con dos compuestos.

En investigaciones anteriores de café puertorriqueño, se han reportado todas las pirazinas a excepción de 2- etil -5- metilpirazina y 2- etil-3-metilpirazina en las variedades Borbón, Caturra, Limaní y Robusta sembrados en zona alta y baja. 2- etil -5- metilpirazina si se ha reportado en café Caturra, Limaní y Robusta sembrados en zona alta y baja (Rojas, 2005). Mientras que 2- etil-3-metilpirazina sólo se ha reportado en la variedad Borbón y Robusta (Rojas, 2005).

Tabla 8. Clasificación de compuestos volátiles para café Caturra Zona Alta y Zona Baja

Compuestos	Caturra Zona Baja	Caturra Zona Alta
Pirazinas	11	11
Furanos	9	11
Pirroles	4	5
Cetonas	3	3
Fenoles	2	3
Piranos	1	2
Piridinas	1	2
Lactonas	1	1
Total	32	38

De la familia de los furanos se encontró, que 5-metilfurfural, acetato de furfurilo, 2-metiltetrahidrofuran-3-ona, 2-furanmetanol y 2-furaldehído estuvieron presentes en las muestras realizadas por en las diferentes alturas, y fueron los compuestos identificados en mayor número de muestras. Los furanos 5-metilfurfural, 2-furanometanol, y 2-furaldehído se han reportado en café *C. arábica* variedades Borbón, Caturra, Limaní y *C. canephora* variedad Robusta sembrados en zonas altas y bajas del centro de la isla. Mientras que el acetato de furfurilo se localizó en las mismas condiciones a excepción de la variedad Robusta (Rojas, 2005). El 2-metiltetrahidrofuran-3-ona, no se ha reportado previamente en café en Puerto Rico pero si en otras partes del mundo (Akiyama *et al.*, 2008; Akiyama *et al.*, 2003; Akiyama *et al.*, 2005; Cheong *et al.*, 2013; López-Galilea *et al.*, 2006; Maeztu *et al.*, 2001; Moon & Shibamoto, 2009; Roberts *et al.*, 2000; Sanz *et al.*, 2001; Sunarharum *et al.*, 2014). (Tabla 9).

El 2-acetilfurano y 2-metilfurano se hallaron en las diferentes altitudes y también han sido reportadas en variedades Borbón, Caturra, Limaní y Robusta de Puerto Rico (Rojas, 2005). Se han reportado que 5-metilfurfural, 2-furanometanol, 2-acetilfurano, 2-metilfurano y 2-furaldehído en muestras de café Borbón, Caturra, Limaní y Robusta sembrados en zonas altas y bajas en café puertorriqueño (Rojas, 2005). El acetato de furfurilo se reportó en muestras de café Borbón, Caturra, Limaní en zonas altas y bajas (Rojas, 2005).

También fueron identificados el propionato de furfurilo, sulfuro de metilo furfurílico y el 3-metilfuran. Estos son los furanos que se encuentran en menor cantidad de muestras y sólo se identificaron en las muestras provenientes de la Estación Experimental Agrícola de Adjuntas. Estos compuestos podrían ser característicos de esta zona en particular. Por otro lado, el propionato de furfurilo ha sido previamente reportado en muestras de café arábica puertorriqueño zonas altas y bajas, en áreas similares en las variedades Borbón y Caturra.

Tabla 9. Compuestos identificados en café arábica variedad Caturra en zonas alta y baja reportados previamente.

Compuestos	Zona Alta	Zona Baja	Reportados Previamente
Pirazinas			
2,5-dimetilpirazina	X	X	2,3,4,5,7,8,13,15,14,18,20,21,22
2,6-dimetilpirazina	X	X	3,4,5,7,8,22,13,15,14,16,21
2,3-dimetilpirazina	X	X	3,14,5, 7,12,13,8,15,18,19,21,22
2-etil-3,5-dimetilpirazina	X	X	1,19,2,23,4,5,21,9,11,13,16,20,22
2-etil-3-metilpirazina	X	X	7,13,14,21,22
2-etil-5-metilpirazina	X	X	3,4,5,7,8,13,22, 15,21
2-etil-6-metilpirazina	X	X	2,13,12357815,18,21,22
3-etil-2,5-dimetilpirazina	X	X	4,5,7,20,21,11
Etilpirazina	X	X	3,4,13,5,16,8,22,15,12,14,18,20,21
2-metilpirazina	X	X	2,3,4,5,7,8,12,16,15,21,22, 13,14
2,3,5-trimetilpirazina	X	X	1,21,15,6,8,23,9,11,16,18
Furanos			
5-metilfurfural	X	X	2,3,4,5,7,12,14,13,15,16,18,20,21,21,22
2-furanmetanol	X	X	16,2,3,4,5,7,8,12,15,14,18,21,22,
Propionato de furfurilo		X	3,5,21
3,5-dimetilfuran-2(5H)-ona	X		5
4,5-dihidro-2-metilfuran-3(2H)-ona	X		24, 25,26,27,28
Acetato de furfurilo	X	X	2.34578,21,22,13,15,16,20,18
2-metilfuran	X	X	7,22
2-metiltetrahidrofuran-3-ona	X	X	3,4,5,7,22,8,15,20,13,30
Acetato de 5-formilfurfurilo		X	25,24,26,27,28
2-Acetilfurano	X	X	2,3,5,8,13,14,15,22,21
Sulfuro de metilo furfurílico		X	8,7,13,22
3-metilfuran		X	7,22
2-furaldehído	X	X	2,21,22,5,8,11,13,14,15,16,18,20,23

Tabla 9. Compuestos identificados en café arábica variedad Caturra en zonas alta y baja reportados previamente (*cont.*).

Compuestos	Zona	Zona	Reportados Previamente
	Alta	Baja	
Cetonas			
2,3-pentanodiona	X	X	1,2,4,5,7,8,11, 12,13,14,18,19,20,21,22,23
1-acetoxiacetona	X	X	8,22
1-hidroxi-2-propanona	X	X	4,5,7,8, 22,
Fenoles			
4-vinil-2-metoxifenol	X	X	1,2,3,4,5,6,9,8,10,13,15,16, 17,18,19,20,21,23
2-metoxifenol	X	X	11,8,12,9,2,3,13,4,14,15,57,18,19,20,23,21,22
4-etil-2-metoxifenol	X		2,3,5,6,8,9,10,13,16,17,18,19,20,23, 21
Piridinas			
N-acetil-4(H)-piridina	X		14,21
Piridina	X	X	1.2.3.4.5,7,8,12,13,14,15,16,20,21,22
Píranos			
3-hidroxi-2-metil-4H-piran-4-ona (maltol)	X	X	8,11,15,18,21
Lactonas			
Dihidro-2(3H)-furanona	X	X	7,14,15,8,22,18,21

(1) Baggenstoss *et al.*, 2008; (2) Akiyama *et al.* 2007; (3) Akiyama *et al.*, 2005; (4) Akiyama *et al.*, 2003; (5) Akiyama *et al.*, 2008; (6) Buffo & Cardelli-Freire; 2004, (7) Sanz *et al.*,2001; (8) Cheong *et al.*, 2013; (9) Deibler *et al.*,1998; (10) Peralta, 2011; (11) Fisk *et al.*, 2012; (12) González *et al.*, 2011; (13) López-Galilea *et al.*, 2006; (14) Mondello *et al.*, 2005; (15) Moon & Shibamoto, 2009; (16) Ortega *et al.*, 2007; (17) Puerta, 2011; (18) Ribeiro *et al.*,2012; (19) Semmelroch & Grosch, 1995; (20) Sunarharum *et al.*,2014; (21) Rojas, 2005; (22) Maeztu *et al.*, 2001; (23) Clarke & Vitzthum, 2008; (24) Vazquez-Cruz *et al.*, 2012; (25) Muratore *et al.*,2006; (26) Hillmann *et al.*, 2012; (27) Guerrero *et al.*, 2007; (28) Pereira *et al.*, 2011; (29) Conde *et al.*,2009; (30) Roberts *et al.*, 2000.

El sulfuro de metilo furfurílico y 3-metilfuran han sido reportados en café arábica de otras partes del mundo (Cheong *et al.*, 2013; López-Galilea *et al.*, 2006; Maeztu *et al.*, 2001;

Sanz *et al.*, 2001). Para las 3,5-dimetilfuran-2(5H)-ona y 4,5-dihidro-2-metilfuran-3(2H)-ona sólo se identificaron en las muestras de Caturra zona baja y aún no han sido reportadas. Por último tenemos al acetato de 5-formilfurfurilo, el cual, fue identificado por en las muestras provenientes del área de Jayuya.

Este compuesto no ha sido reportado en café anteriormente y según Muratore *et al.*, 2006 es indicativo de actividad microbiana. Sin embargo, ha sido reportado en investigaciones relacionadas a frutas, vinagres y vinagre balsámico (Guerrero *et al.*, 2007; Hillmann *et al.*, 2012; Pereira *et al.*, 2011).

Por el grupo de los pirroles se encontró que 1H-pirrol-2-carboxaldehído, 1-H-pirrol-2-carbox aldehído, 1-metil,1-(1H-pirrol-2-yl)-etanona y 1-(1-metil-1H pirrol-2-yl)-etanona fueron identificados tanto en la zona alta y baja. Todas estas fueron identificadas en la zona alta a excepción de 1-(1-metil-1Hpirrol-2-yl)-etanona que fue detectada en ambas zonas. La 1-(2-furanilmetil)-1H-pirrol sólo se identificó en las muestras de caturra zona alta. Todos estos pirroles han sido previamente reportadas en muestras de café puertorriqueño en zonas altas y bajas en las variedades Borbón, Caturra, Limaní y Robusta, con la excepción de 1-(1-metil-1Hpirrol-2-yl)-etanona que no fue identificada en la variedad Limaní (Rojas, 2005).

Posteriormente, se encontraron los pirroles, 1H-pirrol-2-carboxaldehído, 1-metil- 1H-pirrol-2-carboxaldehído, 1-(1H-pirrol-2-yl)-etanona, 1-(1-metil-1Hpirrol-2-yl)-etanona en ambas zonas. En la zona alta tenemos que 1-(2-furanilmetil)-1H-pirrol y 1-(1H-pirrol-2-yl)-etanona fueron detectadas en las diferentes alturas. Y por último, la 1-(1-metil-1Hpirrol-2-yl)-etanona sólo se identificó en las muestras analizadas de la Estación Experimental en Adjuntas y en Jayuya.

Según (Rojas, 2005), todos estos compuestos han sido reportados previamente en café puertorriqueño.

Por el grupo de las cetonas, se encuentran la 2,3-pentanodiona, 1-acetoxyacetona y 1-hidroxi-2-propanona. Se puede observar que no hay diferencias, ya que las muestras presentaron el mismo comportamiento en ambas zonas. La 2,3-pentanodiona fue detectada tanto en zona alta y baja mientras que 1-acetoxyacetona se identificó en la Estación Experimental en Adjuntas y en Jayuya. De todas las cetonas sólo la 2,3-pentanodiona ha sido reportado previamente en muestras de muestras de café Borbón, Caturra, Limaní y Robusta a diferentes altitudes del centro de la isla (Rojas, 2005) En los fenoles, se identificó en ambas zonas a 4-vinil-2-metoxifenol y 2-metoxifenol. El 4-etil-2-metoxifenol sólo se observó en el café de zona alta en las muestras provenientes de la Estación Experimental en Adjuntas y de Jayuya. Además, ha sido reportado previamente en muestras de café Borbón, Caturra, Limaní y Robusta a diferentes altitudes del centro de la isla al igual que el 2-metoxifenol (Rojas, 2005). Mientras que en la variedad Robusta el 4-etil-2-metoxifenol sólo se ha reportado en los cafés sembrados en el pueblo de San Sebastián (Rojas, 2005). Otros compuestos de importancia en el perfil aromático del café y que representan la minoría en las muestras analizadas lo son las piridinas, píranos y lactonas. Por las piridinas encontramos que para ambas zonas se identificó a piridina en ambas zonas. En la zona alta se identificó a n-acetil-4(H)-piridina, solamente en las muestras provenientes de Jayuya. Por los píranos tenemos a maltol en ambas zonas y a dihidro-2H-piran-3(4H)-ona en la zona alta. Finalmente para las lactonas, se encontró que dihidro-2(3H)-furanona, se identificó en ambas zonas. Todos los compuestos antes mencionados, han sido previamente reportados en muestras de café puertorriqueño variedades Borbón, Caturra, Limaní y Robusta en zonas altas y bajas de la isla a excepción del dihidro-2H-piran-3(4H)-ona (ver tabla 9).

En resumen podemos decir que no se observaron diferencias en las muestras analizadas por ambas alturas. Tenemos que para la zona baja se obtuvo un porcentaje mayor de pirazinas, cetonas y lactonas mientras que para los píranos y piridinas se mantuvieron igual. En la zona alta se obtuvieron más grupos de compuestos en mayor porcentaje que los de zona baja (Ver Tabla 10). Esto también se debe a que la zona alta estuvo compuesta de tres fincas diferentes mientras que en la zona baja sólo se tomaron muestras de una sola finca, limitando una comparación equitativa entre diferentes ambientes dentro de esa zona.

Tabla 10. Clasificación de compuestos encontrados en el café Caturra zona alta y baja expresadas en porciento.

Compuestos	Zona Alta	Zona Baja
Pirazinas	28.9 %	34.4 %
Furanos	28.9 %	28.1 %
Pirroles	13.2 %	12.5 %
Cetonas	7.9 %	9.4 %
Fenoles	7.9 %	6.3 %
Píranos	5.3 %	3.1 %
Piridinas	5.3 %	3.1 %
Lactonas	2.6 %	3.1 %

5.4 Análisis Cualitativo de las muestras de GC-O

El olor y el aroma forman un papel importante en nuestro diario vivir, debido a que estos están directamente relacionados a nuestras emociones y recuerdos (Bartsch *et al.*, 2016). En investigaciones anteriores, se ha demostrado que hay diversidad de aromas y no se pueden clasificar o identificar tan fácilmente, además de que sólo una fracción limitada de componentes volátiles contribuye al aroma de un compuesto (Aceña *et al.*, 2011). En muchas ocasiones, se utilizan descriptores para poder identificar o clasificar esos aromas, mientras que otras veces se utilizan cualidades para poder describir los olores que se perciben (Aceña, 2011). Hoy en día el análisis del aroma nos ayuda en la creación de nuevos productos que puedan cumplir con las exigencias de los consumidores. Para este tipo de análisis se han desarrollado instrumentos que analizan como si fueran catadores, pero de manera rápida y objetiva como lo es la nariz electrónica (Aceña, 2011). Aunque hay otro tipo de instrumentos que ayuda de forma más directa a los humanos para que estos mismos puedan ser los catadores como lo es el Olfatometro.

La cromatografía de gases acoplada a olfatometría está basada en la evaluación sensorial de los compuestos químicos que eluyen de la columna cromatográfica para determinar cuáles son aromáticamente activos, utilizando como detector la (Aceña, 2011) nariz de una persona adecuadamente entrenada para que perciba y describa la intensidad aromática de los compuestos (Aceña, 2011).

Actualmente, no existen estudios anteriores para identificar los aromas del café en Puerto Rico por esta técnica. Sin embargo, si se han realizado estudios en otras partes del mundo a muestras de café molido y su infusión (Akiyama *et al.*, 2008; Akiyama *et al.*, 2007; Akiyama *et al.*, 2003, 2005; Deibler *et al.*, 1998; Fisk *et al.*, 2012; López-Galilea *et al.*, 2006; Maeztu *et al.*, 2001; Mayer & Grosch, 2001; Mondello *et al.*, 2005; Sanz *et al.*, 2001; Semmelroch & Grosch,

1995). Durante más de un siglo, se han realizado varias investigaciones para determinar los componentes presentes en el aroma del café (Grosch, 1998). Muchos de los volátiles son el producto de las reacciones a las que son sometidas las muestras de café y son un factor importante para determinar la calidad del mismo (Sunarharum *et al.*, 2014).

