

**UNIVERSIDAD NACIONAL DE SAN ANTONIO ABAD DEL
CUSCO**

FACULTAD DE CIENCIAS

ESCUELA PROFESIONAL DE QUÍMICA



**DETERMINACIÓN DE LA HUMEDAD POR ESPECTROSCOPIA
DE INFRARROJO MEDIO Y ANÁLISIS MULTIVARIADO EN
FRUTOS DE *Physalis peruviana* L. (AGUAYMANTO).**

TESIS PRESENTADA POR:

Bach. Reneé Isabel Huamán
Quispe

*Para optar al título profesional de
Químico.*

ASESORA:

Dra. CELINA LUÍZAR OBREGÓN

Cusco, Agosto 2017

RESUMEN

El siguiente trabajo de tesis, tiene como objetivo determinar el contenido de humedad en frutos de *Physalis peruviana L. (aguaymanto)* por espectroscopia de infrarrojo FTIR medio y análisis multivariado. La metodología empleada consistió en desarrollar un modelo quimiométrico óptimo basado en la correlación de los valores de humedad del aguaymanto con las frecuencias FTIR de los respectivos espectros. Para la determinación del contenido de humedad se realizaron once experimentos; de los cuales diez fueron determinaciones gravimétricas y una determinación termogravimétrica, todos los experimentos fueron trabajados por duplicado a la temperatura constante de 70°C. El contenido de humedad fue monitoreado a diferentes intervalos de tiempo hasta obtener el peso constante; así mismo, se obtuvieron simultáneamente los espectros FTIR preparando pastillas de aguaymanto con KBr. Se utilizó el espectrómetro IR Nicolet 380 – FTIR para dar lectura de las frecuencias IR y el software OMNIC 7.3 para la recolección de los respectivos espectros de aguaymanto. Para la creación de modelo quimiométrico, se realizó la identificación de las zonas más significativas dadas por las bandas de absorción de los grupos -OH de la molécula de agua (3034 y 1638 cm^{-1}) presentes en las regiones de 3710 – 2818 cm^{-1} y 1776 – 950 cm^{-1} ; con las regiones IR ya identificadas y los valores de humedad, se construyeron once modelos de quimiométricos a un nivel de confianza del 95 % utilizando el software Pirouette 4.5. Se ejecutaron los algoritmos de análisis exploratorio – cualitativo para observar las relaciones existentes entre las muestras y las variables (frecuencias IR) mediante el análisis jerárquico de clústers HCA y el análisis de componentes principales PCA., seguidamente se ejecutaron los algoritmos de análisis cuantitativo dados por la regresión por mínimos cuadrados parciales PLS y la regresión por componentes principales PCR, siendo el algoritmo de regresión por mínimos cuadrados

parciales PLS, el más adecuado para predecir el contenido de humedad en frutos de aguaymanto por presentar la mejor respuesta a la correlación de las variables involucradas, mostrando valores comprendidos entre 0.95 y 1.00 en los coeficientes de correlación R^2 y valores menores a 3 en los errores de calibración Res Cal. De los once modelos generados, se obtuvo un sólo modelo optimizado (MOD10_PLS-EB-GRAV240), descrito por la ecuación $Y = 0.9995x + 0.0131$, el cual fue validado a través de la predicción del contenido de humedad un grupo de muestras desconocidas o de prueba (muestras no incluidas en la calibración), dicha validación se corroboró con los valores obtenidos en los errores de predicción SEP, los cuales fueron menores a 2. De esta manera se logró determinar el contenido de humedad en frutos de aguaymanto mediante la espectroscopia FTIR y análisis multivariado, la cual es una metodología rápida, económica y confiable.