

SEP  
SECRETARÍA DE  
EDUCACIÓN PÚBLICA



TECNOLÓGICO NACIONAL DE MÉXICO

DIVISIÓN DE ESTUDIOS DE POSGRADO E INVESTIGACIÓN

OPCIÓN I.- TESIS

TRABAJO PROFESIONAL

“APLICACIÓN DE LA ESPECTROSCOPIA INFRARROJA  
(MIR) PARA LA VALIDACIÓN DE COMPUESTOS DE  
MANGO (*Mangifera indica*) Y ZANAHORIA  
(*Daucus carota*)”.

QUE PARA OBTENER EL GRADO DE:  
MAESTRO EN CIENCIAS  
EN INGENIERÍA QUÍMICA

PRESENTA:

*I.Q. Juan Pablo Candenario Estevez*

DIRECTOR DE TESIS:

*Dra. Guadalupe Luna Solano*

CODIRECTOR DE TESIS:

*Dra. Alejandra Ramírez Martínez*



ORIZABA, VERACRUZ, MÉXICO.

MAYO 2018





FECHA: 30/05/2018  
DEPENDENCIA: POSGRADO  
ASUNTO: Autorización de Impresión  
OPCIÓN: I

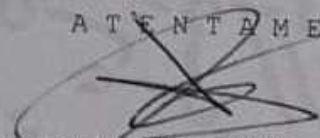
C. JUAN PABLO CANDELARIO ESTEVEZ  
CANDIDATO A GRADO DE MAESTRO EN:  
CIENCIAS EN INGENIERIA QUIMICA

De acuerdo con el Reglamento de Titulación vigente de los Centros de Enseñanza Técnica Superior, dependiente de la Dirección General de Institutos Tecnológicos de la Secretaría de Educación Pública y habiendo cumplido con todas las indicaciones que la Comisión Revisora le hizo respecto a su Trabajo Profesional titulado:

"APLICACION DE LA ESPECTROSCOPIA INFRARROJA (MIR) PARA LA VALIDACION DE COMPUESTOS DE MANGO (MANGIFERA INDICA) Y ZANAHORIA (DAUCUS CAROTA)".

Comunico a Usted que este Departamento concede su autorización para que proceda a la impresión del mismo.

ATENTAMENTE

  
RUBEN POSADA GOMEZ

JEFE DE LA DIV. DE ESTUDIOS DE POSGRADO

C.A. TITULACIÓN



SECRETARIA DE  
EDUCACIÓN PÚBLICA  
INSTITUTO  
TECNOLÓGICO  
DE ORIZABA

ggc



SEP

SECRETARÍA DE  
EDUCACIÓN PÚBLICA



Subsecretaría de Educación Superior  
Tecnológico Nacional de México  
Instituto Tecnológico de Orizaba

FECHA : 07/02/2018

ASUNTO: Revisión de Trabajo Escrito

C. RUBEN POSADA GOMEZ  
JEFE DE LA DIVISION DE ESTUDIOS  
DE POSGRADO E INVESTIGACION.  
P R E S E N T E

Los que suscriben, miembros del jurado, han realizado la revisión de la Tesis del (la) C. :

JUAN PABLO CANDELARIO ESTEVEZ

la cual lleva el título de:

"APLICACION DE LA ESPECTROSCOPIA INFRARROJA (MIR) PARA LA VALIDACION DE COMPUESTOS DE MANGO (MANGIFERA INDICA) Y ZANAHORIA (DAUCUS CAROTA)".

Y concluyen que se acepta.

A T E N T A M E N T E

PRESIDENTE : DRA. GUADALUPE LUNA SOLANO

SECRETARIO : DRA. ALEJANDRA RAMIREZ MARTINEZ

VOCAL : DR. DENIS CANTU LOZANO

VOCAL SUP. : M.I. NORMA ALEJANDRA VALLEJO CANTU

FIRMA  
FIRMA  
FIRMA  
FIRMA

EGRESADO(A) DE LA MAESTRIA EN CIENCIAS EN INGENIERIA QUIMICA

OPCION: I Tesis



Avenida Oriente 9 Núm. 852. Colonia Emiliano Zapata, C.P. 94320 Orizaba, Veracruz, México

Teléfonos (272) 7 24 40 96 Fax. (272) 7 25 17 28

e-mail: Orizaba@itorizaba.edu.mx www.itorizaba.edu.mx





INSTITUTO TECNOLÓGICO DE ORIZABA  
Aviso de Realización del Acto de Recepción Profesional



Referencia a la Norma ISO 9001; 7.5.1

Revisión: OR-I 01

Código: ITORI-AC-PO-008-03

Página 1 de 1

Fecha: 19/05/2018

Opción: I Tesis

C. Integrantes del jurado


Presidente: DRA. GUADALUPE LUNA SOLANO  
Secretario: DRA. ALEJANDRA RAMIREZ MARTINEZ  
Vocal: DR. DENIS CANTU LOZANO  
Vocal Sup.: M.I. NORMA ALEJANDRA VALLEJO CANTU

Por este medio le informo que el Acto de Recepción Profesional del

C. JUAN PABLO CANDELARIO ESTEVES

con No. de control M11010119 egresado del Instituto Tecnológico de Orizaba,  
pasante de la maestría en: CIENCIAS EN INGENIERIA QUIMICA se  
realizará el día: Viernes 29 de Junio de 2018 a las 11:00 horas en  
la SALA AUDIOVISUAL de POSGRADO. Por lo que se pide su puntual asistencia.

ATENTAMENTE

  
ING. JOSUE JOEL RIVERA MONTALVO  
Jefe de la División de Estudios Profesionales

c.c.p. Archivo  
c.c.p. Candidato  
c.c.p. Recursos Humanos  
c.c.p. Departamento Académico  
c.c.p. Departamento de Servicios Escolares



**SEP**

SECRETARÍA DE  
EDUCACIÓN PÚBLICA



Subsecretaría de Educación Superior  
Tecnológico Nacional de México  
Instituto Tecnológico de Orizaba

## **DIVISIÓN DE ESTUDIOS DE POSGRADO E INVESTIGACIÓN**

### **OPCION I.- TESIS**

### **TRABAJO PROFESIONAL**

APLICACIÓN DE LA ESPECTROSCOPÍA (MIR) PARA  
LA VALIDACIÓN DE COMPUESTOS DE MANGO (*Mangifera indica*) Y  
ZANAHORIA (*Daucus carota*)

QUE PARA OBTENER EL GRADO DE:

### **MAESTRO EN CIENCIAS EN INGENIERÍA QUÍMICA**

PRESENTA:  
**JUAN PABLO CANDELARIO ESTEVEZ**

DIRECTOR DE TESIS:  
**DRA. GUADALUPE LUNA SOLANO**

**ORIZABA, VER, MÉXICO**

**OCTUBRE DE 2017**



Avenida Oriente 9 Núm. 852, Colonia Emiliano Zapata. C.P. 94320 Orizaba, Veracruz, México  
Teléfonos: (272) 7 24 40 96 Fax. (272) 7 25 17 28  
e-mail: Orizaba@itorizaba.edu.mx www.itorizaba.edu.mx







---

## RECONOCIMIENTOS

La presente investigación se realizó en el Instituto Tecnológico de Orizaba en la División de Estudios de Posgrado e Investigación, bajo la asesoría y coordinación de la Dra. Guadalupe Luna Solano y Dra. Alejandra Ramírez Martínez. A continuación, se presenta los congresos y publicación obtenidas de esta tesis.

Presentaciones en congresos:

- 2017 Ponencia: Aplicación de la espectroscopía MIR para la determinación de ácido cítrico, ascórbico y azúcar en muestras frescas y deshidratadas de zanahoria. Academia Journals. Efectuado en el Instituto Tecnológico de Celaya. Celaya, Guanajuato. México. 2017.
- 2017 Ponencia: Determinación de parámetros característicos del proceso de secado de mango y zanahoria aplicando modelos cinéticos. Presentado en el 3er Congreso Nacional multidisciplinario de Educación, Ciencia y Tecnología. (CONAMTEC). Efectuado en el Instituto tecnológico de Pachuca. Pachuca, Hidalgo. México. 2017.
- 2017 Poster: Comparación de métodos analíticos para la determinación de compuestos presentes en mango y zanahoria. Presentado en el 3er Congreso Nacional multidisciplinario de Educación, Ciencia y Tecnología. (CONAMTEC). Efectuado en el Instituto tecnológico de Pachuca. Pachuca, Hidalgo. México. 2017.

---

## RESUMEN

Aplicación de la espectroscopia infrarroja (MIR) para la validación de compuestos de mango (*Mangifera indica*) y zanahoria (*Daucus carota*).

**Elaborado por:** Juan Pablo Candelario Estevez

**Asesor:** Dra. Guadalupe Luna Solano  
Dra. Alejandra Ramírez Martínez

En la actualidad diversas industrias aplican técnicas analíticas complejas (como HPLC, RMN, espectroscopia de adsorción atómica, conductimetría, y análisis por química húmeda) para la determinación de compuestos específicos; sin embargo, al aplicar estas técnicas se demanda tiempo y gasto en reactivos; además, de generar grandes cantidades de residuos por el tratamiento de muestras para su análisis. Debido a esto, es necesario determinar y/o desarrollar nuevas técnicas para el análisis de diversos componentes en matrices de estudio.

La espectroscopía infrarroja junto con las técnicas quimiométricas, permiten cuantificar analitos específicos e investigar de manera rápida y eficaz la calidad y seguridad en los alimentos, en un tiempo considerablemente corto. Es por ello, que el objetivo de este trabajo fue aplicar la espectroscopía infrarroja media para la validación de compuestos presentes en muestras frescas y deshidratadas de mango y zanahoria. Por lo que; fue utilizado, un espectrómetro infrarrojo y regresión de mínimos cuadrados para la obtención de modelos matemáticos que permitan predecir el contenido de azúcar total (CAT), glucosa (CG), fructosa (CF), ácido cítrico (CAC) y L-ascórbico (CAA). Las muestras deshidratadas de mango y zanahoria en hojuelas (diámetro 2 cm y espesor 0.2 cm) se les aplicó un proceso de secado a 60 °C. Las muestras deshidratadas presentaron un contenido de humedad (%X) inferior al 10 % en peso y valores de actividad de agua ( $a_w$ ) fueron inferiores a 0.5, lo que indica una estabilidad microbiológica. Los modelos matemáticos desarrollados mostraron ser efectivos para obtener resultados específicos de CAT, CG, CF, CAC y CAA presentando coeficientes de regresión superiores a 0.8 ( $R^2 > 0.8$ ). Además, esta técnica redujo el tiempo de análisis y la



---

cantidad de residuos para el análisis de muestras, demostrando el potencial de la quimiometría.

## **ABSTRACT**

### **Application of infrared spectroscopy (MIR) for validation of mango (Mangifera indica) and carrot (Daucus carota) components**

**By:** Juan Pablo Candelario Estevez

**Advisor:** Dra. Guadalupe Luna Solano

Dra. Alejandra Ramírez Martínez

Several industries apply analytical techniques complex (such as HPLC, atomic adsorption spectroscopy, conductometry and wet chemical analysis) to analysis the specific components, however, applying these techniques requires time, reactive, and getting large wastes by the sample treatments for analysis. Due this problem, it is necessary determine and/or develop new techniques for the analysis of several components into study matrices.

Infrared spectroscopy with chemometric techniques allows the quantification of specific analytes and research the quality and safety into food, in a feasible, fast and affective manner considerably short time. Due to above, the aim in this work was to apply infrared spectroscopy MIR for validation of compound into samples fresh and dehydrated of mango and carrot. So, an infrared spectrometer and least squares regression were used to obtain mathematical models that allows predicting the content total sugar (CAT), glucose (CG), Fructose (CF), citric acid (CAC) and L-ascorbic (CAA). To obtain dehydrate samples of mango and carrot slices (0.2 cm thickness and 2 cm diameter), the drying process was applicated at 60 °C. the dehydrate samples showed a moisture content (%X) and values of water activity were lower than 10 % by weight and 0.5, respectively. Indicating a microbiological stability. The mathematical models developed were effective to obtain specific results of CAT, CG, CF, CAC and CAA; presenting regression coefficients greater than 0.8 ( $R^2 > 0.8$ ). In addition, this technique reduced the time of analysis and the amount of waste for the analysis of samples, this showed the great potential of chemometric techniques.

---

## ÍNDICE

LISTA DE FIGURAS	i
LISTA DE TABLAS	ii
INTRODUCCIÓN	1
OBJETIVO GENERAL	2
OBJETIVOS ESPECIFICOS	2
JUSTIFICACIÓN	3
CAPÍTULO 1 FUNDAMENTOS TEÓRICOS	5
1.1 Espectroscopía de infrarrojo	5
1.2 Regiones de la Espectroscopía de infrarrojo	6
1.2.1 Región del Infrarrojo cercano	6
1.2.2 Región del Infrarrojo medio	6
1.2.3 Región del Infrarrojo lejano	7
1.3 Principios de la absorción	7
1.3.1 Modelo mecánico de las vibraciones	9
1.4 Instrumentación	11
1.4.1 Espectrómetros dispersivos	11
1.4.2 Espectrómetros de transformada de Fourier	12
1.5 Técnicas de medición	13
1.5.1 Espectroscopía de reflectancia total atenuada	14
1.6 Aplicaciones de la espectroscopía infrarroja	14
1.7 Métodos de referencia	15
1.8 Quimiometría	16
1.8.1 Regresión de mínimos cuadrados	17
1.8.2 Análisis de los componentes principales (PCA)	17



---

1.8.3 Mínimos cuadrados parciales (PLS)	17
1.9 Proceso de secado	18
1.9.1 Secado por charolas	19
1.10 Calidad de los alimentos	19
1.10.1 Humedad	20
1.10.2 Actividad de agua	20
1.10.3 Color	20
1.11 Mango	21
1.11.1 Generalidades del mango	21
1.11.2 Producción del mango	22
1.12 Zanahoria	23
1.12.1 Generalidades de la zanahoria	23
1.12.2 Producción de la zanahoria	24
1.13 Principales constituyentes en alimentos	25
1.11.1 Carbohidratos	25
1.11.2 Ácidos carboxílicos	27
1.12 Diseño de experimentos	29
1.12 Antecedentes y avances de la Espectroscopía	29
CAPÍTULO 2. MATERIALES Y MÉTODOS	35
2.1 Metodología general	35
2.2 Selección de la muestra	36
2.3 Acondicionamiento de la muestra	36
2.4 Proceso de secado	37
2.4.1 Análisis fisicoquímicos de las muestras en el proceso de secado	39
2.4.1.1 Determinación de humedad	39

---

2.4.1.2 Determinación de actividad de agua	39
2.4.1.3 Determinación de color	39
2.5 Métodos de referencia	40
2.5.1 Determinación de azúcar	40
2.5.2 Determinación de Glucosa/dextrosa	41
2.5.3 Determinación de fructosa	41
2.5.4 Determinación de ácido cítrico	41
2.5.5 Determinación de ácido L-ascórbico	41
2.6 Obtención de la información espectral	42
2.7 Aplicación de la técnica quimiométrica	43
2.8 Validación de los modelos	44
2.9 Diseño experimental	45
CAPÍTULO 3. RESULTADOS Y DISCUSIÓN	48
3.1 Caracterización fisicoquímica del mango y la zanahoria	48
3.2 Proceso de secado por charolas de mango y zanahoria	48
3.2.1 Secado por charolas de hojuelas de mango de mango y zanahoria	49
3.2.1.1 Evolución de la pérdida de humedad en el proceso de secado	49
3.2.1.2 Evolución de la actividad de agua ( $a_w$ ) en el proceso de secado	50
3.2.1.3. Evolución de parámetros de color durante el proceso de secado	51
3.2.1.3.1 Evolución del parámetro L en el proceso de secado	52
3.2.1.3.2 Evolución del parámetro a en el proceso de secado	53
3.2.1.3.3 Evolución del parámetro b en el proceso de secado	54
3.2.1.3.4 Evolución en la diferencia de color $\Delta E$ en el proceso de secado	56
3.3 Métodos de referencia	57
3.4 Análisis de la información espectral	58

---

3.5 Desarrollo y validación de modelos matemáticos	60
3.6 Validación de los modelos	62
REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS	63
APÉNDICES	75
APÉNDICE A	76
APÉNDICE B	80

## LISTA DE FIGURAS

<b>Figura</b>	<b>Pág.</b>
1.1 Naturaleza ondulatoria de un haz de radiación electromagnética de una sola frecuencia (Skoog <i>et al.</i> , 2008)	5
1.2 Espectro de absorción IR de una película de estireno con las regiones del MIR (Skoog <i>et al.</i> , 2008)	7
1.3 Tipos de vibraciones moleculares (Castillo-Martínez, 2007)	8
1.4 Representación del movimiento armónico a) Modelo mecánico de una molécula diatómica (Workman, 1996), b) Diagrama de energía potencial (Skoog <i>et al.</i> 2008)	9
1.5 Diagramas de energía potencial de a) modelo armónico simple y modelo anarmónico (Workman, 1996) y b) modelo anarmónico con niveles de energía vibracional (Castillo-Martínez, 2007)	11
1.6 Espacio de color Hunter L, a, b (HunterLab, 2017)	21
1.7 Estructura química general de los ácidos carboxílicos (Muñoz-Villa <i>et al.</i> , 2014)	27
1.8 Molécula del Ácido L-ascórbico y ácido L-deshidroascórbico (Badui, 2006)	28
2.1 Metodología general para el análisis de componentes en mango ( <i>Mangifera indica</i> ) y zanahoria ( <i>Daucus carota</i> )	35
2.2 Proceso de corte para la obtención de hojuelas de mango	36
2.3 Hojuelas de zanahoria de 2 cm de diámetro	37
2.4 Secador de charolas	37
2.5 Espectrómetro infrarrojo modelo EFT 2500	44
3.1 Evolución de la pérdida de humedad en el proceso de secado a 60 °C en hojuelas de a) mango y b) zanahoria	49
3.2 Evolución de la actividad de agua en el proceso de secado a 60°C en hojuelas de a) mango y b) zanahoria	50
3.3 Evolución de color en el parámetro L en proceso de secado a 60 °C en hojuelas de a) mango y b) zanahoria	52



<b>Figura</b>		<b>Pág.</b>
3.4	Evolución de color en el parámetro a en el proceso de secado a 60 °C en hojuelas de a) mango y b) zanahoria	53
3.5	Evolución de color en el parámetro b en el proceso de secado a 60 °C en hojuelas de a) mango y b) zanahoria	55
3.6	Evolución de color en el parámetro $\Delta E$ en el proceso de secado a 60 °C en hojuelas de a) mango y b) zanahoria	57
3.7	Información espectral de hojuelas de: Mango a) fresca, b) deshidratada y Zanahoria c) fresca y d) deshidratada	59

### LISTA DE TABLAS

<b>Tabla</b>		<b>Pág.</b>
1.1	Contenido nutrimental del mango	22
1.2	Principales estados productores de mango	23
1.3	Contenido nutrimental de la zanahoria	24
1.4	Producción de zanahoria en México	25
2.1	Especificaciones del secador por charolas	38
2.2	Características físicas del espectrómetro IR-FT	42
2.3	Especificaciones del equipo infrarrojo IR-FT	42
2.4	Diseño experimental para la aplicación de la espectroscopía FT-IR	45
2.5	Experimentos para la aplicación de la Espectroscopía para la determinación de compuestos en mango y zanahoria	45
3.1	Características físicas de las muestras para el análisis	48
3.2	Analitos cuantificados en hojuelas de mango y zanahoria por cada 100 g	58
3.3	Modelos matemáticos para la predicción en muestras de mango Manila	60

Tabla		Pág.
3.4	Análisis estadístico de los modelos de predicción en muestras de mango	61
3.5	Modelos matemáticos para la predicción en muestras de zanahoria	61
3.6	Análisis estadístico de los modelos de predicción en muestras de zanahoria	62

## INTRODUCCIÓN

La calidad las frutas y los vegetales está determinada por la combinación de una serie de parámetros externos como el color, tamaño y forma y por atributos internos tales como el contenido de sólidos solubles, vitaminas, proteínas, minerales, acidez, pH, etc., los cuales son identificados y cuantificados comúnmente por métodos químicos convencionales (Munawar *et al.*, 2016). Éstos demandan tiempo, reactivos y son altamente costosos (Egidio *et al.*, 2009; Alamprese y Casiraghi, 2015).

El mango (*Mangifera indica*) es una de las frutas tropicales más importantes alrededor del mundo debido a su sabor, apariencia y composición nutricional, por lo cual es altamente demandado en el mercado internacional (Munawar *et al.*, 2016). Por otro lado, la zanahoria (*Daucus carota*) es uno de los cultivos más importantes debido a que posee cantidades considerables de  $\beta$ -caroteno y vitaminas B1, B2, B6 y B12 (Zielinska y Markowski, 2007). Sin embargo, debido a su elevado contenido de nutrientes y humedad, estos productos son propensos a reacciones de descomposición (Domínguez-Niño *et al.*, 2016).

La Espectroscopía infrarroja ha crecido constantemente en los últimos años y ha sido usada como una herramienta analítica efectiva en diversas áreas de investigación. Comparada con los métodos clásicos para el análisis cualitativo y cuantitativo, la espectroscopía infrarroja ofrece rapidez en el análisis de muestras, además, la muestra requiere poco o ninguna pretratamiento para ser analizada (Egidio *et al.*, 2009; Alamprese y Casiraghi, 2015; Forina *et al.*, 2015; Guo *et al.*, 2016; Márquez *et al.*, 2016). Tradicionalmente, la Espectroscopía cercana (NIR) ha sido aplicada extensamente en comparación con la Espectroscopía infrarroja media (MIR), sin embargo, en años recientes, el interés en el estudio de MIR ha aumentado debido a sus avances instrumentales y técnicos. El objetivo del proyecto es aplicar la espectroscopía infrarroja media para la validación de compuestos presentes en muestras frescas y deshidratadas de mango y zanahoria.

---

## **OBJETIVO GENERAL**

Aplicar la espectroscopía infrarroja media para la validación de compuestos presentes en muestras frescas y deshidratadas de mango y zanahoria.

## **OBJETIVOS ESPECIFICOS**

Cuantificar el contenido de glucosa, fructosa, sacarosa, ácido cítrico y ácido L-ascórbico mediante métodos de referencia en muestras frescas y deshidratadas de mango y zanahoria.

Obtener información espectral de glucosa, fructosa, sacarosa, ácido cítrico y ácido L-ascórbico, mediante un espectrómetro FT-IR en muestras frescas y deshidratadas de mango y zanahoria.

Desarrollar modelos de predicción de glucosa, fructosa, sacarosa, ácido cítrico y ácido L-ascórbico presente en muestras frescas y deshidratadas de mango y zanahoria.