Durante nuestra investigación por Olfatometria se evaluaron las muestras de café Arábica *Coffea arábica L.* variedades Borbón y Caturra de 7 fincas a diferentes alturas del centro de la isla. El análisis se basó en la descripción de los aromas percibidos en el puerto de olfateo. Se utilizó la técnica de microextracción en fase sólida (SPME) para extraer la composición química. Las muestras se analizaron por cromatografía de gas acoplada a un detector FID y a un olfatómetro (GC-O) utilizando la Columna HP-5MS. Se identificaron 19 compuestos de las variedades Borbón y Caturra Zona Alta y Zona Baja.

5.5 Analisis de las muestras Café Borbón por MS

En las muestras de Café Borbón Zona Alta se obtuvo un total de 11 compuestos entre estos se encuentran: cetonas, furanos, piridinas, lactonas y aldehídos. Mientras que para el café Borbón Zona Baja se obtuvo un total de 16 compuestos: pirroles, pirazinas, cetonas, furanos, fenoles, piridinas, lactonas entre otros (Tabla 11).

De los 19 compuestos sólo 9 fueron identificados en ambas zonas. De los compuestos identificados, los de mayor número fueron los furanos. Este grupo está compuesto por un total de 8 furanos que representan un 50 % de los compuestos de las muestras de café Borbón zona baja y el 54.5 % en las de zona alta.

Tabla: 11. Clasificación de compuestos volátiles para café Borbón Zona Alta y Zona Baja

Compuestos	Zona Alta	Zona Baja
Pirroles	0	1
Pirazinas	0	1
Cetonas	2	2
Furanos	6	8
Fenoles	0	1
Piridinas	1	1
Lactona	1	1
Aldehídos	1	0
Otros	0	1
Total	11	16

En el grupo de las cetonas se identificaron un total de 2 compuestos en ambas altitudes, formando un 12.5 % en las muestras de zona baja y un 18.2 % en la alta. El grupo compuesto de piridinas y las lactonas obtuvieron un 9.1 y 6.3 % en la zona alta y baja, respectivamente. Los aldehídos sólo fueron identificados en la zona alta representando un 9 %. Otros compuestos representaron un 6.25%. Los pirroles, pirazinas y fenoles no fueron identificados en la zona alta pero obtuvieron un 6% en la zona baja, como se muestra en las Figuras 4 y 5.

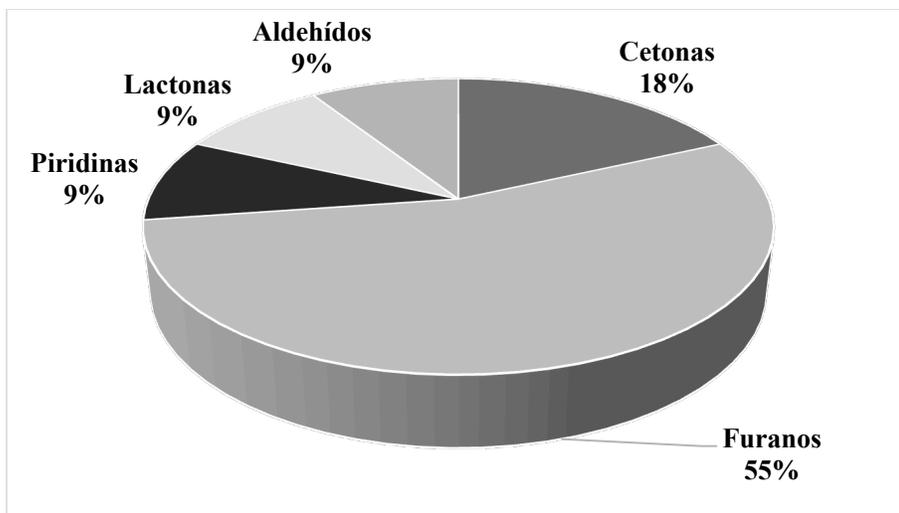


Figura 4. Compuestos Encontrados en el Café Borbón Zona Alta Expresadas en Porciento

Se puede apreciar que la zona alta presenta menor cantidad de compuestos en comparación a la zona baja (Figura 4 y 5). Esto puede deberse a la diferencia en las zonas que fueron plantadas, el tratamiento de los árboles, condiciones climatológicas entre otras.

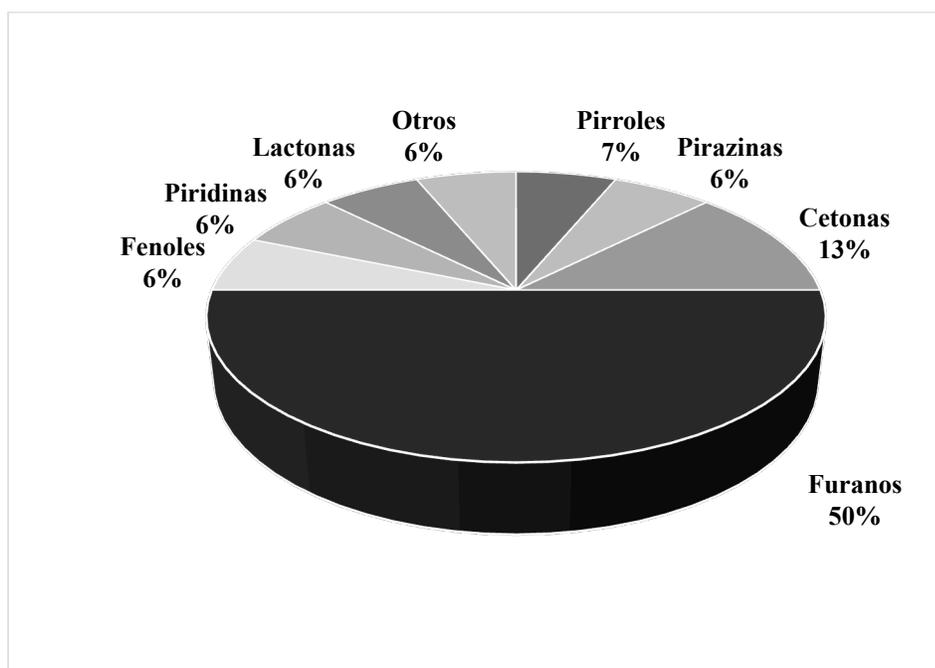


Figura 5. Compuestos Encontrados en el Café Borbón Zona Baja Expresadas en Porciento

5.6 Analisis de las muestras Café Caturra por MS

En las muestras de Café Caturra zona alta se obtuvo un total de 10 compuestos. Entre estos se encuentran: cetonas, furanos, piridinas y lactonas. Para el café Caturra zona baja se obtuvo un total de 9 compuestos como se muestra en la Tabla 12.

Tabla 12. Clasificación de Compuestos Volátiles para Café Caturra Zona Alta y Zona Baja

Compuestos	Zona Alta	Zona Baja
Pirroles	0	1
Cetonas	1	1
Furanos	7	6
Piridinas	0	1
Lactona	1	1
Total	9	10

De los compuestos identificados, los de mayor número fueron los furanos. Este grupo está compuesto por un total de 7 furanos que representan un 60 % de los compuestos de las muestras de café Caturra zona baja y el 77.8% en las de zona alta Figuras 6 y 7.

En el grupo de las cetonas y las lactonas se identificó solamente un compuesto en ambas altitudes formando un 10.0% en las muestras de zona baja y un 11.0 % en la alta. El grupo de pirroles se encontró en un 10% para las muestras de zona baja y no se identificaron en las muestras de zona alta. Lo mismo sucedió con las piridinas las cuales obtuvieron un 10 % en la zona baja como se muestra en las Figuras 6 y 7.

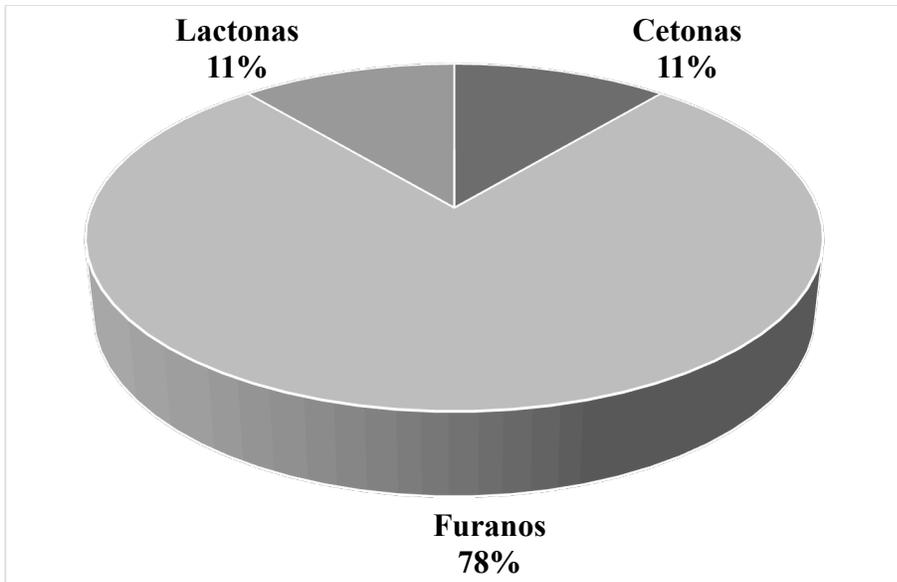


Figura 6. Compuestos Encontrados en el Café Caturra Zona Alta Expresadas en Porciento

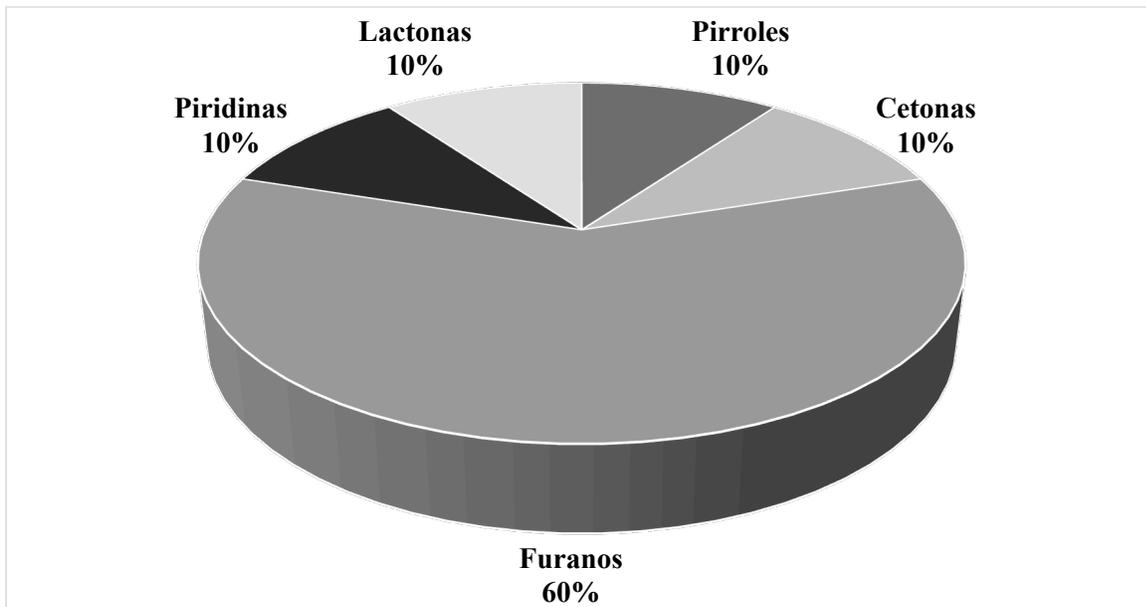


Figura 7. Compuestos Encontrados en el Café Caturra Zona Alta Expresadas en Porciento

Se puede apreciar que la zona alta presenta menor cantidad de compuestos en comparación a la zona baja. Esto puede deberse a la diferencia en las zonas que fueron plantadas, el tratamiento de los árboles, condiciones climatológicas, entre otras. Por otro lado, se puede apreciar que para ambas variedades Borbón y Caturra la zona alta presenta menor cantidad de compuestos en comparación a la zona baja. Otro factor a considerar es que en las muestras de café Borbón obtuvieron más familias de compuestos que en la variedad Caturra.

5.7 Análisis de las muestras Café Borbón por GC/O

En la parte de olfatometría se analizaron las muestras con la ayuda de tres olfateadores previamente entrenados para describir la percepción de las mismas. De todos los compuestos con actividad aromática hay algunos que proporcionan una esencia característica. A estos compuestos se les denominan como clave “key” o con carácter de impacto. Estos compuestos son los que tienen el valor más significativo pero esto implica que se encuentren en mayor concentración (Aceña, 2011; Buffo *et al.*, 2004; Maeztu *et al.*, 2001; Sunarharum *et al.*, 2014).

Luego de olfatear las muestras, se calculó el Linear Retention Index (LRI) y finalmente se verificó el LRI con dos bases de datos: la Kovats y la University of Florida. Se identificó que los odorantes más potentes presentes en las muestras de café Borbón zona alta están constituidos por tres tipos de descriptores: en primer lugar se encuentran las notas herbáceas y verdes con un 38.9 %, seguidas de las notas dulces que constituyen un 30.6%, y finalmente las notas tostadas o quemadas con un 19.4 %. La fracción minoritaria de los descriptores estuvo compuesta de los aromas frutales, cítricos, terrosos o húmedos y los refrescantes. Estos contaron con un 2.78 % para cada uno de los descriptores.

En las muestras de café Borbón bajo predominan las notas herbáceas y verdes con un 50.0 %. Seguidas de las notas dulces con un 21.4 % y las terrosas o húmedas con un 14.30 % (Ver Figura 9). Sólo dos grupos obtuvieron la menor representación en las muestras. La primera de ellas fueron las notas tostadas con un 7.10 % y el otro grupo estuvo compuesto por las muestras que no pudieron ser identificadas utilizando las bases de datos que también representan un 7.10 % (Ver Figura 8). La Tabla 5 y 6 en el Apéndice muestran los descriptores de aromas que utilizaron los olfateadores para describir las muestras de café Borbón zona alta y zona baja.

