

APLICACIÓN DE LA CIENCIA SENSORIAL MOLECULAR EN LA DETERMINACIÓN DEL SABOR DE LOS ALIMENTOS: UNA REVISIÓN

APPLICATION OF MOLECULAR SENSORY SCIENCE IN DETERMINING FOOD FLAVOR: A REVIEW

Jorge A. Pino ^{a,b*} (0000-0002-1079-7151)

^a Instituto de Investigaciones para la Industria Alimenticia, La Habana, Cuba.

^b Instituto de Farmacia y Alimentos, Universidad de La Habana, Cuba.

^{a,b*} jpinoalea53@gmail.com

Recibido: 09 de septiembre de 2024;

Aceptado: 21 de marzo de 2025;

RESUMEN

La ciencia sensorial molecular (CSM) o sensómica representa una metodología multidisciplinaria e integrada enfocada en explorar los atributos sensoriales de los alimentos a nivel molecular. Al centrarse en las interacciones a nivel molecular responsables del sabor y aroma, la CSM ha revolucionado la forma en que se determinan y caracterizan los sabores. El objetivo del trabajo fue examinar las metodologías, aplicaciones y tendencias emergentes en el análisis sensorial molecular, enfatizando su papel en la industria alimentaria. Se discuten los métodos más usados para el desarrollo de la CSM, así como una búsqueda temática en la base de datos Scopus sobre ASM hasta 2024. Dentro del enfoque de la CSM, se ha empleado la cromatografía de gases acoplada con la espectrometría de masas y la olfatometría para determinar los compuestos clave que son activos en el olor. Se utilizan métodos de análisis de dilución, frecuencia de detección y tiempo-intensidad para identificar estos compuestos activos en el aroma. Además, se calculan los Valores de Actividad de Olor (OAV, por sus siglas en inglés) para determinar la contribución individual de cada compuesto volátil al aroma característico del alimento. Asimismo, se efectúan pruebas de reconstitución de aroma y pruebas de omisión para confirmar la importancia de estos compuestos clave en la configuración del perfil de sabor general del alimento. Se mostraron los avances clave, como la cromatografía de gases-olfatometría (GC-O), la cromatografía de gases-olfatometría-espectrometría de masas (GC-MS-O), el análisis de dilución de extractos de aroma (AEDA) y el rol de las tecnologías ómicas, que han logrado un impacto de la CSM en la optimización del sabor, la calidad de los alimentos y la aceptación del consumidor.

Palabras claves: ciencia sensorial molecular; sensómica; aroma-activo; cromatografía de gases-olfatometría-espectrometría de masas.

ABSTRACT

Molecular sensory science (MSS) or sensomics represents a multidisciplinary and integrated methodology focused on exploring the sensory attributes of food at the molecular level. By focusing on the molecular interactions responsible for flavor and aroma, MSS has revolutionized the way flavors are determined and characterized. The object of the present work was to examine the methodologies, applications, and emerging trends in molecular sensory analysis, emphasizing its role in the food industry. The most commonly used methods for the development of MSS are discussed, as well as a thematic search in the Scopus database on MSC up to 2024. Within the MSS approach, gas chromatography coupled with mass spectrometry and olfactometry has been used to determine the key odor-active compounds. Dilution analysis, detection frequency, and time-intensity methods are used to identify these aroma-active compounds. Additionally, Odor Activity Values (OAVs) are calculated to determine the individual contribution of each volatile compound to the characteristic aroma of the food. Furthermore, aroma reconstitution tests and omission tests are conducted to confirm the importance of these key compounds in shaping the overall flavor profile of the food. Key advances were shown, such as gas chromatography-olfactometry (GC-O), gas chromatography-olfactometry-mass spectrometry (GC-MS-O), aroma extract dilution analysis (AEDA), and the role of omics technologies, which have impacted MSS in optimizing flavor, food quality, and consumer acceptance.

Keywords: molecular sensory science; sensomic, aroma-active; gas chromatography-olfactometry-mass spectrometry.

