

POSIBLE USO DE ESPECTROSCOPIA RAMAN COMO HERRAMIENTA DE ANÁLISIS EN LA PRODUCCIÓN Y CONTROL DE CALIDAD DE BACANORA

POSSIBLE USE OF RAMAN SPECTROSCOPY AS A TOOL FOR ANALYSIS IN PRODUCTION AND QUALITY CONTROL OF BACANORA

Valentín Ortega-Clavero^{1,2*}, Vidal Salazar-Solano³, Andreas Weber¹, Werner Schröder¹,
Nicolas Javahiraly⁴, Patrick Meyrueis² y J. Mario Moreno-Dena³

¹Universidad de Ciencias Aplicadas Offenburg, Badstr. 24, 77652, Offenburg, Alemania. ²ICube / ePhot, Universidad de Estrasburgo, Boulevard Sébastien Brant, BP 10413, F-67412, Illkirch, Francia. Tel.: +49 781 205 276; Fax: +49 781 205 45 276. ³Centro de Investigación en Alimentación y Desarrollo A.C. Hermosillo, Sonora, México. ⁴ICube / Iness, Universidad de Estrasburgo, Boulevard Sébastien Brant, BP 10413, F-67412, Illkirch, Francia.

Autor para correspondencia (valentin.ortega@hs-offenburg.de, valentin.ortega-clavero@etu.unistra.fr)

RESUMEN

La industria del bacanora en Sonora, México, enfrenta la influencia de una compleja red de factores culturales, tecnológicos, económicos y legales que inhiben su desarrollo. Ello ocurre pese al esfuerzo institucional por radicar un marco normativo que elimine la práctica de los métodos informales de elaboración que derivan en calidades heterogéneas de licor. El conseguirlo se complica ante la dificultad que enfrentan los actores de esta industria para implementar prácticas efectivas de verificación de las normas vigentes en los confines de la geografía de la Denominación de Origen. En este documento se describe el uso de un prototipo de espectrómetro Raman por transformada de Fourier para analizar cualitativamente muestras desconocidas de bacanora. Este dispositivo se construyó con el uso de un interferómetro Michelson convencional, un contador de fotones de diseño propio y un foto-detector de referencia. Los resultados del trabajo confirman que dada su naturaleza de diseño y construcción, este instrumento de medición y su efectiva técnica de operación a bajo costo, constituye una alternativa viable, adaptable fácilmente a las necesidades de los actores productivos e institucionales, para asistirlos en la elaboración de bacanora y a la verificación de su calidad conforme a los criterios de la normatividad.

Palabras clave: Espectroscopia Raman, bebidas alcohólicas, bacanora, calidad.

SUMMARY

The bacanora industry in the state of Sonora, México faces complex arrays of cultural, technological, economic and legal factors that inhibit its development. This happens despite the institutional efforts to create a regulatory framework to eliminate informal methods of preparation that result in liquor of heterogeneous quality. Enforcement of the framework is complicated by poor verification practices of existing rules in the Protected Designation of Origin. This document describes the use of a Fourier Transform Raman spectrometer prototype for qualitatively analyzing samples of bacanora. This measurement technique could assist in production of bacanora that complies with quality standards. This device can be built inexpensively by combining a conventional Michelson interferometer, a in-house designed photon counter, and a reference photo-detector. The advantages of this measurement technique are described; certain implications related

to the use of this method in bacanora production are also analyzed from different perspectives. The results of the study confirm that this instrument and technique, due to its low cost in manufacturing and operation, are easily adaptable options to the needs of producers and researchers, and they could assist bacanora production that meets quality standards outlined in regulations.

Index words: Raman spectroscopy, alcoholic beverage, bacanora, quality.

INTRODUCCIÓN

La industria del bacanora engloba actividades socioeconómicas y culturales concurrentes en la elaboración y aprovechamiento de esa bebida espirituosa obtenida a partir del procesamiento del maguey *Agave Angustifolia* Haw. Los métodos utilizados para su preparación son generalmente artesanales y poco sofisticados (Gutiérrez-Coronado *et al.*, 2007; Salazar-Solano y Mungaray-Lagarda, 2009), lo que impide efectuar el proceso de estandarización necesario para llevar a esta industria a niveles competitivos. Estudios sobre la composición química muestran la presencia de algunos materiales considerados dañinos cuando sobrepasan ciertos niveles (Lachenmeier *et al.*, 2006; De León-Rodríguez *et al.*, 2008).

Existe la posibilidad de que a partir de las normas vigentes (e.g. NOM-120-SSA1-1994; NOM-168-SCFI-2005) y de la implementación de la *Ley de Fomento para la Producción, Industrialización y Comercialización del Bacanora del Estado de Sonora* (B.O.NO. 46 SECC. III, 2008), algunos aspectos de la producción se modernicen y se aseguren condiciones para su estandarización. Sin embargo, los cambios necesarios para cumplir con las normas y regulaciones podrían tener efectos negativos de corto plazo en la industria si estos no son compatibles con las capacidades y necesidades de los productores.

