



Application Note AN-NIR-105

# Análisis de café tostado y molido por espectroscopía de infrarrojo cercano

## Determinación rápida de la cafeína, la actividad del agua y la humedad

El análisis continuo de los granos de café tostados permite a las tostadoras mejorar sus configuraciones de tostado, lo que lleva a una mayor eficiencia energética y productos finales más consistentes. El sabor no solo se ve afectado por el grado de tostado, sino que el contenido de cafeína también puede cambiar. Los métodos analíticos convencionales como HPLC (cromatografía líquida de alto rendimiento) para la determinación de la concentración de cafeína requieren habilidades técnicas para operar, reactivos

químicos y toma de varios minutos a horas para obtener los resultados.

Por el contrario, la espectroscopia de infrarrojo cercano (NIRS) es una alternativa rápida y libre de químicos para el análisis de cafeína, actividad del agua y humedad en granos de café tostados y café molido. La solución NIRS es fácil de usar y no requiere preparación de muestras. Estos analizadores se pueden operar cerca del tostador o en un laboratorio de control de calidad.

## EXPERIENCIA

Se analizaron hasta 35 muestras de granos de café tostados y molidos en un analizador de sólidos Metrohm DS2500 con el soporte DS2500 y vasos de muestra mini NIRS (**Figura 1**). Las muestras se colocaron en las copas de muestra mini NIRS para el análisis en modo de reflexión difusa. La adquisición de datos y el desarrollo del modelo de predicción se realizaron con el paquete de software Vision Air Complete (**tabla 1**).

Los valores de referencia para la cafeína, la actividad del agua y la humedad se obtuvieron con los métodos primarios respectivos. El análisis de cafeína siguió la directriz ISO 20481 y se realizó con un cromatógrafo iónico (IC), la determinación de la actividad del agua siguió la norma ISO 18787 y la determinación de la humedad se realizó de acuerdo con la norma DIN 10772-1.

**Tabla 1.** Resumen de equipos de hardware y software.

| Equipo                       | Número de artículo |
|------------------------------|--------------------|
| Analizador de sólidos DS2500 | 2.922.0010         |
| Soporte DS2500               | 6.7430.040         |
| Mini vasos de muestra NIRS   | 6.7402.030         |
| Vision Air 2.0 completo      | 6.6072.208         |