INTRODUCCIÓN

En los últimos años, se han desarrollado las ciencias ómicas, las cuales podrían definirse como disciplinas que buscan estudiar en su conjunto a las distintas moléculas que componen y permiten la función de un organismo, y las redes de interacción entre ellas para comprender a los sistemas biológicos más complejos con mayor precisión. Estas ciencias se dividen en grupos como metabolómica, proteómica, genómica y transcriptómica (Capozzi & Bordoni, 2013). Ómica es un neologismo proveniente del inglés que en biología molecular se utiliza como sufijo para referirse al estudio de la totalidad o del conjunto de algo. Para la ciencia de los alimentos, se ha formado la sensómica y flavorómica dentro del grupo metabolómico. Los enfoques sensómicos en el ámbito de las ómicas relacionados con los alimentos se centran principalmente en los compuestos activos en el aroma que afectan indirectamente la percepción sensorial del consumidor sobre un alimento.

La sensómica, una de las tecnologías ómicas aplicadas a los alimentos, tiene como objetivo describir las propiedades sensoriales de los alimentos a nivel molecular (Vrzal & Olšovská, 2019) y se basa en un enfoque multidisciplinario e integrado (Ling et al., 2023). Esta se lleva a cabo al examinar compuestos relacionados con la percepción sensorial de los alimentos, no solo para entender la función de los compuestos activos en el aroma de un producto alimenticio, sino también para identificar aquellos compuestos que pueden impactar en la percepción sensorial de los alimentos. El uso exclusivo de métodos instrumentales en la evaluación de los compuestos volátiles puede conducir a una conclusión única y no se puede tomar una decisión sobre las propiedades sensoriales de ese alimento, ya que otros componentes en la matriz alimentaria pueden afectar la percepción sensorial del alimento (Vrzal & Olšovská, 2019).

Además del color, la apariencia y la textura, el sabor es un factor clave en la preferencia y aceptación de los alimentos por parte del consumidor. Abarca el gusto, el aroma y la textura y sensación en boca, influenciados por complejas interacciones de compuestos volátiles y no volátiles.

Una definición de estos tres atributos puede ser la siguiente:

- a) **Gusto:** Involucra las sensaciones básicas percibidas por la lengua, como dulce, salado, ácido, amargo y umami.
- b) **Aroma:** Se refiere a los compuestos volátiles que se perciben principalmente a través de la nariz, tanto por vía retranasal (al masticar) como ortonasal (al oler).
- c) **Textura y sensación en boca:** Factores como la cremosidad, crocantez o astringencia también forman parte de la experiencia del sabor.

El estudio del sabor es crucial en la industria alimentaria para desarrollar productos que satisfagan las preferencias de los consumidores. Además, es fundamental en la creación de nuevos alimentos, en la mejora de productos existentes y en el control de calidad.

El aroma y el sabor (*flavor*) son parámetros de calidad importantes en los alimentos causados por sustancias químicas. Sin embargo, los compuestos activos en cuanto al aroma y sabor que se encuentran de forma natural en los alimentos muestran diferencias extremas en su actividad olfativa y gustativa, definida como la relación entre la concentración y el umbral sensorial. En el trabajo se presentan varios ejemplos del uso de procedimientos de detección guiados por la actividad para desentrañar los compuestos naturales de aroma y sabor en los alimentos. Estas técnicas, denominadas "detección molecular", han permitido recientemente la identificación de componentes naturales muy potentes con propiedades sensoriales interesantes (Schieberle & Hofmann, 2003). Además, dichos compuestos sensorialmente activos pueden ser utilizados como marcadores para orientar la fabricación de alimentos con el fin de optimizar los sabores (Schieberle & Hofmann, 2011; Gao et al., 2014; Liu et al., 2022a, 2022b; Wu et al., 2023; Xu et al., 2024).

Tradicionalmente, el análisis del sabor se basaba en pruebas sensoriales, pero estos métodos a menudo no lograban identificar las interacciones moleculares específicas que impulsan la percepción del sabor. La aparición de la ciencia sensorial molecular (CSM) cierra esta brecha, permitiendo un examen más detallado de los compuestos responsables del sabor.