En ese sentido, la espectroscopía Raman puede ser introducida en el monitoreo de la producción cuando sea necesario, y en la verificación de las características del producto final. Esta técnica de medición ha dejado de ser una herramienta de laboratorio y paulatinamente se ha integrado a los procesos de producción gracias a algunas de sus propiedades intrínsecas (McCreery, 2000). Análisis espectrales de este tipo, en combinación con álgebra lineal, han permitido analizar cualitativamente el contenido de etanol en diversas marcas de tequila (Frausto-Reyes *et al.*, 2005).

Haciendo uso de esta técnica espectroscópica se pueden realizar análisis químicos de muestras de manera limpia, no invasiva, no destructiva y casi siempre sin necesidad de preparar las muestras analizadas, y la vez cumplir con los aspectos requeridos para el desarrollo sostenible. Los costos relacionados con la adquisición y la operación de estos dispositivos se han reducido en los últimos años, sobre todo los dispositivos basados en elementos dispersivos. La espectroscopía Raman se utiliza actualmente en numerosas áreas de estudio, las cuales incluyen a la industria alimenticia, la farmacéutica, la biología, las ciencias forenses, las artes, la arqueología, etc.

Diferentes análisis químicos sobre bacanora, y otras bebidas alcohólicas similares, se han realizado con una complejidad de técnicas que incluyen cromatografía de gases (Lachenmeier *et al.*, 2006). Sin embargo, el uso de espectros Raman como forma de análisis no ha sido utilizada en bacanora. Con el propósito de realizar análisis químicos, especialmente en procesos de producción relacionados con materiales nocivos, se ha diseñado un prototipo de espectrómetro Raman por transformada de Fourier a bajo costo

comparado con instrumentos comerciales (Ortega-Clavero *et al.*, 2012). Este dispositivo se ha utilizado para hacer análisis espectral en muestras de bacanora. Algunas características cualitativas pueden ser detectadas rápidamente de manera eficiente y a bajo costo. Además, con ayuda de procesamiento digital de señales y álgebra lineal fue posible extraer información adicional acerca de las propiedades de las muestras estudiadas.

Conforme a las pautas de su Norma Oficial Mexicana (NOM-168-SCFI-2005), al bacanora se le define como: “Bebida alcohólica regional del Estado de Sonora, México, obtenida por destilación y rectificación de mostos, preparados directa y originalmente con los azúcares extraídos de la molienda de las cabezas maduras de *Agave angustifolia* Haw, hidrolizadas por cocimiento, y sometidas a fermentación alcohólica con levaduras. El bacanora es un líquido que, de acuerdo a su tipo, es incoloro o amarillento cuando es madurado en recipientes de madera de roble o encino, o cuando se aboque sin madurarlo”.

Este licor es uno de los tres destilados de agave más importantes de México y toma su nombre del municipio de Bacanora, Sonora, situado en la Sierra Centro, al este de la ciudad de Hermosillo, capital del estado. La zona tradicional de producción abarca un territorio más amplio, en el cual se incluyen 35 municipios de las regiones del Río Sonora y San Miguel, Sierra Alta, Sierra Sur y Sierra Centro. Estos constituyen el Área de Denominación de Origen (ADOB) (Figura 1), a partir del 6 de noviembre del año 2000 (Diario Oficial de la Federación - Instituto Mexicano de la Propiedad Industrial, 2000).

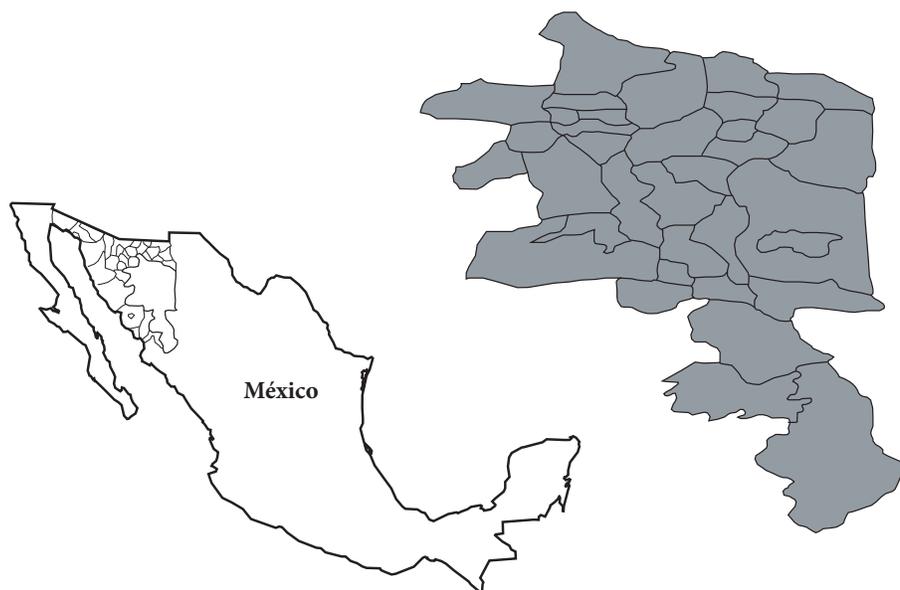


Figura 1. Área de Denominación de Origen del Bacanora (ADOB).