Por otro lado, las muestras de café de la zona baja no presentaron aromas frutales, cítricos ni refrescantes como en las muestras de la zona alta, como nos presenta la Figura 8

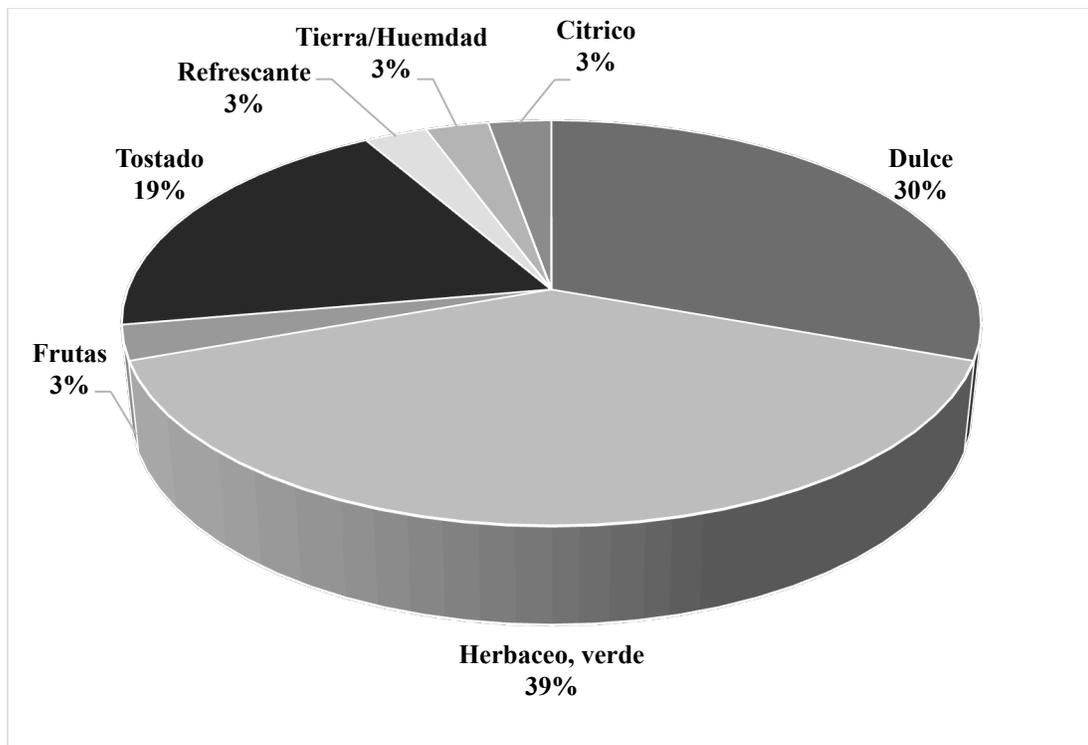


Figura 8. Descriptores Identificados en el Café Borbón Zona Alta Expresadas en Porcentaje

Podemos concluir que, según lo reportado para ambas alturas, los compuestos predominantes son los de las notas herbáceas y las dulces o caramelizadas. Mientras que en las muestras de la zona alta hay más descriptores con tendencias a tostados y en la baja predominan las terrosas.

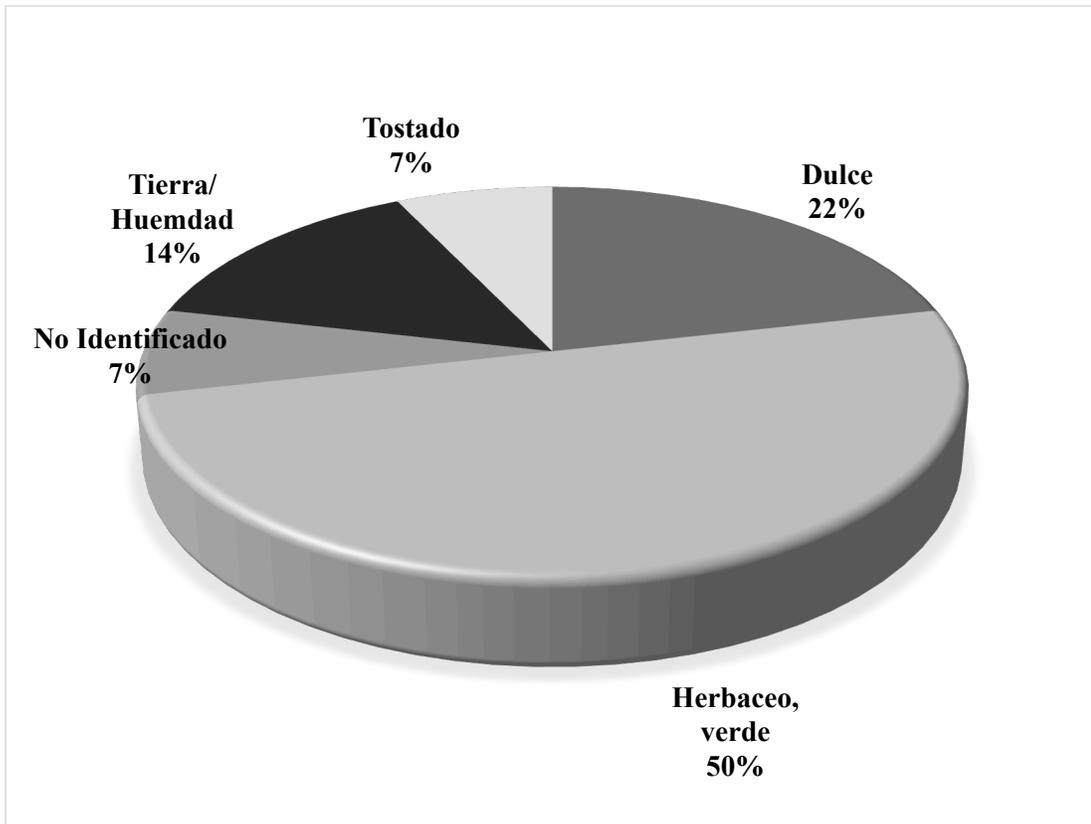


Figura 9. Descriptores Identificados en el Café Borbón Zona Baja Expresadas en Por ciento.

5.8 Análisis de las muestras Café Caturra por GC/O

Se identificó que los odorantes más potentes presentes en las muestras de café Caturra zona alta están constituidos por notas fuertes, pungentes, olor a especias, verde, vegetal, dulce, floral, frutal y tostado. Los tipos de descriptores que predominaron fueron las notas herbáceas y dulces que constituyen un 38.3 % y 23.4 %, respectivamente. El 17.0 % no pudo identificarse utilizando la base de datos. Seguidas de las notas terrosas o húmedos y las florales con un 8.5 %

y 4.3 %, respectivamente. La minoría estuvo representada por los descriptores refrescantes, rancios, tostados y frutales con un 2.1 % para cada uno de ellos. Mientras que en la zona baja predominan las notas fuertes, pungentes, a especias, verde y vegetales que constituyen un 42.6 %. Seguidos por los aromas dulce o caramelo y los no identificados representando un 18.0 % y 14.8 %, respectivamente. Las notas frutales 8.2% seguida de las terrosas o húmedas con un 3.3% y por ultimo las notas tostadas, cítricas, rancias y grasosas con un 1.6 % para cada una de ellas (Ver Figuras 10 y 11).

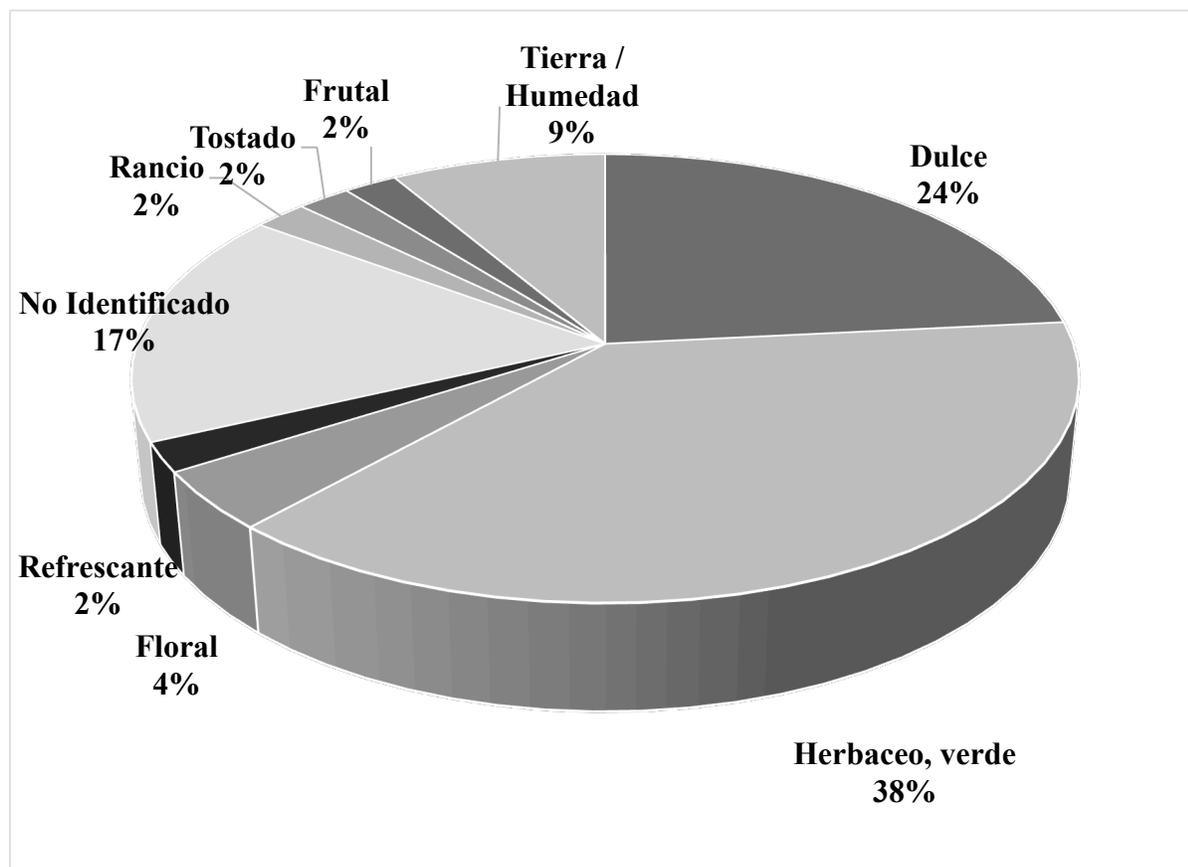


Figura 10. Descriptores Identificados en el Café Caturra Zona Alta Expresadas en Porcentaje

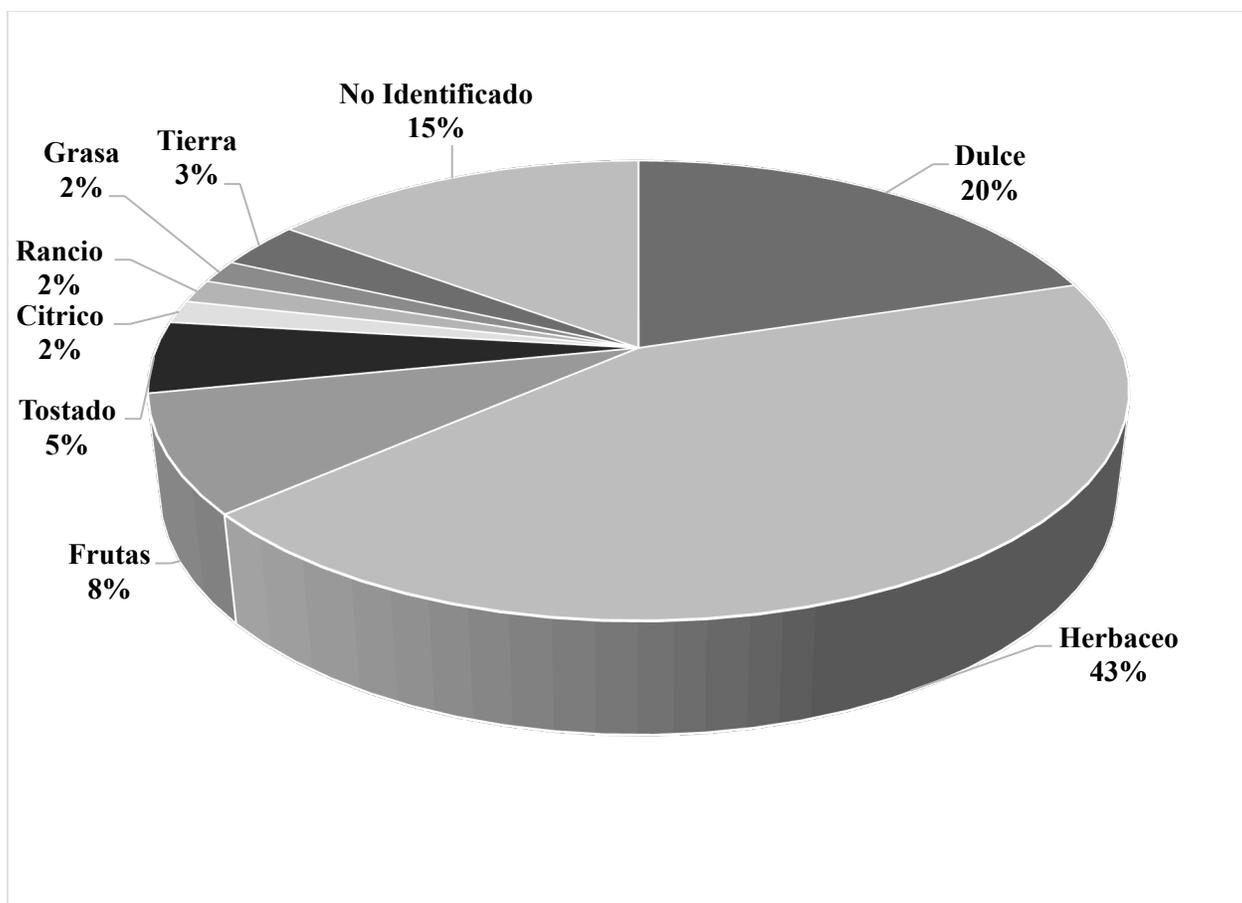


Figura 11. Descriptores Identificados en el Café Caturra Zona Baja Expresadas en Porcentaje

Por otro lado, las muestras de café de la zona baja no presentaron aromas florales ni refrescantes como las muestras de la zona alta. Por último, podemos decir que según nuestro análisis olfatométrico se observó que las muestras de café zona baja variedad Caturra obtuvieron el mayor número de compuestos identificados por los olfateadores, luego le sigue el café de zona alta de la variedad Caturra. Mientras que para las muestras de café variedad Borbón, el que presenta más descriptores es el de zona alta y finalmente la zona baja. En ambas variedades se observa que en ambas alturas son cinco los descriptores que predominan son los herbáceos, en segundo lugar las notas de carácter dulce, las notas tostadas, terrosas y por último las notas

frutales. Debemos mencionar que hubo algunos de los descriptores que no pudieron ser identificados por medio del LRI, ya que las bases de datos utilizadas no nos proporcionaron un descriptor compatible con la descripción de la muestra analizada como se muestra en la Tabla 8 del Apéndice, en donde se muestran los descriptores de las muestras analizadas en ambas alturas. Estas muestras corresponden a los cafés de altura de ambas variedades.

Los descriptores que se encuentran en menor cantidad lo fueron las notas grasas y rancias que sólo fueron identificadas en las muestras de café Caturra zona baja. Para las muestras de café Borbón no se identificaron notas grasas, rancias ni florales. Finalmente las dos notas que fueron identificadas sólo en una de las variedades lo fueron las notas florales identificadas en las muestras de café Caturra zona alta. Las notas cítricas fueron identificadas solamente las muestras de café Borbón zona alta y Caturra zona baja como se muestra en la Tabla 13.

Tabla 13 Número de Descriptores Identificados en el Café Borbón y Caturra en Ambas Alturas.

Descriptores	Borbón		Caturra	
	Zona Alta	Zona Baja	Zona Alta	Zona Baja
Herbáceo, Vegetal	14	14	18	30
Dulce, Caramelo	11	6	11	11
Frutas	1	0	1	5
Tostado, Horneado	7	2	1	1
Cítrico	1	0	0	1
Rancio	0	0	1	1
Graso	0	0	0	1
Terrosos/ Húmedos	1	4	4	2
Floral	0	0	2	0
No Identificado	0	2	0	9
Total	35	28	38	61

5.9 Impresiones del aroma de algunas familias de compuestos volátiles responsables del aroma del café tostado y molido.

Debido a que los olores presentan distintas intensidades aromáticas una sustancia puede exhibir varios olores dependiendo de su contenido en el café (Puerta, 2011). Cabe mencionar que esta investigación, está directamente relacionada con la parte psicológica de cada olfateador (Aceña, 2011; Bartsch *et al.*, 2016; Brattoli *et al.*, 2011), y es cada uno de ellos el que le otorga la descripción de acuerdo a su nivel de percepción o “umbral de percepción”, parte afectiva, emocional y su memoria, según la persona asocie el aroma que eluye por el puerto de olfateo. Resultando en una interpretación subjetiva de cada individuo y cada persona es capaz de interpretar y describir de una manera distinta un mismo aroma. En algunos casos estas interpretaciones pueden causar emociones tales como náuseas o repulsión, mientras que otros aromas pueden causar o dar la sensación de hambre o algún antojo. Por tal razón, minimizamos la subjetividad de los panelistas utilizando un vocabulario general para identificar los aromas y la intensidad de los mismos.