El aroma distintivo de un alimento surge de una mezcla compleja de compuestos volátiles (Belitz et al., 2009). El método más común para identificar las sustancias que confieren aroma a los alimentos es la

cromatografía de gases con detector de llama de hidrógeno (GC, por sus siglas en inglés) y la cromatografía de gases con detector de masas selectivo (GC-MS) (Gou et al., 2021) Se han detectado numerosos compuestos volátiles en diversos productos alimenticios y algunos de ellos son responsables de darle a un alimento su aroma característico. Estos compuestos se conocen como compuestos activos en el aroma o componentes clave del olor (Gou et al., 2021; Guclu et al., 2023).

Una etapa fundamental de los estudios sobre el aroma implica el aislamiento e identificación de los constituyentes aromáticos distintivos presentes en el producto alimenticio. La cromatografía de gases-olfatometría (GC-O, por sus siglas en inglés) y la GC-MS-O son las técnicas comúnmente utilizadas para identificar estos compuestos (Gou et al., 2021; Wang et al., 2021).

Algunos compuestos aromáticos, a pesar de su influencia significativa en el sabor de los alimentos, pueden existir en concentraciones relativamente bajas, pero tener intensidades de olor altas, lo que los hace indetectables solo con métodos instrumentales (Schieberle & Hofmann, 2003; Song & Liu, 2018). Además, durante el aislamiento del aroma y el análisis por GC, algunos compuestos pueden transformarse en otros debido a su inestabilidad y reactividad química. Las técnicas GC-O y GC-MS-O ayudan a mitigar estos desafíos, permitiendo la identificación de compuestos activos en el aroma incluso a concentraciones más bajas. En consecuencia, facilita la exploración de la relación entre estos compuestos aromáticos significativos y sus propiedades sensoriales en los alimentos, un concepto conocido como el enfoque sensómico.

La CSM, también conocida como sensómica, es una metodología utilizada para investigar tanto los atributos cuantitativos como cualitativos de los odorantes alimentarios a nivel molecular (Schieberle & Hofmann, 2011; Gou et al., 2021; Wang et al., 2021). Esta se basa en la combinación del análisis sensorial con métodos instrumentales como la GC-MS, GC-O y GC-MS-O. La CSM ha encontrado aplicaciones significativas en el desarrollo de nuevos productos alimentarios, optimización de recetas y control de calidad. Además, ha permitido a la industria alimentaria entender mejor cómo pequeños cambios en la formulación pueden afectar la percepción del sabor, llevando a productos que satisfacen mejor las preferencias del consumidor. La presente revisión examina las metodologías, aplicaciones y tendencias emergentes en el análisis sensorial molecular, enfatizando su papel en la industria alimentaria.

MÉTODOS

Entre las bases de información científica mundiales como *Google Scholar*, *Scopus*, *Web of Sciences*, *ScienceDirect*, *SciFinder*, *Chemical Abstract* y *Food Science and Technology Abstract*, Scopus tiene una excelente reputación en la mayoría de las instituciones científicas y universidades pues proporciona un impacto positivo en la calidad de las investigaciones. Por tal razón, esta fue seleccionada para realizar la búsqueda de los documentos relacionados con la ciencia sensorial molecular y la tendencia de las investigaciones sobre el tema. La investigación abarcó un período de 28 años comprendido de 1997 a octubre de 2024. El material de análisis se conformó de 241 documentos digitales resultantes de la aplicación de criterios de búsqueda y exclusión. Se utilizó como elemento de búsqueda principal las palabras *molecular sensory science*, la que debían aparecer en el título, resumen o palabras clave de los documentos resultantes. Se determinaron las frecuencias y porcentajes para los siguientes elementos: publicaciones por año, país de origen de la investigación y afiliaciones. Para el registro y análisis de los datos se utilizó el programa Microsoft 365® Excel ® 2024.

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

Estudio bibliométrico sobre la ciencia sensorial molecular

El número de publicaciones con relación al CASM fue de 241 documentos científicos, los cuales han tenido un incremento progresivo contuvieron un acrecentamiento más pronunciado en 2024 (Figura 1).

