



Universidad Nacional José Faustino Sánchez Carrión

Escuela de Posgrado

**Espectroscopia de infrarrojo cercano acoplada a la quimiometría como
herramienta predictiva de compuestos bioactivos y capacidad antioxidante
en quinua (*Chenopodium quinoa Willd.*)**

Tesis

Para optar el Grado Académico de Doctor en Ciencia y Tecnología de los Alimentos

Autor

Edwin Antonio Macavilca Ticlayauri

Asesor

Dr. Danton Jorge Miranda Cabrera

Huacho – Perú

2024

RESUMEN

En este estudio, se planteó como **objetivo** explorar el uso de la espectroscopia de reflectancia difusa en el rango de infrarrojo cercano NIR en combinación con las técnicas quimiométricas para predecir los compuestos bioactivos y la capacidad antioxidante (CA) en granos enteros de quinua. Los pasos **metodológicos** iniciaron con la obtención de los datos de referencia en laboratorio mediante la cuantificación de compuestos fenólicos, flavonoides y betalainas totales, también la medición de la CA mediante ensayos DPPH, ABTS, FRAP y ORAC. Los espectros de 38 ecotipos de quinuas coloreadas del altiplano Peruano fueron recolectado en un rango de 900 a 2500 nm, se usaron tres transformaciones espectrales y se sometieron a corrección de dispersión (SNV, MSC, DT) y filtrado (Suavizado SG, la primera y segunda derivada) obteniendo 10 combinaciones para el modelado mediante la regresión de mínimos cuadrados parciales (PLS-R), el criterio de selección fue modelo con mayor coeficiente R^2 , menor error cuadrático medio RMSE, tanto en la calibración y en la validación cruzada, y con una mayor capacidad de predicción RPD. Los **resultados** mostraron que los compuestos fenólicos correlacionan significativamente con todos los métodos de CA ($r > 0.74$ y valor $p < 0.05$), el mejor performance fue con una excelente predicción en la cuantificación de polifenoles, flavonoides, CA en los ensayos ABTS, ORAC y DPPH directo (QUENCHER) con valores de $R^2 > 0.953$ en la calibración, $R^2 > 0.832$ en la validación cruzada y un RPD entre 2.20 a 3.92. Se logro una predicción aceptable en los métodos FRAP y DPPH con R^2 de 0.934 a 0.946, y RPD de 1.84 a 2.12, sin embargo, para las betalainas se obtuvo una deficiente correlación y mal ajuste con $R^2 < 0.588$ y $RPD < 1.5$. Se **concluye** que la espectroscopia NIR acoplada a la quimiometría constituye una herramienta ventajosa para predecir compuestos bioactivos y CA en granos enteros de quinuas de una forma no destructiva, y resulta útil para sustituir las técnicas analíticas tradicionales respetando los principios de la química analítica verde.

Palabras clave: espectros NIR, validación cruzada, calibración quimiométrica, QUENCHER