



Application Note AN-RS-052

Evaluación del chocolate mediante espectroscopia Raman

Control rápido de calidad de diferentes tipos de chocolate

En 2024, el mercado mundial del chocolate se valoró en aproximadamente 131 000 millones de dólares. Se proyecta que alcance aproximadamente los 173 000 millones de dólares para 2030, lo que implica una tasa de crecimiento constante de aproximadamente el 4 % [1]. Este crecimiento está impulsado por la demanda sostenida de los consumidores y se espera que siga aumentando.

La espectroscopia se utiliza cada vez más en la fabricación de chocolate para el control de calidad (CC), gracias a su capacidad para evaluar la composición del chocolate, proporcionando un

espectro de «huella dactilar» que revela sus detalles químicos. En concreto, la espectroscopia Raman puede utilizarse en el CC para distinguir entre tipos de chocolate, detectar adulteraciones, medir la cristalización y la textura, y supervisar el proceso de fabricación.

Esta nota de aplicación describe técnicas para recopilar eficazmente espectros Raman de diversos chocolates, proporcionando una base para la evaluación de la calidad y la detección de adulteraciones.

Se midieron los espectros Raman de barras de chocolate con diferente contenido de cacao, incluido el chocolate blanco (Lindt, Suiza), con una potencia láser baja (5%) y un tiempo de integración largo (120 s) (Figura 1).

Los tipos específicos de muestras de chocolate utilizados en este estudio se resumen en la Tabla 1. La potencia del láser se ajustó en función del contenido de cacao del chocolate (desde blanco hasta el 100%), sin superar el 15%, a menos que se deseara medir el chocolate fundido.

Tabla 1. Muestras y picos Raman importantes.

Muestra	% Cacao
Chocolate (diferentes tipos)	100%
	85%
	70%
	Leche (~30%)
	Blanco (20%)

DESCRIPCIÓN GENERAL DEL EXPERIMENTO

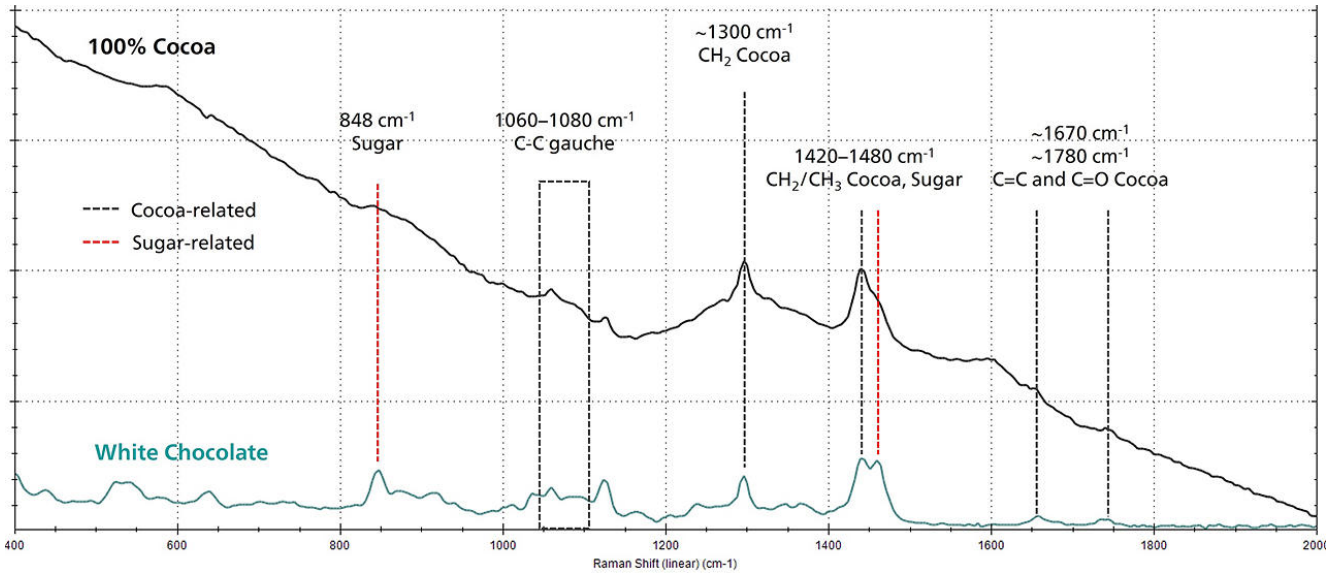


Figura 1. Espectros Raman representativos de chocolate 100% cacao y blanco (sin tratamiento matemático).