Obtener el error relativo de los modelos de predicción de glucosa, fructosa, sacarosa, ácido cítrico y ácido L-ascórbico en muestras frescas y deshidratadas de mango y zanahoria.



---

## JUSTIFICACIÓN

El mango (*Mangifera indica*) y la zanahoria (*Daucus carota*) son una fuente primordial de vitaminas y minerales que los hacen altamente demandantes en el mercado internacional. Sin embargo, son considerados perecederos por su elevado contenido de humedad. La calidad de las frutas y verduras está determinada por la combinación de una serie de parámetros externos como el color, tamaño y forma y por atributos internos tales como el contenido de sólidos solubles, vitaminas, proteínas, minerales, acidez, pH, etc., los cuales son cuantificados comúnmente por métodos químicos convencionales.

A pesar de que existen diferentes métodos químicos para la identificación de compuestos de los alimentos, estos demandan tiempo, reactivos y son altamente costosos, debido a ello, se tiene el interés de la aplicación de la espectroscopía infrarroja media (MIR) para el análisis de compuestos en los alimentos, debido a su alta sensibilidad, selectividad, elevada calidad espectral, y rápida respuesta, además es un método no destructivo, no invasivo y económico. La Espectroscopía media es una herramienta analítica válida y eficaz, que puede ser utilizada como una alternativa a los métodos químicos convencionales y métodos instrumentales modernos (cromatografía, HPLC, etc.). La información que se obtiene de los espectros infrarrojos MIR, se debe a la interacción de energía radiante con los enlaces de los constituyentes, así como también en la forma y la intensidad por lo que provee una única “huella dactilar” en términos de los picos de las muestras e intensidades máximas. Permitiendo realizar el análisis multivariado de diversos compuestos presentes en los alimentos frescos y deshidratados. El objetivo del proyecto es aplicar la espectroscopía infrarroja media para la validación de compuestos presentes en muestras frescas y deshidratadas de mango (*Mangifera indica*) y zanahoria (*Daucus carota*).

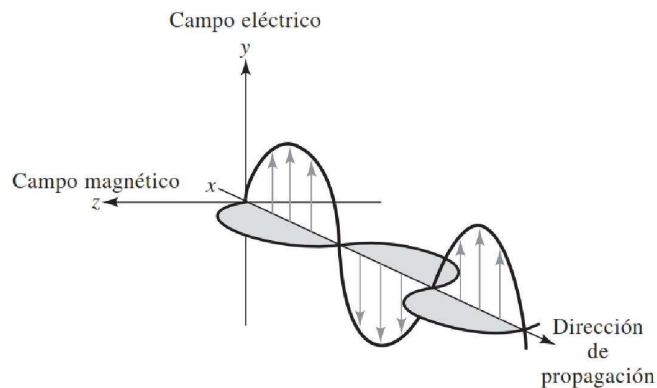
# **CAPÍTULO 1**

## **FUNDAMENTOS TEÓRICOS**

## CAPÍTULO 1 FUNDAMENTOS TEÓRICOS

### 1.1 Espectroscopía de infrarrojo

La espectroscopía infrarroja (IR) es una técnica que permite el estudio de la composición y estructura química de compuestos heterogéneos y materiales biológicos, se basa en la interacción de la radiación electromagnética con la materia a analizar (Sivam *et al.*, 2013). Las propiedades de la radiación electromagnética son descritas por medio de modelos ondulatorios sinusoidales (Figura 1.1), que incorpora características como longitud de onda, frecuencias, velocidad y amplitud (Skoog *et al.*, 2008).



**Figura 1.1** Naturaleza ondulatoria de un haz de radiación electromagnética de una sola frecuencia (Skoog *et al.*, 2008).

El estudio de la espectroscopía comenzó en 1800 con Herschel, quien observó la existencia de radiación delante de la proporción roja del espectro visible (Givens *et al.*, 1997). En 1881, Abney y Festing realizaron algunos trabajos realizados en la región cercana del espectro infrarrojo (700 a 1200 nm). Los espectros realizados se encontraban en un rango de 700 a 1200 nm. (Ciurczak y Drennen, 2002). En 1950, empezaron a ser comercializados los primeros espectrómetros infrarrojos, y a mediados de 1970, se desarrollaron equipos que poseían elementos que dispersaban la luz y se introdujeron los primeros equipos con Transformada de Fourier (FT). Estos instrumentos presentaban un interferómetro en el que se aplicaron la modelación matemática (transformada de Fourier) para la estabilización del proceso. Así en 1980,

se desarrollaron nuevas técnicas para la Espectroscopía infrarroja media, en el que se desarrolló la ATR (Reflexión total atenuada), ofreciendo diversas ventajas entre las que destaca la velocidad del análisis, análisis de muestras sin pretratamiento, etc. (Quilitzsch *et al.*, 2005). Actualmente, las aplicaciones de la Espectroscopía abarcan diversos sectores para el análisis productos, por ejemplo, productos agroalimentarios, farmacéuticos, fibras textiles, industria química, petroquímica, entre otros (Castillo-Martínez, 2007; Peets *et al.*, 2017).

## 1.2 Regiones de la Espectroscopía de infrarrojo

La Espectroscopía infrarroja se encuentra dividida en tres regiones: la región infrarroja cercana, infrarroja media y la infrarroja lejana; los cuales presentan características diferentes y permiten el análisis de diversos grupos funcionales.

### 1.2.1 Región del Infrarrojo cercano

La Espectroscopía de la región cercana (NIR) se caracteriza por la combinación y sobretonos de los enlaces O-H, C-H y N-H, es definida en un rango de longitud de onda de 730 a 2500 nm. (Workman, 1996; Quilitzsch *et al.*, 2005; Egido *et al.*, 2009).

### 1.2.2 Región del Infrarrojo medio

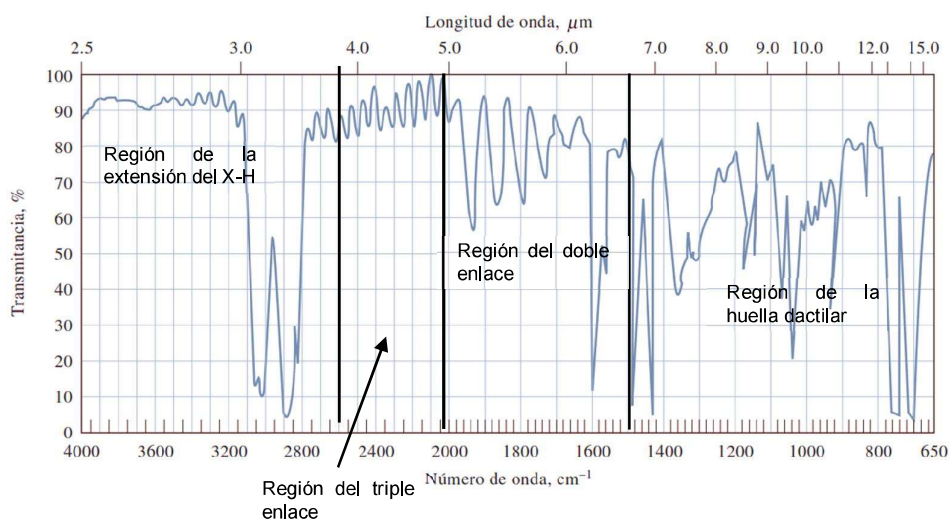
La región media (MIR) se encuentra comprendida entre 2500 a  $5 \times 10^4$  nm y es caracterizada por las vibraciones fundamentales de los enlaces químicos C-C, C-H, O-H, C=O y N-H (Workman, 1996; Quilitzsch *et al.*, 2005; Ramírez-Rodríguez *et al.*, 2005; Vila-López *et al.*, 2006; Egido *et al.*, 2009;).

Además, esta región se divide en 4 subregiones (Figura 1.2) y son generalizadas como: la región de la extensión del X-H ( $4000 - 2500 \text{ cm}^{-1}$ ), la región del triple enlace ( $2500 - 2000 \text{ cm}^{-1}$ ), la región del doble enlace ( $2000 - 1500 \text{ cm}^{-1}$ ) y la región de la huella dactilar ( $1500 - 600 \text{ cm}^{-1}$ ) (Stuart, 2004).



### 1.2.3 Región del Infrarrojo lejano

La espectroscopía infrarroja lejana (FIR) es caracterizada por la rotación de las moléculas, encontrándose entre una longitud de onda de  $5 \times 10^4$  a  $10^6$  nm (Workman, 1996; Givens *et al.*, 1997; Settle, 1997).



**Figura 1.2** Espectro de absorción IR de una película de estireno con las regiones del MIR (Skoog *et al.*, 2008)

### 1.3 Principios de la absorción

Generalmente, la Espectroscopía óptica ocupa la información sistemática de la interacción entre la radiación electromagnética con la materia (átomos o moléculas) de líquidos o sólidos (Quilitzsch *et al.*, 2005), otorgando información de los grupos funcionales tales como C-C, C-H, O-H, C=O y N-H (Ramírez-Rodríguez *et al.*, 2005; Vila-López *et al.*, 2006; Egido *et al.*, 2009).

En la espectroscopía MIR se irradia energía infrarroja con longitudes de onda entre 2500 a 50,000 nm a una muestra, en donde parte de la energía electromagnética es absorbida selectivamente de acuerdo a la frecuencia de vibración de la molécula generando un cambio en el momento dipolar y en la polarizabilidad del enlace químico, respectivamente, de esta forma produce información vibracional diferente, generando

un espectro específico para la muestra analizada (Ramírez-Rodríguez *et al.*, 2005; Sivam *et al.*, 2013).

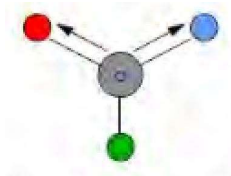
Para que una molécula pueda absorber radiación infrarroja, la energía de la radiación incidente ha de coincidir con la diferencia de energía entre dos estados energéticos, produciendo un cambio en el momento dipolar de la molécula debido a movimientos vibratorios. Los movimientos vibratorios que se pueden presentar en la molécula son de dos tipos (Castillo-Martínez, 2007; Skoog *et al.*, 2008):

Movimientos de estiramiento: es la vibración en la que se produce un cambio en la distancia interatómica a lo largo del eje de enlace entre dos átomos.

Movimientos de flexión: es el movimiento que produce un cambio en el ángulo de enlace y son de cuatro tipos: tijereteo, balanceo, aleteo y de torsión.

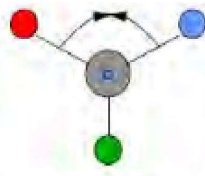
En la Figura 1.3, se muestra los tipos de vibraciones de una molécula con más de dos átomos.

#### Vibraciones de estiramiento

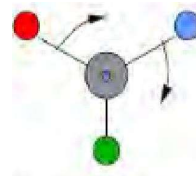


Simétrico

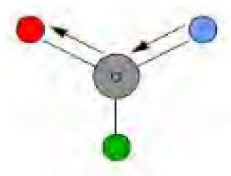
#### Vibraciones de flexión



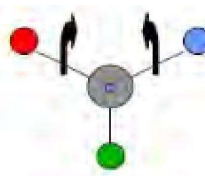
Tijereteo en el plano



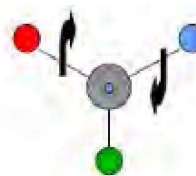
Balanceo en el plano



Asimétrico



Aleteo fuera del plano



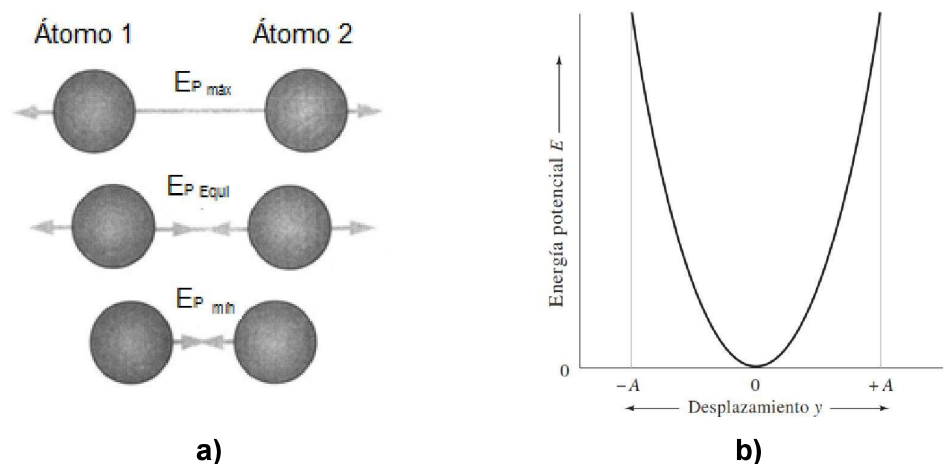
Torsión fuera del plano

**Figura 1.3** Tipos de vibraciones moleculares (Castillo-Martínez, 2007)

### 1.3.1 Modelo mecánico de las vibraciones

La luz (energía infrarroja) de un espectrómetro infrarrojo interacciona con la matriz de la muestra, y sus moléculas generaran un cambio o algún movimiento intermolecular específico por lo que existirá un cambio en el momento dipolar de la molécula. Sin embargo, las características de vibración de una molécula, se puede representar mediante un modelo mecánico que consta de dos masas (átomos) unidas por un resorte (enlace) (Figura1.4 a); cuando una de las masas genere una perturbación se producirá una vibración a lo largo del eje denominado movimiento armónico simple (Workman, 1996; Hui, 2006; Skoog *et al.*, 2008).

El movimiento armónico simple de una molécula se puede graficar como la energía potencial de los átomos en el enlace, esto formaría un pozo de energía potencial que cambia constantemente (Figura1.4b); cuando los átomos se encuentran en la posición de equilibrio, la energía potencial se encuentra equilibrada, y cuando las masas se separan la energía potencial es máxima (Workman, 1996; Castillo-Martínez, 2007).



**Figura1.4** Representación del movimiento armónico a) Modelo mecánico de una molécula diatómica (Workman, 1996) y b) Diagrama de energía potencial (Skoog *et al.*2008)

La frecuencia en la que la vibración dipolar depende de la fuerza y las masas de los átomos unidos entre sí. Cuando las vibraciones del oscilador armónico simple son

continuamente cargadas las energías cinéticas y potenciales se regeneran comúnmente. Por lo que la energía total de los enlaces es proporcional a la frecuencia de la vibración ( $\nu$ ), así que, la frecuencia natural de la vibración para los enlaces está dada por la ecuación (1.1):

$$\nu = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{K}{\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2}}} \quad (1.1)$$

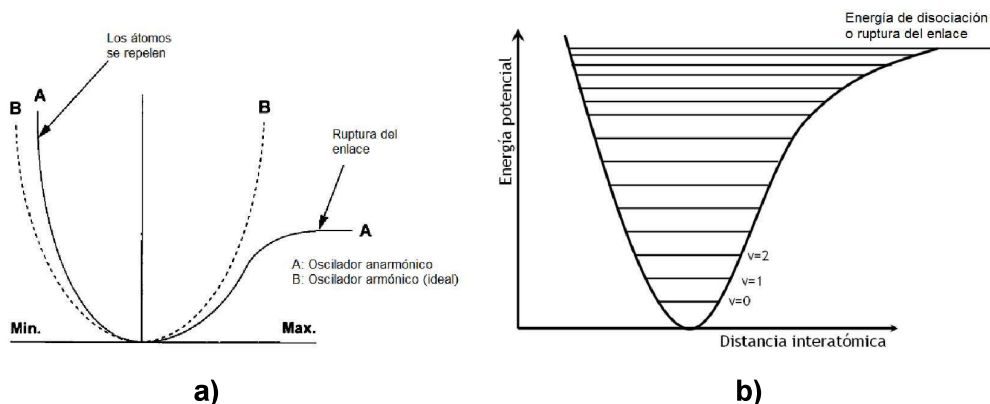
Donde  $K$  es la constante de la fuerza entre los átomos,  $m_1$  y  $m_2$  es la masa de los átomos 1 y 2, respectivamente. Sin embargo, los modelos descritos anteriormente, no describen el comportamiento real de la molécula, debido a esto, el nivel de energía discreta vibracional para cualquier molécula está dada por la ecuación (1.2):

$$E = h\nu \left( v + \frac{1}{2} \right) \quad (1.2)$$

Donde  $h$  es la constante de Planck,  $\nu$  es la frecuencia vibracional del enlace,  $v$  es el número cuántico vibracional (solamente puede tomar valores de 0 y enteros positivos). A este modelo vibracional es incompleto para moléculas reales, en donde se debe tener en cuenta la energía de repulsión coulombica de dos átomos cuando se aproximan, que provoca un mayor aumento de la energía potencial; y en el otro extremo, la disminución de la energía potencial cuando la distancia interatómica se acerca a aquella en la que tiene lugar la ruptura del enlace (Figura 1.5a). El comportamiento de las moléculas reales se acerca más al oscilador anarmónico (Figura 1.5b) (Workman, 1996; Castillo-Martínez, 2007; Skoog *et al.*, 2008).

Por lo tanto, en una molécula real se puede presentar una ruptura entre los enlaces de los átomos generando diferencias significativas sobre los resultados obtenidos, en la Figura 1.5a se presenta la diferencia entre los modelos armónico y anarmónico de una molécula ideal o real.

De modo que la información cuantitativa y cualitativa que contiene los espectros infrarrojos MIR (la forma y la intensidad de los picos) se debe a la interacción de la energía radiante sobre los constituyentes que presenta la muestra, (Kassouf *et al.*, 2016).



**Figura 1.5** Diagramas de energía potencial de a) modelo armónico simple y modelo anarmónico (Workman, 1996) y b) modelo anarmónico con niveles de energía vibracional (Castillo-Martínez, 2007).

## 1.4 Instrumentación

La Espectroscopía infrarroja es una técnica experimental muy versátil, ya que es fácil obtener espectros de muestras en estado líquido, sólido y gaseoso (Stuart, 2004). Los espectrómetros infrarrojos consisten en tres componentes básicos: fuente de radiación, monocromadores y detector (Settle, 1997). Sin embargo, la región infrarroja media (MIR), requiere de instrumentos infrarrojos con aditamentos que los hacen específicamente diferentes, los cuales son el monocromador, interferómetro y policromador (Skoog *et al.*, 2008, Hui, 2006). Y se clasifican en espectrómetros dispersivos y los espectrómetros de transformada de Fourier (Gauglitz y Vo-Dinh, 2003).

### 1.4.1 Espectrómetros dispersivos

Básicamente un espectrómetro dispersivo no varía significativamente con respecto a un espectrómetro FT-IR en su diseño. El haz de radiación IR es dirigida a la muestra y a una muestra de referencia, y posteriormente el haz se combina en una trayectoria

común por medio de un espejo rotatorio. El haz entra en la rejilla del monocromador y finalmente el haz llega al detector para ser cuantificado (Gauglitz y Vo-Dinh, 2003).

#### 1.4.2 Espectrómetros de transformada de Fourier

Los espectrómetros infrarrojos con transformada de Fourier, comúnmente se denominan espectrómetros FT-IR, se encuentran equipados con un dispositivo llamado interferómetro de Michelson, este dispositivo se basa en dividir el haz de luz infrarroja de modo que aumente la intensidad; este haz es reflejado en el espejo fijo y en el espejo móvil, para que retorne nuevamente al divisor de haz y la luz resultante atraviese la muestra y sea cuantificada por el detector. El procedimiento matemático empleado para convertir el interferograma IR a un espectro IR es llamado transformada de Fourier (Sablinskas, 2003; Stuart, 2004).

- Interferómetro de Michelson

El interferómetro de Michelson es uno de los más comunes usados en la Espectroscopía FT-IR. Este dispositivo consiste en dos espejos planos perpendicularmente, donde uno de ellos permite una semireflexión. Los materiales tales como germanio u óxido de hierro se recubren sobre un sustrato “transparente a los infrarrojos” tales como bromuro de potasio o yoduro de cesio para producir divisores de haz para las regiones del infrarrojo medio o cercano (Stuart, 2004).

La fuente de radiación, pasa a través de un divisor de haz “beamsplitter” que dirige la mitad de la radiación a un espejo fijo y la otra mitad a un espejo móvil. Los dos rayos se recombinan en el beamsplitter de una manera constructiva o destructiva dependiendo la posición del espejo. El resultado es un interferograma el cual se convierte por medio de un algoritmo matemático en un diagrama de intensidad en función de la frecuencia (Gauglitz y Vo-Dinh, 2003).



- Fuente de radiación

Para que una fuente de radiación sea aceptable en los estudios espectroscópicos, debe generar un haz de energía radiante suficientemente elevada para que sea detectada y pueda ser cuantificado con facilidad. Además, su potencia de salida debe ser estable durante periodos razonables. La energía radiante de una fuente varía en forma exponencial con el voltaje de la fuente de alimentación. Las fuentes más comunes de los equipos infrarrojos son sólidos inertes calientes a 1500 a 2000 K, una temperatura a la cual la salida máxima radiante ocurre de 1.5 a 1.9  $\mu\text{m}$ . (Skoog *et al.*, 2008). Otra fuente de radiación son los rayos láser (Light amplification by simulated emission of radiation) debido a las características amplificadoras de luz, los rayos láser producen haces de radiación especialmente angostos y extremadamente intensos. Debido a estas características, los rayos láser se han convertido en una fuente primordial para las regiones UV, Visible e IR del espectro (Gauglitz & Vo-Dinh, 2003; Skoog *et al.*, 2008)

- Detectores

Los primeros detectores en la Espectroscopía fueron el ojo humano, una placa o películas fotográficas. En la actualidad, los transductores convierten la energía radiante en una señal eléctrica y han remplazado a los antiguos dispositivos de detección. El detector de rutina de los equipos infrarrojos medios es el DTGS (Deuterated TriGlycine Sulfate) Sulfato de Triglicina Deuterado, el detector opera a temperatura ambiente y presenta una óptima lectura en la escala de la transmitancia (Gauglitz & Vo-Dinh, 2003; Skoog *et al.*, 2008).

### 1.5 Técnicas de medición

Dentro de las técnicas de medición en la Espectroscopía infrarroja es la técnica de transmisión más frecuentemente aplicada debido a que es simple y puede ser utilizada para la caracterización de gases, líquidos y sólidos. La determinación cuantitativa está basada en la ley de Lambert-Beer y en técnicas que permiten realizar mediciones por

medio de la reflectancia (Gauglitz y Vo-Dinh, 2003; Stuart, 2004). El método de reflectancia puede dividirse en dos categorías: reflectancia interna, la medición puede ser tomada usando una celda de reflectancia total atenuada en contacto con la muestra y reflectancia externa, la cual el haz es reflejado directamente sobre la superficie de la muestra (Stuart, 2004).