La producción informal de bacanora permanece entre las estrategias de supervivencia de miles de familias, que buscan aprovechar las oportunidades de una demanda que a mediados de la primera década del siglo XXI, se estimaba en 250,000 L; en ese momento, la producción no parecía rebasar los 20,000 L anuales de bacanora (Núñez-Noriega y Salazar-Solano, 2009). El rápido incremento en la demanda de bacanora ha ocasionado el aumento considerable de sus precios, en beneficio de los productores, y las regiones productoras han experimentado ciertos niveles de escasez de plantas de maguey debido a su continua explotación (Sánchez-Teyer *et al.*, 2009).

Las familias dedicadas a la producción y venta de bacanora han desarrollado formas organizativas adaptadas a la lógica de una fuente de ingresos complementarios a los obtenidos de la actividad ganadera. A fines del siglo XX esta actividad dejó de ser clandestina, pero los procesos tradicionales de producción y comercialización han permanecido sin alteraciones de fondo por más de dos siglos. La principal diferencia con el pasado, es que en el presente prolifera un producto que no está respondiendo a las expectativas de un mercado en expansión. Más aún, los métodos utilizados pueden representar un serio riesgo para la salud pública, ya que en este tipo de bebidas alcohólicas pueden aparecer importantes cantidades de agentes cancerígenos o de metanol si no se tiene un control adecuado durante su fabricación.

Este trabajo tiene como objetivo principal el análisis cualitativo de tres muestras de bacanora por medio de la extracción de sus respectivos espectros Raman. Asimismo, se hace uso de la información espectral para determinar la similitud entre las muestras de bacanora y la información espectral extraída de una muestra pura de etanol.

MATERIALES Y MÉTODOS

El proceso de medición por medio de espectroscopía Raman

La espectroscopía Raman está basada en la dispersión no elástica (dispersión Raman) generada por la muestra estudiada a partir de una fuente monocromática (McCreery, 2000). Las líneas de dispersión Raman son inherentes a las uniones moleculares, lo cual permite identificar las características químicas de una muestra específica. La intensidad

de la dispersión es varias órdenes de magnitud menor que la luz utilizada en la excitación de la fuente, por lo que el sistema de detección es generalmente un contador de fotones (Ferraro, 2003). Dado que esta técnica de medición se basa en un efecto puramente óptico, es posible hacer mediciones sin utilizar compuestos químicos adicionales.

Muestras de bacanora

El análisis espectral Raman se llevó a cabo en tres diferentes muestras de bacanora y en varias ocasiones utilizando la misma instrumentación, sin embargo no hubo réplicas de dichas muestras. Dos de estas fueron obtenidas en el municipio de Rayón, Sonora. Se ha precisado que con el fin de obtener una mayor cantidad de etanol (C_2H_6O), el productor agregó sacarosa ($C_{12}H_{22}O_{11}$) en forma de azúcar convencional durante el proceso de fermentación a una de las muestras. La tercera muestra proviene de un productor establecido en el municipio de Bacoachi, Sonora. No se obtuvo información adicional acerca de las muestras (destilación, almacenamiento, cocción, volumen de alcohol, etc.) previo a las mediciones. El Cuadro 1 ofrece información sobre las características y procedencia de las muestras utilizadas. Una vez obtenidas, éstas no fueron manipuladas ni preparadas para su análisis.

Configuración del espectrómetro Raman por transformada de Fourier

El dispositivo empleado para obtener el espectro Raman de las muestras de bacanora se ilustra en la Figura 2. Este espectrómetro consiste básicamente en un interferómetro Michelson convencional y en un contador de fotones de diseño propio basado en un foto-diodo avalancha (Excelitas Technologies Corp., C30921SH), el cual es enfriado por medio de un arreglo de elementos Peltier a aproximadamente $-40\text{ }^{\circ}\text{C}$. Adicionalmente se utiliza un amplificador de transimpedancia con entrada de foto-diodo SiO_2 , el cual se utiliza para detectar una señal de referencia durante el proceso de medición.

A la salida del láser de excitación y a la del dispositivo contador de fotones, se colocó un filtro dieléctrico para la línea de láser (Edmund Optics®, con longitud de onda central a 632.8 nm, 3 nm FWHM y transmisión mínima de 35 %). Así mismo se colocó un filtro de corte (NF, DNPF633-12.5, Lot

Cuadro 1. Muestras de bacanora utilizadas en el análisis espectral Raman.

Núm. de Muestra	Origen de la muestra	Productor y preparación
1	Rayón, Sonora	Productor 1 con azúcar
2	Rayón, Sonora	Productor 1 sin azúcar
3	Bacoachi, Sonora	Productor 2 (desconocido)