Tabla 2. Lista de picos importantes que se muestran en la Figura 1.*

Relación	número de onda (cm ⁻¹)
Relacionado con el cacao	1060–1080
	~1300
	1420–1480
	~1670, ~1780
Relacionado con el azúcar	<750, 848
	1460

MÉTODO

La recopilación de datos Raman con un sistema Raman de laboratorio i-Raman NxG 1064 (Figura 2) se optimizó ajustando el tiempo de integración y la potencia del láser (Tabla 3) para determinar las mejores condiciones para maximizar la intensidad de la señal y minimizar el riesgo de fusión de la muestra.



Figura 2. En este estudio se utilizaron el i-Raman NxG 1064 y la sonda de fibra óptica montada de Metrohm.

Tabla 3. Configuración del sistema utilizada para el análisis de diferentes tipos de chocolate mediante espectroscopia Raman.

Longitud de onda de excitación	1064 nm
Potencia del láser	5–15%
Tiempo de integración	>60 s
Accesorios	Sonda de muestreo estándar Portasondas con regulador de distancia
Software	SpecSuite

Todas las muestras de chocolate se analizaron colocando un trozo de chocolate sobre la platina con una sonda Raman firmemente fijada sobre la muestra (**Figura 3**). La distancia de trabajo óptima se determinó ajustando la posición de la sonda en el eje z mientras se monitorizaba continuamente la intensidad de la señal Raman.

Una vez encontrada la distancia focal óptima, un regulador de distancia ayuda al operador a posicionar la sonda sobre la muestra para garantizar una medición consistente y fiable.



Figura 3. Una muestra de chocolate en el soporte de la sonda.

RESULTADOS

Intensidad del láser y fusión

El chocolate se funde entre 30 y 36 °C. Se utilizó chocolate 100 % para establecer el umbral de fusión inducido por láser debido a su color más oscuro. La muestra más oscura absorbe más luz láser y, como resultado, se funde a potencias más bajas y tiempos de exposición más cortos.

Optimizar la potencia del láser es fundamental para evitar danos térmicos o cambios estructurales durante la medición. Los espectros Raman obtenidos al 5 %, 10 % y 15 % de potencia del láser revelaron cambios notables en los picos relacionados con el cacao (**Figura 4a**), con fusión visible al 10 %. Los chocolates de color más claro toleraron potencias más altas, generalmente hasta el 15 %.

Sin embargo, la fusión no es el único indicador de cambios estructurales inducidos por el calor. Incluso el chocolate blanco mostró sutiles cambios de cristalinidad en el rango de 1060 a 1100 cm^{-1} cuando la potencia del láser superó el 10 % (**Figura 4b**). Estos resultados resaltan que el chocolate puede sufrir alteraciones térmicas con potencias láser relativamente bajas, lo que enfatiza la necesidad de una cuidadosa selección de la potencia durante el control de calidad (QA/QC). Los métodos de rechazo de fluorescencia combinados con una excitación de 785 nm de menor potencia ofrecen posibles soluciones.

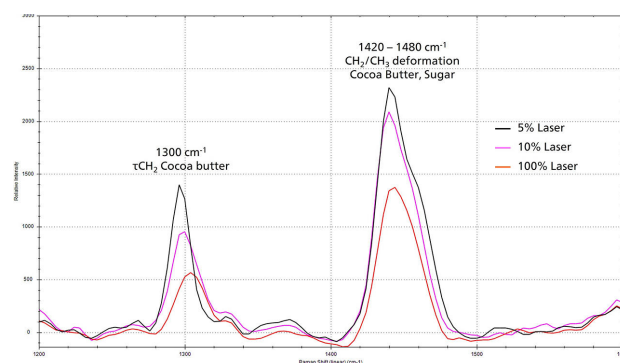


Figura 4a. Vista de cerca de los picos Raman del 100% de chocolate medidos con un láser de 1064 nm al 5%, 10% y 15% de potencia láser.

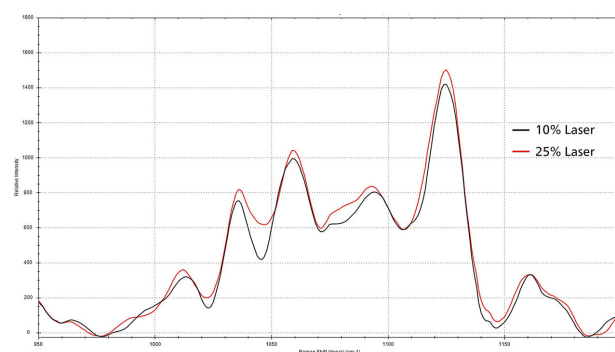


Figura 4b. Región de extensión de la cadena gruesa del chocolate blanco medida con una potencia láser del 10% y del 25%, lo que demuestra la diferencia entre las potencias del láser.