#### 1.5.1 Espectroscopía de reflectancia total atenuada

La Espectroscopía de reflectancia total atenuada (ATR por Attenuated Total Reflectance) utiliza el fenómeno de reflexión total interna, en el cual un haz de radiación que entra a un cristal someterá a reflexión total interna cuando el ángulo de incidencia en la interfaz entre la muestra y el cristal sea mayor que el ángulo crítico, y parte de la energía será absorbida por la muestra, otorgando la radiación atenuada que no fue absorbida, es cuantificada y se representa en función de la longitud de onda obteniendo un espectros con características espectrales de absorción de la muestra (Stuart, 2004).

### 1.6 Aplicaciones de la espectroscopía infrarroja

La aplicación de la espectroscopía infrarroja es utilizada comúnmente en diversos sectores industriales, debido a que sus técnicas son un camino rápido y confiable para la investigación de la calidad y seguridad de diversos productos manufacturados (De fuentes-Navarta *et al.*, 2008; Ferreira *et al.*, 2014; Giovanelli *et al.*, 2014; Calamari *et al.*, 2016).

La espectroscopía MIR se empezó a utilizar recientemente debido a su alta especificidad, por lo que su aplicación es muy variante y es empleada en la investigación agrícola como una técnica cualitativa para identificar y verificar sustancias puras desconocidas a partir de extractos o destilaciones (Schulz y Baranska, 2009). También es empleado en el análisis que permite el control de contaminantes atmosféricos, el control de la contaminación de aguas, el control y

análisis de suelos (De fuentes-Navarta *et al.*, 2008). Por otra parte, la espectroscopía MIR también ha sido utilizada en el control analítico en los procesos de manufactura para diversos compuestos químicos, farmacéuticos y en el área de los alimentos, debido a su alta especificidad y rápido análisis para el control de la calidad de frutas y verduras, así como también en los productos de origen animal, como los productos lácteos, cárnicos, etc. Además, se ha realizado aplicaciones en el sector clínico, microbiológico y en la determinación de constituyentes en los polímeros (Givens *et al.*, 1997; Ciurczak y Drennen, 2002; Ramírez-Rodríguez *et al.*, 2005; Castillo-Martínez, 2007; Xie *et al.*, 2011; Ferreira *et al.*, 2014; Alamprese y Casiraghi, 2015; Calamari *et al.*, 2016; Kassouf *et al.*, 2016; Lenz *et al.*, 2016; Munawar *et al.*, 2016; Nascimento *et al.*, 2016; Nishikawa *et al.*, 2016; Vagnini *et al.*, 2017).

### **1.7 Métodos de referencia**

Con frecuencia, las determinaciones de componentes en alimentos se realizan por métodos de química húmeda. Estas técnicas son eficientes; sin embargo, requieren de un pretratamiento de la muestra y además de tiempo para realizar la cuantificación (Frizon *et al.*, 2015).

La determinación de azúcares y ácidos orgánicos presentes en alimentos se realizan por métodos sofisticados que requieren de un tratamiento minucioso para la separación de los analitos, tales métodos son la cromatografía, HPLC, espectroscopía de absorción de masas, etc. (Frizon *et al.*, 2015; Ayvaz *et al.*, 2016); estos métodos resultan ser complejos, requieren de un tiempo considerable y son altamente costosos. La evolución del contenido de sólidos solubles y los ácidos orgánicos son propiedades importantes que permiten definir el estado de maduración de las frutas y determina el tiempo de cosecha (Fan *et al.*, 2016).

La determinación de ácido L-ascórbico debe ser analizada rápidamente, debido a que este compuesto es degradado por la acción del oxígeno atmosférico, esta determinación se puede realizar usando una solución estandarizada de 2,6 diclorofenol indofenol (Ranganna, 2008).

La cantidad de ácido cítrico, es determinada mediante la acción de la neutralización mediante una solución alcalina de NaOH (Xie *et al.*, 2011; Munawar *et al.*, 2016). La cuantificación de dextrosa es realiza por medio de la oxidación de soluciones de cloramida T (Egan *et al.*, 1991).

El azúcar total se determina mediante el método de Fehling antes y después de la inversión del azúcar y es corregido por un factor de 0.95. La determinación de fructosa se realiza por medio de espectrómetro FT-IR mediante soluciones de concentración conocida y correlacionando la muestra a analizar (Egan *et al.*, 1991; Zapico-Suárez, 2013).

### **1.8 Quimiometría**

La quimiometría se ha convertido en una parte fundamental de los análisis espectroscópicos infrarrojos (Kassouf *et al.*, 2016). Y es parte esencial en el estudio de matrices complejas como los alimentos, productos farmacéuticos y para la clasificación de los polímeros (Romera-Fernández *et al.*, 2012; Giovenzana *et al.*, 2015; Kassouf *et al.*, 2016). Además, la quimiometría es una herramienta matemática necesaria para extrapolar y obtener información a partir de la información espectral (Giovenzana *et al.*, 2015).

Las técnicas quimiométricas son técnicas estadísticas para la obtención de correlaciones y modelos matemáticos que permiten la calibración del equipo y crear modelos matemáticos para la predicción de compuestos de interés. Dentro de las técnicas estadísticas se encuentra: análisis de componentes principales (PCA), regresión de mínimos cuadrados, regresión de mínimos cuadrados parciales (PLS), entre otras (Vila-López *et al.*, 2006; Romera-Fernández *et al.*, 2012; Giovenzana *et al.*, 2015; Calamari *et al.*, 2016)

### 1.8.1 Regresión de mínimos cuadrados

La regresión de mínimos cuadrados es un método matemático que permite calcular parámetros característicos para modelos matemáticos que permiten la predicción de compuestos. Básicamente se representa mediante la ecuación 1.3.

$$y = mx + b \quad (1.3)$$

Dónde:  $b$  la ordenada al origen, es decir, el valor de  $y$  cuando  $x$  es cero, y  $m$  es la pendiente de la recta. La ecuación 1.3 permitirá realizar modelos matemáticos que permitan la calibración del equipo y predecir una variable de interés. (Skoog *et al.*, 2008; Díaz-Martín *et al.*, 2015).

### 1.8.2 Análisis de los componentes principales (PCA)

Este método estadístico es comúnmente usado como una herramienta que permite la visualización y compresión de datos, reduciendo los datos del espectro dentro de un pequeño conjunto de números, donde la variable ortogonal sobre cada uno de los datos es calculada. Posteriormente, se grafica los valores obtenidos desarrollando y visualizando la tendencia de los datos y creando la ecuación de calibración (Karoui *et al.*, 2010).

### 1.8.3 Mínimos cuadrados parciales (PLS)

Los mínimos cuadrados parciales o regresión de mínimos cuadrados parciales (PLS por su acrónimo en inglés Partial Least Squares) es un método matemático multivariable que es aplicado en diversas ciencias. PLS puede ser visto como un buen método para realizar análisis de regresión, porque los componentes son seleccionados de modo que ellos describen las variables dependientes en cierto sentido (Höskuldsson, 1988; Zhao *et al.*, 2017). PLS ha sido empleado para la calibración de equipos infrarrojos y para la predicción de variables, además que no tiene un bajo valor en error para la predicción de los analitos de interés (Rambla *et al.*, 1997).

## 1.9 Proceso de secado

El proceso que permite preservar las propiedades nutrimentales y organolépticas de los alimentos es el secado. Esta operación ha sido utilizada desde tiempos muy remotos (Villegas-Santiago *et al* 2011; Huang *et al.*, 2016). Además, este proceso unitario es complejo y poco estudiado con respecto a las condiciones del proceso con la finalidad de mantener la calidad del fruto (Villegas-Santiago *et al.*, 2011; Chen *et al.*, 2016), debido a los mecanismos de transferencia de masa y calor acompañados por transformaciones físicas, químicas y cambios de fase (Kerdpiboom *et al.*, 2006; Traffano-Schiffo *et al.*, 2014; Chen *et al.*, 2016).

Por otra parte, el secado de los alimentos posee grandes ventajas dentro de las cuales se encuentra que reduce su peso y volumen, así como también se minimiza los costos de empaquetado, transporte y almacenamiento. Además, permite la estabilidad del producto debido a su bajo contenido de humedad (Ochoa-Martínez *et al.*, 2012; Xiao *et al.*, 2015; Wang *et al.*, 2017).

Existen diversos métodos para el secado de alimentos, como el secado por charolas, aspersión, ósmosis, liofilización, entre otros. Las frutas y vegetales deshidratados son químicamente más estables que los productos frescos, ya que su deterioro es menor debido a agentes microbianos, químicos y bioquímicos (Prakash *et al.*, 2004; Ding *et al.*, 2016).

De acuerdo con la teoría cinética tradicional del proceso de secado se divide en tres etapas. La primera etapa corresponde al período de inducción en el que diferentes mecanismos se acoplan a los de flujo de agua. La segunda etapa representa el periodo en el que la velocidad de secado alcanza su valor máximo permaneciendo esta constante y la última etapa corresponde a la caída de la tasa de secado. En este periodo, el flujo de agua desde el interior hacia la superficie de la muestra es menor que la evaporación del agua superficial. Debido a esto, se producen diversos cambios en la estructura interna de la muestra (Traffano-Schiffo *et al.*, 2014).



El secado con flujos de aire caliente es uno de los métodos más extensamente usados. Sin embargo, el tiempo de secado prolongado y el sobrecalentamiento de la superficie del producto durante esta operación unitaria, resulta en el oscurecimiento de la muestra, pérdida de sabor y decrece la habilidad de rehidratación (Chen *et al.*, 2016).

#### 1.9.1 Secado por charolas

El proceso de secado por charolas es uno de los más sencillos, permitiendo la interacción de la muestra con corrientes de aire caliente en un recinto cerrado. La muestra es colocada en bandejas o charolas las cuales se colocan en el interior del gabinete, donde la muestra se seca al estar expuesto con el flujo de aire caliente. Durante este proceso, el mecanismo de transferencia de agua en el producto, son los siguientes (Villegas-Santiago, 2008):

- El movimiento de agua es debido a las fuerzas capilares
- Difusión del líquido debido al gradiente de concentración
- Difusión superficial
- Difusión del vapor de agua en los poros llenos de aire
- Flujo debido a gradientes de presión
- El flujo debido a la vaporización-condensación del agua

#### 1.10 Calidad de los alimentos

La calidad de los alimentos se debe preservar en cada uno de los pasos desde el manejo, procesamiento, y hasta el almacenamiento de los productos, debido a que los consumidores aprecian los productos con mínimas modificaciones (Megías-Pérez *et al.*, 2014; Giovenzana *et al.*, 2015). Por lo que la calidad de los alimentos se basa en sus propiedades físicas, nutritivas y el contenido de compuestos bioactivos, tales como la vitamina C, antioxidantes y otros constituyentes que están relacionados a los beneficios hacia la salud (Lankmayr *et al.*, 2004; Megías-Pérez *et al.*, 2014; Giovenzana *et al.*, 2015). Sin embargo, la calidad de los alimentos deshidratados se

ve afectada por el proceso de secado empleado, así como el tratamiento y manejo antes y después del proceso de secado (Tatemoto *et al.*, 2015). Debido a esto, en los alimentos deshidratados, se debe tener presente tres parámetros primordiales, los cuales son la humedad, actividad de agua ( $a_w$ ) y el color.

#### 1.10.1 Humedad

El agua es el principal constituyente de los alimentos, ayudándoles a mantener su frescura, sabor, textura y color; por lo que, el contenido de humedad es uno de los atributos críticos en la determinación de la calidad de los productos alimenticios (Pu *et al.*, 2016). Debido que, los alimentos poseen un elevado contenido de agua pueden desarrollar reacciones químicas, enzimáticas y microbiológicas, reduciendo la calidad y contenido nutricional, disminuyendo su valor comercial (Villegas-Santiago, 2008; Xiao *et al.*, 2015).

#### 1.10.2 Actividad de agua

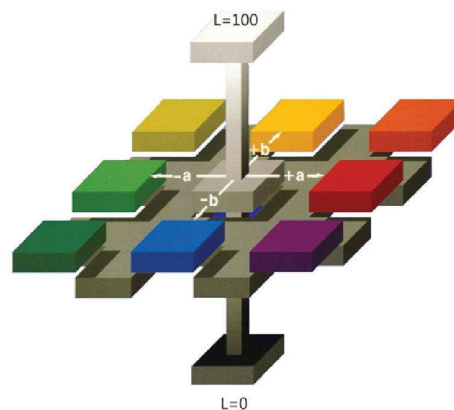
La actividad de agua ( $a_w$ ) en los productos, está altamente correlacionada con el contenido de humedad, es un parámetro crítico, que determina la cantidad de agua disponible en un alimento para realizar reacciones deteriorativas y el crecimiento microbiano, por lo que indica la estabilidad de los alimentos. Este parámetro toma valores de 0 a 1, en el que los alimentos estables se encuentran por debajo de 0.5, en donde el crecimiento microbiano y reacciones enzimáticas no logran efectuarse. (Villegas-Santiago, 2008; Martuscelli *et al.*, 2017).

#### 1.10.3 Color

La calidad de un alimento, sin tomar en cuenta los aspectos sanitarios, toxicológicos y nutricionales, se basan en el color, sabor, olor y textura. Sin embargo, el primer acercamiento del consumidor al alimento es el color, esto influye en la aceptabilidad o rechazo del producto por los consumidores (Badui, 2006; Shenoy *et al.*, 2014; Huang

*et al.*, 2016). Los colores de los alimentos se deben a diversos compuestos, principalmente orgánicos, algunos de los cuales se producen durante su manejo y procesamiento además de reacciones químicas y enzimáticas. El oscurecimiento enzimático es una de las reacciones más importantes en frutas y verduras durante el procesamiento térmico (Wang *et al.*, 2017).

El color de los alimentos comúnmente es determinado mediante el espacio de color HunterLab. El espacio de color Hunter es un espacio rectangular que posee 3 dimensiones. Se basa en la teoría de los Colores-Opuestos de Hering (Figura 1.6). Con estas coordenadas se define un espacio cartesiano en donde el eje L corresponde a la luminosidad que posee un rango de 0 (negro) a 100 (blanco). El parámetro a se encuentra definido por el color rojo para valores positivos y verde para valores negativos. El parámetro b define la componente amarillo-azul, donde el color amarillo define valores positivos y azul para valores negativos (Pu *et al.*, 2016).



**Figura 1.6** Espacio de color Hunter L, a, b (HunterLab, 2017)

## 1.11 Mango

### 1.11.1 Generalidades del mango

El mango es el fruto tropical más importante en el mercado internacional, debido a sus excelentes características organolépticas y nutricionales (Yahia *et al.*, 2006; Villegas-Santiago *et al.*, 2011; Corzo y Álvarez, 2012; Nascimento *et al.*, 2016). El género *Mangifera* pertenece a dicotiledóneas de la familia “Anacardiaceae”, es originario de la

región asiática. Este fruto es comercialmente cultivado en más de 103 países del mundo. Los principales países que lo cultivan son India, China, México, Pakistán, Indonesia, Tailandia, Filipinas, Brasil, Australia, Nigeria y Egipto (Hymavathi y Khader., 2005; Jiang y Song, 2010; Nambi *et al.*, 2015; Jahurul *et al.*, 2015).

El mango es una fuente primordial de vitaminas A y C (Goyal *et al.*, 2006). Además, proporciona un contenido de fibra lo que permite un buen funcionamiento de sistema digestivo, en la Tabla 1.1 se presenta la información nutrimental del mango. Los valores obtenidos son por cada 100 gramos de muestra de fruta fresca comestible.

**Tabla 1.1** Contenido nutrimental del mango (Villegas-Santiago, 2008).

<b>Nutriente</b>	<b>Contenido</b>
Humedad (%)	79-84
Proteínas (%)	0.60
Lípidos (%)	0.40
Carbohidratos (%)	17.00
Minerales (%)	0.40
Azúcar total (%)	13.50
Azúcares reductores (mg)	3.2-6.8
Azúcares no reductores (mg)	6-12
Vitamina C (mg/100 g)	14-60.00
Acidez (%)	0.11-0.8

### 1.11.2 Producción del mango

India ocupa el primer lugar en la producción mundial de mango, contribuyendo con el 36.2% de la producción anual. Mientras que México es el séptimo productor mundial de este fruto, aportando el 4.2% del volumen total global. En el país son 28 estados que producen mango, siendo Guerrero, Chiapas Nayarit Oaxaca, Michoacán, Sinaloa y Veracruz los principales productores de este fruto a nivel nacional (SIAP, 2014-A). En la Tabla 1.2 se presentan los principales productores de mango a nivel nacional.

**Tabla 1.2** Principales estados productores de mango (SIAP, 2014-A)

Estado	Producción (Ton)
Guerrero	364,317.53
Chiapas	196,166.05
Nayarit	175,210.23
Oaxaca	160,704.62
Michoacán	137,393.98
Sinaloa	110,888.77
Veracruz	100,831.68

Cuando la fruta se encuentra madura es consumida como fruta fresca, sin embargo, se puede otorgar un procesamiento y obtener purés, jugos néctares, rebanadas, mermeladas, dulces de mago y hojuelas (Morton, 1993; Hui, 2006; Goyal *et al.*, 2006; Yahia *et al.*, 2006; Jahurul *et al.*, 2015).

## 1.12 Zanahoria

### 1.12.1 Generalidades de la zanahoria

La zanahoria (*Daucus carota*) es originaria de Europa, Asia y del norte de África; aunque hoy en día; son cultivadas y consumidas por gente de todo el mundo, debido a su alto valor nutrimental y por su gran aporte de vitaminas y minerales (Prakash *et al.*, 2004; Jiang y Song, 2010; Gamboa-Santos *et al.*, 2013; Da Silva-Dias, 2014; Chen *et al.*, 2016). La zanahoria pertenece a la familia *Umbelliferae* y especie *Daucus carota*. El sabor de la zanahoria es único y delicioso, inicialmente fue utilizada para propósitos médicos y gradualmente se usó en alimentos. Existen diferentes variedades de zanahorias, las cuales pueden ser de color blanco, amarillo, naranja, roja o morado en su pulpa, esto se debe a los diversos compuestos fenólicos que poseen (Da Silva-Dias, 2014).

La composición química de la zanahoria se muestra en la Tabla 1.3, como se puede observar que es un alimento que aporta gran cantidad de energía, además de que

posee un alto contenido de vitaminas. Los valores presentados corresponden a 100 gramos de tubérculo fresco comestible.

**Tabla 1.3** Contenido nutrimental de la zanahoria (Hui, 2010)

Nutriente	Contenido
Energía Kj	173
Humedad (g)	88.29
Proteínas (g)	0.93
Lípidos (g)	0.24
Cenizas (g)	0.97
Carbohidratos (g)	9.58
Fibra dietética total (g)	2.8
Azúcar total (g)	4.74
Sucrosa (g)	3.59
Glucosa (g)	0.59
Fructosa (g)	0.55
Vitamina C (mg)	58
Vitamina K (mg)	13.2
Vitamina A (IU)	16706

### 1.12.2 Producción de la zanahoria

Los principales productores de este vegetal son China, Uzbekistán, Rusia y Estados Unidos de América (FAO, 2014). La producción de zanahoria en México fue de 331,069.04 toneladas, en la Tabla 1.4 se presentan los estados con mayor aportación. El estado de Veracruz aportó 2.44% de la producción anual, siendo el municipio de Coatepec el principal productor (SIAP, 2014-B).

La zanahoria es consumida en ensaladas, además, mediante su procesamiento se elaboran alimentos para bebés, bebidas refrescantes, salsas o si se le aplica un

proceso de secado puede ser una botana saludable libre de grasas o implementarse como un ingrediente en sopas (Quilitzsch *et al.*, 2005; Hui, 2006, Chen *et al.*, 2016).

**Tabla 1.4** Producción de zanahoria en México (SIAP, 2014-B)

<b>Estado</b>	<b>Producción (Ton)</b>
Guanajuato	87,376.28
Puebla	64,387.95
Zacatecas	57,389.15
México	45,503.02
Querétaro	25,193.00
Tlaxcala	11,582.00
Veracruz	8,102.00

### 1.13 Principales constituyentes en alimentos

Los alimentos se encuentran constituidos por una matriz compleja de diversos compuestos, dentro de los cuales sobresalen los carbohidratos, lípidos, proteínas, humedad y minerales (Lankmayr *et al.*, 2004). Sin embargo, los principales carbohidratos presentes en las frutas y verduras son la fructosa, dextrosa y sacarosa y dentro de los principales ácidos carboxílicos se encuentran el ácido cítrico y L-ascórbico, estos son los responsables de impartir el sabor característico a cada especie de frutas y verduras (Hui, 2010). Además, el ácido cítrico y el ácido L-ascórbico (Vitamina C) son indispensables en la dieta debido a su gran aporte para la prevención de enfermedades respiratorias.

#### 1.11.1 Carbohidratos

Los carbohidratos son compuestos formados por carbono, hidrogeno y oxígeno. Estos presentan grupos funcionales los cuales son C=O y -OH (Badui, 2006). Los



carbohidratos son los compuestos orgánicos más abundantes en la naturaleza, y también los más consumidos. Además, son la fuente primordial de energía (Nielsen, 2010; Ilaslan *et al.*, 2014).

En general, los carbohidratos son clasificados dentro de tres grupos: monosacáridos incluye las pentosas y hexosas (glucosa, fructosas y galactosa), los oligosacáridos son la sucrosa, maltosa, galactosa, lactosa, etc. Dentro del grupo de los polisacáridos incluyen los almidones, glucógeno y otros polisacáridos que presentan estructuras químicas complejas (Hui, 2006; Badui, 2006; Nielsen, 2010; Ilaslan *et al.*, 2014).

Siendo la sacarosa, glucosa y fructosa las que imparten el sabor dulce a las frutas y vegetales, debido al desdoblamiento de los almidones, en su proceso de maduración (Pinzón *et al.*, 2007; Hui, 2010). Además, estos carbohidratos pueden encontrarse en el sector comercial, los cuales son implementados en bebidas, y alimentos procesado, otorgando un sabor deseable.

- Glucosa/Dextrosa

La glucosa también se denomina dextrosa, es un monosacárido más abundante en la naturaleza, se encuentra en diversas frutas, como la manzana, fresas y se encuentra también en las hortalizas. Su concentración depende básicamente del grado de madurez del fruto (Badui, 2006). La glucosa pertenece al grupo de las hexosas, también se conoce como un azúcar aldosa porque contiene un grupo aldehído (CHO) localizado en el primer átomo de carbono de la cadena. Por lo que este azúcar es uno de mas importantes debido a su origen que proviene del almidón (Vaclavik, 1998).

