

# Detección rápida y selectiva de trigonelina, un marcador de calidad del café, utilizando un espectrómetro Raman portátil

El control de calidad en la industria alimentaria es un tema clave que requiere métodos rápidos, eficientes y selectivos que puedan discriminar los productos, detectar adulteraciones fraudulentas o accidentales e identificar el contenido de algunos biomarcadores dentro de un proceso particular de condiciones de almacenamiento. En este sentido, la espectroscopia Raman junto con las propiedades ópticas de las nanoestructuras metálicas es una técnica potente que puede implementarse en el análisis de alimentos.

Espectroscopia Raman mejorada en superficie (SERS) es una técnica que aprovecha las propiedades ópticas de las nanoestructuras de metales nobles (p. ej., nanoesferas de oro o plata) para mejorar las señales Raman de las moléculas adsorbidas en la superficie del metal. Los cambios en el material, la geometría y el tamaño de las estructuras metálicas permiten la modulación en la mejora de estas nanoantenas únicas. Este avance ha dado lugar a muchas aplicaciones, incluido el diseño de sensores nuevos y selectivos con límites de detección más bajos para metabolitos alimentarios para adaptarse a las necesidades de la agricultura y la industria. Además, SERS minimiza el tiempo de adquisición y reduce la cantidad de muestra necesaria.



En este sentido, este informe muestra cómo el dispositivo Raman portátil i-Raman Plus 785 se puede utilizar en combinación con nanotriángulos de oro modificados para desarrollar un método de cuantificación alternativo para la trigonelina. Este alcaloide es un biomarcador presente en diferentes alimentos, como el café y la quinua, que brinda beneficios potenciales para la salud y cuya degradación térmica (p. ej., durante el proceso de

Los nanotriángulos de oro modificados con ácido mercaptopropiónico se han utilizado como nanoantenas para cuantificar la concentración de soluciones trigonelina de la señal SERS. Las nanoestructuras se han optimizado para mejorar las señales entre 700 y 800 nm de longitud de onda. Las curvas de calibración se han preparado utilizando el  $1034\text{ cm}^{-1}$  área de pico y en comparación con la espectroscopía Raman tradicional. Los resultados muestran las ventajas de la técnica, que incluyen límites de detección más bajos, y el potencial de este método para cuantificar trigonelina en alimentos.

## EXPERIMENTAL

Instrumentación: especlómetro portátil i-Raman Plus con excitación láser de 785 nm, rango de desplazamiento Raman de  $150\text{--}2800\text{ cm}^{-1}$ , tiempo de integración de 50 s, 10 escaneos y portacubetas de líquido con paso óptico de 10 mm.

## RESULTADOS Y DISCUSIÓN

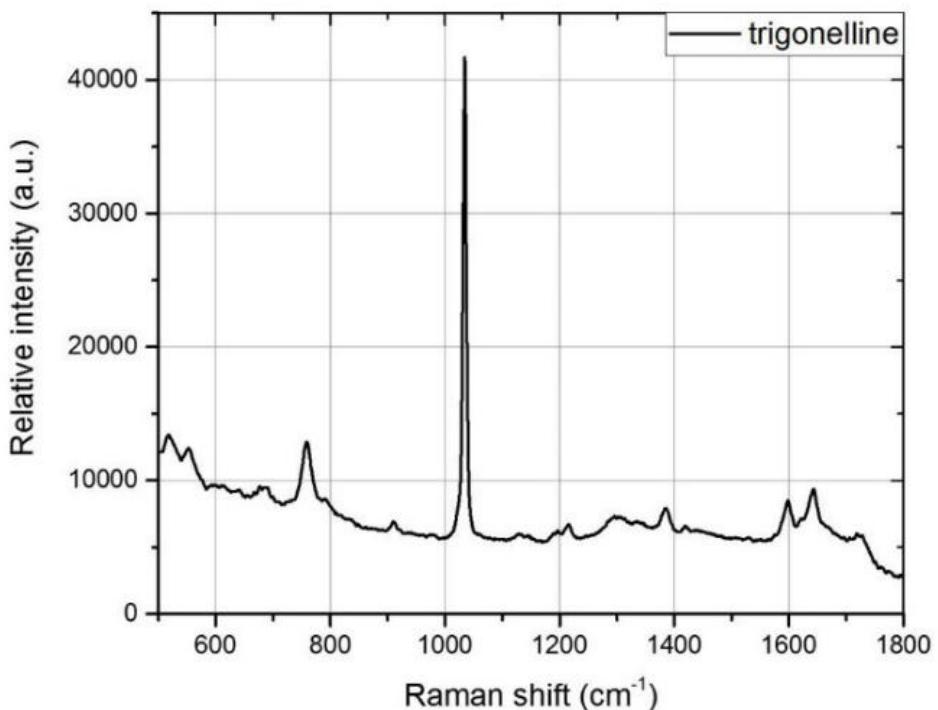
Se analizó una solución de trigonelina 250 mM utilizando espectroscopía Raman convencional. El espectro en **Figura 1** muestra una señal intensa a  $1034\text{ cm}^{-1}$ , correspondiente al modo de respiración