El chocolate generalmente consta de tres componentes principales: cacao, manteca de cacao y azúcar, en proporciones significativamente diferentes según el tipo. Por ejemplo, el chocolate 100% no contiene azúcar añadido, mientras que el chocolate blanco carece de cacao, pero sí contiene manteca de cacao. Las demás variedades se encuentran entre estos extremos, con diferentes contenidos de cacao y azúcar. (Tabla 4).

Tabla 4. Contenido de cacao y azúcar de diferentes chocolates.

Tipo de chocolate	Cacao (%)*	Azúcar (g)**
Blanco	20	16
Leche	31	17
70%	70	9
85%	85	4
100%	100	0

Los picos de azúcar más importantes se observan claramente en los chocolates blanco, con leche y al 70% (Figura 5). Sin embargo, en el chocolate al 85%, la única característica espectral perceptible relacionada con el azúcar aparece a 1460 cm⁻¹. Esto sugiere que la espectrometría Raman determina eficazmente el contenido de azúcar para las mediciones de control de calidad. Los ingredientes relacionados con el cacao presentan bandas Raman características alrededor de 1300 cm⁻¹ y 1420-1480 cm⁻¹. Al confinar un modelo de Mínimos Cuadrados Parciales (PLS) a estas regiones espectrales, se obtuvo el modelo predictivo más preciso para el análisis del contenido de cacao.

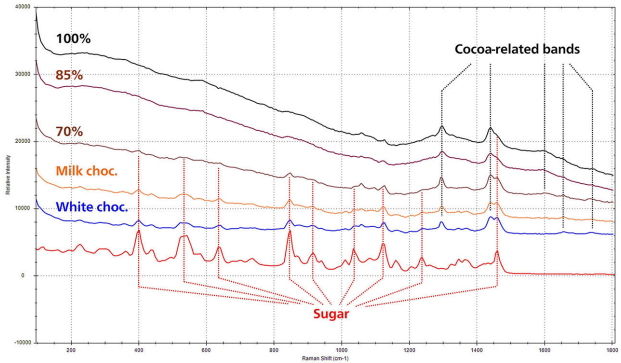


Figura 5. Espectros Raman de cacao 100%, cacao 85%, cacao 70%, chocolate con leche, chocolate blanco y azúcar. Método de recolección de datos: potencia láser 5%, tiempo de integración 120 s, promedio 3.

Rendimiento del modelo PLS y precisión predictiva

Los modelos PLS generados a partir de picos clave entre 1200 y 1600 cm^{-1} en los espectros Raman de varios tipos de chocolate muestran una alta concordancia entre el contenido de cacao predicho y medido, con un bajo error estándar. Esto confirma la eficacia de la espectroscopia Raman para el análisis rutinario del contenido de cacao (Figura 6a). Anadir puntos de datos aumentaría la confianza en las predicciones con niveles más altos de cacao.

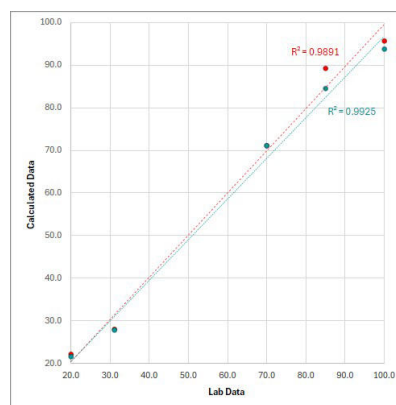


Figura 6a. Modelo de calibración PLS y estadísticas del modelo de sólidos de cacao y manteca de cacao.

El modelo de contenido de azúcar demuestra una precisión predictiva aún mayor, atribuida a los picos de azúcar distintivos y a la ausencia de variación relacionada con la temperatura en las mediciones de azúcar. Los datos de azúcar también pueden refinar las predicciones del contenido relacionado con el cacao, ya que la intensidad Raman del azúcar varía proporcionalmente al contenido de cacao (Figura 6b). Tanto el contenido de azúcar como el de cacao son parámetros importantes de control de calidad medibles mediante espectroscopia Raman.