Como los aromas que percibimos pertenecen a una matriz compleja hay que tener en cuenta las interacciones que ha tenido la matriz como, por ejemplo, algunas reacciones que se pueden llevar a cabo durante su almacenamiento o la forma en la cual estos compuestos son extraídos de la matriz. Sin embargo, no podemos ignorar el hecho de que muchos de los grupos o familias con actividad aromática expiden un olor parecido a diferentes concentraciones, pH, polaridad presencia de oxígeno o cambios en temperaturas (Aceña, 2011), creando confusiones a la hora de clasificar o identificar las mismas.

Según estudios anteriores se ha reportado que las pirazinas contribuyen al aroma de alimentos cocinados y al aroma del café (Clarke & Vitzthum, 2008; Sanz, Ansorena, Bello, & Cid, 2001). Entre sus descriptores se encuentran las notas tostadas, terrosas, mohosas, leñosas, herbales, maíz dulce, amargo, maní tostado, pimentón, guisantes verdes, arveja, pimienta, chocolate, galleta, nuez, graso, maíz, alquitrán, paprika, rancio y quemado (Akiyama *et al.*, 2005; Cheong *et al.*, 2013; Clarke & Vitzthum, 2008; González *et al.*, 2011; Goodner & Rouseff, 2011; López-Galilea *et al.*, 2006; Maeztu *et al.*, 2001; Ortega, *et al.*, 2007; Puerta, 2011; Sanz *et al.*, 2001; Rojas, 2005).

Para los pirroles se han reportado descriptores de aroma a dulce, maíz, cereal, aceite, medicinal, setas comestibles, grasa, nueces, setas, quemado, ahumado, humo y pan horneado (Cheong *et al.*, 2013; Goodner & Rouseff, 2011; Kipkorir *et al.* 2015; Puerta, 2011; Rojas, 2005). Aunque hay estudios que reportan que los pirroles suelen proporcionar efectos negativos al café ya que pueden ofrecer aromas parecidos a hongos y humo (Goodner & Rouseff, 2011; Kipkorir *et al.*, 2015). Además, los pirroles se consideran de poca importancia en sabores porque son demasiado inestables para fines de uso comercial (Goodner & Rouseff, 2011; Kipkorir *et al.*, 2015).

Las cetonas son muy volátiles y descritas con notas a hongos, manteca, moho, fruta, caramelo, fruta cocinada, rosas, mantequilla, dulce, frambuesa, miel, manzana cocida, floral, grasa, rancio, madera, jarabe de arce y jarabe de arce (González *et al.*, 2011; Goodner & Rouseff, 2011; López-Galilea *et al.*, 2006; Puerta, 2011; Rojas, 2005). En el caso de la 2,3-pentanediona se percibe frecuentemente en las bebidas o infusiones de café mientras que 1-octen-3-ona en el café de beneficiado con descriptor específico de setas (López-Galilea *et al.*, 2006).

Los compuestos derivados de los furanos son conocidos sus características de sabor dulce y caramelo (Moon & Shibamoto, 2009). Se ha reportado que estos compuestos son formados de la reacción entre un azúcar y un aminoácido a temperaturas elevadas, lo que sugiere que la composición de los granos de café es una matriz ideal para la formación de los mismos (Moon & Shibamoto, 2009). Por otro lado, los furanos imparten notas con olor a quemado, caramelo o azúcar quemada, hierba, heno, aromas etéreos (flores, árboles, frutos, hierbas, especias, semillas), cuero, pan, acetona, chocolate, tierra, aceite, mohoso, almendra, ahumado, astringente y café tostado (González *et al.*, 2011; Moon & Shibamoto, 2009; Puerta, 2011; Rojas, 2005; Sanz *et al.*, 2001). Los fenoles se asocian con el aroma al tabaco, ahumado, fenólico, quemado, caucho astringente, amargo, picante, terroso, madera, medicina, clavo y especias (Puerta, 2011; Rojas, 2005; Sanz *et al.*, 2001).

Las piridinas presentan un olor fuerte pero en ocasiones presenta un agradable a quemado/ahumado en dilución extrema, además fue uno de los primeros aromas reportados en café en 1946 (Moon & Shibamoto, 2009). Según, Rojas (2005), estas aumentan según el nivel de tostado, y se encuentran en mayores cantidades bajo condiciones similares en las variedades de café arábica que en los cafés de la especie Robusta. También, muestran aromas con notas ahumadas, amargo, astringente, caramelo, mantequilla, verde desagradable, hierbas verdes, tabaco, tostados, nauseabundo, fuerte y a tierra (Cheong *et al.*, 2013; Moon & Shibamoto, 2009; Puerta, 2011; Rojas, 2005; Sanz *et al.*, 2001).

Las lactonas han sido reportadas desde la década de 1960 y desde entonces se han detectado constantemente entre los compuestos volátiles del café. La dihidro-2(3H)-furanona y sus derivados poseen sabores y aromas a mantequilla, coco, melocotón nuez, dulce, especia,

quemado, grasa. Por sus cualidades, estos compuestos han sido ampliamente utilizados para la elaboración de saborizantes y perfumes (Moon & Shibamoto, 2009; Puerta, 2011).

Otra de las familias presentes en el aroma del café es la de los aldehídos. Estos proporcionan notas aromáticas descritas como chocolate, madera, pepino, grasa frita, rosa, miel, Jacinto, frutas cítricas, fermentado, malta, vinoso, papa cocida, manteca, vainilla, picante, quemado, tostado, rancio , dulce, herbal, frutas y flores (González *et al.*, 2011; Puerta, 2011; Rojas ,2005). Finalmente los esterres, estos presentan notas frutales, dulces, grasa, rancio, irritante y flora (Puerta, 2011).

5.10 Factores a considerar para los aromas en las muestras de café

La búsqueda de las identidades de los compuestos, nos lleva a la relación que existe entre el aroma y la percepción de calidad que esperan los consumidores (Aceña, 2011). Los consumidores esperan obtener un café de alta calidad. Este café debe ser inocuo y con sabores y aromas agradables (Puerta, 2011). Como hemos mencionado anteriormente, debemos tener en cuenta que el número y la concentración de los compuestos responsables del aroma y sabor del café dependerán de la especie, ubicación geográfica, las condiciones climatológicas, condiciones del suelo, madurez, el tipo de beneficiado, pH, el grado de tueste y las condiciones de fermentación, secado y almacenamiento (Deibler *et al.*, 1998; Akiyama *et al.*, 2005; Mondello *et al.*, 2005; López-Galilea *et al.*, 2006; González-Sánchez *et al.*, 2011; Fisk *et al.*, 2012; Puerta, 2011; Sunarharum *et al.*, 2014) .

En caso de identificar olores objetables o anómalos en las muestras de café no necesariamente significa que son producto de la percepción del panelista u olfateador. Aunque no podemos decir exactamente cuál es la causa de la presencia de estos olores objetables si

sabemos que pueden ser causados por defectos en el grano del café como lo son bacterias, moho, hongos, daño por insectos o animales, contaminación con sustancias químicas, granos inmaduros, fermentación no controlada o degradación en el beneficio, utilización de ingredientes inapropiados, contaminación (a través del aire, del agua, por interacción con los materiales del envasado), por reacciones químicas que tienen lugar en el propio alimento (oxidaciones, pardeamientos no enzimáticos, cambio en las concentraciones de una o más sustancias, reacciones inducidas por la luz, etc.), o por el mismo proceso natural de deterioro del producto, no sólo durante el procesado, sino también durante el envasado y el almacenamiento. Todo esto nos lleva a la pérdida y degradación de los aromas y de compuestos impacto (Aceña, 2011; Roberts *et al.*, 2000; Puerta, 2011)

Sin embargo, debemos de mencionar que, aunque no se hayan identificado en esta investigación, hay otros compuestos que pueden estar presentes en las muestras de café, como lo son los compuestos azufrados. Entre sus descriptores se encuentran los olores fuertes, azufre, papa cocida, putrefacto, café tostado, cebolla, caramelo, vegetales verdes, nuez, café tostado envejecido, descompuesto, animal, carne asada cereal y col. Otro grupo son las aminas con descriptores picantes, penetrante, descompuesto, pescado, amoníaco y desagradables. En los alcoholes se describen notas florales, ligeramente cítrico, dulce, frutal, mohoso, tierra, tostado, verde, herbal, rancio. Para los ácidos notas descriptivas de queso, vinagre, dulce, rancio, floral, mentolado, frutal, verde herbal, grasa, rancio, mohoso, terroso. Los hidrocarburos con descriptores de olor fétido, petróleo, tabaco, manteca, terroso, madera Finalmente los oxasoles con descriptores a almendra, leguminosas, dulce, avellana, tierra, papa, verde (Puerta, 2011; Rojas, 2005).

La dificultad en las investigaciones relacionadas a los compuestos volátiles se asocia a la complejidad de la matriz y la diversidad de estos aromas, además del esfuerzo exhaustivo de los olfateadores en la evaluación y análisis de las muestras.

6. CONCLUSIÓN

Las muestras de café analizadas para cada una de las variedades y alturas mostraron diferencias entre ellas en términos de composición química. Además, se demostró que hay algunos compuestos que están presentes más en una variedad que en otras pero la altura no es un factor determinante en el desarrollo de los compuestos volátiles de los mismos. Sin embargo, debemos tener en cuenta que además de la altura, existen otros factores que pueden influenciar la composición química del café tales como: el origen de procedencia, la torrefacción y el almacenamiento. Estos pueden alterar su composición de una manera tanto positiva o negativa, dando paso a la formación de aromas o reacciones que alteran sus propiedades organolépticas.

Respecto a los porcentajes de los compuestos encontrados en ambas variedades, podemos decir que los furanos, pirroles, cetonas y pirazinas fueron los compuestos con mayor representación en las variedades de cafés analizadas. Además, se pudo demostrar que en las variedades Borbón y Caturra, hay la presencia de compuestos previamente reportados en estudios de café puertorriqueño de otras variedades.

Por otro lado, respecto a la olfatometría podemos decir que se pudo observar como estos descriptores de los olfateadores se acercan a los valores calculados para la determinación del Índice Lineal de Retención (LRI). Esta relación confirma que la nariz humana sigue siendo uno de los mejores métodos, ya que actúa como un detector sensible, cuyos límites de detección para algunos volátiles son difíciles de igualar con los instrumentos analíticos.

Sin embargo este tipo de análisis es de carácter subjetivo, ya que cada panelista puede otorgar una descripción deferente al compuesto percibido de acuerdo a su umbral de percepción o su capacidad de interpretar el mismo. Las muestras analizadas por el Olfatometro presentaron

en su mayoría notas pungentes, herbáceas, vegetales y pimentases, seguidas de las notas un poco más dulces y frutales.

Finalmente, pudimos observar como la técnica de GC/O nos ayuda a identificar los aromas de indeseados en nuestro producto final como lo fue el caso de los olores herbáceos que son característicos de los granos que no alcanzan completamente su grado de madurez. Estos aromas objetables pueden surgir en cualquier parte del proceso desde la recolección de café hasta su recolección distribución. En adición la técnica de GC/O demuestra la importancia que tiene las buenas prácticas agrícolas y el manejo adecuado durante los demás procesos.

7. RECOMENDACIONES

- Utilizar otro tipo de detector selectivo que sea sensible a compuestos azufrados y nitrogenados.
- Analizar muestras de distintos puntos de la isla y diferentes alturas.
- Analizar diferentes grados de tueste de los granos de café.
- Realizar un análisis sensorial para determinar los compuestos de aceptación para los consumidores.
- Analizar diferentes variedades y especies de café.
- Confirmar los compuestos volátiles con actividad aromática en las variedades de café analizadas.
- Tener un mayor número de panelistas para realizar el análisis olfatométrico.
- Analizar por olfatometría el extracto del café colado y comparar con las muestras del café molido o utilizar otras técnicas de extracción de compuestos volátiles.

8. LITERATURA CITADA

- Aceña, L. (2011). *Aplicación de la Cromatografía de Gases-Olfatometría en la Caracterización del Aroma del Vinagre de Vino, de los Pistachos y del Aceite de Oliva*. Universitat Rovira I Virgili Tarragona, España.
- Aceña, L., Vera, L., Guasch, J., Busto, O., & Mestres, M. (2010). Comparative study of two extraction techniques to obtain representative aroma extracts for being analysed by gas chromatography–olfactometry: Application to roasted pistachio aroma. *Journal of Chromatography A*, 1217(49), 7781–7787. <http://doi.org/10.1016/j.chroma.2010.10.030>
- Aceña, L., Vera, L., Guasch, J., Busto, O., & Mestres, M. (2011). Determination of Roasted Pistachio (Pistacia vera L .) Key Odorants by Headspace Solid-Phase Microextraction and Gas Chromatography - Olfactometry(1) Ace, L.; Vera, L.; Guasch, J.; Busto, O. Determination of Roasted Pistachio (Pistacia vera L .) Key Odo, 2518–2523.
- Akiyama, M., Murakami, K., Hirano, Y., Ikeda, M., Iwatsuki, K., Wada, A., Iwabuchi, H. (2008). Characterization of Headspace Aroma Compounds of Freshly Brewed Arabica Coffees and Studies on a Characteristic Aroma Compound of Ethiopian Coffee. *Journal of Food Science*, 73(5), C335–C346. <http://doi.org/10.1111/j.1750-3841.2008.00752.x>
- Akiyama, M., Murakami, K., Ikeda, M., Iwatsuki, K., Kokubo, S., Wada, A., Tanaka, K. (2005). Characterization of Flavor Compounds Released During Grinding of Roasted Robusta Coffee Beans. *Food Science and Technology Research*, 11, 298–307. <http://doi.org/10.3136/fstr.11.298>
- Akiyama, M., Murakami, K., Ikeda, M., Iwatsuki, K., Wada, a, Tokuno, K., Iwabuchi, H. (2007). Analysis of the headspace volatiles of freshly brewed arabica coffee using solid-phase microextraction. *Journal of Food Science*, 72(7), C388-96. <http://doi.org/10.1111/j.1750-3841.2007.00447.x>
- Akiyama, M., Murakami, K., Ohtani, N., Iwatsuki, K., Sotoyama, K., Wada, A., Tanaka, K. (2003). Analysis of volatile compounds released during the grinding of roasted coffee beans using solid-phase microextraction. *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, 51(7), 1961–1969. <http://doi.org/10.1021/jf020724p>
- Avilés, I. (2009). *Fijación Biológica de Nitrógeno y Agrosistemas de Producción de Café (Coffea Arabica L .) en Puerto Rico*. M.S. Tesis Universidad de Puerto Rico , RUM.
- Baggenstoss, J., Poisson, L., Kaegi, R., Perren, R., & Escher, F. (2008). Roasting and Aroma Formation : Effect of Initial Moisture Content and Steam Treatment, 5847–5851.
- Bartsch, J., Uhde, E., & Salthammer, T. (2016). Analysis of odour compounds from scented consumer products using gas chromatography-mass spectrometry and gas chromatography-olfactometry. *Analytica Chimica Acta*, 904, 98–106. <http://doi.org/10.1016/j.aca.2015.11.031>