- Fructosa

La fructosa es un azúcar reductor y dado que es altamente levorrotatorio, también se le nombra como levulosa y forma parte de algunos polisacáridos más complejos (Badui, 2006). La fructosa es un azúcar de seis carbonos como la glucosa; sin

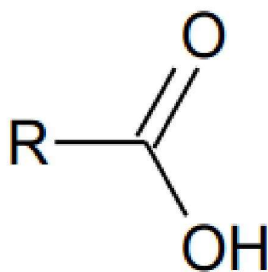
embargo, la fructosa es una azúcar cetosa, debido que presenta un grupo cetona en el segundo carbono de su cadena (Vaclavik, 1998).

- Sacarosa

La sacarosa también nombrada como azúcar o sucrosa, es la fuente de carbono más favorable seguida de glucosa, fructosa y lactosa (Hui, 2010; Muñoz-Villa *et al.*, 2014). El almidón es degradado por enzimas para formar glucosa y fructosa, estos monómeros de azúcar se unen mediante un enlace glucosídico para la formación de la sacarosa (Vaclavik, 1998). Además, el almidón, la sucrosa y otros metabolitos intermediarios son importantes para otorgar el sabor de los alimentos (Hui, 2010).

### 1.11.2 Ácidos carboxílicos

Los ácidos carboxílicos son los ácidos orgánicos, se encuentran ampliamente distribuidos en la naturaleza, ya sea en su forma original o el en la forma de algunos de sus derivados. Estructuralmente los ácidos pueden ser alifáticos y/o aromáticos otorgando propiedades específicas (Muñoz-Villa *et al.*, 2014). El grupo funcional característico es el grupo carboxilo (Figura 1.7), donde R representa una cadena alifática o aromática.



**Figura 1.7** Estructura química general de los ácidos carboxílicos (Muñoz-Villa *et al.*, 2014)

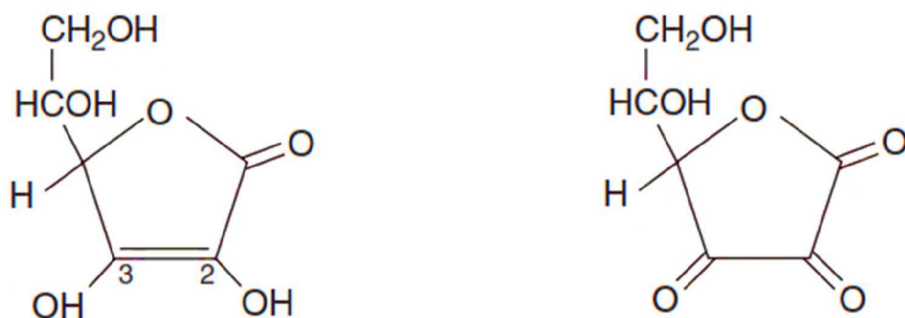
- Ácido cítrico

El ácido cítrico es un constituyente natural y común en plantas y animales. Es el ácido orgánico más versátil y frecuentemente usado en el área de bebidas, alimentos, farmacéutica, textil, metal, química, etc. (Badui, 2006; Zarska *et al.*, 2016; Mielcarek *et al.*, 2017; Vandenberghe *et al.*, 2017). Este ácido cumple diversas funciones, por ejemplo: como conservador, amortiguador de pH, saborizante e inhibidor de reacciones enzimáticas y también actúa como agente antimicrobiano, entre otras (Badui, 2006, Hui, 2010). El ácido cítrico se encuentra fácilmente en el mercado, además que es fácil su transporte y almacenamiento (Mielcarek *et al.*, 2017).

La obtención del ácido cítrico se realiza por medio de síntesis bioquímica o mediante microorganismos en la fermentación que degradan los carbohidratos (Muñoz-Villa *et al.*, 2014).

- Ácido L-ascórbico

El ácido L-ascórbico es un derivado de los hidratos de carbono, posee una estructura cetónica cíclica que corresponde a la forma enólica de la 3-ceto-1-gulofuranolactona; contiene un enol en los carbonos 2 y 3 que la hace un agente ácido y altamente reductor, por lo que se oxida fácilmente (Figura 1.8).



**Figura 1.8** Molécula del Ácido L-ascórbico y ácido L-deshidroascórbico (Badui, 2006)

Este compuesto se encuentra principalmente en frutas y vegetales frescos, por lo que es recomendable consumirlo, debido que el cuerpo humano no lo sintetiza (Leong y Oey, 2012). La degradabilidad de este ácido, es mediante la acción del oxígeno por lo que pierde su propiedad como vitamina. La reacción se lleva a cabo de ácido L-ascórbico a ácido L-deshidroascórbico estos dos constituyentes conforman a la vitamina C, sin embargo, el ácido L-deshidroascórbico representa aproximadamente un 80% de la potencia vitamínica del ácido L-ascórbico. Además, este ácido se desestabiliza por la acción del calor, por lo que resulta ser un compuesto termosensible.

El ácido L-ascórbico puede ser estabilizado por el contenido de fructosa y glucosa en un rango de temperatura de 24-45 °C. También se encuentra en jugos y otros alimentos fortificados, como mermeladas y harinas.

### **1.12 Diseño de experimentos**

El diseño de experimentos desempeña un papel importante dentro del campo de diseño y optimización de procesos y productos (Arias-Nava *et al.*, 2014). Así como también son frecuentemente utilizados en la investigación ya que estos permiten el estudio de diversos factores con distintitos niveles. Existen diversos tipos de diseños de experimentos, cuando se inicia una investigación y teniendo presente varios factores a investigar, es común utilizar el diseño  $2^k$  el cual posee dos niveles con k factores, los niveles de estos factores pueden ser cualitativos como cuantitativos. El diseño  $2^k$  se considera diseño factorial de efectos fijos, cuando los niveles son definidos por el experimentador, sin embargo, los diseños factoriales de efectos mixtos presentan factores fijos y aleatorios (Montgomery, 2012; Muñoz-López, 2014).

### **1.12 Antecedentes y avances de la Espectroscopía**

Romera-Fernández *et al.* (2012) realizaron estudios de espectroscopía FT-MIR y PLS-R en la que determinaron antocianinas en distintos tipos de vinos. Los métodos de

referencia aplicados en la determinación de antocianinas fue HPLC-DAD (Cromatografía de alta resolución equipo con detector tipo diodo). Los espectros fueron obtenidos mediante un espectrómetro FT-IR Foss WineScan FT 120. Se usaron herramientas quimiométricas para la determinación cuantitativa y generación de modelos basados en la regresión de mínimos cuadrados parciales para la determinación de 12 antocianinas presentes en vino. Concluyeron que los modelos para la predicción de las antocianinas son satisfactorios ya que los coeficientes de las correlaciones ( $R^2$ ) fueron superiores a 0.80.

Regmi *et al.* (2012) realizaron estudios sobre la determinación directa de ácidos orgánicos presentes en vinos y productos derivados mediante la espectroscopía infrarroja con transformada de Fourier (FT-IR), además, aplicaron técnicas quimiométricas para calibración del equipo. Los ácidos determinados en vinos, vinagres y alcohol fueron el ácido cítrico, málico, tartárico, láctico, succínico y ácido acético. Los métodos de referencia para verificar el contenido de los ácidos presentes fue HPLC. Los coeficientes de regresión ( $R^2 > 0.80$ ) para la calibración y la validación del espectrómetro FT-IR de los componentes presentes en el vino fue satisfactoria. Sin embargo, el ácido láctico y el ácido succínico, representaron los valores de  $R^2$  0.08 y 0.65 en la calibración, mientras para la validación se obtuvieron  $R^2$  0.03 y 0.58, respectivamente. Esto indicó que las correlaciones para el ácido láctico y ácido succínico no fueron satisfactorias.

Alves de Oliveira *et al.* (2014) realizaron estudios sobre la comparación de métodos espectroscópicos NIR y MIR para la determinación de azúcares, ácidos orgánicos y carotenoides en fruta pasión (*Passiflora edulis f. flavicarpa*) en diferente estado de maduración, las cuales se recogieron en el sur de Brasil. La pulpa fue liofilizada para evitar alguna interferencia posterior. Se aplicaron técnicas enzimáticas para la determinación de azúcares y ácidos orgánicos. Para la cuantificación de carotenoides presentes en la fruta, se utilizó el HPLC. Los espectros NIR y Mir fueron obtenidos mediante un espectroscopio MPA y espectrómetro FTIR tensor 27, respectivamente. El análisis de los datos se realizó mediante PLS. Concluyen que el contenido de sólidos solubles en la fruta varía entre 4.6 y 16.5 °Brix de acuerdo a su estado de maduración.

Los coeficientes de correlación  $R^2$  de los modelos para la predicción de glucosa, fructosa, sucrosa, azúcares totales, ácido cítrico y acidez total fueron superiores de 0.85, además, los modelos de la predicción de glucosa, fructosa, sucrosa, azúcares totales y ácido cítrico es mejor aplicar espectroscopía MIR y para el contenido de acidez total es mejor aplicar la metodología NIR.

Ferreira *et al.* (2014) aplicaron y compararon la espectroscopía NIR y MIR para la determinación de los parámetros de calidad de muestras de soya. Los parámetros determinados a fueron la cantidad de humedad, cenizas, proteínas y lípidos mediante el uso de técnicas de la AOAC. Aplicaron la espectroscopía NIR y MIR con medición de reflectancia difusa, asociando herramientas quimiométricas para generar modelos de calibración para los parámetros de calidad. Los coeficientes de regresión de los modelos son satisfactorios para el contenido humedad (0.72) y lípidos (0.81) en el NIR, en el MIR para la cantidad de cenizas (0.81) y proteínas (0.88). Consideraron que ambas técnicas son efectivas para su aplicación en la industria como una herramienta analítica para el monitoreo de los parámetros de calidad de la soya. Además, minimizan el tiempo de análisis a 5 minutos en comparación con los métodos de referencia que tardan aproximadamente de 10-16 horas.

Hell *et al.* (2016) realizaron estudios sobre la comparación de la espectroscopía NIR y MIR para la determinación multivariable de las propiedades composicionales en muestras de salvado de trigo. Los parámetros medidos fueron el contenido de agua, proteína, cenizas, almidón, fibra dietética soluble e insoluble y lípidos. Los espectros NIR y MIR se obtuvieron mediante un espectrómetro MPA FT-IR y un espectrómetro ATR-FTIR Perkin Elmer Frontier, respectivamente. Aplicaron PLS para el desarrollo de modelos de calibración y predicción. Concluyeron que la espectroscopía NIR es mejor para la predicción de cenizas, almidón y fibra dietética soluble e insoluble, mientras que MIR solamente presentó una mejor predicción de proteínas.

Kyrleou *et al.* (2015) cuantificaron simultáneamente el contenido de polifenoles totales y taninos condensados en semillas de uvas mediante la espectroscopía infrarroja de transformada de Fourier equipada con accesorios para la reflectancia difusa. Los espectros fueron tomados mediante un espectrofotómetro Thermo Nicolet

6700 FT-IR. Los resultados se compararon con métodos convencionales. Los modelos obtenidos mediante las PLS fueron satisfactorios, obteniendo coeficientes de correlación de 0.97 para el contenido de polifenoles totales y 0.99 para los taninos condensados.

Musingarabwi *et al.* (2015) analizaron cualitativa y cuantitativamente la evolución de uvas durante su crecimiento usando espectroscopía NIR y MIR con transformada de Fourier, las uvas fueron seleccionadas con 5 grados de maduración y los parámetros que se evaluaron fueron el contenido de azúcares y ácidos orgánicos presentes en las muestras. Las muestras fueron congeladas rápidamente mediante nitrógeno líquido, posteriormente se removieron las semillas, y fueron almacenadas a  $-80\text{ }^{\circ}\text{C}$  para su preservación (temporada 2010/2011 y 2011/2012). En las muestras frescas 2012/2013 (temporada 2012/2013) en los 5 estados de maduración, se eliminaron las semillas y se obtuvieron los espectros mediante un espectrómetro MPA FT-IR y ATR FT-IR. La información de referencia se obtuvo mediante un HPLC donde se cuantificó glucosa, fructosa, ácido málico, ácido tartárico, y ácido succínico. Aplicaron regresión PLS para el desarrollo de modelos de calibración de los espectrómetros. Concluyen que la aplicación de la espectroscopía infrarroja MIR y NIR es muy versátil ya que se obtiene información espectral de diversos constituyentes. Los coeficientes de regresión de los modelos son satisfactorios para los constituyentes de la muestra mediante la espectroscopía MIR. Estos presentan un coeficiente de regresión  $R^2 > 0.9$  para el ácido tartárico, ácido málico, glucosa y para el ácido succínico es de 0.76. Por otra parte, se obtuvieron  $R^2 < 0.85$  para el NIR.

Ayvaz *et al.* (2016) estudiaron la calidad de jugos de tomate usando un espectrómetro FT-IR portátil y análisis multivariado. Los parámetros monitoreados fueron glucosa, fructosa, azúcares reductores totales, sólidos solubles, viscosidad sérica, consistencia de Bostwick, valor de pasta Bostwick predicho y el pH, ya que influyen directamente en el sabor y consistencia del jugo. Los análisis de referencia se realizaron mediante un viscosímetro Ostwald y sérica, la glucosa y fructosa fueron cuantificados mediante HPLC y el pH mediante un potenciómetro. Los espectros fueron obtenidos mediante un espectrómetro Care 630 FT-IR. Aplicaron análisis PLS para el desarrollo de



calibraciones del equipo. Los valores de los análisis de referencia que se obtuvieron fueron similares a los reportados en literatura. Los modelos matemáticos desarrollados de las variables latentes obtuvieron coeficientes de correlación mayores de 0. Por lo que, concluyen que los modelos para la predicción de las variables del jugo de tomate son satisfactorios.

Dewaest *et al.* (2016) realizaron estudios acerca de la evolución en pastas de almidón que fueron sometidas al calentamiento y enfriamiento, las evoluciones se verificaron mediante técnicas espectroscópicas MIR con reflectancia total atenuada, aplicando técnicas quimiométricas para el análisis de los espectros IR. Encontrando que los componentes de las muestras del almidón varían de acorde al tipo de almidón y si este ha sufrido una transformación química, esto altera la cristalinidad del carbohidrato.

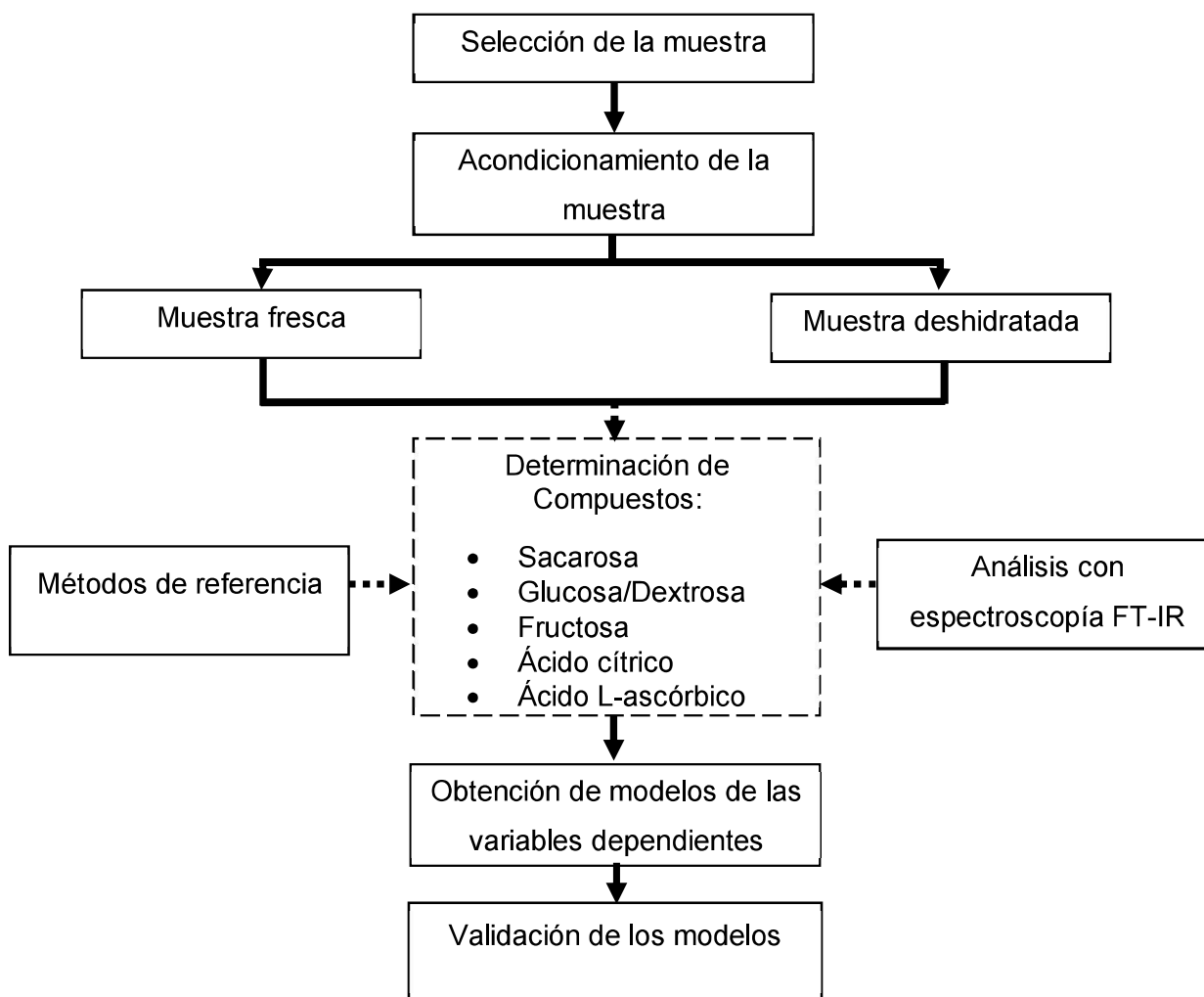
Munawar *et al.* (2016) estudiaron la calidad del mango (*Mangifera indica*) mediante técnicas espectroscópicas y quimiométricas. Los parámetros estudiados fueron la cantidad de sólidos solubles (SSC), acidez titulable (AT), y la cantidad de ácido L-ascórbico (AA). Los modelos construidos mediante las técnicas quimiométricas resultaron satisfactorias para la predicción de los parámetros de calidad ya que fueron validados por métodos referencia. Los métodos aplicados para el análisis de los espectros fueron mediante PCR (Principal Component Regression) y PLSR (Partial Least Square Regression). Concluyendo que los mejores modelos de predicción y validación, se realizaron mediante PLSR; Corroborando que el contenido de AA es de 32.21 mg, la AT 495.48 mg y SS es de 13.39 °Brix por cada 100 g de muestra fresca.

**CAPÍTULO 2**  
**MATERIALES Y MÉTODOS**

## CAPÍTULO 2. MATERIALES Y MÉTODOS

### 2.1 Metodología general

En la Figura 2.1 se muestra la metodología general para la obtención de modelos matemáticos que permita cuantificar y predecir el contenido de azúcar, dextrosa, fructosa, ácido cítrico y ácido L-ascórbico en muestras frescas y deshidratadas de mango (*Mangifera indica*) y zanahoria (*Daucus carota*).



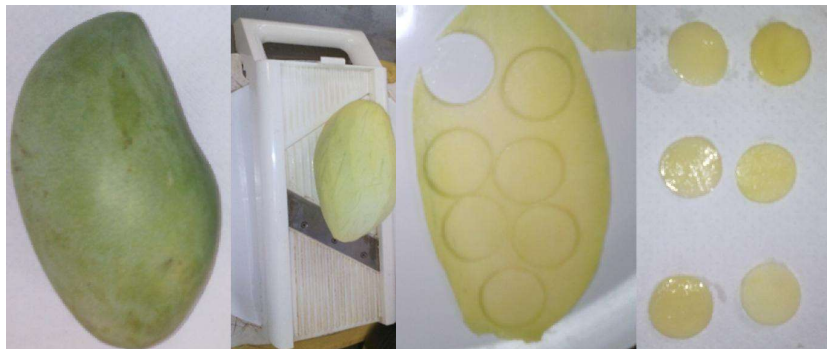
**Figura 2.1** Metodología general para el análisis de componentes en mango (*Mangifera indica*) y zanahoria (*Daucus carota*)

## 2.2 Selección de la muestra

La muestra de mango (*Mangifera indica*) y zanahoria (*Daucus carota*) fueron adquiridas en Orizaba, Veracruz de un mercado local "Emiliano Zapata". La selección de la materia prima (fruto y tubérculo) basó en el grado de maduración y el color que presentaba la piel del mango y zanahoria.

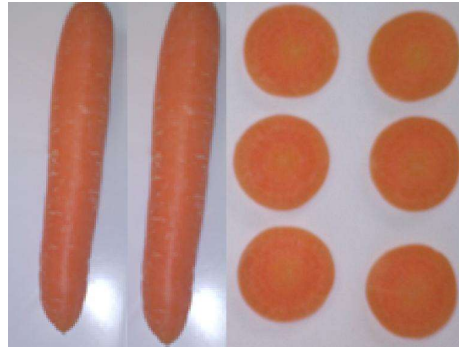
## 2.3 Acondicionamiento de la muestra

Los mangos (*Mangifera indica*) fueron lavados y pelados manualmente, posteriormente se sometieron a un proceso de corte en la que se obtuvieron hojuelas de 2 cm de diámetro y con un espesor de 0.2 cm. En la Figura 2.2 se muestra el proceso para la obtención de las hojuelas de mango.



**Figura 2.2** Proceso de corte para la obtención de hojuelas de mango

Por otra parte, las zanahorias (*Daucus carota*) fueron lavadas, el exceso de agua se eliminó con papel absorbente y posteriormente se sometieron al proceso de corte axial con respecto al centro de la zanahoria, obteniendo hojuelas de 0.2 cm de espesor. En la Figura 2.3, se puede observar el proceso al que fueron sometidas las zanahorias.



**Figura 2.3** Hojuelas de zanahoria de 2 cm de diámetro

#### **2.4 Proceso de secado**

El proceso de secado de las hojuelas de mango y zanahoria se realizó en un secador de charolas (Figura 2.4), este equipo fue construido en su interior de lámina de acero inoxidable especificación AISI SA-240 T-304 y lámina de acero al carbón especificación AISI SA-36 con acabado en primer anticorrosivo y pintura esmalte en su exterior, cuenta con doble pared y aislante térmico que evita pérdidas de calor en el interior del equipo haciéndolo sumamente eficiente.