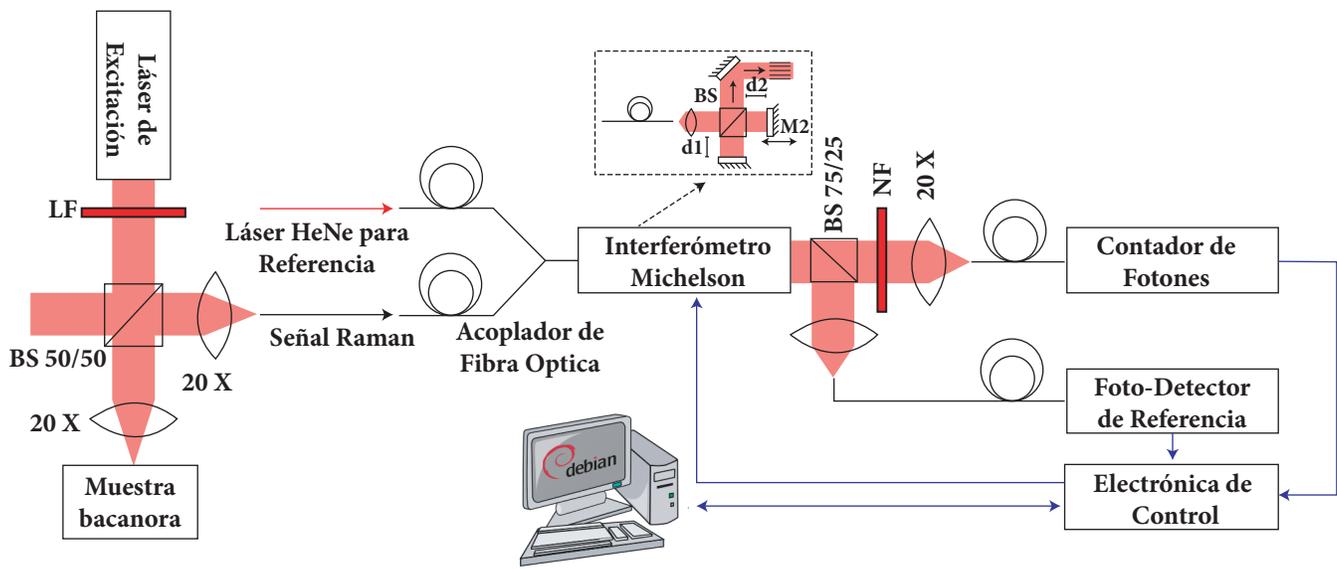


Figura 2. Diagrama general del prototipo de espectrómetro Raman utilizado para las mediciones de bacanora. BS es un divisor de haz, LF es un filtro de línea para el láser, NF es un filtro de corte para eliminar la señal del láser de excitación (plasma) a la entrada del contador de fotones, y MMF es una fibra óptica multi-modo.

Oriel, con banda central de supresión a 632.8 nm, densidad óptica OD = 6.0, transmisión mayor a 90 % fuera del área de supresión). El filtro LF permite eliminar las señales luminosas ajenas a la longitud de onda del haz de luz de excitación (generadas por la lámpara de descarga del láser). El filtro NF permite suprimir la longitud de onda del láser de excitación y sólo permite pasar la luz Raman generada en la muestra bajo observación (dispersión Raman).

Los componentes del espectrómetro Raman se montaron sobre una mesa óptica de acero inoxidable sin amortiguamiento, con dimensiones de 80 cm x 120 cm, y con rejilla rectangular de perforaciones métricas de 50 mm. Para el acoplamiento de los componentes se utilizaron rieles y soportes del tipo SYS 40 (OWIS).

Las muestras se han excitado utilizando un láser de helio-neón (HeNe, longitud de onda $\lambda = 632.816$ nm, potencia $P = 30$ mW). Un segundo láser HeNe de baja potencia se agregó al interferómetro por medio de un acoplador de fibras ópticas mono-modo (62.5/125 μm). Esta señal genera un patrón de interferencia monocromático y ayuda a determinar la trayectoria óptica que ha seguido la luz proveniente de la muestra (luz de la dispersión Raman). Una aplicación para PC basada en el lenguaje de programación C/C++ sobre la plataforma libre GNU Linux/Debian (<https://www.debian.org/>) ayuda a controlar el sistema de medición y a evaluar los datos obtenidos. Esta aplicación sirve, entre otras cosas, como interfaz gráfica para el usuario, y permite la transmisión de comandos al espectrómetro y la recepción de datos

provenientes de las mediciones.

La mayor parte de los componentes utilizados para la construcción de este instrumento de medición son convencionales y pueden ser adquiridos actualmente a costos reducidos. Además, este espectrómetro Raman no posee componentes especiales para compensar los efectos no deseados en el interferómetro (el interferómetro Michelson es sumamente sensible a vibraciones y a cambios de temperatura). Los posibles errores generados por medio de vibraciones o cambios de temperatura son extraídos matemáticamente mediante el algoritmo de re-muestreo (en sustitución del comúnmente utilizado método de cruce por cero – “zero-crossing method”) que permite la extracción precisa de la trayectoria óptica dentro del interferómetro Michelson.

Asimismo, para la evaluación de los espectro Raman, se utilizan diferentes esquemas de interpolación (ej. lineal, “spline”, cúbica) previo a la aplicación de la transformada de Fourier. Así pues, se ha sustituido hardware especializado por técnicas de procesamiento digital de señales. El equipamiento más especializado que se ha utilizado (el láser HeNe y la fuente de alto voltaje) puede ser fácilmente reemplazados por pequeños módulos mucho más accesibles. Con el fin de validar y comparar ciertos aspectos de la composición química de las muestras de bacanora, se hicieron también mediciones de contenido de etanol y metanol con un dispositivo de cromatografía de gases de la marca Bruker®, modelo 400-GC Series 1 (Bruker Optik GmbH, Germany).