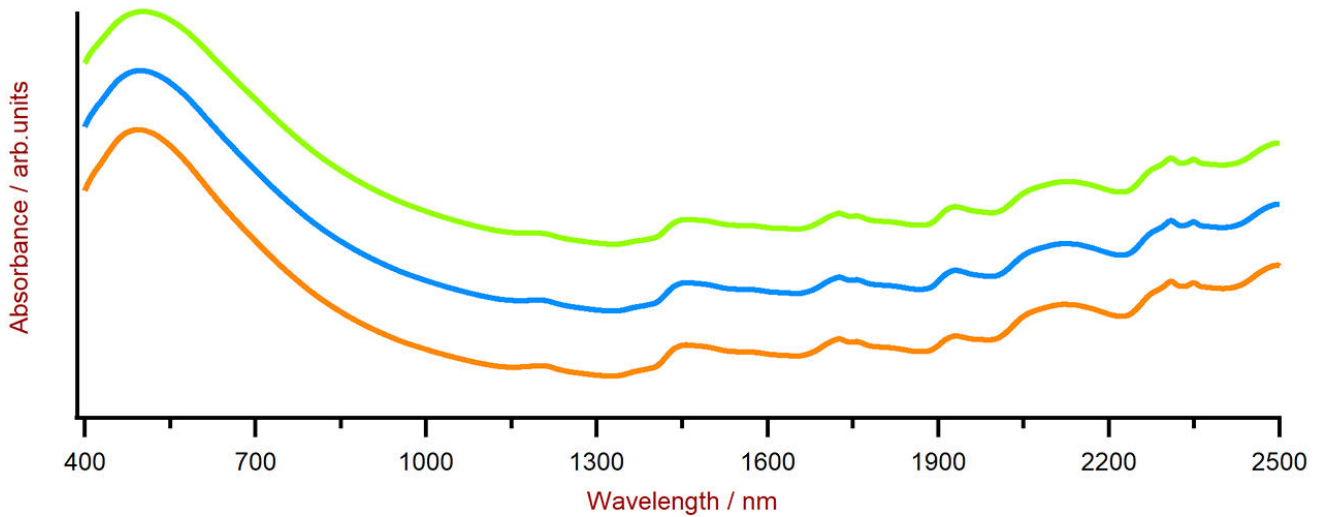


**Figure 1.** Un analizador de sólidos Metrohm DS2500 con granos de café molidos en una mini taza de muestra NIRS.

## RESULTADO

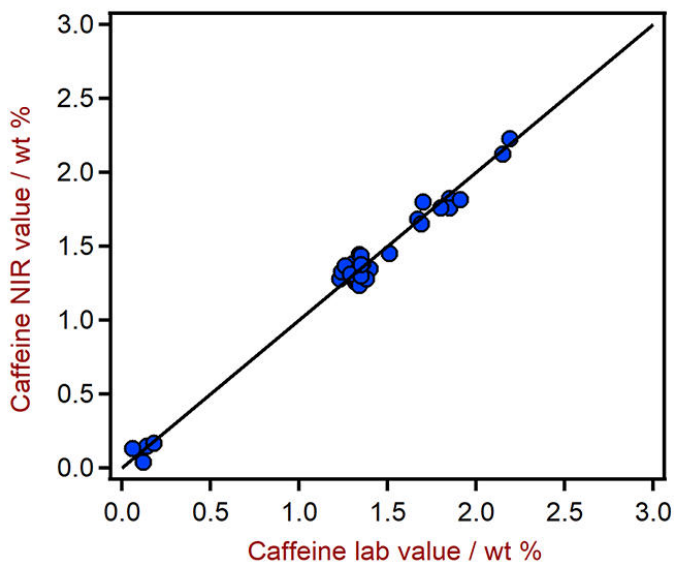
Los espectros Vis-NIR obtenidos (**Figura 2**) se utilizaron para crear modelos de predicción para los diferentes parámetros de referencia. Los diagramas de correlación que muestran la relación entre la

predicción Vis-NIR y los valores de referencia se muestran en **Figuras 3–5** junto con las respectivas figuras de mérito (FOM).



**Figure 2.** Selección de espectros Vis-NIR de muestras de granos de café tostados y molidos. Los datos se obtuvieron con un analizador de sólidos DS2500. Se aplicó un desplazamiento de espectros con fines de visualización.

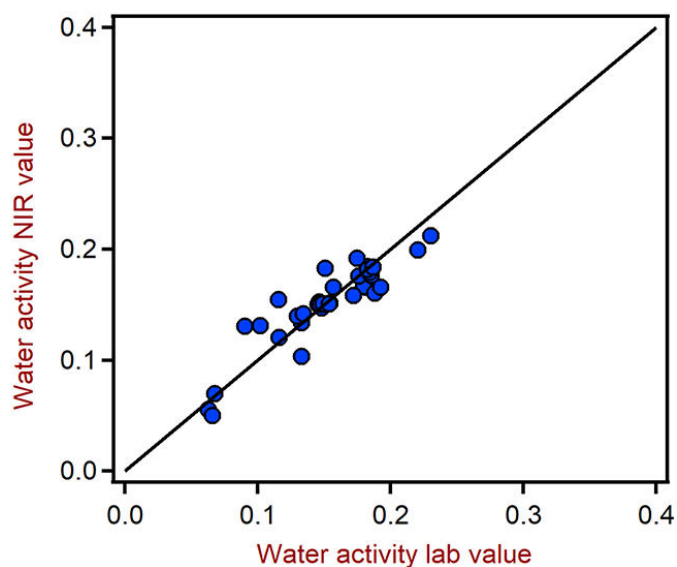
## RESULTADOS CAFFEINE IN ROASTED COFFEE



| Figures of Merit                   | Value      |
|------------------------------------|------------|
| R <sup>2</sup>                     | 0.986      |
| Standard Error of Calibration      | 0.0742 wt% |
| Standard Error of Cross-Validation | 0.0721 wt% |

**Figure 3.** Diagrama de correlación y los respectivos FOM para la predicción de cafeína en muestras de café molido tostado usando un Analizador de Sólidos DS2500. Los valores de laboratorio se determinaron mediante cromatografía iónica de acuerdo con las directrices de la norma ISO 20481.