**Figura 2.4** Secador de charolas

El equipo cuenta con un sistema de control digital de temperatura, lo que permite estabilizar el proceso en un lapso de tiempo muy corto. Además, cuenta con dos

secciones, la primera sección se encuentra en la parte superior del equipo en su parte interna contiene un radiador y ventilador lo que permite realizar un proceso de convección forzada, la segunda sección se encuentra en la parte inferior del equipo, la cual se encuentra equipado por la cabina en la que se colocan las charolas con el producto a deshidratar. Las especificaciones técnicas del equipo se muestran en la Tabla 2.1.

**Tabla 2.1** Especificaciones del secador por charolas

Dimensiones		Motor	
Altura	167 cm	Potencia	0.25 HP
Ancho	148 cm	Alimentación	110 V
Profundidad	72 cm		
Otras especificaciones		Elemento térmico	
Temperatura	40- 90 °C	Potencia	4500 W
Capacidad	10 charolas	Alimentación	220 V

El proceso de secado de hojuelas de mango y zanahorias se realizó siguiendo los siguientes pasos:

1. El secador se conectó a la alimentación eléctrica, posteriormente se encendió y se fijó la temperatura de secado (60 °C) mediante el controlador digital de temperatura.
2. Se colocaron 240 g de hojuelas de mango o zanahoria en las mallas, para que posteriormente, se introdujeran al secador cuando se estabilizó la temperatura en el equipo de secado.
3. Durante el proceso de secado se tomó muestra cada 15 minutos durante la primera hora, en la siguiente hora se tomó cada 30 minutos, posteriormente se tomó muestra cada 60 minutos.
4. En cada momento de la toma de la muestra de hojuelas de mango y zanahoria se realizaron determinaciones de humedad, actividad de agua y color; cuyo

objetivo fue monitorear la evolución del proceso de secado. Estas determinaciones se realizaron mediante los métodos descritos en la sección 2.4.1 de este capítulo.

#### 2.4.1 Análisis fisicoquímicos de las muestras en el proceso de secado

Las hojuelas de Mango (*Mangifera indica*) y Zanahoria (*Daucus carota*) fueron evaluadas con tres parámetros esenciales que permiten verificar la evolución del proceso de secado (contenido de humedad, actividad de agua y el color). Las determinaciones se realizaron antes, durante y después del proceso. Los métodos que se aplicaron para el análisis del proceso de secado se describen a continuación.

##### 2.4.1.1 Determinación de humedad

Para la determinación del contenido de humedad se utilizó una Termobalanza con lámpara de halógeno (marca OHAUS modelo MB35). Se colocó aproximadamente 1 gramo de muestra en una charola de aluminio que posteriormente se introdujo en la cámara de secado de la Termobalanza, programándose a una temperatura de 65°C y seleccionando el tiempo de secado de forma automática, al finalizar la medición, el equipo proporcionó el valor del contenido de humedad de la muestra en base húmeda.

##### 2.4.1.2 Determinación de actividad de agua

La actividad de agua ( $a_w$ ) para cada muestra fue determinada a 25 °C empleando un medidor de actividad de agua Aqualab serie 3 modelo TE.

##### 2.4.1.3 Determinación de color

Los parámetros de color (L, a, b,  $\Delta E$ ) fueron determinados empleando un colorímetro HunterLab modelo Miniscan XE Plus el cual se encuentra acoplado a una computadora donde se registran los datos de las mediciones realizadas. El colorímetro HunterLab

fue calibrado utilizando una placa negra y blanca como estándares de color para la luminosidad (L). El color de las muestras fue determinado en modo de reflectancia y expresado por el parámetro L (Luminosidad), a (Rojo/Verde) y b (Amarillo/Azul).

La diferencia de color ( $\Delta E$ ) es un parámetro ampliamente usado para evaluar la variación total de color entre una muestra fresca y una muestra deshidratada (Villegas-Santiago *et al.*, 2011; Ochoa-Martínez *et al.*, 2012; Bautista de maideros *et al.*, 2016). La diferencia de color ( $\Delta E$ ) fue determinada tomando como referencia los parámetros de color individuales (L, a y b) y utilizando la ecuación 2.1 descrita por Habeych *et al.* (2016).

$$\Delta E = \sqrt{\Delta L^2 + \Delta a^2 + \Delta b^2} \quad (2.1)$$

Donde:

$\Delta L$ = Variación del parámetro luminosidad final ( $L_{\text{final}}$ ) con respecto al inicial ( $L_{\text{inicial}}$ )

$\Delta a$ = Variación del parámetro a final ( $a_{\text{final}}$ ) con respecto al inicial ( $a_{\text{inicial}}$ )

$\Delta b$ = Variación del parámetro b final ( $b_{\text{final}}$ ) con respecto al inicial ( $b_{\text{inicial}}$ )

## 2.5 Métodos de referencia

Las muestras de mango (*Mangifera indica*) y zanahoria (*Daucus carota*) fueron analizadas por métodos químicos convencionales (técnicas analíticas por química húmeda) para determinar el contenido de azúcar, glucosa, fructosa, ácido cítrico y ácido L-ascórbico. Los métodos aplicados para las determinaciones antes mencionadas se describen a continuación.

### 2.5.1 Determinación de azúcar

La determinación de azúcar se aplicó el método Fehling de acuerdo a la Norma Mexicana (NMX-F-312-1978) antes y después de la inversión de azúcares descrito por



Egan *et al.*, (1991). El método de Fehling se basa en la reducción del óxido cúprico a óxido cuproso por la presencia del azúcar.

#### 2.5.2 Determinación de Glucosa/dextrosa

Para la determinación de la glucosa se aplicó el método titrimétrico descrito por Egan *et al.* (1991) utilizando soluciones de Cloramida T y titulando el exceso con tiosulfato de sodio en presencia de almidón. Debido a que la glucosa oxida la solución de cloramida T.

#### 2.5.3 Determinación de fructosa

El contenido de fructosa fue determinado por el método instrumental descrito por Zapico-Suárez, (2013). Se utilizó soluciones de fructosa de concentración conocida para elaborar una curva estándar mediante el espectrómetro infrarrojo, posteriormente se cuantifica el contenido de fructosa de la muestra.

#### 2.5.4 Determinación de ácido cítrico

El contenido de ácido cítrico fue determinado mediante la aplicación del método titrimétrico de acuerdo a la Norma Mexicana (NMX-F-102-S-1978). Este método se basa en la neutralización de los cationes  $H^+$  con soluciones de NaOH adicionando fenolftaleína como indicador (Munawar *et al.*, 2016; Calamari *et al.*, 2016).

#### 2.5.5 Determinación de ácido L-ascórbico

El ácido L-ascórbico fue rápidamente analizado, debido a que es susceptible a la oxidación por la presencia del oxígeno atmosférico. Se aplicó el método titrimétrico descrito por Ranganna (2008) utilizando una solución estándar de 2,6 diclorofenol indofenol.

## 2.6 Obtención de la información espectral

La información espectral se obtuvo utilizando un espectrómetro infrarrojo modelo EFT 2500 FT-IR marca DORDLab (Figura 2.5). Acondicionado mediante el accesorio de ATR (Atenuated Total Reflectance). Las características del equipo se muestran en la Tabla 2.2, en el que se muestran las dimensiones del equipo; Además, las especificaciones del instrumento infrarrojo de medición se muestran en la Tabla 2.3.

**Tabla 2.2** Características físicas del espectrómetro IR-FT

Parámetro	Valor
Altura (cm)	26
Longitud (cm)	55
Anchura (cm)	52
Peso (kg)	28

**Tabla 2.3** Especificaciones del equipo infrarrojo FT-IR

Parámetro	
Rango espectral	4000- 400 $\text{cm}^{-1}$
Resolución	4 $\text{cm}^{-1}$
Detector	DTGS
Velocidad de escaneo	0.4 $\text{cm/s}$ -2.5 $\text{cm/s}$
Alimentación eléctrica	110 V

La información espectral de las muestras de mango (*Mangifera indica*) y zanahoria (*Daucus carota*) frescas y deshidratadas fueron analizadas por medio de un espectrómetro TF-IR. A continuación, se presenta el procedimiento que se empleó para la obtención de los espectrogramas.

1. El equipo infrarrojo es conectado a la alimentación eléctrica, este debe estar acoplado con el equipo de cómputo. El equipo infrarrojo debe calentarse por 30 min, para realizar la medición de las muestras. El software MainFTOS, es un

programa que permite ordenar al espectrómetro la velocidad de análisis, además, reúne la información espectral de las muestras.



**Figura 2.5** Espectrómetro infrarrojo modelo EFT 2500

2. Se coloca el accesorio ATR en la sección de compartimento de la muestra, posteriormente se introduce la muestra. Se indica mediante el software al espectrómetro la velocidad de análisis.
3. Obtenida la información espectral se envían a un archivero, para que posteriormente se analice el tipo de enlace los picos característicos de cada muestra.
4. La información obtenida (espectrogramas) fue analizada por medio tratamiento matemáticos (regresión de mínimos cuadrados) para la generación de modelos matemáticos en la calibración y validación.

## **2.7 Aplicación de la técnica quimiométrica**

Una vez realizada las corridas experimentales, con los resultados obtenidos del contenido azúcar, glucosa, fructosa, ácido cítrico y ácido L-ascórbico se llevó a cabo la modelación matemática mediante la regresión lineal de mínimos cuadráticos utilizando el software Matlab R2014b. En las muestras que requerían un contenido de

humedad menor del 10% se aplicó la prueba estadística de Dunnett con un  $\alpha=0.05$  para evaluar el efecto del secado sobre los parámetros de color.

El modelo matemático para la predicción del contenido de azúcar, glucosa, fructosa, ácido cítrico y ácido L-ascórbico se muestra en la ecuación 2.2.

$$\%X = C_1x + C_2 \quad (2.2)$$

Donde:

$\%X$ = Contenido del compuesto de interés.

$C_1$  y  $C_2$ = Constantes del modelo de regresión.

$x$ = lectura de la transmitancia.

## 2.8 Validación de los modelos

Para la validación de los modelos matemáticos, se analizaron muestras de mango y zanahoria que posteriormente se corroboraron con los métodos de referencia, de este modo, se verificó el contenido de cada una de las variables de respuesta. El procedimiento que se siguió se muestra a continuación:

Se tomaron muestras frescas y deshidratadas de la mango y zanahoria, posteriormente se realizó la medición con el espectrómetro FT-IR en el que se utilizó el accesorio de ATR. Los valores obtenidos fueron sometidos a los modelos desarrollados en el tema 2.7, lo que permitió verificar la cantidad del componente de interés en las muestras establecidas. Las posibilidades de predicción de los modelos matemáticos desarrollados para la calibración y validación del contenido de azúcar, glucosa, fructosa, ácido cítrico y ácido L-ascórbico en muestras frescas y deshidratadas de mango y zanahoria fueron evaluadas por diversos parámetros estadísticos dentro de los cuales destacan: el coeficiente de determinación de la calibración y validación ( $R^2$ ), el error de predicción en la calibración (RMSEC) y la predicción (RMSEP) (Fan *et al.*, 2016).

## 2.9 Diseño experimental

Para la llevar a cabo el estudio de la aplicación de la espectroscopía infrarroja media para validar los compuestos presentes en las muestras frescas y deshidratadas de mango y zanahoria se utilizó un diseño experimental mixto. En la Tabla 2.4 se muestra los factores y niveles que se emplearon para el desarrollo del diseño experimental, en el que se tuvo dos variables cualitativas y una cuantitativa.

**Tabla 2.4** Diseño experimental para la aplicación de la espectroscopía FT-IR

FACTOR	NIVELES			
	Bajo	Codificado	Alto	Codificado
<b>Alimento</b>	Zanahoria	(-1)	Mango	(1)
<b>Humedad</b>	<10%	(-1)	>69%	(1)
<b>Método</b>	FT-IR	(-1)	Referencia	(1)

**Tabla 2.5** Experimentos para la aplicación de la Espectroscopía para la determinación de compuestos en mango y zanahoria

Experimento	Alimento	Humedad	Método
1	Zanahoria	< 10%	FT-IR
2	Zanahoria	< 10%	REFERENCIA
3	Zanahoria	> 69%	FT-IR
4	Zanahoria	> 69%	REFERENCIA
5	Mango	< 10%	FT-IR
6	Mango	< 10%	REFERENCIA
7	Mango	> 69%	FT-IR
8	Mango	> 69%	REFERENCIA

En la Tabla 2.5 se muestra los experimentos realizados de manera aleatoria, los que posteriormente fueron analizados mediante el software Minitab versión 14, con la finalidad de obtener los modelos para la predicción del contenido de dextrosa, fructosa, azúcar total, ácido cítrico, y L-ascórbico presentes en las muestras frescas y deshidratadas de mango y zanahoria.



**CAPÍTULO 3**  
**RESULTADOS Y DISCUSIÓN**

## CAPÍTULO 3. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

### 3.1 Caracterización fisicoquímica del mango y la zanahoria

Las características de las hojuelas que fueron utilizadas para el desarrollo de este proyecto se presentan en la Tabla 3.1. Donde se aprecia el contenido de humedad de 69.895% y 85.915% en base húmeda, de mango y zanahoria respectivamente. Además, el valor de la  $a_w$  es elevado, indicando que estos alimentos son altamente precederos.

**Tabla 3.1** Características físicas de las muestras para el análisis

Parámetro	Mango	Zanahoria
Tamaño:		
Longitud (cm)	12.0	12.0
Diámetro (cm)	7.5± 0.3	2.0 ± 0.2
Peso (g)	259.6	38.0
Propiedades físicas		
Sólidos solubles (°Brix)	14.38	8.00
$a_w$	0.976	0.987
Humedad (%)	69.895	85.915
Color de la pulpa		
Parámetros de color L	40.03	30.89
Parámetros de color a	1.79	11.67
Parámetros de color b	19.29	13.80

### 3.2 Proceso de secado por charolas de mango y zanahoria

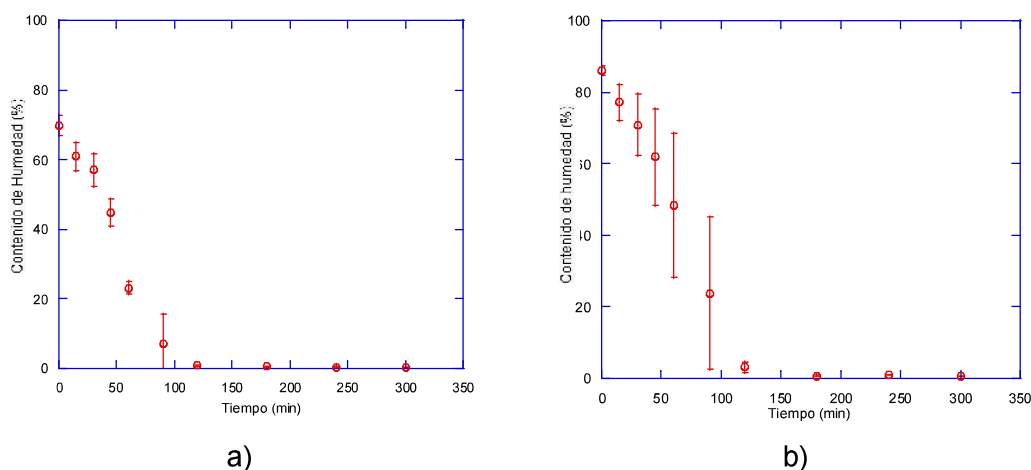
Durante el proceso de secado, los parámetros evaluados como indicadores de la calidad de productos deshidratados fueron la humedad, actividad de agua ( $a_w$ ) y el color.



### 3.2.1 Secado por charolas de hojuelas de mango de mango y zanahoria

#### 3.2.1.1 Evolución de la pérdida de humedad en el proceso de secado

El contenido de la humedad presente en alimentos frescos y deshidratados es un factor importante para verificar su estabilidad. En la Figura 3.1a se aprecia la evolución de la pérdida de humedad en el proceso de secado a 60°C de las hojuelas de mango y mientras la Figura 3.1b corresponde a la zanahoria. En el que se observa que a partir de los 90 minutos el contenido de humedad se encuentra por debajo del 10%, por lo tanto, las hojuelas de este fruto son estables y no se presentaran reacciones de descomposición. Además, la etapa del proceso de secado se encuentra comprendida a los tiempos de: 0-30 min (primera etapa), 30-180 min se encuentra la segunda etapa, en la cual se realiza la mayor transferencia de masa, mientras 180-300 min está determinada la tercera etapa, donde la difusión de agua es menor debido al gradiente de presión dentro del alimento (Tatemoto *et al.*, 2015).



**Figura 3.1** Evolución de la pérdida de humedad en el proceso de secado a 60 °C en hojuelas de a) mango y b) zanahoria

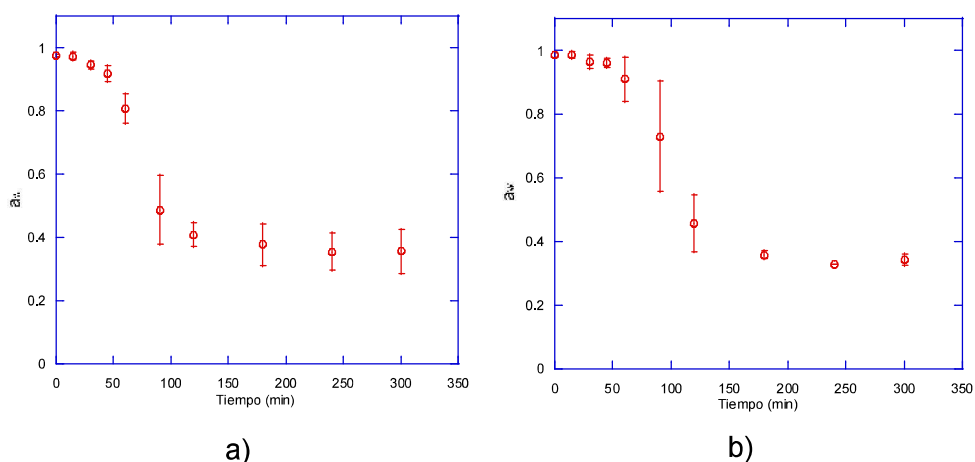
Los resultados obtenidos para las hojuelas de mango variaron en comparación a lo reportado por Bautista de Medeiros *et al.* (2016). Debido que el estudio fue diferente variedad (Tommy Atkins). Además, el contenido de humedad fue de 0.1 kg de agua/kg

de sólidos secos a partir de 100 minutos. Mientras, lo reportado por Ochoa-Martínez *et al.* (2012) y Pu *et al.* (2017) fueron similares sus resultados con los de esta investigación.

Con lo que respecta a la zanahoria, Prakash *et al.* (2004) reportaron valores diferentes debido al equipo de secado (secado por lecho fluidizado), en comparación a nuestro estudio (secador por charolas). Sin embargo, ambos estudios permitieron obtener valores del contenido de humedad inferiores al 10% en peso.

### 3.2.1.2 Evolución de la actividad de agua ( $a_w$ ) en el proceso de secado

La actividad de agua es propiedad termodinámica extensamente utilizada como una herramienta para el control de la calidad en alimentos (Martuscelli *et al.*, 2017). Galaz *et al.* (2017) indicó valores inferiores de 0.5 para  $a_w$ , estos valores indican el bajo grado de disponibilidad de agua para efectuarse reacciones de deterioro en alimentos y el crecimiento de microorganismo. La  $a_w$  en muestra fresca fue de 0.97 y 0.987 del mango y zanahoria, respectivamente. En la Figura 3.2a y 3.2b se muestra la evolución de la actividad de agua ( $a_w$ ) en hojuelas de mango y zanahoria, respectivamente. Las hojuelas son estables a partir de los 120 minutos debido que presentan valores inferiores de acuerdo a lo reportado por Galaz *et al.* (2017).



**Figura 3.2** Evolución de la actividad de agua en el proceso de secado a 60 °C en hojuelas de a) mango y b) zanahoria

Bautista de Medeiros *et al.* (2016) reportaron valores similares para mango 'Tommy Atkins'. Sin embargo, se discute con lo reportado Ochoa-Martínez *et al.* (2012) debido a las condiciones del proceso de secado y variedad de fruto, por lo que obtuvieron 0.55  $a_w$  al término del proceso de secado de 240 minutos.

Con respecto a la zanahoria, Dipersio *et al.* (2007) reporta la actividad de agua fue de 0.987 en el tiempo inicial (0 min), esto indica que el tubérculo es inestable, debido a su alto contenido de humedad. Es por lo que se encuentra catalogada como un alimento perecedero. Con referencia a reportado por Dipersio *et al.* (2007), la actividad de agua de la zanahoria al final del proceso fue de 0.33-0.37 en un tiempo de 6 horas, sin embargo, es un tiempo considerable en comparación a nuestro estudio.

Además, es notablemente en la Figura 3.2 durante el proceso de secado (30 a 120 min) disminuyó significativamente el contenido de humedad y debido a esto la actividad de agua disminuyó. La  $a_w$  fue inferior a 0.5 después de los 120 min. Esto indica que el alimento deshidratado es estable, en el que no puede efectuar y desarrollar reacciones enzimáticas y microbiológicas.

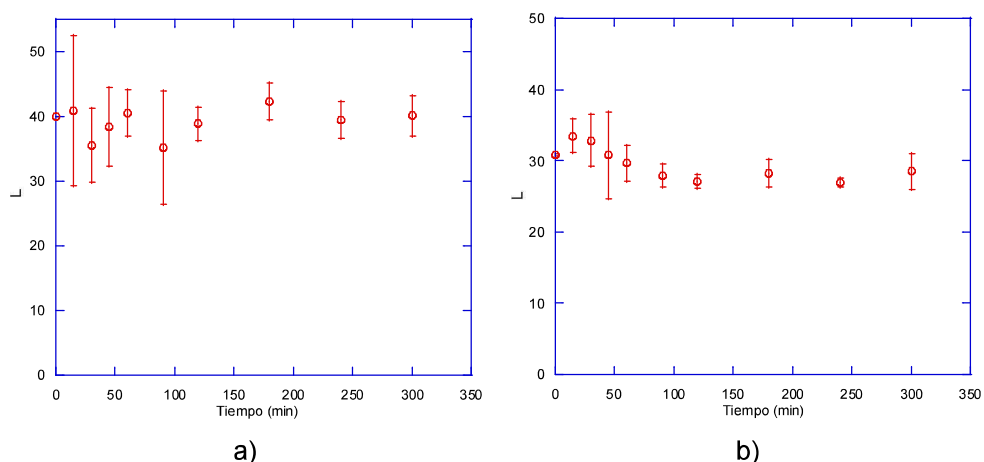
### 3.2.1.3. Evolución de parámetros de color durante el proceso de secado

El color es uno de los atributos más importantes que influyen en la aceptabilidad del producto por los consumidores (Huang *et al.*, 2016). El color de los alimentos depende de diversos factores tales como operaciones llevadas a cabo antes, durante y después del proceso de secado y las condiciones de secado (temperatura, flujo de aire, etc.) (Sumnu *et al.*, 2005; Koca *et al.*, 2007). Así como también, a diversas enzimas que actúan con la presencia del oxígeno y la luz provocando un oscurecimiento degradando su valor nutritivo y sabor (Koca *et al.*, 2007; Wu *et al.*, 2014; Huang *et al.*, 2016; Chen *et al.*, 2016).