Metodología para la medición y la evaluación de los espectros Raman de las muestras

Para efectuar las mediciones, cada ampolla con la muestra se coloca frente a uno de los objetivos 20X para microscopio, para ser excitada por medio del haz láser HeNe. Las señales del contador de fotones y del foto-detector de referencia son muestreadas simultáneamente mientras el espejo móvil (M2) se desplaza alrededor del punto de equilibrio ($d_1 = d_2$). El tiempo de medición varía de 30 s a 3 min, dependiendo de la resolución requerida que va normalmente de 1.66 cm^{-1} a 5.0 cm^{-1} .

Una vez que el proceso de escaneo ha finalizado se obtienen las señales Pi del contador de fotones y Ri del foto-detector de referencia (el cual es capaz de detectar niveles de potencia del orden de los nW). Del arreglo Ri se extrae información precisa acerca del recorrido que realizó el espejo móvil M2. Esto permite calcular el interfograma real Ij a partir del arreglo Pi. El espectro Raman es obtenido mediante aplicación de la transformada de Fourier a Ij. Los algoritmos para el cálculo del espectro Raman han sido implementados en GNU/Octave, el cual es un lenguaje de alto nivel y que pertenece a la categoría de software libre bajo la licencia GPL (licencia pública general).

Dadas las características altamente etílicas del bacanora, se ha utilizado descomposición en valores singulares (DVS) para determinar la similitudes de las muestras analizadas. Esta técnica permite descomponer una matriz A de tamaño $m \times n$ de datos (en el presente casos los espectros Raman) y retener las características más importantes de manera reducida y eficiente (Burden y Faires, 2011). En términos generales, en este método de factorización tiene la forma $A = USV^T$, donde las columnas de U y V contienen los vectores singulares (Berry *et al.*, 1995).

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

Los espectros Raman de las tres muestras de bacanora fueron obtenidos con el prototipo de espectrómetro Raman que se ilustra en la Figura 2. Estos espectros se presentan en el rango de 0 cm^{-1} a 3500 cm^{-1} , con una resolución espectral de 5.0 cm^{-1} . Las tres pruebas de bacanora mostraron un espectro Raman muy similar. Así mismo, los tres espectros, como era de esperarse, tienen una similitud notable con el espectro Raman de etanol, que ha sido utilizado como referencia. Los espectros Raman de las muestras se pueden observar en la Figura 3.

A pesar de la similitud entre los espectros, las muestras pueden ser cualitativamente distinguidas al comparar las líneas Raman de etanol, especialmente la que se encuentra en 1453 cm^{-1} (la cual pertenece al modo normal de oscilación

de enlace llamado CH_3 flexión fuera de fase). El par de líneas Raman en 1047 cm^{-1} y 1084 cm^{-1} también difieren cualitativamente en los tres espectros de bacanora. Es posible a su vez corroborar cómo las muestras de bacanora muestran ruido adicional comparado con el espectro Raman de etanol. Esto se debe a la complejidad de la composición química que posee el bacanora. Como consecuencia la intensidad de la dispersión Raman es distribuida entre una cantidad mayor de compuestos químicos a lo largo del espectro. La parte final de los espectros (Línea en 3212 cm^{-1}) muestra una que pertenece a la lámpara de descarga del láser de excitación. Esta línea no fue suprimida en su totalidad por el filtro de línea LF.

Las muestras de bacanora presentan además, a diferencia del espectro de etanol, una banda ancha de baja intensidad entre 3000 cm^{-1} y 3500 cm^{-1} , la cual es característica de agua (H_2O). La banda Raman característica de etanol ha sido localizada con un mínimo de desviación (comparado con los valores observados en la literatura) en 882 cm^{-1} . Dada la naturaleza cualitativa del análisis espectral, esta línea Raman característica de etanol no ofrece resultados concluyentes en cuanto al contenido de etanol de las muestras de bacanora. Sin embargo, la intensidad de la línea Raman en 1453 cm^{-1} coincide con las cantidades de etanol obtenidas por medio de cromatografía de gases. En la medición de validación por medio de cromatografía de gases, las tres muestras de bacanora arrojaron los siguientes valores de etanol: Núm. 1 = 53.0 %, Núm. 2 = 48.8 %, y Núm. 3 = 50.8 %.

Para extraer información adicional de las tres muestras, es posible aplicar ciertas técnicas de procesamiento de señales. En este caso se aplicó la técnica denominada descomposición en valores singulares (DVS). DVS es un método en álgebra lineal para descomponer una matriz real o compleja A en matrices USV^T y permite encontrar similitudes en los valores presentes en dichas matrices. En la Figura 4 se muestra una proyección en dos dimensiones obtenida a partir de la aplicación de DVS a los arreglos numéricos que contienen a los espectros Raman. Este tipo de gráficas ayuda a verificar la similitud entre variables (en el presente caso los espectros Raman de las muestras).

Las dos muestras de bacanora provenientes del productor 1 tienden a reunirse y mantienen una distancia notable con la muestra del productor 2. Esto podría sugerir una similitud en el proceso de producción, en la selección de la materia prima utilizada o en algún otro paso del proceso de elaboración de bacanora del productor 1, que difieren del proceso utilizado por el productor 2.