- Bertrand, B., Villarreal, D., Laffargue, A., Posada, H., Lashermes, P., & Dussert, S. (2008). Comparison of the Effectiveness of Fatty Acids, Chlorogenic Acids, and Elements for the Chemometric Discrimination of Coffee (*Coffea arabica* L.) Varieties and Growing Origins, 2273–2280.
- Bhumiratana, N., Adhikari, K., & Chambers, E. (2011). Evolution of sensory aroma attributes from coffee beans to brewed coffee. *LWT - Food Science and Technology*, 44(10), 2185–2192. <http://doi.org/10.1016/j.lwt.2011.07.001>
- Bigger, M. (2007). The Basics of the Coffee Crop The Origins of Coffee (pp. 3–16).
- Borkhataria, R., Collazo, J. a., Groom, M. J., & Jordan-Garcia, A. (2012). Shade-grown coffee in Puerto Rico: Opportunities to preserve biodiversity while reinvigorating a struggling agricultural commodity. *Agriculture, Ecosystems and Environment*, 149, 164–170. <http://doi.org/10.1016/j.agee.2010.12.023>
- Brattoli, M., De Gennaro, G., De Pinto, V., Demarinis Loiotile, A., Lovascio, S., & Penza, M. (2011). Odour Detection Methods: Olfactometry and Chemical Sensors. *Sensors*, 11, 5290–5322. <http://doi.org/10.3390/s110505290>
- Buffo, R. a., & Cardelli-Freire, C. (2004). Coffee flavour: An overview. *Flavour and Fragrance Journal*, 19(February), 99–104. <http://doi.org/10.1002/ffj.1325>
- Bustillo, A. (2006). Una revisión sobre la broca del café, *hypothenemus hampei* (coleoptera: Curculionidae: Scolytinae), en Colombia. *Revista Colombiana de Entomología*, 32(2), 101–116.
- Cheong, M. W., Tong, K. H., Ong, J. J. M., Liu, S. Q., Curran, P., & Yu, B. (2013). Volatile composition and antioxidant capacity of Arabica coffee. *Food Research International*, 51(1), 388–396. <http://doi.org/10.1016/j.foodres.2012.12.058>
- Chin, S. T., & Marriott, P. J. (2014). Review of the role and methodology of high resolution approaches in aroma analysis. *Analytica Chimica Acta*, 854, 1–12. <http://doi.org/10.1016/j.aca.2014.06.029>
- Clarke, R., & Vitzthum, O. (2008). *Coffee, Recent Developments*. Retrieved from http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/cbdv.200490137/abstract%5Cnhttp://books.google.com/books?hl=en&lr=&id=jIFY_Pz8LH0C&oi=fnd&pg=PR3&dq=Coffee,+Recent+Developments&ots=OzLuZonu1E&sig=B1sd-zWWTHn_upQMXl0QR48ozz0
- Conde, E., Cara, C., Moure, A., Ruiz, E., Castro, E., & Domínguez, H. (2009). Antioxidant activity of the phenolic compounds released by hydrothermal treatments of olive tree pruning. *Food Chemistry*, 114(3), 806–812. <http://doi.org/10.1016/j.foodchem.2008.10.017>
- Crews, C., & Castle, L. (2007). A review of the occurrence, formation and analysis of furan in heat-processed foods. *Trends in Food Science and Technology*, 18, 365–372. <http://doi.org/10.1016/j.tifs.2007.03.006>
- Cristancho, M., Escobar, C., & Dickson, J. (2007). Evolución de razas de *Hemileia vastatrix* en Colombia. *Cenicafé*, 58(4), 340–359. Retrieved from [http://www.cenicafe.org/es/publications/arc058\(04\)340-359.pdf](http://www.cenicafe.org/es/publications/arc058(04)340-359.pdf)

- d'Acampora Zellner, B., Dugo, P., Dugo, G., & Mondello, L. (2008). Gas chromatography-olfactometry in food flavour analysis. *Journal of Chromatography A*, 1186(1–2), 123–143. <http://doi.org/10.1016/j.chroma.2007.09.006>
- Deibler, K. D., Acree, T. E., & Lavin, E. H. (1998). Aroma analysis of coffee brew by gas chromatography-olfactometry. *Developments in Food Science*, 40, 69–78. [http://doi.org/10.1016/S0167-4501\(98\)80033-2](http://doi.org/10.1016/S0167-4501(98)80033-2)
- Delahunty, C., Eyres, G., & Dufour, J.-P. (2006, September). Gas chromatography-olfactometry.
- Díaz, E. (2014). *Evaluación de Diferentes Variedades de Mango (Mangifera Indica L.) y la Obtención de una Esencia*. MS thesis. University of Puerto Rico, Mayagüez.
- El-Abassy, R. M., Donfack, P., & Materny, A. (2011). Discrimination between Arabica and Robusta green coffee using visible micro Raman spectroscopy and chemometric analysis. *Food Chemistry*, 126(3), 1443–1448. <http://doi.org/10.1016/j.foodchem.2010.11.132>
- Firestein, S. (2001). How the olfactory system makes sense of scents. *Nature*, 413(6852), 211–218. <http://doi.org/10.1038/35093026>
- Fisk, I. D., Kettle, A., Hofmeister, S., Virdie, A., & Silanes Kenny, J. (2012). Discrimination of roast and ground coffee aroma. *Flavour*, 1, 14. <http://doi.org/10.1186/2044-7248-1-14>
- Flament, I. (2002). *Coffee Flavor Chemistry*.
- Frisullo, P., Laverse, J., Barnabà, M., Navarini, L., & Del Nobile, M. a. (2012). Coffee beans microstructural changes induced by cultivation processing: An X-ray microtomographic investigation. *Journal of Food Engineering*, 109(1), 175–181. <http://doi.org/10.1016/j.jfoodeng.2011.09.015>
- Gonzalez, H., Gonzalez, S., & Rosales, T. (2011). Café (Coffea Arabica L.): Compuestos Volátiles Relacionados con el Aroma y Sabor. *Unacar Tecnociencia*, 5(151), 35–45.
- González, O. (2013). *Dinámica Poblacional de la Broca del Café Hypothenemus Hampei (Ferrari) y sus Enemigos Naturales en el Cultivo De Café Coffea Arabica L. En Puerto Rico*. MS thesis. University of Puerto Rico, Mayagüez.
- Goodner, K., & Rouseff, R. (2011). *Practical Analysis of Flavor and Fragrance Materials. Practical Analysis of Flavor and Fragrance Materials*. <http://doi.org/10.1002/9781444343137>
- Guerrero, E. D., Marín, R. N., Mejías, R. C., & Barroso, C. G. (2007). Stir bar sorptive extraction of volatile compounds in vinegar: Validation study and comparison with solid phase microextraction. *Journal of Chromatography A*, 1167(1), 18–26. <http://doi.org/10.1016/j.chroma.2007.08.039>
- Gutiérrez, M. C., & Drognet, M. (2002). La cromatografía de gases y la espectrometría de masas: Identificación de compuestos causantes de mal olor. *Boletín Intexter Del Instituto de Investigación Textil Y de Cooperación Industrial*, 35–41.

- Hillmann, H., Mattes, J., Brockhoff, A., Dunkel, A., Meyerhof, W., & Hofmann, T. (2012). Sensomics analysis of taste compounds in balsamic vinegar and discovery of 5-acetoxymethyl-2-furaldehyde as a novel sweet taste modulator. *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, *60*(40), 9974–9990. <http://doi.org/10.1021/jf3033705>
- Jackson, D., Skillman, J., & Vandermeer, J. (2012). Indirect biological control of the coffee leaf rust, *Hemileia vastatrix*, by the entomogenous fungus *Lecanicillium lecanii* in a complex coffee agroecosystem. *Biological Control*, *61*(1), 89–97. <http://doi.org/10.1016/j.biocontrol.2012.01.004>
- Kipkorir, R., Muhoho, S., Muliro, P., Mugendi, B., & Broedel, M. F. O. (2015). Effects of Coffee Processing Technologies on Aroma Profiles and Sensory Quality of Ruiru 11 and SL 28 Kenyan Coffee Varieties, *3*(2), 178–188.
- Kwon, D.-J., Jeong, H.-J., Moon, H., Kim, H.-N., Cho, J.-H., Lee, J.-E., Hong, Y.-S. (2015). Assessment of green coffee bean metabolites dependent on coffee quality using a 1H NMR-based metabolomics approach. *Food Research International*, *67*, 175–182. <http://doi.org/10.1016/j.foodres.2014.11.010>
- Lara, L. D. (2005). *Efectos de la altitud, sombra, producción y fertilización sobre la calidad del café (Coffea arabica L. var. Caturra) producido en sistemas agroforestales de la zona cafetalera norcentral de Nicaragua*. Turrialba, Costa Rica.
- Lemogne, C., Smadja, J., Zerdazi, E.-H., Soudry, Y., Robin, M., Berthoz, S., Bonfils, P. (2015). Congenital anosmia and emotion recognition: A case-control study. *Neuropsychologia*, *72*, 52–58. <http://doi.org/10.1016/j.neuropsychologia.2015.04.028>
- Liu, Y., & Kitts, D. D. (2011). Confirmation that the Maillard reaction is the principle contributor to the antioxidant capacity of coffee brews. *Food Research International*, *44*(8), 2418–2424. <http://doi.org/10.1016/j.foodres.2010.12.037>
- López-Galilea, I., Fournier, N., Cid, C., & Guichard, E. (2006). Changes in headspace volatile concentrations of coffee brews caused by the roasting process and the brewing procedure. *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, *54*, 8560–8566. <http://doi.org/10.1021/jf061178t>
- Maeztu, L., Sanz, C., Andueza, S., Paz De Peña, M., Bello, J., & Cid, C. (2001). Characterization of espresso coffee aroma by static headspace GC-MS and sensory flavor profile. *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, *49*(11), 5437–5444. <http://doi.org/10.1021/jf0107959>
- Mayer, F., & Grosch, W. (2001). Aroma simulation on the basis of the odourant composition of roasted coffee headspace. *Flavour and Fragrance Journal*, *16*(3), 180–190. <http://doi.org/10.1002/ffj.975>
- Mondello, L., Costa, R., Tranchida, P. Q., Dugo, P., Lo Presti, M., Festa, S., Dugo, G. (2005). Reliable characterization of coffee bean aroma profiles by automated headspace solid phase microextraction-gas chromatography-mass spectrometry with the support of a dual-filter mass spectra library. *Journal of Separation Science*, *28*(9–10), 1101–1109. <http://doi.org/10.1002/jssc.200500026>

- Moon, J. K., & Shibamoto, T. (2009). Role of roasting conditions in the profile of volatile flavor chemicals formed from coffee beans. *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, 57(200 mL), 5823–5831. <http://doi.org/10.1021/jf901136e>
- Muratore, G., Licciardello, F., Restuccia, C., Puglisi, M. L., & Giudici, P. (2006). Role of different factors affecting the formation of 5-hydroxymethyl-2-furancarboxaldehyde in heated grape must. *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, 54(3), 860–3. <http://doi.org/10.1021/jf051786t>
- Olguín, L. P., & Rodríguez, H. (2004). *Metodos en biotecnología. Instituto de biotecnología.*
- Ortega, A. G., Borges, P., & Roncal, E. (2007). Caracterización de Componentes Volátiles en Extractos de Café, 17(2), 54–60.
- Peralta, A. (2011). IV. Revisión del Estudio de Volátiles en Café (Coffea Arabica) por Microextracción en Fase Sólida. *Africa*.
- Pereira, J., Pereira, J., & Câmara, J. S. (2011). Effectiveness of different solid-phase microextraction fibres for differentiation of selected Madeira island fruits based on their volatile metabolite profile - Identification of novel compounds. *Talanta*, 83(3), 899–906. <http://doi.org/10.1016/j.talanta.2010.10.064>
- Peterson, S. W., Pérez, J., Vega, F. E., & Infante, F. (2003). *Penicillium brocae*, a new species associated with the coffee berry borer in Chiapas, Mexico. *Mycologia*, 95(1), 141–7. <http://doi.org/10.2307/3761973>
- Petronilho, S., Coimbra, M. a., & Rocha, S. M. (2014). A critical review on extraction techniques and gas chromatography based determination of grapevine derived sesquiterpenes. *Analytica Chimica Acta*, 846, 8–35. <http://doi.org/10.1016/j.aca.2014.05.049>
- Plutowska, B., & Wardencki, W. (2008). Application of gas chromatography–olfactometry (GC–O) in analysis and quality assessment of alcoholic beverages – A review. *Food Chemistry*. <http://doi.org/10.1016/j.foodchem.2007.08.058>
- Puerta, G. (2011). Composición química de una taza de café. *Avances En Química*, 1–12. Retrieved from http://www.cenicafe.org/es/index.php/nuestras_publicaciones/avances_tecnicos/publicaciones_avt0414composicion_quimica_de_una_taza_de_cafe
- 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. <http://doi.org/10.1016/j.talanta.2012.09.022>
- Risso, É. M., Péres, R. G., & Amaya-Farfan, J. (2007). Determination of phenolic acids in coffee by micellar electrokinetic chromatography. *Food Chemistry*, 105, 1578–1582. <http://doi.org/10.1016/j.foodchem.2007.03.028>
- Rivera, B. (2009). *Secretario Departamento de Agricultura Estado libre Asociado de Puerto Rico*. San Juan , Puerto Rico. Retrieved from [http://senado.pr.gov/Proyectos del Senado/ps0203- 09.pdf](http://senado.pr.gov/Proyectos_del_Senado/ps0203-09.pdf)

- Roberts, D. D., Pollien, P., & Milo, C. (2000). Solid-phase microextraction method development for headspace analysis of volatile flavor compounds. *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, 48(6), 2430–2437. <http://doi.org/10.1021/jf9911161>
- Rodríguez, M. (2000). Tiempos de crisis: Los campesinos y el café en Puerto Rico durante el cambio de siglo y la Gran Depresión. *Agriculture*, 75.
- Rojas, G. (2005a). *Caracterización del aroma del café molido de Puerto Rico mediante la técnica de microextracción en fase sólida (SMPE) y cromatografía de gas acoplada a espectrometría de masas (GC/MS)*. MS thesis. University of Puerto Rico, Mayagüez.
- Sacchetti, G., Di Mattia, C., Pittia, P., & Mastrocola, D. (2009). Effect of roasting degree, equivalent thermal effect and coffee type on the radical scavenging activity of coffee brews and their phenolic fraction. *Journal of Food Engineering*, 90, 74–80. <http://doi.org/10.1016/j.jfoodeng.2008.06.005>
- Salazar-Yepes, M., Buriticá-C., P., & Cadena-Gómez, G. (2002). Implicaciones de los estudios sobre biodiversidad de los Uredinales (Royas) en la región cafetera colombiana. *Cenicafé*, 53(3), 219–238. Retrieved from [http://www.cenicafe.org/es/publications/arc053\(03\)219-238.pdf](http://www.cenicafe.org/es/publications/arc053(03)219-238.pdf)
- Sanz, C., Ansorena, D., Bello, J., & Cid, C. (2001). Optimizing headspace temperature and time sampling for identification of volatile compounds in ground roasted Arabica coffee. *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, 49(3), 1364–1369. <http://doi.org/10.1021/jf001100r>
- Semmelroch, P., & Grosch, W. (1995). Analysis of roasted coffee powders and brews by gas chromatography-olfactometry of headspace samples. *LWT - Food Science and Technology*, 28(2), 310–313. [http://doi.org/10.1016/S0023-6438\(95\)94411-7](http://doi.org/10.1016/S0023-6438(95)94411-7)
- Sigma Aldrich. (2016). SUPELCOWAX® 10 - Capillary GC Columns, by name | Sigma-Aldrich. Retrieved from <http://www.sigmaaldrich.com/analytical-chromatography/analytical-products.html?TablePage=14540630>
- Sunarharum, W. B., Williams, D. J., & Smyth, H. E. (2014). Complexity of coffee flavor: A compositional and sensory perspective. *Food Research International*, 62, 315–325. <http://doi.org/10.1016/j.foodres.2014.02.030>
- USDA. (2016). World Arabica Production Ratio Forecast to Rebound.
- van Ruth, S. M. (2001). Methods for gas chromatography-olfactometry: A review. *Biomolecular Engineering*, 17(4–5), 121–128. [http://doi.org/10.1016/S1389-0344\(01\)00070-3](http://doi.org/10.1016/S1389-0344(01)00070-3)
- Vas, G., & Vékey, K. (2004). Solid-phase microextraction: A powerful sample preparation tool prior to mass spectrometric analysis. *Journal of Mass Spectrometry*, 39(3), 233–254. <http://doi.org/10.1002/jms.606>
- Vazquez-Cruz, M. A., Jimenez-Garcia, S. N., Torres-Pacheco, I., Horacio Guzman-Maldonado, S., Guevara-Gonzalez, R. G., & Miranda-Lopez, R. (2012). Effect of Maturity Stage and Storage on Flavor Compounds and Sensory Description of Berrycactus (*Myrtillocactus geometrizans*). *Journal of Food Science*, 77(4). <http://doi.org/10.1111/j.1750-3841.2012.02621.x>