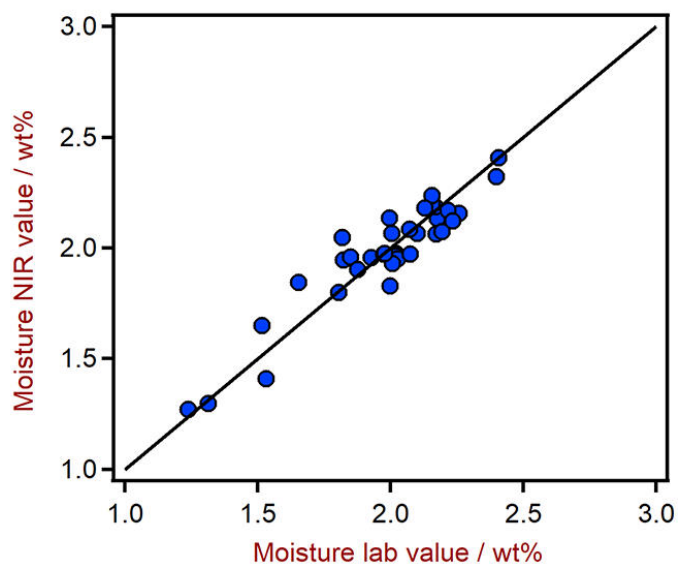
## RESULTADOS WATER ACTIVITY IN ROASTED COFFEE



| Figures of Merit                   | Value |
|------------------------------------|-------|
| R <sup>2</sup>                     | 0.82  |
| Standard Error of Calibration      | 0.018 |
| Standard Error of Cross-Validation | 0.021 |

**Figure 4.** Diagrama de correlación y los respectivos FOM para la predicción de la actividad del agua en muestras de café molido tostado utilizando un Analizador de Sólidos DS2500. Los valores de laboratorio se determinaron de acuerdo con las directrices de la norma ISO 18787.

## RESULTADOS MOISTURE IN ROASTED COFFEE



| Figures of Merit                   | Value     |
|------------------------------------|-----------|
| R <sup>2</sup>                     | 0.88      |
| Standard Error of Calibration      | 0.099 wt% |
| Standard Error of Cross-Validation | 0.109 wt% |

**Figure 5.** Diagrama de correlación y los respectivos FOM para la predicción de humedad en muestras de café molido tostado utilizando un Analizador de Sólidos DS2500. Los valores de laboratorio se determinaron de acuerdo con las directrices de DIN 10772-1.

## CONCLUSIÓN

Esta nota de aplicación muestra la viabilidad de la espectroscopia de infrarrojo cercano para el análisis de varios parámetros de calidad en el café molido tostado. Un analizador NIRS puede determinar la concentración de cafeína (0,1–2,5 % en peso) además de la actividad del agua y el contenido de humedad

en una sola medición. No solo se entregan los resultados en menos de un minuto, sino que no se requieren reactivos químicos para el análisis. El ahorro de tiempo mediante el uso de NIRS en comparación con los métodos analíticos tradicionales (Tabla 2) es inmenso.

**Tabla 2.** Comparación del tiempo hasta el resultado de los diferentes métodos utilizados para analizar el café.

| Parámetro         | Método                                   | Tiempo de resultado                           |
|-------------------|--|---|
| Cafeína           | Sistema IC (ISO 20481)                   | 120 min (preparación y medición de muestras)  |
| Actividad de agua | Sistema de actividad de agua (ISO 18787) | 15–30 min                                     |
| Humedad           | Horno – Pérdida por secado (DIN 10772-1) | 13 horas (preparación y medición de muestras) |

Internal references: AW NIR CH-0069-042023; AW

NIR CH-0070-042023

## CONTACT

Metrohm Hispania  
Calle Aguacate 15  
28044 Madrid

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

## CONFIGURACIÓN



### DS2500 Solid Analyzer

Sólida espectroscopía del infrarrojo cercano para control de calidad en laboratorio y entorno de producción.

El DS2500 Analyzer es la solución probada y flexible para los análisis rutinarios de sólidos, cremas y, opcionalmente, también líquidos a lo largo de toda la cadena de producción. Su diseño robusto hace que el DS2500 Analyzer sea resistente al polvo, la humedad, las vibraciones y los cambios de temperatura, lo que hace que sea especialmente adecuado para el uso en entornos de producción muy difíciles.

El DS2500 cubre toda la gama espectral de 400 a 2500 nm y proporciona en menos de un minuto resultados precisos y reproducibles. El DS2500 Analyzer cumple los requisitos de la industria farmacéutica y gracias a su manejo sencillo ayuda al usuario a realizar las tareas rutinarias diarias.

Gracias a los accesorios perfectamente adaptados al aparato se logran los mejores resultados posibles incluso con los tipos de muestra más difíciles, por ejemplo, la materia sólida de grano grueso como los gránulos o las muestras semilíquidas como las cremas. Al medir la materia sólida, se puede aumentar la productividad con el uso de la MultiSample Cup, que permite realizar medidas automatizadas en serie de hasta 9 muestras.