Esta técnica de medición, dada su versatilidad, podría ser aplicada para monitorizar las diferentes fases de elaboración de bacanora. Algunos de los aspectos que se pueden

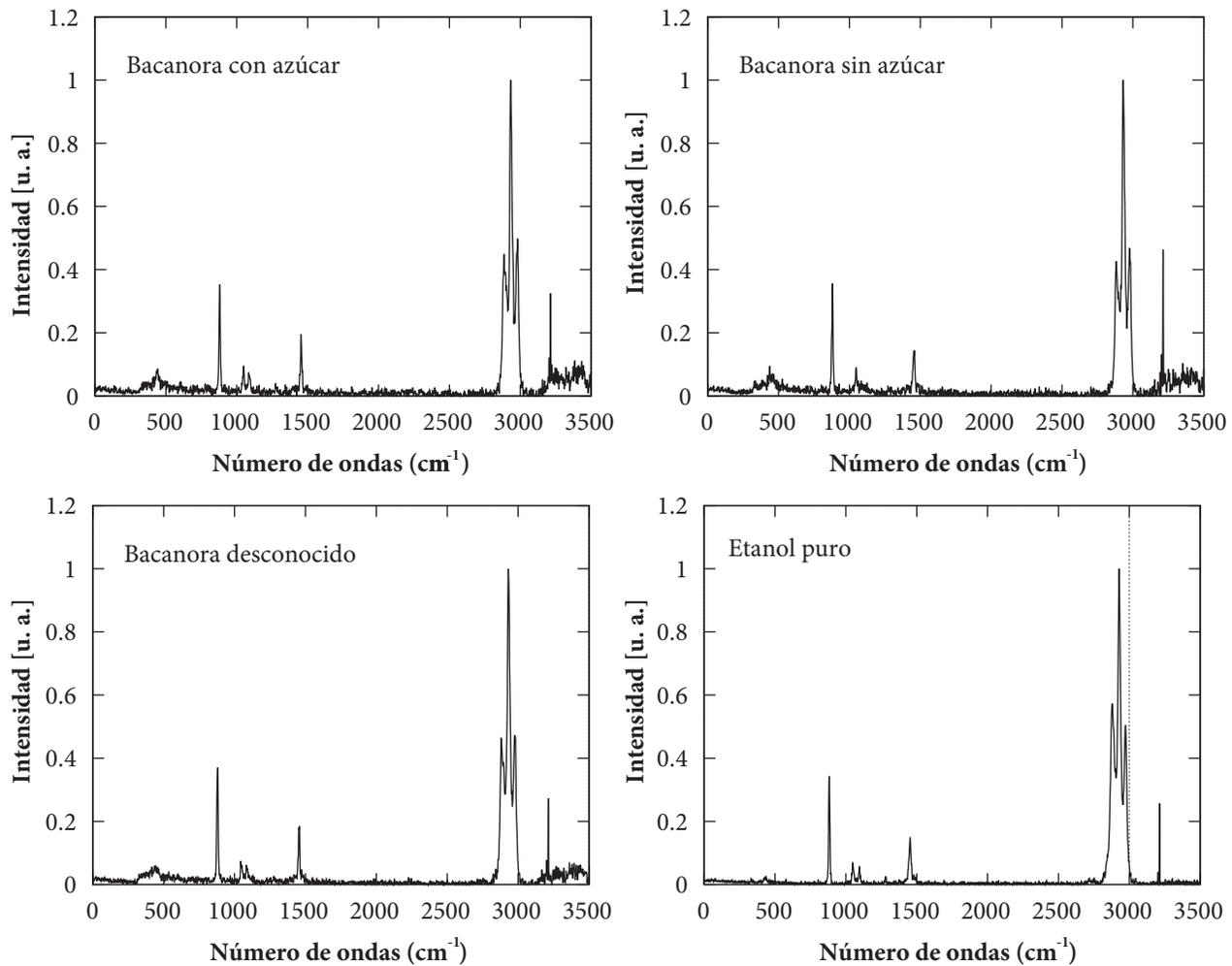


Figura 3. Espectro Raman de las tres muestras de bacanora y de una muestra de etanol puro utilizado como comparación.

tomar en cuenta para justificar esta propuesta son los siguientes:

Aplicabilidad. La espectroscopía Raman ofrece la posibilidad de realizar análisis químicos en las diferentes fases de producción de bacanora de forma rápida y limpia, con los cuales se puede determinar la presencia de una variedad de materiales normalmente presentes en este tipo de bebidas. En el presente trabajo se hizo hincapié en materiales como etanol y agua, pero con espectroscopía Raman también es posible la detección de otros materiales como alcoholes superiores, metanol, entre otros. Para la medición no es necesario tener contacto físico con la muestra y tampoco se requiere preparar las muestras antes de ser analizadas. Por otro lado, los espectros obtenidos son altamente específicos en relación con los componentes químicos presentes en la muestra analizada. El usuario de este tipo de medición debe poseer ciertos conocimientos acerca de la técnica, aunque la capacitación puede llevarse a cabo en un lapso de tiempo

aceptable.

Económico. Los costos generados por la adquisición y mantenimiento de esta clase de instrumentos de medición se han reducido significativamente (especialmente en dispositivos basados en sistemas dispersivos). Así mismo, la construcción de un sistema Raman de transformada de Fourier acompañado por algoritmos para el procesamiento digital de señales, como el presentado en la sección de materiales y métodos, puede obtenerse con una fracción de los recursos que se requieren con artefactos comerciales similares. Actualmente un dispositivo FT-Raman comercial está valuado entre los 80,000 y 125,000 €, dependiendo de la configuración ofrecida por los fabricantes (como Bruker Optics, Thermo Fisher, o Jasco).