### 3.2.1.3.1 Evolución del parámetro L en el proceso de secado

En la Figura 3.3a se presenta la evolución del parámetro de color L que presentaron las hojuelas de mango durante el proceso de secado a 60°C. La luminosidad de las hojuelas de mango fue de 40.03 unidades (0 min). Sin embargo, a 30 minutos se presentó una disminución a 35 unidades debido al gradiente de humedad y a la transferencia de masa que se presenta en ese instante en la hojuela. Posteriormente de 180-300 min el parámetro de color L (luminosidad) permaneció estable debido que la humedad de la hojuela de mango era uniforme.

En la Figura 3.3b se aprecia la evolución del color en el parámetro de luminosidad (parámetro L) en las hojuelas de zanahoria, en la que a partir de los 15 minutos alcanzó un máximo de luminosidad, debido a que se empieza la difusión del agua libre de la zanahoria. Posteriormente la luminosidad de la hojuela disminuye hasta que logra su estabilización desde los 90 minutos a los 300 minutos.



**Figura 3.3** Evolución de color en el parámetro L en el proceso de secado a 60 °C en hojuelas de a) mango y b) zanahoria

Sumnu *et al.* (2005) reportaron el parámetro de luminosidad en zanahoria fue de 50 y 60 unidades aproximadamente, en el que fue empleando secador con aire caliente a 60°C y un secador por microondas, respectivamente, menciona que las hojuelas

presentaron un oscurecimiento debido al aire caliente por la elevada temperatura y oxidación de diversos compuestos presentes en el tubérculo.

Por lo que se aplicó un análisis de estadístico de varianza (ANOVA) para los dos tipos de hojuelas (mango y zanahoria), aplicando la prueba de Dunnett ( $\alpha=0.05$ ) (Apéndice A1 y Apéndice B1, respectivamente) el cual mostró que no existe diferencia significativa en el parámetro de color L durante el proceso de secado de hojuelas de mango y zanahoria. Además, la luminosidad de las hojuelas de mango y zanahoria no fueron afectadas por la temperatura del secador. Resultados similares fueron reportados por Ochoa-Martínez *et al.* (2012) con respecto al mango.

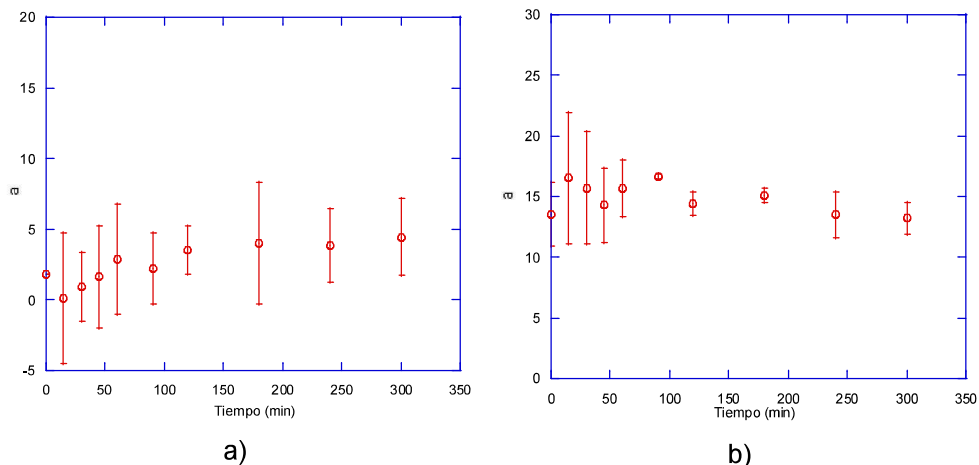
#### 3.2.1.3.2 Evolución del parámetro a en el proceso de secado

El parámetro de color a (Coordenada a) indica la relación entre el color verde (-) y rojo (+), el cambio del color en el parámetro a en hojuelas de mango durante el proceso de secado se puede apreciar en la Figura 3.4a. Durante el proceso de secado presentó un cambio (disminución en 15 min) que posteriormente se estabilizó debido a la pérdida de humedad. Sin embargo, también se debe a la cantidad de clorofilas y carotenos que presentan los mangos. Debido al calor se presentó una oxidación de las hojuelas debido a la presencia de carotenos y azúcares provocando una coloración anaranjado-amarillo.

De acuerdo con lo reportado por Ochoa-Martínez *et al.* (2012) y Bautista de Medeiros *et al.* (2016) reportaron valores positivos en el parámetro de color a (rojo-verde) en frutos frescos debido al grado de maduración del mango. Además, Yuan *et al.* (2017) reportó para hojuelas de mango un incremento de acuerdo al tiempo de secado, incrementando a la intensidad de la muestra hacia la región roja del espacio de color HunterLab.

Mientras en zanahoria, el parámetro de color a en el inicio de nuestro proceso fue de 13.5, analizando el espacio de color HunterLab (parámetro a y b) indicando un color naranja, el cual es característico de la zanahoria. Sin embargo, durante el proceso se

presentó un cambio de acuerdo al contenido de humedad en el alimento lo cual repercute en el parámetro a, que posteriormente se estabilizó en los 180 minutos. Comparando con lo reportado por Sumnu *et al.* (2005) indica que la coordenada de color a fue de 20, en un proceso de secado por charolas con una temperatura de 60 °C.



**Figura 3.4** Evolución de color en el parámetro a en el proceso de secado a 60 °C en hojuelas de a) mango y b) zanahoria

Esto permitió realizar un análisis de varianza (ANOVA) con la prueba de Dunnett ( $\alpha=0.05$ ) en ambos tipos de hojuelas, el cual nos indicó que no existe diferencia significativa con respecto al color en el parámetro a durante el proceso de secado de las hojuelas de mango (Apéndice A2) y en las hojuelas de zanahoria (Apéndice B2).

### 3.2.1.3.3 Evolución del parámetro b en el proceso de secado

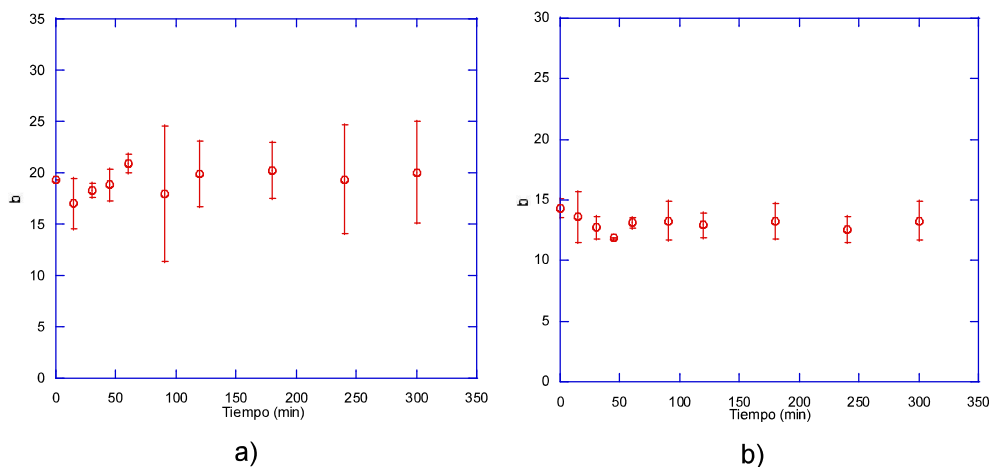
En la Figura 3.5a y 3.5b se puede observar la evolución del cambio de color en el parámetro b en las hojuelas de mango y zanahoria, respectivamente. Durante el proceso de secado en hojuelas de mango presentó un cambio diminuto en el parámetro de color b. Sin embargo, este se mantuvo hasta el final del proceso de secado. El parámetro de color b posee una relación con el parámetro de color L debido

a la transferencia de masa (pérdida de agua en la matriz del alimento) y con el bajo contenido de clorofilas y un valor promedio de carotenos.

Ochoa- Martínez, *et al.* (2012) reportaron valores negativos para el parámetro de color  $b$  en las hojuelas de mango (Tommy atkins). Esto contradice la opinión (sobre el color de las hojuelas de mango Hilacha) de Corzo O. y Álvarez C. (2012). Debido al grado de madurez del fruto y el contenido de azúcares.

Para la zanahoria, el valor del parámetro  $b$  al inicio del proceso de secado fue de 14.32 (0 min.). Sin embargo, durante el proceso de secado aplicado a las hojuelas, se presentó una variación en 15 -45 minutos, este hecho se encuentra estrechamente relacionado con la transición de la primera etapa a la segunda etapa del proceso de secado donde se presenta la mayor parte de transferencia de masa y calor sobre la hojuela de zanahoria. Posteriormente se observó en la Figura 3.4, el parámetro de color permaneció estable de 120 min hasta el culmino del proceso de secado.

Sumnu *et al.* (2005) reportó el valor del parámetro  $b$  fue de 28 en base a un proceso de secado a 60 °C en hojuelas de zanahoria, con un espesor de 0.6 cm, además, indicó que las hojuelas se encontraron con una tonalidad pardeada.



**Figura 3.5** Evolución del color en el parámetro  $b$  en el proceso de secado a 60 °C en hojuelas de a) mango y b) zanahoria

---

Por lo que se realizó un análisis de varianza (ANOVA) para ambas muestras (mango y zanahoria) con la prueba de Dunnett ( $\alpha=0.05$ ) concluyendo que no existe diferencia significativa de color en el parámetro b en ambas hojuelas (Apéndice A3 y B3), con base a una muestra control (tiempo 0 min).

#### 3.2.1.3.4 Evolución en la diferencia de color $\Delta E$ en el proceso de secado

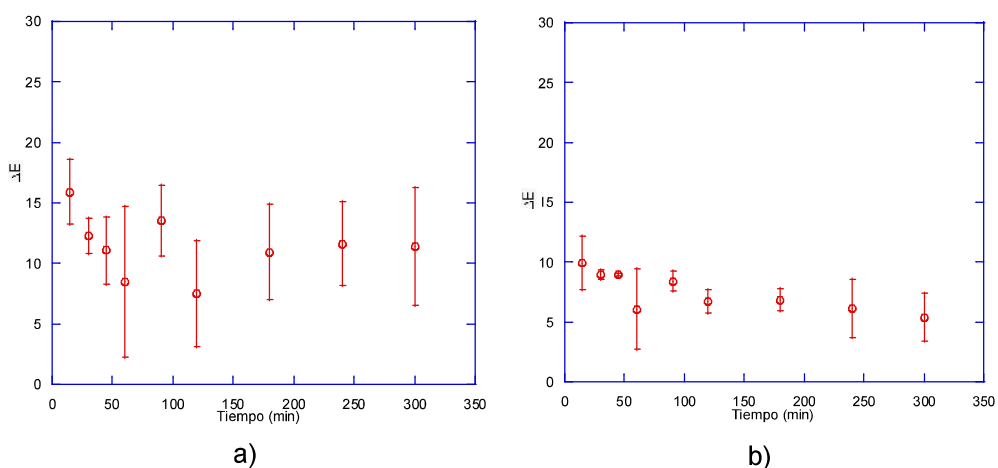
La diferencia de color ( $\Delta E$ ) en el proceso de secado se puede observar en la Figura 3.6a para el mango y para la zanahoria se aprecia en la Figura 3.6b. En la muestra de mango se puede apreciar una disminución de color debido a la pérdida del contenido de agua en las hojuelas de mango, como lo reportado por Corzo y Álvarez (2012). Además, el valor ( $\Delta E$ ) es bastante útil para expresar la cantidad total de cambio de color debido al proceso de secado efectuado sobre las hojuelas de los alimentos de estudio.

Ochoa- Martínez *et al.* (2012) reportó valores bajos de ( $\Delta E$ ) aplicando el proceso de secado por charolas de hojuelas de mango debido a los altos contenidos de humedad. Además, las hojuelas deshidratadas no presentaron diferencia con respecto a la muestra fresca.

Analizando este parámetro ( $\Delta E$ ), el contenido de sólidos solubles afecta e interfiere al proceso de secado perjudicando en los parámetros de color, otorgando un pardeamiento no enzimático y/o provocando la caramelización del producto (Reacción de Maillard). De lo contrario, cuando el mango se encuentra en estado verde, el contenido de sólidos solubles es menor presentando valores bajos de luminosidad (aprox. 40.03), mientras que los parámetros de color a y b son inferiores de 5 y 15 respectivamente indican un bajo contenido de sólidos solubles, clorofilas y carotenos en la pulpa del fruto.



En la Figura 3.6b se presenta la evolución de la diferencia de color en hojuelas de zanahorias, en la cual se puede apreciar diminutas diferencias en el color durante el proceso en 15 y 60 min., Además a los 90 min. aumentó la diferencia de color. Al final del proceso se observa una estabilidad en el cambio total de color de las hojuelas de zanahorias, por lo que la diferencia de color resultante de las hojuelas de zanahoria fue de 5.4 en relación con las hojuelas de zanahorias frescas. Esto sugiere que las hojuelas de mango y zanahoria no se presentaron una diferencia de color con respecto a las muestras originales (fresca).



**Figura 3.6** Evolución de color en el parámetro  $\Delta E$  en el proceso de secado a 60 °C en hojuelas de a) mango y b) zanahoria

### 3.3 Métodos de referencia

Los métodos analíticos de química humedad utilizados fueron descritos en el tema 2.5 de esta investigación. En la Tabla 3.2 se muestra el contenido de azúcar total, dextrosa, fructosa, ácido cítrico y L-ascórbico en muestras frescas y deshidratadas de mango y zanahoria. Además, el proceso de secado contribuyó significativamente para la concentración de los analitos estudiados.

**Tabla 3.2** Analitos cuantificados en hojuelas de mango y zanahoria por cada 100 g

Compuesto	Mango Manila		Zanahoria	
	Fresca	Deshidratada	Fresca	Deshidratada
Azúcar total (g)	7.7152 <sup>1.6779</sup>	33.7241 <sup>0.4687</sup>	3.9358 <sup>0.0391</sup>	53.8803 <sup>2.1472</sup>
Glucosa/dextrosa				
Fructosa				
Ácido cítrico (g)	0.8941 <sup>0.2407</sup>	9.8225 <sup>0.0490</sup>	0.0423 <sup>0.0188</sup>	0.0620 <sup>0.0000</sup>
Ácido L-ascórbico (mg)	21.7288 <sup>0.7101</sup>	91.0271 <sup>0.7111</sup>	5.6956 <sup>0.2952</sup>	19.4858 <sup>1.4283</sup>

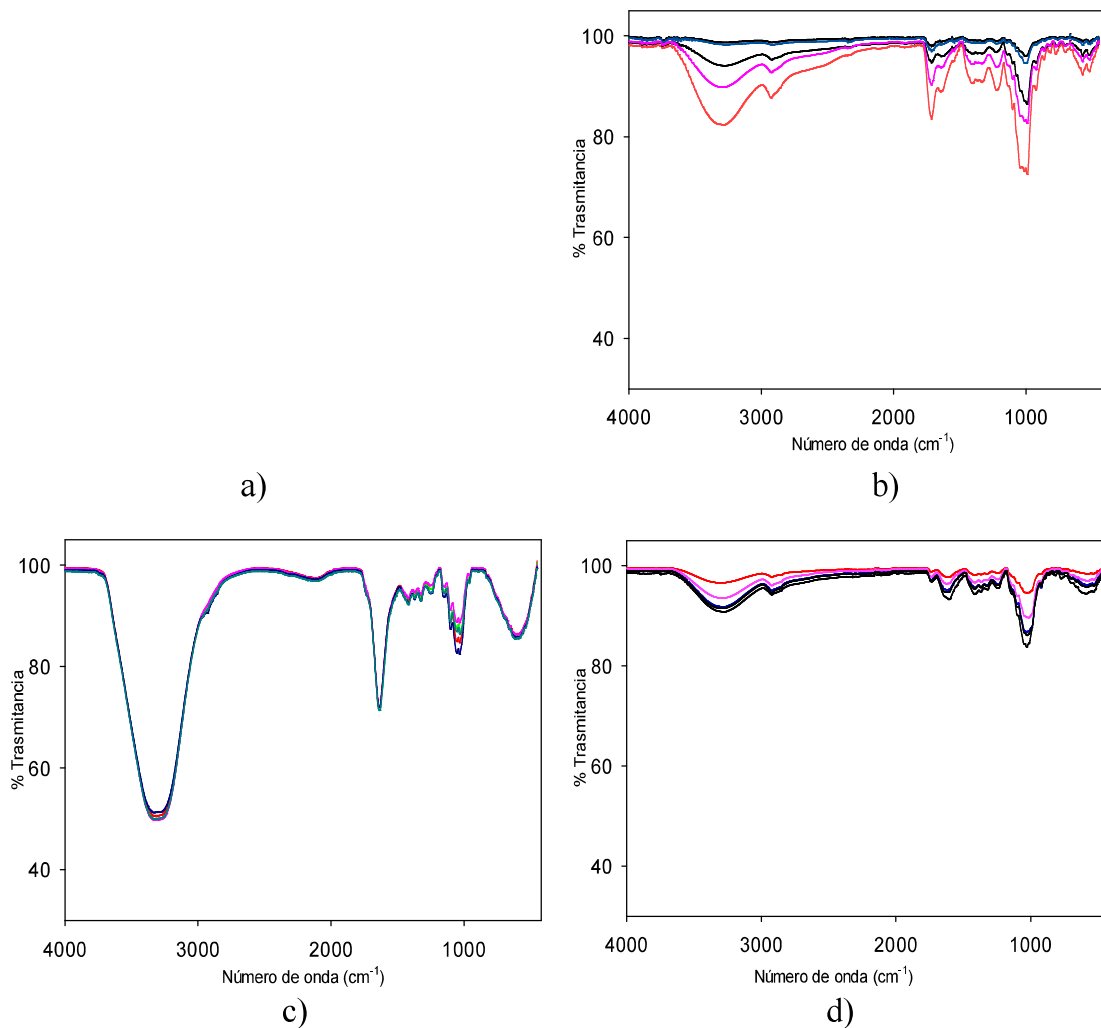
Jha *et al.*, (2005) reportaron los valores de 8.7-17.9%, 0.12% y 6.8 mg para el contenido de azúcar total, ácido cítrico y L-ascórbico, respectivamente, en muestra de mango con un grado de maduración organoléptica adecuada. En comparación a nuestro estudio, el mango Manila presentó una coloración  $\frac{3}{4}$  partes verde y  $\frac{1}{4}$  amarillo, debido a estas condiciones de maduración fueron las adecuadas aplicar el proceso de secado, resultados similares obtuvo Villegas *et al.*, (2011). Los resultados obtenidos de ácido cítrico y L-ascórbico fueron diferentes a los valores reportados por Jha *et al.*, (2010). Esto es debido al grado de maduración, además el contenido de humedad afecta considerablemente la estabilidad de estos ácidos orgánicos.

Con respecto a la zanahoria, el contenido de sólidos solubles reportado por Huy *et al.*, (2010) fue de 4.74 g, mientras el contenido de ácido L-ascórbico fue de 12.46 mg de acuerdo a lo reportado por Chen *et al.*, (2016). Las variaciones de los analitos estudiados con respecto a diversos investigadores son debido a la zona de cultivo y tratamientos aplicados para la fertilización de la tierra (Ignat *et al.* 2012).

### 3.4 Análisis de la información espectral

Los espectros infrarrojos (MIR) permiten el análisis de grupos funcionales asociados principalmente al contenido de humedad, proteínas, lípidos y carbohidratos (Ferreira *et al.*, 2014). Sin embargo, se pueden determinar otros constituyentes dentro de la matriz de estudio. En la Figura 3.6 se muestra la información espectral obtenida a partir de muestras de mango y zanahoria frescas y deshidratadas. El rango espectral

importante para este estudio fue de 1800-800  $\text{cm}^{-1}$ , debido que en esta región corresponde a los azúcares y ácidos orgánicos (Bureau *et al.*, 2009).



**Figura 3.7** Información espectral de hojuelas de: Mango a) fresca, b) deshidratada y Zanahoria c) fresca y d) deshidratada

El rango de 1400-900  $\text{cm}^{-1}$  fueron identificadas varias bandas las cuales corresponden a la glucosa, fructosa y sacarosa (azúcar total). En la región de 1400-1199  $\text{cm}^{-1}$  corresponde a los enlaces de O-C-H, C-C-H y C-O-H; los cuales identifican los carbohidratos (Sinelli *et al.*, 2008; Leopold *et al.*, 2011.). Las bandas en la región 1153-900  $\text{cm}^{-1}$  son asignadas a enlaces C-O, C-C. Mientras que, el ácido cítrico se atribuye

al rango de 1150-1300  $\text{cm}^{-1}$  de acuerdo a lo reportado por Bureau *et al.*, (2009). Con lo que respecta al ácido L-ascórbico, se encuentra en el rango de 1800-1000  $\text{cm}^{-1}$  donde se aprecian los enlaces C-H, C=O, C=C, C-O, C-O-C y -OH de este compuesto. Sin embargo, los grupos funcionales principales para el ácido L-ascórbico son 1753, 1672, 1350 y 980  $\text{cm}^{-1}$  (Yang *et al.*, 2002; Bichara *et al.*, 2014).

### 3.5 Desarrollo y validación de modelos matemáticos

Los modelos matemáticos fueron obtenidos mediante el software Matlab. La técnica quimiométrica aplicada fue mínimos cuadrados. Esta técnica quimiométrica permitió correlacionar los valores de química húmeda y los números de onda obtenidos de los espectrogramas. Los modelos matemáticos que permiten predecir el contenido de estos analitos se muestran en la Tabla 3.3. en el cual se aprecia para cada constituyente estudiado en el mango y la zanahoria.