- Vega. (2002). The presence of the coffee berry borer , *Hypothenemus hampei*, in Puerto Rico : fact or fiction ?, (1), 2–4.
- Vega, F. E., Infante, F., Castillo, A., & Jaramillo, J. (2009). The coffee berry borer, *Hypothenemus hampei* (Ferrari) (Coleoptera: Curculionidae): a short review, with recent findings and future research directions. *Terrest. Arthropod Rev.*, 2, 129–147. <http://doi.org/doi:10.1163/187498209X12525675906031>
- Vignoli, J. a., Bassoli, D. G., & Benassi, M. T. (2011). Antioxidant activity, polyphenols, caffeine and melanoidins in soluble coffee: The influence of processing conditions and raw material. *Food Chemistry*, 124(3), 863–868. <http://doi.org/10.1016/j.foodchem.2010.07.008>
- Wang, X., Wang, S., & Cai, Z. (2013). The latest developments and applications of mass spectrometry in food-safety and quality analysis. *TrAC - Trends in Analytical Chemistry*, 52, 170–185. <http://doi.org/10.1016/j.trac.2013.08.005>

9. APÉNDICE

Apéndice 1. Compuestos Identificados en las Muestras de Café Borbón Zona Alta

Compuestos	Muestras															
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16
Pirazinas																
2,5-dimetilpirazina	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X
2,6-dimetilpirazina	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X
2,3-dimetilpirazina	X	X				X				X	X	X	X	X	X	
2-etil-3,5-dimetilpirazina											X	X				
2-etil-3-metilpirazina		X	X		X					X	X			X	X	
2-etil-5-metilpirazina	X	X	X		X	X		X	X	X	X	X		X	X	
2-etil-6-metilpirazina	X	X	X		X	X	X	X	X		X	X		X	X	X
3-etil-2,5-dimetilpirazina	X	X	▲	▲	●	X	X	●	▲	X	▲			▲	X	●
Etenilpirazina	X				X											
Etilpirazina	X	X	X	X	X	X	X		X	X	X		X	X	X	X
2-metilpirazina	▲	▲	▲	▲	●	▲	▲	▲	▲	●	▲	▲	▲	▲	▲	▲
2,3,5-trimetilpirazina	X	X	X		X	X	X		X	X	X	X		X	X	
5-metil-6,7-dihidro-(5H)-ciclopentapirazina							●									

X = Compuestos presentes en las muestras analizadas por columna Carbowax, ● = Compuestos presentes en las muestras analizadas por columna HP-5, ▲ = Compuestos presentes en ambas columnas

Apéndice 1. Compuestos Identificados en las Muestras de Café Borbón Zona Alta (cont.)

Compuestos	Muestras																
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	
Furanos																	
2,2'-bisfurano					X												
5-metilfurfural	▲	▲	▲	▲	●	▲	▲	▲	▲	▲	▲	▲	▲	▲	▲	▲	▲
2-furanmetanol	▲	▲	▲	▲	●	▲	▲	▲	▲	▲	▲	▲	▲	▲	▲	▲	▲
Acetato de furfurilo	▲	▲	▲	▲	●	▲	▲	▲	▲	▲	▲	▲	▲	▲	▲	▲	▲
3,5-dimetilfuran-2(5H)-ona					X												
2-metiltetrahidrofuran-3-ona		●	●	●	▲	▲	●	●	●	▲	●	▲	●	▲	●	●	●
2-acetilfurano	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X		X	X	X	X	X	X
Furfuril metil éter					X				X								
Difurfuril éter					▲					●				●			
Sulfuro de metilo furfurílico					X				X								
2-metilfurano						X											
3-metilfurano					X					X	X			X			
2-furaldehído	X	X	X	X	●	X	X	X	●	X	X	X	X	X	X	X	X
Furfurilformato		●		●		●			●			●			●	●	●

X = Compuestos presentes en las muestras analizadas por columna Carbowax, ▲ = Compuestos presentes en ambas columna, ● = Compuestos presentes en las muestras analizadas por columna HP-5

Apéndice 1. Compuestos Identificados en las Muestras de Café Borbón Zona Alta (cont.)

Compuestos	Muestras															
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16
Pirroles																
1-metil-1H-pirrol	●	●	●	●	▲	●		●	●	●	●	●	●	●	●	●
1-(2-furanilmetil)-1H-pirrol				X	X				X						X	
1H-pirrol-2-carboxaldehído	X	X	X	X		X	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X
1-metil- 1H-pirrol-2-carboxaldehído	X	X	X			X	X	X	X		X	X	X	X	X	
2-[N-Aziridil]metilpirrol											X					
1-(1H-pirrol-2-yl)-etanona	▲	X	▲	X		X	▲	X	X	▲	X	X	▲	X	X	●
1-(1-metil-1Hpirrol-2-yl)-etanona										X				X		
Cetonas																
2-metil-5-propionilfurano					X											
2,3-pentanodiona	●		●	●	●	●	●	●	●	▲	●	●	●	●		●
1-acetoxiacetona		X	X	X		X	X	X		X			X		X	X
1-hidroxi-2-propanona.	●	●	●	●	●	●	●	●	●	●	●	●	●	●	●	●
Damascenona	●															
Fenoles																
4-vinil-2-metoxifenol	▲	▲	▲	▲	▲	▲	▲	▲	▲	▲	▲	▲	▲	▲	▲	▲
2',5'-dihidroxi-acetofenona					●						●			●		
2-metoxifenol	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X
4-etil-2-metoxifenol										X						
Piridinas																
N-acetil-4(H)-piridina		●			●	●			●	●	●	●		●		
Piridina	▲	X	X	●		▲	▲	▲	●	X	X	X	▲	X	▲	●
3-etilpiridina					X											
Lactonas																
5-heptildihidro-2(3H)-furanona		●														
Dihidro-2(3H)-furanona	X	X				X		X	X						X	

X = Compuestos presentes en las muestras analizadas por columna Carbowax ▲ = Compuestos presentes en ambas columnas
 ● = Compuestos presentes en las muestras analizadas por columna HP-5

Apéndice 1. Compuestos Identificados en las Muestras de Café Borbón Zona Alta (*cont.*)

Compuestos	Muestras															
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16
Píranos																
3-hidroxi-2-metil-4H-piran-4-ona (3-hidroxi-2-metil-4H-piran-4-ona (maltol))					●		▲	●		▲	X	X		▲	●	●
Esteres																
Propionato de etilo						X										

X = Compuestos presentes en las muestras analizadas por columna Carbowax ▲ = Compuestos presentes en ambas columnas
 ● = Compuestos presentes en las muestras analizadas por columna HP-5

Apéndice 2. Compuestos Identificados en las Muestras de Café Borbón Zona Baja

Compuestos	Muestras								
	1	2	3	4	5	6	7	8	9
Pirazinas									
2,5-dimetilpirazina	X	X	X	X	X	X	X	X	X
2,6-dimetilpirazina	X	X	X	X	X	X	X	X	X
2,3-dimetilpirazina	X	X	X	X	X	X	X	X	X
2-etil-3-metilpirazina	X	X	X	X	X	X	X	X	X
2-etil-5-metilpirazina	X	X	X	X	X	X	X	X	X
2-etil-6-metilpirazina	X	X	X	X	X	X	X	X	X
2-etil-3,5-dimetilpirazina	•	•		•	•			•	
3-etil-2,5-dimetilpirazina	X	X	X	X	X	X	▲	X	X
Etilpirazina	X	X	X	X	X	X	X	X	X
2-metilpirazina	▲	▲	▲	▲	▲	▲	▲	▲	▲
2,3,5-trimetilpirazina	X	X	X	X	X	X	X	X	X
Furanos									
5-metilfurfural	▲	▲	▲	▲	▲	▲	▲	▲	▲
2-furanmetanol	▲	▲	▲	▲	▲	▲	▲	▲	▲
acetato de furfurilo	▲	▲	▲	▲	▲	▲	▲	▲	▲
2-metiltetrahidrofuran-3-ona	•	▲	▲	▲	▲	▲	•	•	▲
2-acetilfurano		X	X	X	X	X	X	X	X
Difurfuril éter	•			▲	▲	•	•		•
2-metilfurano				X	X				
3-metilfurano		X				X	X	X	
2-furaldehído	▲	▲	▲	▲	▲	▲	▲	▲	▲
Furfurilformato		•							
Pirroles									
1-(2-furanilmetil)-1H-pirrol	▲	•	•	▲	▲	•	▲	▲	•
1H-pirrol-2-carboxaldehído	X	X	X	X	X	X	X	X	X
1-H-pirrol-2-carbox aldehído, 1-metil	X	X	X				X	X	X
1-(1H-pirrol-2-yl)-etanona	X	▲	X	X	X	▲	▲	X	X

Apéndice 2. Compuestos Identificados en las Muestras de Café Borbón Zona Baja (cont.)

Compuestos	Muestras								
	1	2	3	4	5	6	7	8	9
Pirroles									
1-(1-metil-1Hpirrol-2-yl)-	X			X	X	X	X	X	X
Cetonas									
2,3-pentanodiona	●	●	●	●	●	▲	●	●	▲
1-acetoxiacetona		●		X	X	X	●	X	X
1-hidroxi-2-propanona	●	●				●		●	●
4-acetilpirazol								X	
Fenoles									
4-vinil-2-metoxifenol	▲	▲	▲	▲	▲	▲	▲	▲	▲
2-metoxifenol	X	X	X	X	X	X	X	X	X
4-etil-2-metoxifenol	X	X		X	X	X	▲		X
Piridinas									
N-acetil-4(H)-piridina	●		●	●	●	●		●	
Piridina	▲	▲	X	▲	▲	X	▲	▲	X
Piridina, 1,2,3,6-tetrahydro-1-methyl				X	X				
Lactonas									
Dihidro-2(3H)-furanona								X	X
Piranos									
3-hidroxi-2-metil-4H-piran-4-ona (maltol)		X	●	▲	▲	▲	▲	▲	X

X = Compuestos presentes en las muestras analizadas por columna Carbowax ● = Compuestos presentes en las muestras analizadas por columna HP-5
▲ = Compuestos presentes en ambas columnas

Apéndice 3. Compuestos Identificados en las Muestras de Café Caturra Zona Baja

Compuestos	Muestras		
	1	2	3
Pirazinas			
2,5-dimetilpirazina	X	X	X
2,3-dimetilpirazina			X
2,6-dimetilpirazina	X	X	X
2-etil-3-metilpirazina			X
2-etil-5-metilpirazina	X	X	X
2-etil-6-metilpirazina	X	X	X
2-etil-3,5-dimetilpirazina	•		
3-etil-2,5-dimetilpirazina	X	X	X
Etilpirazina	X	X	X
2-metilpirazina	X	▲	▲
2,3,5-trimetilpirazina	X		X
Furanos			
5-metil-2-furaldehído	•	X	•
2-furanmetanol	▲	▲	▲
Acetato de furfurilo	▲	▲	▲
3,5-dimetilfuran-2(5H)-ona	X		
4,5-dihidro-2-metilfuran-3(2H)-ona		X	
2-metiltetrahidrofuran-3-ona	•	•	X
2-acetilfurano		X	X
2-metilfurano			X
2-furaldehído	▲	▲	▲
Pirroles			
1H-pirrol-2-carboxaldehído	•	▲	▲
1-H-pirrol-2-carbox aldehído, 1-metil	X	X	X
1-(1H-pirrol-2-yl)-etanona	▲	X	X
1-(1-metil-1Hpirrol-2-yl)-etanona			X

Apéndice 3. Compuestos Identificados en las Muestras de Café Caturra Zona Baja (cont.)

Compuestos	Muestras		
	1	2	3
Cetonas			
2,3-pentanodiona	●		▲
1-acetoxiacetona	X	X	X
1-hidroxi-2-propanona	●		●
Fenoles			
4-vinil-2-metoxifenol	▲	▲	▲
2-metoxifenol	X	X	X
Piridinas			
Piridina	X	▲	▲
Lactonas			
Dihidro-2(3H)-furanona			X
Píranos			
3-hidroxi-2-metil-4H-piran-4-ona (3-hidroxi-2-metil-4H-piran-4-ona (maltol))	●		X

X = Compuestos presentes en las muestras analizadas por columna Carbowax ● = Compuestos presentes en las muestras analizadas por columna HP-5
▲ = Compuestos presentes en ambas columnas

Apéndice 4. Compuestos Identificados en las Muestras de Café Caturra Zona Alta

Compuestos	Muestras														
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15
Pirazinas															
2,5-dimetilpirazina	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X	
2,6-dimetilpirazina	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X
2,3-dimetilpirazina	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X		X
2-etil-3,5-dimetilpirazina							X								
2-etil-3-metilpirazina	X	X			X	X				X		X			X
2-etil-5-metilpirazina	X	X	X	X	X	X		X	X	X	X	X	X		X
2-etil-6-metilpirazina	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X
3-etil-2,5-dimetilpirazina	▲	X	X	▲		▲	X	▲	●	▲	▲	X	▲	X	X
Etilpirazina	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X
2-metilpirazina	▲	▲	▲	▲	▲	▲	▲	▲	▲	▲	▲	▲	▲	▲	▲
2,3,5-trimetilpirazina	X	X	X	X	X	X	X	X		X	X	X	X	X	X
Furanos															
5-metilfurfural	▲	●	▲	▲	▲	▲	●	▲	▲	▲	▲	▲	▲	▲	▲
2-furanmetanol	X	▲	▲	▲	▲	▲	▲	▲	▲	▲	▲	▲	▲	▲	▲
Acetato de furfurilo	X	▲	X	▲	▲	X	▲	X	▲	▲	X	X	▲	▲	▲
Propionato de furfurilo											X				
2-metiltetrahydrofuran-3-ona	▲	▲	●	▲	▲	▲	▲	●	●	▲	X	▲	●	▲	▲
2-acetilfurano	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X
Sulfuro de metilo furfurílico							X								
3-metilfurano												X			
2-metilfurano		X		X	X		X				X				X
2-furaldehído	▲	▲	▲	▲	▲	▲	▲	▲	▲	▲	▲	▲	▲	▲	▲
Acetato de 5-formilfurfurilo					●										

X = Compuestos presentes en las muestras analizadas por columna Carbowax ● = Compuestos presentes en las muestras analizadas por columna HP-5

▲ = Compuestos presentes en ambas columnas

Apéndice 4. Compuestos Identificados en las Muestras de Café Caturra Zona Alta (cont.)