El prototipo de espectrómetro Raman que aquí se propone tiene un costo aproximado de 20,000 € en componentes, y este valor puede ser aún más reducido si ciertos elementos

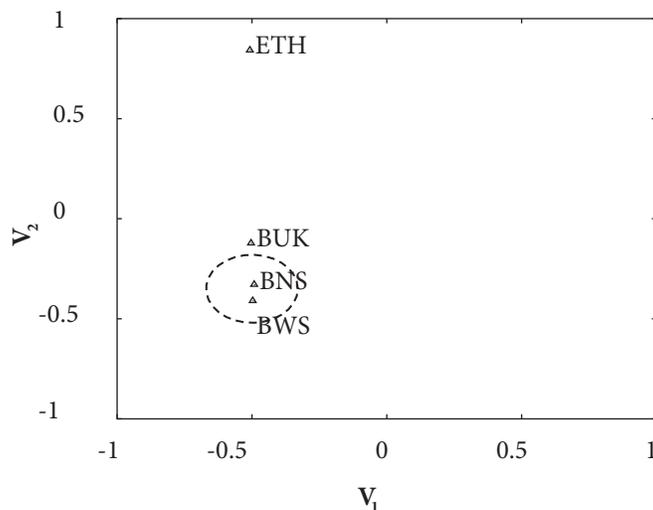


Figura 4. Proyección bi-dimensional de los datos obtenidos por medio de la descomposición en valores singulares (DVS) en V_1 . BWS = bacanora con azúcar, BNS = bacanora sin azúcar, BUK = bacanora desconocido, ETH = etanol.

(*i.e.*, láser de excitación, fuentes de voltaje) son reemplazados por módulos de aplicación específico. También existen en el mercado dispositivos Raman de instrumentación dispersiva a precios aún más bajos (*i.e.*, 1000 a 2000 €) que permiten mediciones con menor resolución y exactitud espectral, que sin embargo pudieran ser utilizados con el mismo fin analítico. Además, la relación costo-beneficio en el uso de esta herramienta (*i.e.*, valor agregado al licor producido y embotellado) podría resultar relevante una vez que la producción de bacanora abandone sus formas tradicionales.

Legal. A pesar de que la ley no estipula el uso de un instrumento en específico, es altamente probable que los productores de bacanora tengan que introducir algún tipo de análisis para la producción de bacanora.

Ambiental. En espectroscopía Raman no se generan desechos de ningún tipo, lo cual permitiría aplicar esta técnica de forma extensa en la producción de bacanora. Durante las fases iniciales de la elaboración del bacanora sería posible, por ejemplo, analizar aspectos que pudieran afectar al entorno de las plantas utilizadas como materia prima. Las plantas de agave utilizadas para la elaboración de bacanora han sido sometidas a sobre-explotación en los últimos años.

La información espectral aquí obtenida de muestras de bacanora con un prototipo de espectrómetro Raman por transformada de Fourier, se asemeja a la información obtenida de etanol en mediciones propias y en otras previamente reportadas en la literatura. Tales mediciones permiten hacer una discriminación entre muestras de bacanora, mediante la descomposición de valores ópticos singulares.

Sin embargo, la cantidad de muestras aquí analizadas es

reducida y conviene evaluar muestras adicionales de bacanora para tener mayor certeza de este método de factorización, así como hacer un análisis más profundo de los espectros para la detección de materiales nocivos en bacanora (*i.e.*, metanol, acetaldehído, alcohol propílico, entre otros), que a menudo se relacionan con sabores desagradables en bebidas alcohólicas.

En comparación con otros métodos y técnicas de medición, la espectroscopía Raman puede llevarse a cabo de manera sencilla y más rápida que con cromatografía cuyos tiempos de medición varían desde algunos minutos para mediciones sencillas hasta algunas horas para análisis elaborados, y que además requiere contar con personal altamente capacitado. La espectroscopía Raman también es mejor que la espectroscopía infrarroja, ya que en ésta el agua interfiere de manera significativa en las mediciones, lo que no ocurre en la espectroscopía Raman. Adicionalmente, la técnica Raman permite realizar mediciones sin tener contacto con la muestra, y por lo mismo no genera desechos ni desperdicios, y las muestras pueden ser de menos de 1 mL.

Un aspecto importante del método aquí descrito es la presencia potencial de fluorescencia debida a materiales orgánicos contenidos en el bacanora, especialmente en el que se deja madurar en barricas. No obstante, este efecto se supera con el uso de longitudes de onda más altas como fuente de excitación. Cabe señalar que existen otros métodos menos sofisticados pero también menos precisos, los cuales son utilizados con frecuencia para este mismo fin con niveles aceptables de confiabilidad.

El paso a la formalización y estandarización en la industria

del bacanora avanza de manera paulatina. Las características de la espectroscopía Raman hacen que esta técnica constituya una posible solución para esta industria, en el corto plazo, para lograr un mejor control del proceso de elaboración y de la calidad del producto final.

Pese a la exactitud en frecuencia de los resultados, la información espectral presentada requiere ser evaluada en mayor número de muestras de bacanora para producir resultados significativos y de mayor relevancia.