**Tabla 3.3** Modelos matemáticos para la predicción en muestras de mango Manila

Compuesto	Modelos en muestra	
	Fresca	Deshidratada
Azúcar Total	-	$y = 10.56 * x_1 + 31.95$
Dextrosa	-	-
Fructosa	-	-
Ácido cítrico	-	$y = 4.679 * x_1 + 9.258$
Ácido L-ascórbico	-	$y = 64.29 * x_1 + 83.6$

**Tabla 3.4** Análisis estadístico de los modelos de predicción en muestras de mango

Compuesto	Modelos en muestra							
	Fresca				Deshidratada			
	R <sup>2</sup>	R <sup>2</sup> <sub>aj</sub>	SSE	RMSE	R <sup>2</sup>	R <sup>2</sup> <sub>aj</sub>	SSE	RMSE
Azúcar Total	-	-	-	-	0.9204	0.8939	0.07138	0.1543
Dextrosa	-	-	-	-	-	-	-	-
Fructosa	-	-	-	-	-	-	-	-
Ácido cítrico	-	-	-	-	0.8387	0.7849	0.002435	0.02849
Ácido L-ascórbico	-	-	-	-	0.8931	0.8574	0.1624	0.2326

**Tabla 3.5** Modelos matemáticos para la predicción en muestras de zanahoria

Compuesto	Modelos en muestra	
	Fresca	Deshidratada
Azúcar Total	$y = 7.74 * x_1 + 2.535$	$y = 28.92 * x_1 + 48.98$
Dextrosa	-	-
Fructosa	-	-
Ácido cítrico	$y = 0.6996 * x_1 + 0.001391$	$y = 1.219 * x_1 + 0.08611$
Ácido L-ascórbico	$y = 328.5 * x_1 - 7.242$	$y = 24.82 * x_1 + 15.26$

**Tabla 3.6** Análisis estadístico de los modelos de predicción en muestras de zanahoria

Compuesto	Modelos en muestra							
	Fresca				Deshidratada			
	R <sup>2</sup>	R <sup>2</sup> <sub>ajs</sub>	SSE	RMSE	R <sup>2</sup>	R <sup>2</sup> <sub>aj</sub>	SSE	RMSE
Azúcar Total	0.8873	0.8498	0.02408	0.0896	0.9003	0.8671	2.1200	0.8407
Dextrosa								
Fructosa								
Ácido cítrico	0.8121	0.7495	0.00002	0.00257	0.9787	0.9716	0.00005	0.0045
Ácido L-ascórbico	0.9088	0.8784	0.6785	0.4756	0.7923	0.7230	3.7000	1.1110

Cuadro 3. Resultados del análisis estadístico de los modelos matemáticos zanahorias.

Los modelos desarrollados en muestras frescas permitieron obtener predicciones correctas acerca del contenido de CAT, CAC y CAA para muestras frescas. Mientras para muestras deshidratadas el modelo que no permitió predecir adecuadamente fue el CAA. Quilistzch *et al.*, 2005, reportaron que la espectroscopía infrarroja media fue adecuada para determinar azúcar total en jugos de zanahoria obteniendo  $R^2=0.9$ .

### 3.6 Validación de los modelos

La validación de los modelos se realizó aplicando un diseño experimental 2<sup>3</sup> en el que posee dos variables cualitativas y una cuantitativa. En la Tabla 2.4 se muestra los factores y niveles que se emplearon para el desarrollo del diseño experimental, en el que se tuvo dos variables cualitativas y una cuantitativa.

---

## REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Alamprese, C., y Casiraghi, E., 2015. Application of FT-NIR and FT-IR spectroscopy to fish fillet authentication. *LWT - Food Science and Technology*. 63:720-725.

Alves de Oliveira, G., F. De-Castilhos, C. M-G. Claire-Renard y S. Bureau. 2014. Comparison of NIR and MIR spectroscopic methods for determination of individual sugars, organic acids and carotenoids in passion fruit. *Food Research International*. 60:154-162.

Arias-Nava, E. H., A. J. Rios-Lira, J. A. Vazquez-López y R. Perez- Gonzalez. 2015. Comparative study between the two experimental design approaches Taguchi and traditional in presence of control by control interactions. *Ingeniería, investigación y tecnología*. XVI: 131-142.

Ayvaz, H., A. Sierra-Cadavid, D. P. Aykas, B. Mulqueeney, S. Sullivan y L. E. Rodríguez-Saona. 2016. Monitoring multicomponent quality traits in tomato juice using portable mid-infrared (MIR) spectroscopy and multivariate analysis. *Food control*. 66: 79-86.

Badui D., S., 2006. Química de los alimentos. Pearson Educación, México

Bautista, R. A., Pimenta, Z. M., Oliveira, C. B., Frag, E. G., Supupira, M. I., and Moreira, P. (2016). Influence of dual stage sugar substitution pretreatment on drying kinetics and quality parameters of mango. *LWT- Food Science and Technology*. 67: 167-173.

Bichira, L. C., H. E. Lanús y S.A. Brandán. 2014. Stabilities of aqueous solutions of sucrose containing ascorbic and citric acids by using FTIR spectroscopy and physicochemical studies. *Journal of molecular liquids*. Vol. 200. Part B.

Bureau, S., D. Ruiz, M. Reich, B. Gouble, D. Berrand, J. M. Audergon y M.G.-C. Renard. 2009. Application of ATR-FTIR for a rapid and simultaneous determination of sugars and organic acids in apricot fruit". *Food chemistry*. 115.

Calamari, L., L. Gobbi y P. Bani. 2016. Improving the prediction ability of FT-MIR spectroscopy to assess titratable acidity in cow's milk. *Food chemistry*. 192: 477-484.

Castillo-Martínez, M. 2007. Aplicación de la Espectroscopía NIR al Control Analítico de Procesos de la Industria Química. Tesis de Doctorado en Química. Universidad Autónoma de Barcelona. España.

Chen, Z-G., X. Y. Guo y T. Wu. 2016. A novel dehydration technique for carrot slices implementing ultrasound and vacuum drying methods. *Ultrasonics Sonochemistry*. 30: 28-34.

Ciurczak, E. W. y J. K. Drennen. 2002. Pharmaceutical and medical applications of Near-Infrared spectroscopy. 31. Marcel AG. United States of America.

Corzo O y C. Álvarez. 2012. Color change kinetics of mango at different maturity stages during air drying. *Journal of food processing and preservation*.

Da Silva-Dias, J.C. 2014. Nutritional and Health Benefits of Carrots and Their Seed Extracts. *Scientific Research*. 5:2147-2156.

De fuentes-Navarta, M., C. Bosch Ojeda y F. Sánchez-Rojas. 2008. Aplicación de la Espectroscopía del infrarrojo medio en química analítica de procesos. *Bol. Soc. Quím. Méx.* 2(3). 93-103.

Dewaest, M., C. VILLEMEJANE, D. J-R. Bouveresse, L. Eveleigh, D. N. Rutledge, A. Verel y C. Michon. 2016. Interest of coupling ATR-MIR spectroscopy with independent components analysis to follow starch hydrothermal transformations. *Food Hydrocolloids*.

Díaz-Martín, R., G. Snagiler-Contreas y A. Guardiola-Mouhaffel. 2015. Aplicación del método de mínimos cuadrados para la obtención de los parámetros de los modelos de Hederson y Chung-Pfost. *Educacion quimica*. 26(2): 139-145.

Ding, X., Y. Guo, Y. Ni y S. Kokot. 2016. A novel NIR spectroscopic method for rapid analysis of lycopene, total acid, phenols and antioxidant activity in dehydrated tomato samples. *Vibrational spectroscopy*. 82:1-9.



---

Domínguez-Niño, A., A. N. Buendía-González, I. Andrade-González, D. Cantú-Lozano y G. Luna-Solano. 2016. Efecto del secado por lecho fluidizado sobre las propiedades fisicoquímicas y microbiológicas de queso fresco mexicano. *Revista Mexicana de Ingeniería Química*. 15(3): 869-881.

Egan, H., R. S. Kirk y R. Saw. 1991. Análisis químico de los alimentos de Pearson. Continental S.A. de C.V., México.

Egidio, V. D., N. Sinelli, S. Limbo, L. Torri, L. Franzetti y E. Casiraghi. 2009. Evaluation of shelf-life of fresh-cut pineapple using FT-NIR and FT-IR spectroscopy. *Postharvest Biology and Technology*. 54: 87-92.

Fan, S., B. Zhang, J. Li, W. Huang y C. Wang. 2016. Effect of spectrum measurement position variation on the robustness of NIR spectroscopy models for soluble solids content Apple. *Biosystems Engineering*. 143: 9-19.

FAOSTAT. 2014. Food and agriculture organization of the united nations statistics division. <http://faostat3.fao.org/home/E>. (Consultado agosto 2016).

Ferreira, D.S., O. F. Galão, J. A. L. Pallone y R. J. Poppi. 2014. Comparison and application of near-infrared (NIR) and mid-infrared (MIR) spectroscopy for determination of quality parameters in soybean samples. *Food Control*. 35: 227-232.

Forina, M., P. Oliveri, L. Bagnasco, R. Simonetti, M. C. Casolino, G. F. Nizzi y M. Casale. 2015. Artificial nose, NIR and UV- Visible spectroscopy for the characterisation of the PDO Chianti Classico olive oil. *Talanta*. 144: 1070-1078.

Frizon, C. N. T., G. A. Oliveira, C. A. Perussello, P. G. Peralta-Zamora, A. M. O. Camlofski, Ü. B. Rossa y R. Hoffmann-Ribani. 2015. Determination of total phenolic compounds in yerba mate (*Ilex paraguarensis*) combining near infrared spectroscopy (NIR) and multivariate analysis. *LWT-Food Science and Technology*. 60: 795-801.

Galaz, P., M. Valdenegro, H. Nuñez, S. Almonacid y R. Simpson. 2017. Effect of drum drying temperatures on drying kinetic and polyphenol contents in pomegranate peel". *Journal of food engineering*. Vol. 208.

Gamboa-Santos, J., A.C. Soria, M. Perez-Mateos y J. A. Carrasco. 2013. Vitamin C content and sensorial properties of dehydration carrots blanched conventionally or by ultrasound. 130: 782-788.

Gaulitz, G., y T. Vo-Dinh. 2003. Handbook of spectroscopy. Wiley VCH. Germany.

Giovanelli, G., N. Sinelli, R. Beghi, R. Guidetti y E. Casiraghi. 2014. NIR spectroscopy for the optimization of postharvest Apple management. *Postharvest Biology and Technology*. 87: 13-20.

Giovenzana, V., R. Beghi, R. Civelli y R. Guidetti. 2015. Optical techniques for rapid quality monitoring along minimally processed fruit and vegetable chain. *Trends in food science & technology*. 46(2): 331-338.

Givens, D. I., J. L. De Boever y E. R. Deaville. 1997. The principles, practices and some future applications of near infrared spectroscopy for predicting the nutritive value of foods for animals and humans. 10: 83-114.

Goyal, R.K., A.R.P. Kingsly, M.R. Manikantan y S.M. Ilyas. 2006. Thin-layer drying kinetics of mango slices. *Biosystems engineering*. 95(1): 43-49.

Guo, T., W. H. Feng, X. Q. Liu, H. M. Gao, Z. M. Wang y L. L. Gao. 2016. Fourier transform mid-infrared spectroscopy (FT-MIR) combined with chemometrics for quantitative analysis of dextrin in danshen (*Salvia miltiorrhiza*) granule. *Pharmaceutical and biomedical analysis*. 123: 16-23.

Hell, J., M. Prückler, L. Danner, U. Henniges, S. Apprich, T. Rosenau, W. Kneifel y S. Böhmendorfer. 2016. A comparison between near-infrared (NIR) and mid-infrared (ATTR-FTIR) spectroscopy for the multivariate determination of compositional properties in wheat bran samples. *Food Control*. 60: 365-369.

Höskuldsson A. 1988. PLS regression methods. *Journal of chemometrics*. 2: 211-228.

Huang, J., M. Zhang, B. Adhikari y Z. Yang. 2016. Effect of microwave air spouted drying arranged in two and three-stages on the drying uniformity and quality of dehydrated carrot cubes. *Journal of food engineering*. 177:80-89.

---

Hui Y.H., 2006. Handbook of food science, technology, and engineering. USA. Taylor & Francis

Hui Y.H., 2010. Handbook of fruit and vegetable flavors. Canada. Wiley-& Sons

HunterLab. 2017. The world's true measure of color HunterLab. <https://www.hunterlab.com/es/>. (Consultado marzo de 2017).

Hymavathi, T. V. y V. Khader. 2005. Carotene, ascorbic acid and sugar of vacuum dehydrate ripe mango powders stored in flexible packaging material. *Journal of food composition and analysis*. 18: 181-192.

Ignat, T., Z. Schmilovitch, J. Fefoldi, B. Steiner y S. Akalai-Tuvia. 2012. Non-destructive measurement of ascorbic acid in bell peppers by VIS-NIR and SWIR spectroscopy. *Postharvest biology and Technology*. 74. 91-99.

Ilaslan, k., I. H. Boyaci y A. Topcu. 2014. Rapid analysis of glucose and sucrose contents of commercial soft drinks using Raman spectroscopy. XXX:1-6.

Jahurul, M. H. A., I. S. M. Zaidul, K. Ghafoor, F. Y. Al-Juhaimi, K. L. Nyam, N. A. N. Nourulaini, F. Sahena y A. K. M. Omar. 2015. Mangoe (*Mangifera indica* L.) by products and their valuable components: A review. *Food chemistry*. 183: 173-180.

Jha, S. N., K. Narsaiah, A.D. Sharma, M. Singh, S. Bansal y R. Kumar. 2010. Quality parameters of mango and potential of non destructive techniques for their measurement- a review. *Journal Food Science and Technology*. 47:1-14.

Jiang, Y. y Song, J. Chapter 1. Fruits and Fruit Flavor: Classification and Biological characterization. En: Hui Y.H., eds. Handbook of fruit and vegetable flavors.2010. Canada. Wiley-& Sons: 3-23.

Karoui, R., G. Downey, y C. Blecker. 2010. Mid-Infrared Spectroscopy Coupled with Chemometrics: A Tool for the Analysis of Intact Food Systems and the Exploration of Their Molecular Structure-Quality Relationships - A Review. *Chem. Rev.* 110: 6144-6168.

Kassouf, A., A. Ruellan, D. J-R. Bouvereresse, D. N. Rutledge, S. Domenek, J. Maalouly, H. Chibib y V. Ducruet. 2016. Attenuated Total Reflectance-Mid Infrared Spectroscopy (ATR-MIR) coupled with independent components analysis (ICA): A fast method to determine plasticizers in polylactide (PLA). *Talanta*. 147:569-580.

Kerdpiboom, S., W. L. Kerr y S. Devahastin. 2006. Neuronal network prediction of physical property changes of dried carrot as a function of fractal dimension and moisture content. *Food research international*.39. 1110-1118.

Kerdpiboon, S., W. L. Kerr y S. Devahastin. 2006. Neural network prediction of physical property changes of dried carrot as a function of fractal dimension and moisture content. *Food Research international*. 39: 1110-1118.

Koca, Nuray., H. S. Burdurlu y F. Karadeniz. 2007. Kinetics of color changes in dehydrated carrots. *Journal of food engineering*. 78. 449-455.

Kyraleou, M., C. Pappas, E. Voskidi, Y. Kotserdis, M. Basalekou, P. A. Tarantilis y S. Kallithraka. 2015. Diffuse reflectance Fourier transform infrared spectroscopy for simultaneous quantification of total phenolics and condensed tannins contained in grape seeds. *Industrial Crops and Products*. 74: 784-791.

Lankmayr, E., J. Mocak, K. Serdt, B. Balla, T. Wezl, D. Bandoniene, M. Gfrere y S. Wagner. 2004. Chemometrical classification of pumpkin seed oils using UV-Vis, NIR and FTIR spectra. *Journal of biochemical and biophysical methods*. 61: 95-106.

Lenz, S., K. Böhm, R. Ottner, M. Huber-Humer.2016. Determination of leachate compounds relevant for landfill aftercare using FT-IR spectroscopy. *Waste management*. 55: 321-329.

Leong, S. Y. y I 'Oey. 2012. Effect of endogenous ascorbic acid oxidase activity and stability an vitamin C in carrots (*Daucus carota* subsp. *Savitus*) during thermal treatment. *Food chemistry*. 134: 2075-2085.

Leopold. L. F., N. Leopold, H. A. Diehl, y C. Socaciu. 2011. Quantification of carbohydrates in juices using FTIR spectroscopy and multivariate analysis. *Spectroscopy*. 26.

---

Márquez, C., M. I. López, I. Ruiz-Sánchez y M. P. Callao. 2016. FT-Raman and NIR spectroscopy data fusion strategy for multivariate qualitative analysis of food fraud. *Talanta*. 161: 80-86.

Martuscelli, M., L. Lupieri, G. Sacchetti, D. Mastrocola y P. Pittia. 2017. Prediction of content from water activity analysis in dry-cured ham. *Journal of food engineering*. 200: 29-39.

Megías-Pérez, R., J. Gamboa-Santos, A. C. Soria, M. Villamiel y A. Montilla. 2014. Survey of quality indicators in commercial dehydrated fruits. *Food chemistry*. 150:41-48.

Mielcarek, A., J. Rodziewicz, W. Janczukowicz, D. Dabrowska, S. Ciesielski, A. Thornton y J. Struk-Sokolowska. 2017. Citric acid application for denitrification process support in biofilm reactor. *Chemosphere*. 171: 512-529.

Montgomery, D. C. 2012. Diseño de experimentos. Limusa-Wiley. Mexico D. F.

Morton, J.F., Mangoes. En: Encyclopaedia of Food Science, Food Technology and Nutrition. 1993. USA. Academic Press: 3691-3696.

Muñoz-López, C. 2014. Proceso de secado por charolas y liofilización de ciruela Mexicana (*Spondias purpurea*). Tesis de Maestría. Instituto Tecnológico de Orizaba. México.

Muñoz-Villa, A., A. Sáenz-Galiendo, L. López-López, L. Cantú-Sifuentes y L. Barajas-Bermúdez. 2014. Citric acid: interesting compound. *Revista científica de la Universidad autónoma de Coahuila*. 12 (6): 18-23.

Musingarabwi, D. M., H. H. Nieuwoudt, P. R. Young, H. A. Eyéghè-Bickong y M. A. Vivier. 2015. A rapid qualitative and quantitative evaluation of grape berries at various stages of development using Fourier transform infrared spectroscopy and multivariate data analysis. *Food Chemistry*.

Nambi, V. E., K. Thangavel y D. M. Jesudas. 2015. Scientific classification of ripening period and development of colour grade chart for indian mangoes

---

(*Mangifera indica* L.) using multivariate cluster analysis. *Scientia Horticulturae*. 193:90-98.

Nascimento Marques, E.J., Tonetto de Freitas, S., Pimentel, M. F., y Pasquini, C..2016. Rapid and non- destructive determination of quality parameters in the 'Tommy Atkins' mango using a novel handheld near infrared spectrometer. *Food Chemistry*. 197: 1207-1214.

Nielsen, S. S. 2010. Food analysis. Springer. New York.

Nishikawa, Y., H. Itoh y I. Noda. 2016. Analysis of molecular interaction in polymer systems by using a pulsed compression time-resolved FT-IR/2D-IR spectroscopy. Generation of ring down compression pulses. *Vibrational Spectroscopy*. 86: 149-159.

NMX, 1978. Norma mexicana. Dirección general de normas. Determinación de la acidez titulable en productos elaborados a partir de frutas y hortalizas. <http://www.colpos.mx/bancodenormas/nmexicanas/NMX-F-102-S-1978.PDF>.

(Consultada Diciembre, 2016)

NMX, 1978. Normas Mexicana. Dirección general de normas. Determinación de reductores directos y totales en alimentos. Dirección general de normas. <http://www.colpos.mx/bancodenormas/nmexicanas/NMX-F-312-1978.PDF>.

(Consultada Agosto, 2016).

Ochoa-Martínez, C.I., P.T. Quintero, A.A. Ayala, y M.J. Ortiz. 2012. Drying characteristics of mango slices using Refractance Window™ technique. *Journal of food engineering*. 109:69-75.

Peets, P., I. Leito, J. Pelt y S Vahur. 2017. Identification and classification of textile fibres using ATR-FT-IR spectroscopy with chemometric methods. *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*. 173: 175-181.

Pinzón, I. M. P., G Fisher, y G. Corredor. 2007. Determinación de los estados de madurez del fruto de la gulupa (*Plassiflora edulis* Sims.). *Agronomía colombiana*. 25 (1): 83-95.

---

Prakash, S., S. K. Jha, N. Datta. 2004. Performance evaluation of blanched carrot dried y three different driers. *Journal of food engineering*. 62: 305-313.

Pu, H., Z. Li, J. Hui y G.S. V. Raghavan. 2016. Efec of relative humidity on microwave drying of carrot. *Journal of food Engineering*. 190: 167-175.

Pu, Y-Y. & Sun, D-W. (2017). Combined hot-air and microwave-vacuum drying for improving drying uniformity of mangoes slices based on hyperspectral imaging visualization of moisture content distribution. *Biosystems engineering*. 156:108-119

Quilitzsch, R., M. Baranska, H. Schulz y E. Hoberg. 2005. Fast determination of quality by spectroscopy methods in the UV-VIS., Nir and IR range. *Journal of applied Botany and food quality*. 79: 163-167.

Rambla, F.J., S. Garrigues, y M. de la Guardia. 1997. PLS-NIR determination of total sugar, glucose, fructose and sucrose in aqueous solutions of fruit juices. *Analítica Chimica Acta*. 334: 41-53.

Ramírez-Rodríguez, E., A. M. Anaya-Escalera y G. Mariscal-Landín. 2005. Predicción de la composición química del grano de sorgo mediante espectroscopía de reflectancia en el infrarrojo cercano (NIRS). 43(1): 1-11.

Ranganna, S. 2008. Handbook of analysis and quality control for fruit and vegetable products. McGraw-Hill. New Delhi.

Reeves, III J.B. 1997. The use of mid infrared Difuse Reflectance spectroscopy to determine quantitatively the chemical composition of tall fescue. *USDA Agricultural research service*. :2454-2465.

Regmi, U., M. Palma y C. G. Barroso. 2012. Direct determination of organic acids in wine and wine-derived products by Fourier transform infrared (FT-IR) spectroscopy and chemometric techniques. *Analytica Chimica Acta*. 732:137-144.

Romera-Fernández, M., L. A. Berrueta, S. Garmón-Lobato, B. Gallo, F. Vicente y J. M. Moreda. 2012. Feasibility study of FT-MIR spectroscopy and PLS-R for fast determination of anthocyanins in wine. *Talanta*. 88: 303-330.

---

Sablinskas, V., Section 4. Instrumentation. En: Gauglitz, G. & Vo-Dinh, T., eds. Handbook of spectroscopy. 2003. Germany. Wiley-VCH:48-68.

Schulz H. y Baranska. 2009. Fruits and Vegetables. En: Spectroscopy for food quality analysis and control. Elsevier inc: 321- 345.

Settle, A. F., 1997. Handbook of instrumental techniques for analytical chemistry. Prentice Hall. New Jersey.