Compuestos	Muestras														
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15
Pirroles															
1-(2-furanilmetil)-1H-pirrol	●	●	●	▲	●	●	●	▲	▲	●	●	●	●	▲	●
1H-pirrol-2-carboxaldehído	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X
1-H-pirrol-2-carbox aldehído, 1-metil	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X
1-(1H-pirrol-2-yl)-etanona	▲	▲	X	X	X	X	▲	▲	▲	▲	X	X	▲	▲	X
1-(1-metil-1Hpirrol-2-yl)-etanona		X		X			X							X	
Cetonas															
2,3-pentanodiona	▲	▲	●	▲	▲	●	●	●	●	▲	▲	▲	●	●	▲
1-acetoxiacetona	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X	▲	X	X	X	X
1-hidroxi-2-propanona	●	●	●		●	●		●	●	●		●	●	●	●
Fenoles															
4-vinil-2-metoxifenol	▲	▲	▲	▲	▲	▲	▲	▲	▲	▲	▲	▲	▲	▲	▲
2-metoxifenol	X	X		X	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X
4-etil-2-metoxifenol		X		X											
Piridinas															
N-acetil-4(H)-piridina				●	●					●					●
Piridina	X	X	X	X	X	X	X		▲	X	X	X	X	▲	X
Piranos															
2H-Pyran, 3,4-dihidro-4-hydroxy-(3-hidroxi-2-metil-4H-piran-4-ona (maltol))	X	X		X	▲	X	▲			X	●	▲	X		▲
Lactonas															
Dihidro-2(3H)-furanona	X	X		X	X	X				X	X	X		X	X

X = Compuestos presentes en las muestras analizadas por columna Carbowax ● = Compuestos presentes en las muestras analizadas por columna HP-5
 ▲ = Compuestos presentes en ambas columnas

Apéndice 5. Descriptores Identificados para las Muestras de Borbón Zona Alta

Descriptores Percibidos	Intensidad Percibida	Compuestos	Descriptores calculados por LRI	LRI	Referencias
Muestra 1 T					
Chocolate	2	-----	-----	713	-----
		3-hydroxy-2-butanone, hydroxybutanone	butter, cream	718	Kovats
		ethyl propanoate	sweet, fruity, ethereal	714	UFL
Pimiento Verde	1	-----	-----	776	-----
		hexenone	cooked vegetable	775	Kovats
Cebolla		methyl-2-buten-1-ol, 3	herbaceous, powerful	778	UFL
Pimiento Verde	1	-----	-----	826	-----
		furfural	pungent	830	UFL
Cebolla					
Leche hervida	2	furfural	bread, almond, sweet	829	Kovats
		furfural	sweet, bread-like	830	UFL
Café verde	2	-----	-----	884	-----
		2-hexenol	leaf, green	880	Kovats
Pimiento Verde	1	o-picoline	sweat	886	Kovats
		allyl isothiocyanate, allylpol	pungent, garlic	887	Kovats
Cebolla					
Fruta Dulce	1	hexyl acetate	fruit	1014	Kovats
		hexyl acetate	sweet, fruity	1008	UFL
Caramelo					

Apéndice 5. Descriptores Identificados para las Muestras de Borbón Zona Alta (cont.)

Descriptores Percibidos	Intensidad Percibida	Compuestos	Descriptores calculados por LRI	LRI	Referencias
Muestra 1 T					
Pimiento Verde Cebolla	3	hexyl acetate y 2,3,4,5-tetrahydroanisole 5-(methylthio)-valeronitrile	herb, spice broccoli, cabbage	1014	Kovats
Acetona	1	----- p-cymene	----- solvent, gasoline, citrus	1026 1027	----- UFL
Tostado Café Chocolate Madera	1	dihydrolinalool phenylacetaldehyde	wood green, pungent, honey-like	1052 1047	Kovats UFL
Fruta seca “Cranberry”	1	2-octenal α -ocimene	nut fruit	1060 1056	Kovats Kovats
Tostado Nuez	1	----- guaiacol guaiacol	----- smoke, sweet smoke, sweet	1095 1089 1087	----- Kovats UFL
“Cotton Candy”	1	propyl hexanoate ethyl heptanoate	fruit fruity, wine-like, powerful	1097 1095	Kovats UFL

Apéndice 5. Descriptores identificados para las muestras de Borbón Zona Alta (cont.)

Descriptores Percibidos	Intensidad Percibida	Compuestos	Descriptores obtenidos por LRI	LRI	Referencias
Muestra 1 T					
Quemado	1	----- 2-acetyl-2-thiazoline	----- roast	1110 1105	----- Kovats
Chocolate	1	----- 2-acetyl-2-thiazoline 3-hydroxy-4,5-dimethyl-2(5H)-furanone maltol	----- roast cotton candy, maple cotton candy, sweet	1110 1105 1107 1108	----- Kovats Kovats, UFL
Fenol Café	1	----- 2-phenylethyl alcohol trimethyl-2-cyclohexen-1-one, 3,5,5 (-)-cis-rose oxide	----- honey, spice sweet, tobacco sweet	1119 1118 1118 1117	----- Kovats UFL Kovats
Pimiento Verde Cebolla	2	----- octadienal, (E,E)-2,4	----- woody, green	1120 1121	----- UFL
Pimiento Verde Cebolla	2	perillen menthone	wood green	1126 1126	Kovats Kovats
Acetona, Alcoholado	1	----- (Z)-limonene oxide	----- fresh, citrus	1138 1137	----- Kovats

Apéndice 5. Descriptores identificados para las muestras de Borbón Zona Alta (*cont.*)

Descriptores Percibidos	Intensidad Percibida	Compuestos	Descriptores obtenidos por LRI	LRI	Referencias
Muestra 1 T					
Café tostado	1	----- Methylcyclopentapyrazine	----- roast	1143 1145	----- Kovats
Café verde	1	----- (Z)-piperitol	----- herb	1224 1220	----- Kovats
Quemado	3	4-(1-methylethyl)- benzaldehyde	acid, sharp	1224	Kovats
Quemado	2	----- α -copaene	----- wood, spice	1369 1377	----- Kovats
Café verde	1	----- humulene oxide (-)-cubenol	----- herb spice, herb, green tea	1641 1642 1645	----- Kovats Kovats
Pimiento	3	----- (-)-cubenol	----- spice, herb, green tea	1640 1645	----- Kovats

Apéndice 5. Descriptores identificados para las muestras de Borbón Zona Alta (cont.)

Descriptores Percibidos	Intensidad Percibida	Compuestos	Descriptores obtenidos por LRI	LRI	Referencias
Muestra 9 T					
Pimiento Verde Cebolla	2	----- furfural	----- pungent	824 830	----- UFL
Pimiento Verde Cebolla	2	----- o-picoline allyl isothiocyanate, allyspol	----- sweat sulfur, pungent, garlic	885 886 887	----- Kovats Kovats
Café Acetona Guayacol	2	(E)-3-hexenol cineole, 1,8	fresh spicy, cool	1038 1032	Kovats UFL
“Cotton Candy”	1	----- hydroxy-2,5-dimethyl-3(2H)-furanone, 4 (Furaneol) 2,5-dimethyl-4-hydroxy-3[2H]-furanone	----- caramel, cotton candy caramel	1065 1062 1064	----- UFL Kovats
“Cotton Candy” Dulce	2	----- 3-hydroxy-4,5-dimethyl-2(5H)-furanone maltol	----- cotton candy, spice, maple cotton candy, sweet	1100 1107 1108	----- Kovats, UFL
Tierra	2	ethenyl-dimethylpyrazine	earth	1102	Kovats

Apéndice 5. Descriptores identificados para las muestras de Borbón Zona Alta (cont.)

Descriptores Percibidos	Intensidad Percibida	Compuestos	Descriptores obtenidos por LRI	LRI	Referencias
Muestra 9 T					
Fenol Café Caramelo Green Tierra	1	2-phenylethyl alcohol α -p-dimethylstyrene (-)-cis-rose oxide	honey, spice pine sweet	1118 1118 1117	Kovats Kovats Kovats
Acetona Café Caramelo	1	----- ethyl-4-hydroxymethyl- 3(2H)- Furanone	----- caramel	1138 1139	----- Kovats
“Cotton Candy” Guayacol Caramelo Fenol	1	----- sesquiphellandrene	----- sweet, fruit	1148 1149	----- Kovats
Pimiento Verde Cebolla	1	isobutylmethoxypyrazine	earth, spice, green pepper	1186	Kovats
Café Caramelo, Dulce	2	----- linalyl acetate β -phenethyl acetate linalyl acetate	----- sweet, floral, fruity honey, tobacco sweet, fruit	1259 1257 1260 1261	----- UFL Kovats Kovats

Apéndice 6. Descriptores identificados para las muestras de Borbón Zona Baja

Descriptores Percibidos	Intensidad Percibida	Compuestos	Descriptores obtenidos por LRI	LRI	Referencias
Muestra 3 T					
Pimiento Verde Cebolla	2	----- furfural	----- pungent	824 830	----- UFL
Café con leche	1	furfural	----- bread,sweet sweet	831 829 830	----- Kovats UFL
Pimiento Verde Cebolla	2	----- o-picoline allyl isothiocyanate, allylpol	----- sweat pungent, garlic	883 886 887	----- Kovats Kovats
Café Dulce	1	----- dimethyl pyrazine	----- cocoa	893 892	----- Kovats
Pimiento Verde Cebolla	1	----- sabinene sabinene methylisohexenyl ketone	----- peppery, green pepper pepper	977 976 972 974	----- UFL Kovats Kovats
Café verde	2	----- 2-ethylhexanol	----- green	1036 1032	----- Kovats Kovats

Apéndice 6. Descriptores identificados para las muestras de Borbón Zona Baja (cont.)

Descriptores Percibidos	Intensidad Percibida	Compuestos	Descriptores obtenidos por LRI	LRI	Referencias
Muestra 3 T					
Abombado	1	-----	-----	1040	-----
Podrido		acetophenone	must	1041	Kovats
Humedad		phenylacetaldehyde	pungent	1047	UFL
Cotton Candy	2	-----	-----	1060	-----
Acetona		hydroxy-2,5-dimethyl-3(2H)-furanone, 4 (Furaneol)	caramel, "cotton candy"	1062	UFL
		2,5-dimethyl-4-hydroxy-3[2H]-furanone	caramel	1064	Kovats
Guayacol Tierra	2	-----	-----	1109	-----
Café Humedad		methyl benzoate	prune, sweet	1103	Kovats
		2-acetyl-2-thiazoline	roast	1105	Kovats
		3-hydroxy-4,5-dimethyl-2(5H)-furanone	cotton candy, spice, maple	1107	Kovats, UFL
		maltol	cotton candy, sweet	1108	UFL
Café, Almendra, Acetona	2	2-phenylethyl alcohol	honey, spice	1118	Kovats
		(-)-cis-rose oxide	sweet	1117	Kovats
Humo, Ceniza	1	-----	-----	1120	-----
Pimiento Verde	2	-----	-----	-----	-----
		perillen	wood	1126	Kovats
Cebolla		menthone	green	1126	Kovats

Apéndice 6. Descriptores identificados para las muestras de Borbón Zona Baja (cont.)

Descriptores Percibidos	Intensidad Percibida	Compuestos	Descriptores obtenidos por LRI	LRI	Referencias
Muestra 3 T					
Acetona	2	-----	-----	1142	-----
Café tostado		methylcyclopentapyrazine	roast	1145	Kovats
Dulce					
Pimiento Verde	2	syntexan	garlic	1228	Kovats
Cebolla					
Muestra 7 T					
Plástico	1	-----	-----	761	-----
		fucoserratene	plastic	760	Kovats
Cebolla	1	-----	-----	790	-----
		dimethyl disulfide	onion, cabbage, putrid	785	Kovats
Café	1	-----	-----	828	-----
		<u>furfural</u>	bread, almond, sweet	829	Kovats
Pimiento Verde	3	o-picoline	sweat	886	Kovats
Cebolla		allyl isothiocyanate, allylpol	sulfur, pungent, garlic	887	Kovats

Apéndice 6. Descriptores identificados para las muestras de Borbón Zona Baja (cont.)

Descriptores Percibidos	Intensidad Percibida	Compuestos	Descriptores obtenidos por LRI	LRI	Referencias
Muestra 7 T					
Pimiento Verde	3	----- hexyl acetate y 2,3,4,5-tetrahydroanisole	----- herb, spice	1012 1014	----- Kovats
Cebolla		5-(methylthio)-valeronitrile	broccoli, cabbage	1015	Kovats
Café Quemado	1	----- acetylthiazole mercaptomethylbutyl formate acetylpyrazine propionylpyrroline	----- roast, nut roast roast roast	1021 1020 1023 1023 1024	----- Kovats Kovats Kovats Kovats
Humedad	1	methylethylpyrazine	sweat	1035	Kovats
Café Dulce Caramelo	2	----- guaiacol guaiacol	----- sweet sweet	1080 1089 1087	----- Kovats UFL
Humedad	1	----- pinenol	----- must, dust	1119 1123	----- Kovats
Café verde	1	----- menthone	----- green	1127 1126	----- Kovats
Yerba	1	----- (Z)-dihydrocarvone	----- Herb	1193 1195	----- Kovats
Humedad Pimiento Verde	1	ethyl octenoate	must, pungent	1202	Kovats
Yerba	1	-----	-----	1227	-----

Apéndice 7. Descriptores identificados para las muestras de Caturra Zona Alta

Descriptores Percibidos	Intensidad Percibida	Compuestos	Descriptores obtenidos por LRI	LRI	Referencias
Muestra 2 T					
Pimiento Verde Cebolla	1	----- dimethyl disulfide	----- onion, garlic	738 740	----- UFL
Plástico	1	----- <u>fucoserratene</u>	----- green, plastic	762 760	----- Kovats
Café	1	----- furfural furfural	----- bread, almond, sweet sweet, bread-like	826 829 830	----- Kovats UFL
Pimiento Verde Cebolla	3	allyl isothiocyanate, allyspol o-picoline	sulfur, pungent, garlic Sweat	887 886	Kovats Kovats
Cebolla	1	5-(methylthio)-valeronitrile hexyl acetate y 2,3,4,5-tetrahydroanisole	broccoli, cabbage herb, spice	1015 1014	Kovats Kovats
Pimiento Verde Cebolla	1	----- isobutyl thiazole phenylacetaldehyde	----- tomato leaf, green green, pungent,	1039 1043 1047	----- Kovats UFL
Dulce , Caramelo Café	2	----- guaiacol guaiacol	----- smoke, sweet smoke, sweet	1096 1089 1087	----- Kovats UFL

Apéndice 7. Descriptores identificados para las muestras de Caturra Zona Alta (*cont.*)

Descriptores Percibidos	Intensidad Percibida	Compuestos	Descriptores obtenidos por LRI	LRI	Referencias
Muestra 2 T					
Humedad	2	----- pinenol	----- must, dust	1119 1123	----- Kovats
“Green”	1	----- perillen menthone	----- wood green	1120 1126 1126	----- Kovats Kovats
Dulce Café	1	----- Sesquiphellandrene	----- sweet	1152 1149	----- Kovats
Humedad	1	----- (Z)-4-decenal decanal	----- must musty	1199 1200 1203	----- Kovats UFL
Pimiento Verde Cebolla	1	----- Syntexan	----- garlic	1224 1228	----- Kovats
Flores Dulce	1	----- methyl anthranilate p-menthadienhydroperoxide	----- flower turpentine	1339 1337 1338	----- Kovats Kovats

Apéndice 7. Descriptores identificados para las muestras de Caturra Zona Alta (cont.)