CONCLUSIONES

El prototipo de bajo costo de espectrómetro Raman por transformada de Fourier aquí presentado fue utilizado para analizar tres muestras de bacanora elaboradas por dos diferentes productores. Este tipo de análisis no ha sido reportado previamente en la literatura. La información espectral obtenida permitió contrastar cualitativamente las tres muestras de bacanora y una muestra adicional de etanol puro, sin necesidad de preparar químicamente las muestras analizadas. También se corroboró la similitud entre dos muestras elaboradas por el mismo productor por medio de la descomposición en valores singulares (DVS) de los espectros obtenidos. Sin embargo, DVS es recomendable en casos donde se tienen una mayor cantidad de muestras a comparar para poder hacer un uso óptimo de esta técnica.

La precisión en frecuencia de este prototipo fue verificada con ayuda de la banda Raman característica de etanol en 882 cm^{-1} . Este parámetro fue además comparado anteriormente, de forma más detallada con otros compuestos químicos propuestos en la literatura, utilizados en la calibración de esta clase de instrumentos de medición.

AGRADECIMIENTOS

Este trabajo ha sido parcialmente financiado por el Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACYT), mediante una beca al primer autor para estudios doctorales. A la Sra. Regina Brämmer y al Prof. Dr. Lorenz Klemens del laboratorio Bio-und Umweltanalytik mit Physikalischer Chemie perteneciente a la Universidad de Ciencias Aplicadas Offenburg, por todo el apoyo recibido para realizar y evaluar las mediciones de cromatografía de gas de las mues-

tras presentadas en este documento.

BIBLIOGRAFÍA

- Berry M. W., S. T. Dumais and G. W. O'Brien (1995) Using linear algebra for intelligent information retrieval. *SIAM Review* 37:573-595.
- Burden R. L. and J. D. Faires (2011) Numerical Analysis. Brooks/Cole. 623 p.
- De León-Rodríguez A., P. Escalante-Minakata, M. I. Jiménez-García, L. G. Ordoñez-Acevedo, J. L. Flores-Flores and A. P. Barba-De La Rosa (2008) Characterization of volatile compounds from ethnic agave alcoholic beverages by gas chromatography-mass spectrometry. *Food Technology and Biotechnology* 46:448-455.
- Diario Oficial de la Federación - Instituto Mexicano de la Propiedad Industrial (2000) Declaratoria general de protección a la denominación de origen Bacanora. México, D.F., 6 de noviembre (2000). http://dof.gob.mx/nota_to_doc.php?codnota=2063368 (Noviembre 2013)
- Ferraro J. R. (2003) Introductory Raman Spectroscopy. Elsevier Science. 434 p.
- Frausto-Reyes C., C. Medina-Gutiérrez, R. Sato-Berrú and L. R. Sahagún (2005) Qualitative study of ethanol content in tequilas by raman spectroscopy and principal component analysis. *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy* 61:2657-2662.
- Gutiérrez-Coronado M. L., E. Acedo-Félix y A. I. Valenzuela-Quintanar (2007) Industria del bacanora y su proceso de elaboración. *Ciencia y Tecnología Alimentaria* 5:39-404.
- INEGI, Instituto Nacional de Estadística, Geografía e Informática (2010) Marco Geoestadístico Nacional, Áreas Geoestadísticas Municipales. http://www.inegi.org.mx/geo/contenidos/geoestadistica/m_geoestadistico.aspx (Enero 2014).
- Lachenmeier D. W., E. M. Sohnius, R. Attig and M. G. López (2006) Quantification of selected volatile constituents and anions in Mexican agave spirits (tequila, mezcal, sotol, bacanora). *Journal of Agricultural and Food Chemistry* 54:3911-3915.
- McCreery R. L. (2000) Raman Spectroscopy for Chemical Analysis. Wiley-Interscience, New York, 2000. 448 p.
- NOM-120-SSA1-1994 (1995). Norma Oficial Mexicana, Bienes y Servicios. Prácticas de Higiene y Sanidad para el Proceso de Alimentos, Bebidas No Alcohólicas y Alcohólicas. Publicada en el Diario Oficial de la Federación el 10 de mayo de 1995.
- NOM-168-SCFI-2005 (2005). Norma Oficial Mexicana, Bebidas alcohólicas-Bacanora-Especificaciones de elaboración, envasado y etiquetado. Publicada en el Diario Oficial de la Federación el 14 de diciembre de 2005.
- Núñez-Noriega L, y V. Salazar-Solano (2009) La producción y comercialización de bacanora como estrategia de desarrollo regional en la sierra sonorense. *Estudios Sociales* 17:206-219.
- Ortega-Clavero V., A. Weber, W. Schröder, P. Meyrueis and N. Javahiry (2012) Detailed spectral monitoring of different combustible blends based on gasoline, ethanol and methanol using FT-Raman spectroscopy. *Environmental Biotechnology* 8:1-6.
- Salazar-Solano V. y A. Mungaray-Lagarda (2009) La industria informal del mezcal bacanora. *Estudios Sociales* 17:163-198.
- Sánchez-Teyer F., S. Moreno-Salazar, M. Esqueda, A. Barraza and M. L. Robert (2009) Genetic variability of wild agave angustifolia populations based on AFLP: A basic study for conservation. *Journal of Arid Environments* 73:611-616.