Shenoy, P., F. Innings, T. Lilliebjelke, C. Jonsson, J. Fitzpatrick, L. Ahmé, 2014. investigation of application of digital color imaging to assess the mixture quality of binary food poder mixes. Journal of food engineering. 128:140-145.

SIAP 2014-A. Servicio de Información Agroalimentaria y Pesquera Producción nacional de mango y zanahoria. Por entidad federativa 2014. [www.siap.gob.mx/cierre-de-la-produccion-agricola-por-estado](http://www.siap.gob.mx/cierre-de-la-produccion-agricola-por-estado). Consultado agosto, 2016.

SIAP 2014-B. Atlas Agroalimentario México 2014. Servicio de Información Agroalimentaria y Pesquera. México.

Sivam, A.S., D. Sun-Waterhouse, C. O. Perera y Waterhous, G. I .N., 2013. Application of FT-IR and Raman spectroscopy for the study of biopolymers in breads fortified with fibre and polyphenols. 50: 573-585.

Skoog, D. A., F. J. Holler y T. A. Nieman. 2008. Principios de análisis instrumental. McGraw-Hill. España.

Stuart, B. 2004. Infrared spectrscopy: fundements and aplications. Wiley.& Sons.

Summu, G., E. Turabi, M. Oztop. 2005. Drying of carrot in microwave and lamp-microwave combination oven. LWT.38. 549-553.

Tatemoto, Y., T. Mibu, Y. Yokoi y A. Hagimoto. 2015. Effect of freezing pretreatment on the drying characteristics and volume change of carrots immersed in a fluidized bed of inert particles under reduced pressure. Journal of food engineering. XXX: 1-8.



Traffano-Schiffo, M.V., M. Castro-Giráldez, P. J. Fito y N. Balaguer. 2014. Thermodynamic model of meat drying by infrared thermography. *Journal of food engineering*. 2014. 128: 103-110.

Vaclavik, V. A..1998. Fundamentos de ciencias de los alimentos. Editorial acriba. Zaragoza, España.

Vagnini, M., F. Gabrieli, A. Daveri y D. Sali. 2017. Handheld new technology Raman and portable FT-IR spectrometers as complementary tools for the in situ identification of organic materials in modern art. *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*. 176: 174-182.

Vandenbergh, L. P. S., C. Rodrigues, J. C. De Carvalho, A. B. P. Medeiros y C. R. Soccol. 2017. Production and application of citric acid. *Current Developments in Biotechnology and Bioengineering. Production, isolation and purification of industrial products*. 557-575.

Vila-López R., J. I. Fernández-Fernández, R. Gil-Muñoz y A. Martínez-Cutillas. 2006. Determinación rápida mediante espectrofotometría FT-IR- de la madurez fenólica en uva de la vendimia 2006. *IMIDA*.

Villegas-Santiago, J. 2008. Secado por hojuelas y por lecho fluidizado de minihojuelas de mago manila (*Mangifera indica*). Tesis de Maestría. Instituto tecnológico de Orizaba. México.

Villegas-Santiago, J., M. Calderon-Santoyo, A. Ragazzo-Sánchez, M. A. Salgado-Cervantes y G. Luna-Solano. 2011. Fluidized bed and tray drying of thinly sliced mango (*Mangifera indica*) pretreated with ascorbic and citric acid. *International Journal of Food Science and Technology*. 46: 1296-1302.

Wang, J., X. M. Fang, A. S. Mujumdar, J. Y. Qian, Q. Zhang, X. H. Yang, Y. H. Lui, Z. J. Gao y H. W. Xiao. 2017. Effect of high- humidity hot air impingement blanching (HHAIB) on drying and quality of red pepper (*Capsicum annuum* L.). *Food chemistry*. 220: 145-152.

---

Wormank, J. J. 1996. Interpretive spectroscopy for near infrared, applied spectroscopy reviews. 31: 251-320.

Xiao, H-W., J. W. Bai, L. Xie, D. W. Sun y Z. J. Gao. 2015. Thin-layer air impingement drying enhances drying rate of American ginseng (*Panax quinquefolium* L.) slices with quality considered. Food and Bioproducts processing. 94: 581-591.

Xie, L., X. Ye, D. Liu y Y. Ying. 2011. Prediction of titrable acidity, malic acid, and citric acid in bayberry fruit by near-infrared spectroscopy. Food Research International. 44: 2198-2204.

Yahia, E. M., J. J. Ornelas-Paz y R. Ariza-Flores. 2006. El mango. Trillas. México.

Yang, H y Irudayraj, Joseph. 2002. Rapid determination of vitamina C by NIR, Mir and FT-RAMAN techniques. Journal Pharmacy and Pharmacology. 54: 1247-1255.

Zapico-Suárez, S. 2013. Determinación de simultanea de mono y disacáridos en zumos de frutas mediante técnicas espectroscópicas. Tesis de grado. Maestría en Ciencias Analíticas y Bioquímica. Universidad de Oviedo. Oviedo.

Zarska, M., M. Dzida y A. Apelblat. 2017. Surface tension and densities of concentrated aqueous solutions of citric acid. Journal of molecular liquids. 228: 91-95.

Zhao, W., F. Fan y W. Wang. 2017. Non-linear partial least squares response Surface method for structural reliability analysis. Reability engineering and system safety. 161: 69-77.

Zielinska, M., y M. Markowski. 2007. Drying behavior of carrots dried in a Spout-Fluidize bed dryer. 25(1): 261-270.

## APÉNDICES

## APÉNDICE A

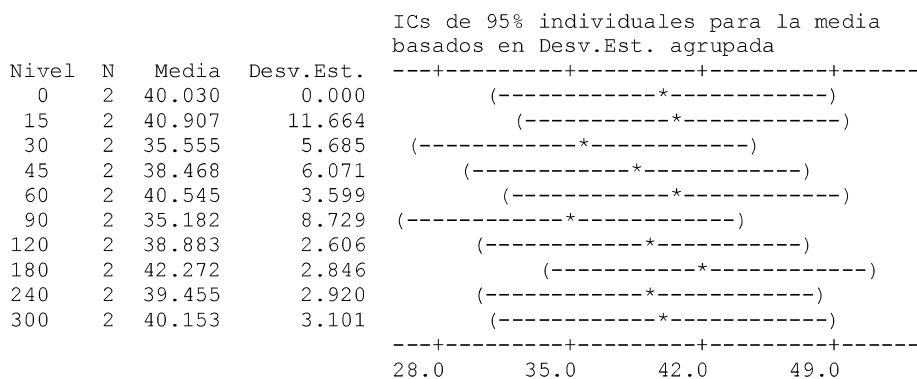
### Apéndice A1

Análisis estadístico (ANOVA) del parámetro de color L (Luminosidad) con la prueba de Dunnett en el proceso de secado por charolas en hojuelas de mango a 60 °C.

#### ANOVA unidireccional: L vs. partida

Fuente	GL	SC	CM	F	P
partida	9	91.7	10.2	0.31	0.953
Error	10	327.4	32.7		
Total	19	419.1			

S = 5.722 R-cuad. = 21.88% R-cuad. (ajustado) = 0.00%



Desv.Est. agrupada = 5.722

Agrupar información utilizando el método de Dunnett

Nivel	N	Media	Agrupación
0 (control)	2	40.030	A
180	2	42.272	A
15	2	40.907	A
60	2	40.545	A
300	2	40.153	A
240	2	39.455	A
120	2	38.883	A
45	2	38.468	A
30	2	35.555	A
90	2	35.182	A

Las medias no etiquetadas con la letra A son significativamente diferentes de la media del nivel de control.

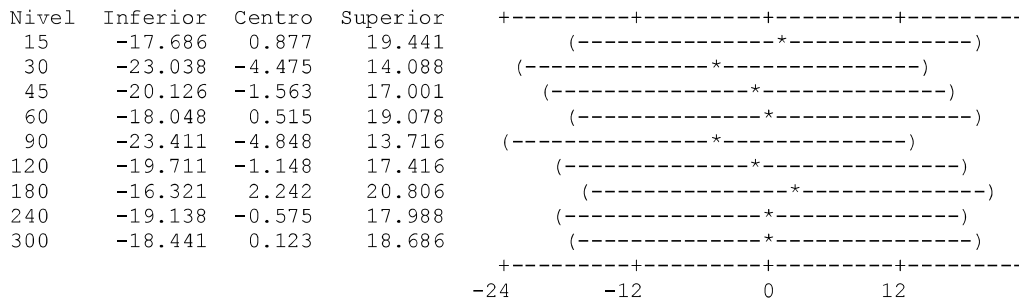
Comparación de Dunnett con un control

Tasa de error por familia = 0.05  
Tasa de error individual = 0.0088

Valor crítico = 3.24

Control = nivel (0) de partida

Intervalos para media de tratamientos menos media de control



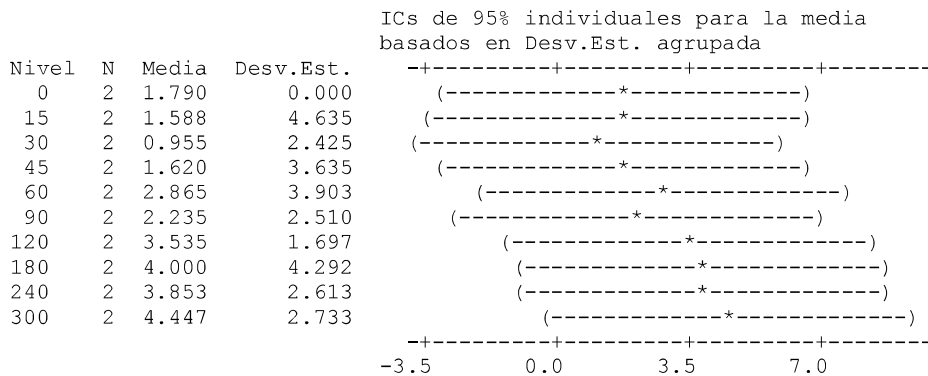
### Apéndice A2

Análisis estadístico (ANOVA) del parámetro de color a (rojo-verde) con la prueba de Dunnett en el proceso de secado por charolas en hojuelas de mango a 60 °C.

#### ANOVA unidireccional: a vs. partida

Fuente	GL	SC	CM	F	P
partida	9	26.58	2.95	0.30	0.957
Error	10	97.71	9.77		
Total	19	124.29			

S = 3.126    R-cuad. = 21.38%    R-cuad. (ajustado) = 0.00%



Desv.Est. agrupada = 3.126

Agrupar información utilizando el método de Dunnett

Nivel	N	Media	Agrupación
0 (control)	2	1.790	A
300	2	4.447	A

180	2	4.000	A
240	2	3.853	A
120	2	3.535	A
60	2	2.865	A
90	2	2.235	A
45	2	1.620	A
15	2	1.588	A
30	2	0.955	A

Las medias no etiquetadas con la letra A son significativamente diferentes de la media del nivel de control.

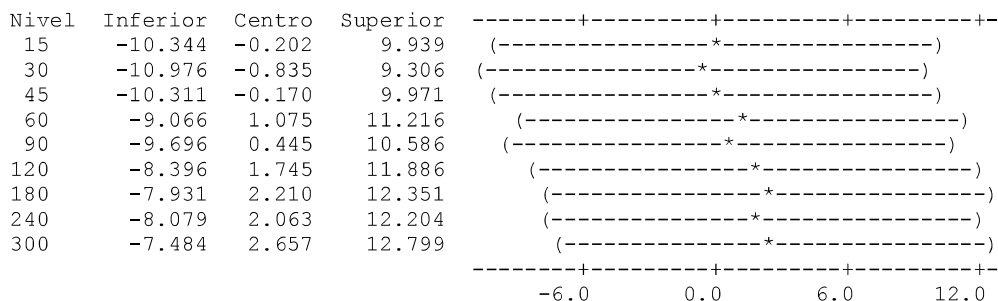
Comparación de Dunnett con un control

Tasa de error por familia = 0.05  
Tasa de error individual = 0.0088

Valor crítico = 3.24

Control = nivel (0) de partida

Intervalos para media de tratamientos menos media de control



### Apéndice A3

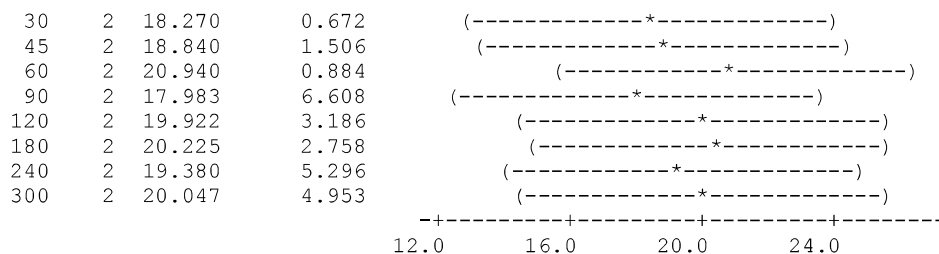
Análisis estadístico (ANOVA) del parámetro de color b (amarillo-azul) con la prueba de Dunnett en el proceso de secado por charolas en hojuelas de mango a 60 °C.

#### ANOVA unidireccional: b vs. partida

Fuente	GL	SC	CM	F	P
partida	9	25.1	2.8	0.23	0.982
Error	10	123.6	12.4		
Total	19	148.7			

S = 3.515    R-cuad. = 16.89%    R-cuad. (ajustado) = 0.00%

ICs de 95% individuales para la media basados en Desv.Est. agrupada				
Nivel	N	Media	Desv.Est.	
0	2	19.290	0.000	(-----+-----+-----+-----+)
15	2	17.028	2.464	(-----+-----+-----+-----+)



Desv.Est. agrupada = 3.515

Agrupar información utilizando el método de Dunnett

Nivel	N	Media	Agrupación
0 (control)	2	19.290	A
60	2	20.940	A
180	2	20.225	A
300	2	20.047	A
120	2	19.922	A
240	2	19.380	A
45	2	18.840	A
30	2	18.270	A
90	2	17.983	A
15	2	17.028	A

Las medias no etiquetadas con la letra A son significativamente diferentes de la media del nivel de control.

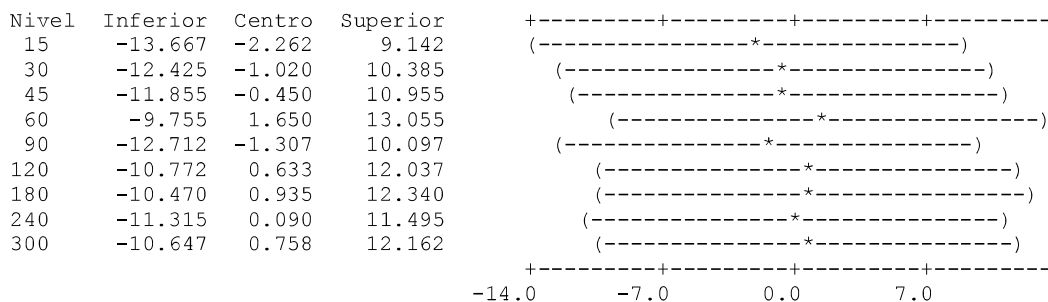
Comparación de Dunnett con un control

Tasa de error por familia = 0.05  
Tasa de error individual = 0.0088

Valor crítico = 3.24

Control = nivel (0) de partida

Intervalos para media de tratamientos menos media de control



## APÉNDICE B

Análisis estadísticos de los parámetros de color L, a, b de las hojuelas de zanahoria, el cual se aplicó la prueba de Dunnett ( $\alpha=0.05$ ) para observar si presentaban cambios con un patrón.

### Apéndice B1

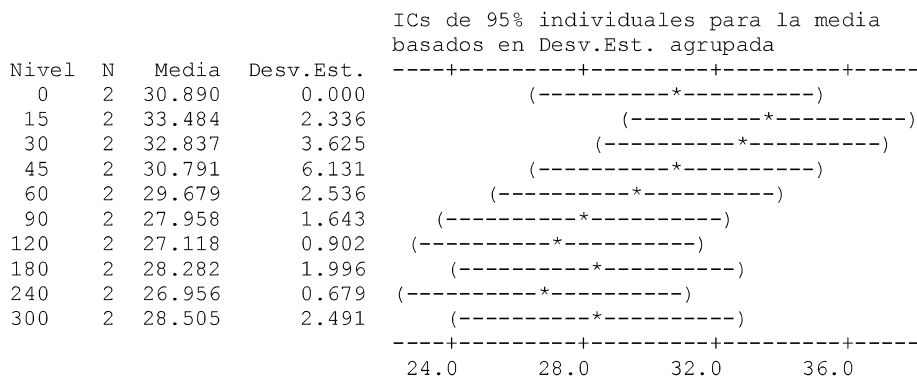
Análisis estadístico (ANOVA) del parámetro de color L (Luminosidad) con la prueba de Dunnett en el proceso de secado por charolas de hojuelas de zanahoria a 60 °C.

#### ANOVA unidireccional: L vs. tiempo

#### ANOVA unidireccional: L vs. tiempo

Fuente	GL	SC	CM	F	P
tiempo	9	94.83	10.54	1.37	0.313
Error	10	76.78	7.68		
Total	19	171.61			

S = 2.771 R-cuad. = 55.26% R-cuad. (ajustado) = 14.99%



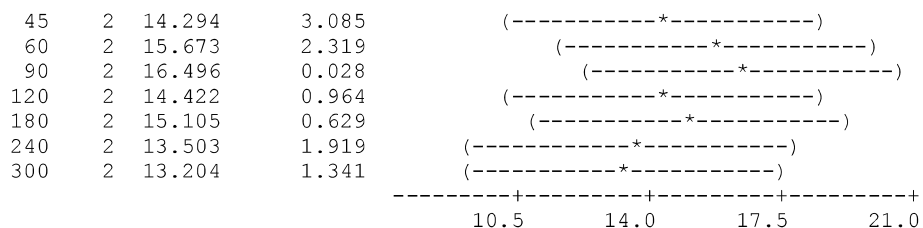
Desv.Est. agrupada = 2.771

Agrupar información utilizando el método de Dunnett

Nivel	N	Media	Agrupación
0 (control)	2	30.890	A
15	2	33.484	A
30	2	32.837	A
45	2	30.791	A
60	2	29.679	A
300	2	28.505	A
180	2	28.282	A







Desv.Est. agrupada = 2.695

Agrupar información utilizando el método de Dunnett

Nivel	N	Media	Agrupación
0 (control)	2	11.670	A
15	2	16.538	A
90	2	16.496	A
30	2	15.708	A
60	2	15.673	A
180	2	15.105	A
120	2	14.422	A
45	2	14.294	A
240	2	13.503	A
300	2	13.204	A

Las medias no etiquetadas con la letra A son significativamente diferentes de la media del nivel de control.

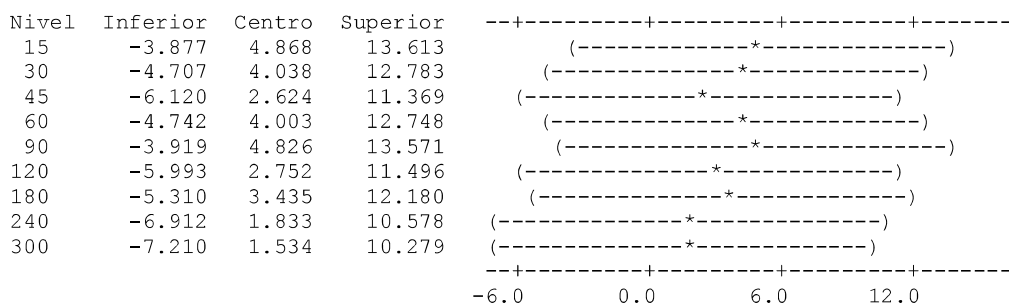
Comparación de Dunnett con un control

Tasa de error por familia = 0.05  
Tasa de error individual = 0.0088

Valor crítico = 3.24

Control = nivel (0) de tiempo

Intervalos para media de tratamientos menos media de control



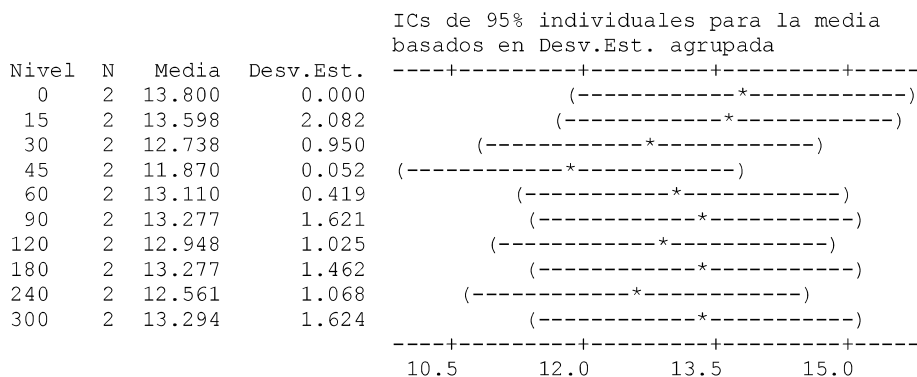
## Apéndice B3

Análisis estadístico (ANOVA) del parámetro de color b (amarillo- azul) con la prueba de Dunnett del proceso de secado por charolas en hojuelas de zanahoria a 60 °C

**ANOVA unidireccional: b vs. tiempo**

Fuente	GL	SC	CM	F	P
tiempo	9	5.54	0.62	0.41	0.902
Error	10	15.01	1.50		
Total	19	20.55			

S = 1.225    R-cuad. = 26.95%    R-cuad. (ajustado) = 0.00%



Desv.Est. agrupada = 1.225

Agrupar información utilizando el método de Dunnett

Nivel	N	Media	Agrupación
0 (control)	2	13.800	A
15	2	13.598	A
300	2	13.294	A
180	2	13.277	A
90	2	13.277	A
60	2	13.110	A
120	2	12.948	A
30	2	12.738	A
240	2	12.561	A
45	2	11.870	A

Las medias no etiquetadas con la letra A son significativamente diferentes de la media del nivel de control.

Comparación de Dunnett con un control

Tasa de error por familia = 0.05  
Tasa de error individual = 0.0088

Valor crítico = 3.24

Control = nivel (0) de tiempo

Intervalos para media de tratamientos menos media de control

Nivel	Inferior	Centro	Superior
15	-4.177	-0.202	3.773
30	-5.037	-1.062	2.913
45	-5.905	-1.931	2.044

60	-4.665	-0.691	3.284	(-----*-----)
90	-4.498	-0.524	3.451	(-----*-----)
120	-4.827	-0.852	3.123	(-----*-----)
180	-4.498	-0.524	3.451	(-----*-----)
240	-5.214	-1.239	2.736	(-----*-----)
300	-4.480	-0.506	3.469	(-----*-----)

-----+-----+-----+-----+-----  
 -5.0            -2.5            0.0            2.5