Descriptores Percibidos	Intensidad Percibida	Compuestos	Descriptores obtenidos por LRI	LRI	Referencias
Muestra 5 T					
Pimiento Verde Cebolla	2	----- pentanol pentanol, 1	----- balsamic green	765 766 765	----- Kovats UFL
Podrido Algarroba	3	----- butyric acid butanoic acid , 1	----- rancid, cheese, sweat sweaty, vomit, rancid	813 820 820	----- Kovats UFL
Café	1	----- Furfural	----- bread, almond, sweet	827 829	----- Kovats
Pimiento Verde Cebolla	2	----- furfural	----- pungent	827 830	----- UFL
Café con leche	2	-----	-----	840	-----
Pimiento Verde Cebolla	1	----- hexanol (E)-2-hexenol 2-hexenal	----- green green, leaf green	852 851 853 854	----- Kovats Kovats Kovats

Apéndice 7. Descriptores identificados para las muestras de Caturra Zona Alta (cont.)

Descriptores Percibidos	Intensidad Percibida	Compuestos	Descriptores obtenidos por LRI	LRI	Referencias
Muestra 5 T					
Pimiento Verde Cebolla	4	----- o-picoline allyl isothiocyanate, allyspol	----- Sweat sulfur, pungent, garlic	888 886 887	----- Kovats Kovats
Popcorn	3	-----	-----	946	-----
Pimiento Verde Cebolla	3	hexyl acetate y 2,3,4,5-tetrahydroanisole 5-(methylthio)-valeronitrile	herb, spice broccoli, cabbage	1014 1015	Kovats Kovats
Café Dulce	4	3-octenone ethyl hydroxybutanoate benzyl alcohol	nut caramel sweet	1040 1039 1039	Kovats Kovats Kovats
Acetona Dulce	2	----- hydroxy-2,5-dimethyl-3(2H)-furanone, 4 (Furaneol) 2,5-dimethyl-4-hydroxy-3[2H]-furanone	----- caramel, cotton candy caramel	1059 1062 1064	----- UFL Kovats
“Cotton Candy ” Dulce	2	----- guaiacol 2-pentylthiophene	----- sweet sweet	1094 1089 1090	----- Kovats Kovats

Apéndice 7. Descriptores identificados para las muestras de Caturra Zona Alta (cont.)

Descriptores Percibidos	Intensidad Percibida	Compuestos	Descriptores obtenidos por LRI	LRI	Referencias
Muestra 5 T					
Medicina	3	-----	-----	1098	-----
Café tostado	3	----- 2-acetyl-2-thiazoline	----- roast	1106 1105	----- Kovats
Acetona Café	3	-----	-----	1119	-----
Fenol Tierra Humedad	3	----- pinenol	----- must, dust	1120 1123	----- Kovats
Hierba	3	----- perillen menthone	----- wood green	1127 1126 1126	----- Kovats Kovats
Acetona Caramelo Cotton Candy	2	ethyl-4-hydroxymethyl- 3(2H)-Furanone	caramel	1139	Kovats
Cafe	1	-----	-----	1185	-----

Apéndice 7. Descriptores identificados para las muestras de Caturra Zona Alta (cont.)

Descriptores Percibidos	Intensidad Percibida	Compuestos	Descriptores obtenidos por LRI	LRI	Referencias
Muestra 5 T					
Pimiento Verde Cebolla	1	isobutylmethoxypyrazine	spice, green pepper	1186	Kovats
Húmedad	2	----- (Z)-4-decenal Decanal	----- must musty	1199 1200 1203	----- Kovats UFL
Pimiento Verde Cebolla	2	----- syntexan	----- garlic	1225 1228	----- Kovats
Humo	2	-----	-----	1367	-----
Pimiento Verde Cebolla	2	----- (-)- γ -elemene	----- green	1429 1425	----- Kovats
“Cranberry”	1	coumarin linalyl butyrate ionone, a	sweet pear, sweet dried fruit	1439 1437 1431	Kovats Kovats UFL

Apéndice 7. Descriptores identificados para las muestras de Caturra Zona Alta (cont.)

Descriptores Percibidos	Intensidad Percibida	Compuestos	Descriptores obtenidos por LRI	LRI	Referencias
Muestra 8 T					
Pimiento Verde	2	-----	-----	836	-----
Cebolla	2	-----	-----	885	-----
Pimiento Verde		o-picoline	sweat	886	Kovats
Cebolla		allyl isothiocyanate, allylpol	sulfur, pungent, garlic	887	Kovats
Café tostado	1	butyl methylbutyrate	fruit, cocoa	1043	Kovats
Dulce		norfuraneol	caramel	1044	Kovats
		2-acetylpyrrole	nut, walnut, bread	1045	Kovats
		methylethyl pyrazine	roast	1047	Kovats
”Cotton Candy”	2	-----	-----	1101	-----
		3-hydroxy-4,5-dimethyl-2(5H)-furanone	cotton candy, spice, maple	1107	Kovats,
		maltol	cotton candy, sweet	1108	UFL UFL
Guayacol	2	2-phenylethyl alcohol	honey, spice	1118	Kovats
Café		trimethyl-2-cyclohexen-1-one, 3,5,5	sweet, cedarwood, tobacco	1118	UFL
Madera		(-)-cis-rose oxide	sweet, rose	1117	Kovats
Quemado					
Tierra					
Chocolate					
Caramelo					

Apéndice 7. Descriptores identificados para las muestras de Caturra Zona Alta (cont.)

Descriptores Percibidos	Intensidad Percibida	Compuestos	Descriptores obtenidos por LRI	LRI	Referencias
Muestra 8 T					
Guayacol, Café	2	2-phenylethyl alcohol	honey, spice	1118	Kovats
Madera		trimethyl-2-cyclohexen-1-one, 3,5,5	sweet, cedarwood, tobacco	1118	UFL
Quemado		(-)-cis-rose oxide	sweet, rose	1117	Kovats
Tierra					
Chocolate					
Caramelo					
Guayacol	1	-----	-----	1199	-----
Acholado		carveol	fresh	1197	Kovats
Fuerte					
Pimiento	1	-----	-----	1230	-----
Verde		dimethyl tetrasulfide	cabbage, sulfur	1232	Kovats
Cebolla		myrtenal	spice	1233	Kovats
		epoxy-p-menthene	dill	1235	Kovats
Flores	1	p-menthadienhydroperoxide	turpentine	1365	Kovats

Apéndice 8. Descriptores identificados para las muestras de Caturra Zona Baja

Descriptores Percibidos	Intensidad Percibida	Compuestos	Descriptores obtenidos por LRI	LRI	Referencias
Muestra 4 T					
Pimiento Verde Cebolla	2	pentanol pentanol,1	balsamic green, grassy, powerful	766 765	Kovats UFL
Pimiento Verde Cebolla	1	mercaptobutanone	onion	804	Kovats
Podrido	1	----- butyric acid butanoic acid ,1	----- rancid, cheese, sweat sweaty, vomit, rancid	813 820 820	----- Kovats UFL
Pimiento Verde Cebolla	1	----- furfural	----- pungent, sweet, bread-like	825 830	----- UFL
Tostado	3	----- furfural furfural	----- bread, almond, sweet sweet, bread-like	827 829 830	----- Kovats UFL
Leche hervida	2	furfural furfural	sweet, bread-like bread, almond sweet	830 829	UFL Kovat

Apéndice 8. Descriptores identificados para las muestras de Caturra Zona Baja (*cont.*)

Descriptores Percibidos	Intensidad Percibida	Compuestos	Descriptores obtenidos por LRI	LRI	Referencias
Muestra 4 T					
Café tostado	1	----- methyl-3-furanthiol, 2-	- ----- roasted	872 870	----- UFL
Acetona	2	----- allyl isothiocyanate, allyspol	----- pungent	886 887	----- Kovats
Pimiento Verde Cebolla	3	----- acetylfuran	----- balsamic	892 893	----- Kovats
Popcorn	3	-----	-----	943	-----
Pimiento Verde Cebolla	1	----- sabinene sabinene methylisohexenyl ketone	----- peppery, green pepper pepper	977 976 972 974	----- UFL Kovats Kovats
Espicias	1	----- myrcene	----- balsamic, must, spice	994 992	----- Kovats
Melocotón	1	----- ethyl hexanoate	----- apple peel, fruit	1003 1002	----- Kovats

Apéndice 8. Descriptores identificados para las muestras de Caturra Zona Baja (cont.)

Descriptores Percibidos	Intensidad Percibida	Compuestos	Descriptores obtenidos por LRI	LRI	Referencias
Muestra 4 T					
Pimiento Verde Cebolla	3	hexyl acetate y 2,3,4,5-tetrahydroanisole 5-(methylthio)-valeronitrile	herb, spice broccoli, cabbage	1014 1015	Kovats Kovats
Pimiento Verde Cebolla	2	----- isobutyl thiazole phenylacetaldehyde	----- tomato leaf, green green, pungent,	1040 1043 1047	----- Kovats UFL
Grasa		----- 2-octenal	----- fat	1056 1060	----- Kovats
Cotton Candy Dulce	2	hydroxy-2,5-dimethyl-3(2H)-furanone, 4 (Furaneol) 2,5-dimethyl-4-hydroxy-3[2H]-furanone	caramel, cotton candy caramel	1062 1064	UFL Kovats
Cotton Candy Dulce		----- propyl hexanoate ethyl heptanoate	----- fruit fruity	1093 1097 1095	----- Kovats UFL
Fenol	2	nonanal nonanal	fat, citrus, green piney, floral, citrusy	1104 1103	Kovats UFL

Apéndice 8. Descriptores identificados para las muestras de Caturra Zona Baja (*cont.*)

Descriptores Percibidos	Intensidad Percibida	Compuestos	Descriptores obtenidos por LRI	LRI	Referencias
Muestra 4 T					
Café	2	----- methyl benzoate	----- prune, sweet	1102	-----
Dulce		2-acetyl-2-thiazoline	roast	1103	Kovats
		3-hydroxy-4,5-dimethyl-2(5H)-furanone	cotton candy, spice, maple	1105	Kovats
		maltol	cotton candy, sweet	1107	Kovats, UFL
				1108	UFL
Fenol	2	-----	-----	1116	-----
Tierra	2	-----	-----	1124	-----
		pinenol	must, dust	1123	Kovats
Acetona	2	-----	-----	1139	-----
		(Z)-limonene oxide	fresh, citrus	1137	Kovats
Café	2	-----	-----	1142	-----
		sesquiphellandrene	sweet	1149	Kovats
Caramelo					
Chocolate	2	-----	-----	1112	-----
		3-hydroxy-4,5-dimethyl-2(5H)-furanone	cotton candy, spice, maple	1107	Kovats, UFL
		maltol	cotton candy, sweet	1108	UFL
Medicina	1	-----	-----	1134	-----
Café tostado	3	-----	-----	1208	-----

Apéndice 8. Descriptores identificados para las muestras de Caturra Zona Baja (*cont.*)

Descriptores Percibidos	Intensidad Percibida	Compuestos	Descriptores obtenidos por LRI	LRI	Referencias
Muestra 4 T					
Pimiento Verde Cebolla	3	linalyl formate	coriander	1223	Kovats
Café tostado	1	-----	-----	1224	-----
Tierra	1	-----	-----	1223	-----
Pimiento Verde Cebolla	1	syntexan	garlic	1228	Kovats
Cranberry		mercapto hexyl acetate, 3	grapefruit	1244	UFL
Café Chocolate	1	-----	-----	1427	-----
Cranberry Frutas secas	1	linalyl butyrate ionone, a	pear, sweet dried fruit	1437 1431	Kovats UFL
Café verde	1	----- bicyclogermacrene	----- green, wood	1518 1517	----- Kovats
Pimiento Verde	3	-----	-----	1697	-----

Apéndice 8. Descriptores identificados para las muestras de Caturra Zona Baja (*cont.*)

Descriptores Percibidos	Intensidad Percibida	Compuestos	Descriptores obtenidos por LRI	LRI	Referencias
Muestra 6 T					
Plástico	1	-----	-----	763	-----
		fucoserratene	green, plastic	760	Kovats
Café con Leche	2	-----	-----	826	-----
		furfural	bread, almond, sweet	829	Kovats
		furfural	sweet, bread-like	830	UFL
Pimiento Verde	1	-----	-----	843	-----
		(E)-2-hexenol	green, leaf	844	Kovats
Café verde	1	-----	-----	855	-----
		hexanol	green	851	Kovats
		hexen-1-ol, (E)-3	green	851	UFL
		(E)-2-hexenol	green, leaf	853	Kovats
		2-hexenal	green	854	Kovats
hexen-1-ol, (Z)-3	green	855	UFL		
Cebolla	1	-----	-----	881	-----
		o-picoline	Sweat	886	Kovats
		allyl isothiocyanate, allylpol	sulfur, pungent, garlic	887	Kovats
Pimiento Verde	3	o-picoline	Sweat	886	Kovats
		allyl isothiocyanate, allylpol	sulfur, pungent, garlic	887	Kovats

Apéndice 8. Descriptores identificados para las muestras de Caturra Zona Baja (*cont.*)

Descriptores Percibidos	Intensidad Percibida	Compuestos	Descriptores obtenidos por LRI	LRI	Referencias
Muestra 6 T					
Pimiento Verde Cebolla	1	----- diethyl disulfide	----- garlic, burnt rubber	931 929	----- UFL
Pimiento Verde Cebolla	2	----- 5-(methylthio)-valeronitrile hexyl acetate y 2,3,4,5-tetrahydroanisole	----- broccoli, cabbage herb, spice	1016 1015 1014	----- Kovats Kovats
Pimiento Verde Cebolla	2	----- cineole, 1,8	----- spicy	1039 1032	----- UFL
Abombado	2	----- acetophenone phenylacetaldehyde	----- must pungent	1040 1041 1047	----- Kovats UFL
Acetona Dulce	2	----- hydroxy-2,5-dimethyl-3(2H)-furanone, 4 (Furaneol) 2,5-dimethyl-4-hydroxy-3[2H]-furanone	----- caramel, cotton candy caramel	1059 1062 1064	----- UFL Kovats
Cotton Candy Dulce Café	2	propyl hexanoate ethyl heptanoate	fruit fruity, wine-like, powerful	1097 1095	Kovats UFL

Apéndice 8. Descriptores identificados para las muestras de Caturra Zona Baja (*cont.*)

Descriptores Percibidos	Intensidad Percibida	Compuestos	Descriptores obtenidos por LRI	LRI	Referencias
Muestra 6 T					
Café Quemado Tostado	1	----- 2-acetyl-2-thiazoline 3-hydroxy-4,5-dimethyl-2(5H)-furanone maltol	----- roast cotton candy, spice, maple cotton candy, sweet	1110 1105 1107 1108	----- Kovats Kovats,UFL UFL
Guayacol Café con Leche	2	2-phenylethyl alcohol trimethyl-2-cyclohexen-1-one, 3,5,5 2-phenylethyl alcohol (-)-cis-rose oxide	honey, spice sweet, , tobacco honey, spice, rose, lilac sweet, rose	1119 1118 1118 1117	Kovats UFL Kovats Kovats
Humedad	2	----- pinenol	----- must, dust	1121 1123	----- Kovats
Hierba	2	----- octadienal, (E,E)-2,4	----- green	1122 1121	----- UFL
Caramelo	1	----- sesquiphellandrene	----- sweet	1145 1149	----- Kovats
Café verde	1	nonadienal, (E,Z)-2,6 2,6-nonadienal nonanol	green green green	1153 1154 1154	UFL Kovats Kovats

Apéndice 8. Descriptores identificados para las muestras de Caturra Zona Baja (cont.)

Descriptores Percibidos	Intensidad Percibida	Compuestos	Descriptores obtenidos por LRI	LRI	Referencias
Muestra 6 T					
Café verde	1	----- dimethyloctadienal	----- green	----- 1186	----- Kovats
Café verde	2	-----	-----	1225	-----
Pimiento Verde Cebolla	1	----- syntexan	----- garlic	1226 1228	----- Kovats