tostado de los granos de café verde) hace posible la formación de diferentes compuestos de sabor y aroma. Por ejemplo, una infusión de café podría contener alrededor de 2,3 mM de trigonelina, y podría haber alrededor de 30-65  $\mu\text{mol}$  de trigonelina en un gramo de granos de café verde, lo que sería un indicador de calidad y podría probarse con esta técnica.



Muestras: soluciones acuosas de trigonelina estándar que van desde 10,0 mM a 0,5 mM. Nanotriángulos de oro modificados con ácido mercaptopropiónico y suspendidos en agua desionizada (AuNTs).

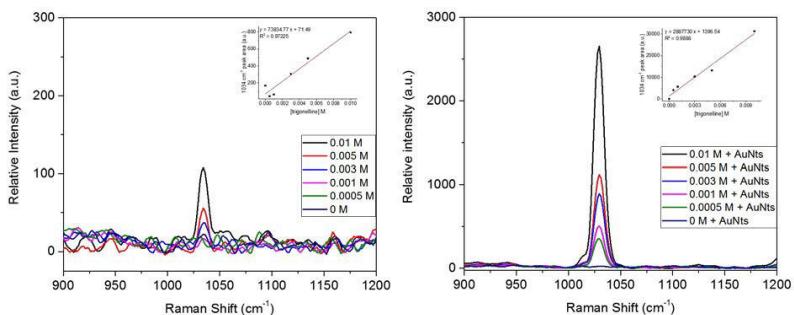
del anillo de piridina, que podría usarse para monitorear la concentración de este compuesto en el agua.



**Figure 1.** Espectro Raman de solución trigonelina a 250 mM

Se analizaron cuatro conjuntos independientes a cinco concentraciones diferentes dentro del rango de 0,5 mM y 10 mM mediante espectroscopía Raman convencional y mediante SERS. Este último requiere un paso adicional en el que los nanotriángulos de oro modificados se mezclan con las soluciones de trigonelina (trigonelina: nanotriángulos de oro = 15:2) antes de escanear las muestras. En todos los casos, la fuerte señal observada a  $1034\text{ cm}^{-1}$  fue monitoreado

y el área del pico dentro de  $1010\text{--}1045\text{ cm}^{-1}$  Se usó una ventana espectral para determinar la concentración del alcaloide. Basado en los resultados y las curvas de calibración (Figura 2) fue posible observar una mejora en la relación señal/ruido de SERS sobre los espectros Raman convencionales bajo el mismo condiciones experimentales. Los resultados muestran que es posible detectar concentraciones por debajo de 0,5 mM usando este método.



**Figure 2.** Espectros raman de soluciones trigonelina sin nanotriángulos de oro (izquierda) y con nanotriángulos de oro (derecha). Los insertos muestran las curvas de calibración de soluciones trigonelina utilizando el área de pico de 1034 cm-1 dentro de una ventana espectral de 1010-1045 cm-1.

En resumen, describimos un método simple para cuantificar la presencia de trigonelina diluida en soluciones utilizando espectroscopía Raman mejorada

de superficie como una herramienta que podría mejorar el proceso de control de calidad de alimentos como el café y la quinua.

## OTRAS LECTURAS

### Notas de aplicación relacionadas

[Instrumentación Raman portátil para aplicaciones](#)

[SERS](#)

[Elección de la longitud de onda del láser más](#)

[adecuada](#)

[Análisis de aceites comestibles por un espe](#)  
[trómetro Raman portátil](#)

## Otros documentos relacionados

[Raman vs SERS... ¿Cuál es la diferencia?](#)

## RECONOCIMIENTOS

Nos gustaría agradecer a Angeline Saldana Ramos, Yulán Hernandez y a la Prof. Betty C. Galarreta del Departamento de Ciencias – Sección Química,

Pontificia Universidad Católica del Perú por compartir los resultados de sus investigaciones.