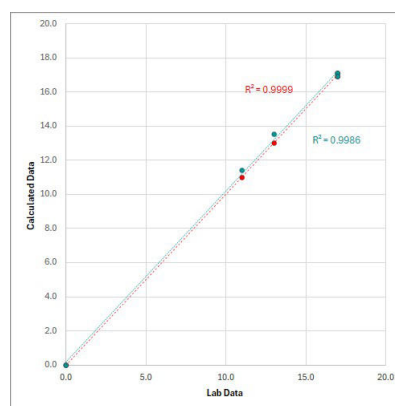


Figura 6b. Modelo de calibración PLS y estadísticas del modelo de contenido de azúcar en diferentes muestras.

CONCLUSIÓN

Este estudio destaca la capacidad de la espectroscopia Raman para realizar mediciones rápidas y no destructivas de indicadores de calidad del chocolate. Los modelos PLS demuestran una alta precisión predictiva tanto para los materiales relacionados con el cacao como para el contenido de azúcar. Aumentar el número de muestras y analizar

una gama más amplia de chocolates mejoraría aún más la robustez y la precisión del modelo.

En general, la espectroscopia Raman, combinada con el modelado quimiométrico, ofrece un método de control de calidad fiable para el análisis rutinario y en tiempo real del chocolate.

REFERENCIAS

1. marknteladvisors. *Chocolate Market Size, Share, Analysis and Industry Trend to 2030*.
2. Esmonde-White, K.; Lewis, M.; Lewis, I. R. Direct Measurement of Chocolate Components Using Dispersive Raman Spectroscopy at 1000 Nm Excitation. *Appl Spectrosc* **2023**, 77 (3), 320–326.
<https://doi.org/10.1177/0003702822114794>
1.
3. *Chocolates, Truffles, and Delicious Gifts: Buy Online | Lindt Shop Intl.*
<https://www.chocolate.lindt.com/> (accessed 2025-08-17).

CONTACT

Metrohm México
Calle. Xicoténcatl #181, Col
Del Carmen, Alcaldía
Coyoacán.
04100. Ciudad de México
México

info@metrohm.mx

CONFIGURACIÓN



i-Raman NxG 1064

El i-Raman NxG 1064 es un espectrómetro Raman de alto rendimiento, desarrollado específicamente para los tipos de muestras más difíciles y complejos. Cuenta con un láser de 1064 nm y una amplia gama espectral de 100–2500 cm^{-1} y resulta excelente para reducir drásticamente la interferencia causada por la fluorescencia, por lo cual es muy idóneo para efectuar análisis de productos altamente fluorescentes o de colores brillantes o de productos naturales, que son problemáticos para los sistemas Raman convencionales.

Esta avanzada capacidad permite realizar medidas rápidas y precisas, incluso con las muestras muy difíciles que se encuentran a menudo en sectores como el farmacéutico, el nutracéutico y el petróleo. Su versátil configuración –incluida la capacidad para efectuar medidas de vista a través en envases opacos– proporciona excelentes resultados en procesos rigurosos de control de calidad, en los que la supresión de la fluorescencia es esencial.

El i-Raman NxG 1064 es el espectrómetro preferido de los usuarios que necesitan llevar a cabo análisis Raman fiables –sin fluorescencia– de muestras de control de calidad muy difíciles.

Descubra cómo este láser de infrarrojo cercano le ayuda a llevar a cabo las medidas de control de calidad más difíciles:

- Los espectrómetros de alta sensibilidad proporcionan resultados en cuestión de segundos y pueden detectar señales Raman por más débiles que estas sean.
- El láser de infrarrojo cercano mide fácilmente tanto muestras muy coloridas como muestras oscuras.
- Sonda de fibra óptica flexible y compatible con una amplia gama de accesorios como un soporte de viales o un soporte de cubeta, una sonda de transflexión y un adaptador de vista a través.
- Potente software SpecSuite que facilita tanto la recogida de datos Raman como la construcción del modelo cuantitativo, la identificación por comparación con las bibliotecas de espectros y los análisis de rutina.
- Compacto y apilable para ahorrar un valioso espacio en la mesa de laboratorio.



Soporte de sonda Raman universal

Soporte de sonda para el uso en combinación con las sondas Raman para laboratorio de Metrohm, incluidos los ejes aptos para laboratorio, los ejes de inmersión para uso industrial y los ejes transparentes. Permite efectuar ajustes XYZ gruesos y finos de forma manual.