## REFERENCIAS

1. Galarreta, BC; Hernández, Y.; Saldana Ramos, A. "Síntesis y aplicación de nanotriángulos de oro en el desarrollo de un método de cuantificación de un potencial alcaloide terapéutico: la trigonelina" Dirección de Gestión de la Investigación (DGI-2016-352) PUCP.
2. Galarreta, BC; Maruenda, H. "Espectroscopía vibracional y de resonancia magnética nuclear en el control de calidad de café orgánico peruano y café instantáneo" Dirección de Gestión de la Investigación (DGI-2014-078) PUCP.
3. Aroca, R. "Espectroscopía vibracional mejorada en superficie" John Wiley & Hijos, 2016.
4. Jaworska, A.; Malek, K.; Marzec, KM; Baranska, M. "Nicotinamida y trigonelina estudiadas conespectroscopía FT-Raman mejorada en superficie" Espectroscopía vibratoria (2012) 63,469-476.

## CONTACT

Metrohm Hispania  
Calle Aguacate 15  
28044 Madrid

[mh@metrohm.es](mailto:mh@metrohm.es)

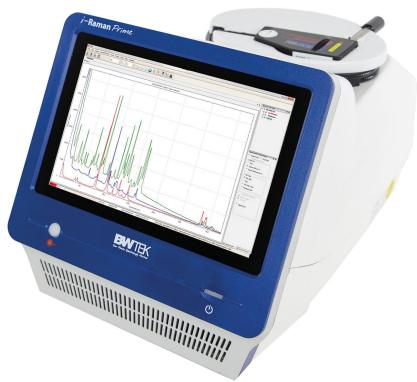
## CONFIGURACIÓN



### Espectrómetro Raman portátil i-Raman Plus 785S

El i-Raman® Plus 785S forma parte de nuestra serie premiada de espectrómetros Raman portátiles i-Raman con nuestra innovadora tecnología de espectrómetro inteligente. Este espectrómetro Raman portátil utiliza un detector equipado con una matriz de CCD con una alta eficiencia cuántica, refrigeración termoeléctrica y elevado rango dinámico, y proporciona un funcionamiento excepcional con poco ruido, incluso con tiempos de integración de hasta 30 minutos. Por lo tanto, también se pueden medir las señales Raman débiles.

El i-Raman Plus 785S ofrece una combinación única de amplio rango espectral y alta resolución con configuraciones que permiten medidas de  $65\text{ cm}^{-1}$  a  $3350\text{ cm}^{-1}$ . El pequeño tamaño del sistema, su diseño ligero y su bajo consumo de energía permiten el análisis Raman en el ámbito de investigación en todas partes. El i-Raman Plus está equipado con una sonda de fibra óptica para facilitar el muestreo y se puede utilizar con un soporte de cubeta, un microscopio de vídeo, un carro de rodillos dobles XYZ con soporte de sonda y nuestro software de análisis multivariado BWIQ® y el software de identificación BWID®. Con el i-Raman Plus, siempre tendrá una solución Raman de alta precisión para el análisis cualitativo y cuantitativo.



#### Espectrómetro Raman portátil i-Raman Prime 785S

El i-Raman® Prime 785S es un sistema Raman de alto rendimiento, bajo nivel de ruido y totalmente integrado, con ordenador tipo tableta y sonda de fibra óptica incorporados. Este espectrómetro Raman portátil utiliza un detector equipado con una matriz de CCD con alta eficiencia cuántica, congelación termoeléctrica (-25 °C) y alto rango dinámico para proporcionar análisis Raman en el ámbito de investigación, incluidas la cuantificación e identificación en tiempo real. El alto rendimiento proporciona espectros Raman con una excelente relación señal/ruido, lo que permite la medida de procesos rápidos e incluso de las señales Raman más débiles para poder detectar también sutiles diferencias en las muestras.

El i-Raman Prime 785S tiene un diseño móvil y una combinación única de un amplio rango espectral y una alta resolución, de modo que permite realizar medidas desde 150 cm<sup>-1</sup> hasta 3350 cm<sup>-1</sup>. El i-Raman Prime puede funcionar con una batería recargable y, por lo tanto, es fácil de transportar. De este modo, pueden llevarse a cabo en cualquier lugar análisis Raman de gran precisión, elevado valor cuantitativo y alta calidad en el ámbito de investigación. El sistema está optimizado para el uso con nuestra tecnología STRaman® para el análisis a través de embalajes no transparentes.



#### Sistema de toma de muestras Raman con microscopio de vídeo (785 nm)

Sistema de toma de muestras con microscopio de vídeo para uso con sondas Raman de B&W Tek para laboratorio e industria. Incluye un objetivo con 20 aumentos a una distancia de trabajo de 16 mm. Proporciona ajuste manual grueso y fino en los ejes X, Y y Z, iluminación LED coaxial para la alineación del objetivo, cámara de vídeo para la visualización de muestras y es compatible con objetivos de microscopios estándar. La sonda no se incluye, sino que se vende por separado. Configuración de 785 nm.

BAC151C-785