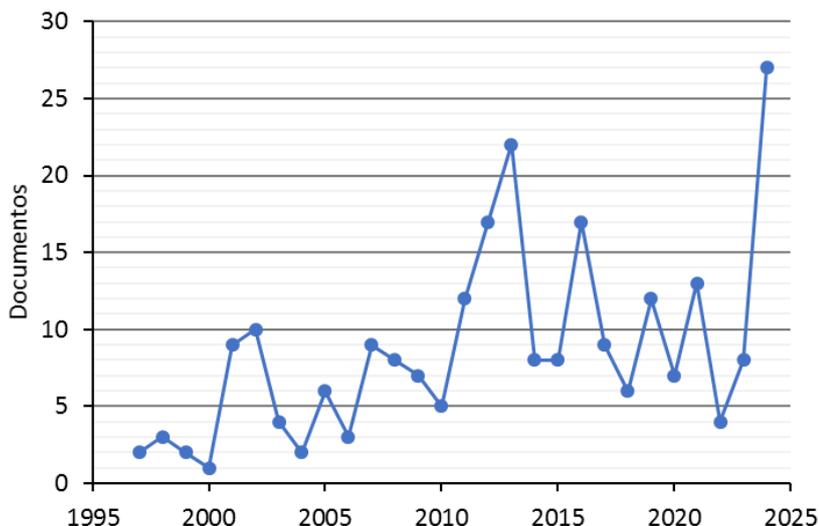


Fig. 1. Número de documentos por año según Scopus.

Con el fin de percibir mejor el panorama mundial de estas publicaciones se hizo una búsqueda por países. Los mayores contribuyentes sobre este tema fueron Alemania, China, EE.UU., Cuba, Francia, Italia, Japón, Polonia, Argentina y Australia. Es interesante destacar que resultaron con 217 documentos publicados los cuatro primeros países del total de 10 países que han publicado sobre este tema (Figura 2). En este selecto grupo de países están involucrados el 93 % del total de los documentos.

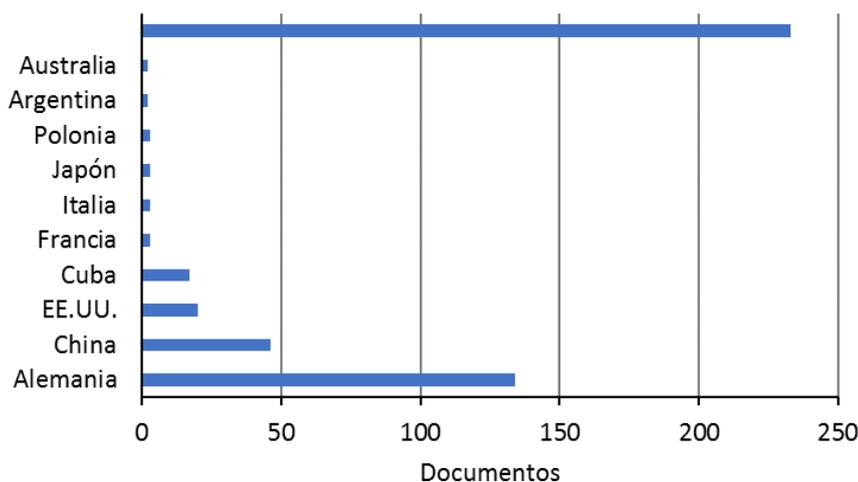


Fig. 2. Número de documentos por países según Scopus.

La mayor cantidad de escritos relacionados con el ASM 1997 hasta el 2024 (Figura 3), se han descrito por la Universidad Técnica de Múnich (Alemania) con 131 citas, seguido de 17 documentos registrados a nombre del Instituto de Investigaciones para la Industria Alimenticia (Cuba) y de la Universidad de Tecnología y Negocios de Beijing (China). Otras nueve instituciones completan el grupo con más trabajos publicados.

Cuba no ha estado ajena al desarrollo de investigaciones con aplicaciones de la CSM (Tabla 1). De acuerdo con la búsqueda, la mayoría de los trabajos fueron publicados en revistas de reconocido prestigio científico y el número de citas de cada publicación es alto, lo que da una idea del reconocimiento de la comunidad científica internacional que se enfoca en el estudio del aroma de los alimentos.

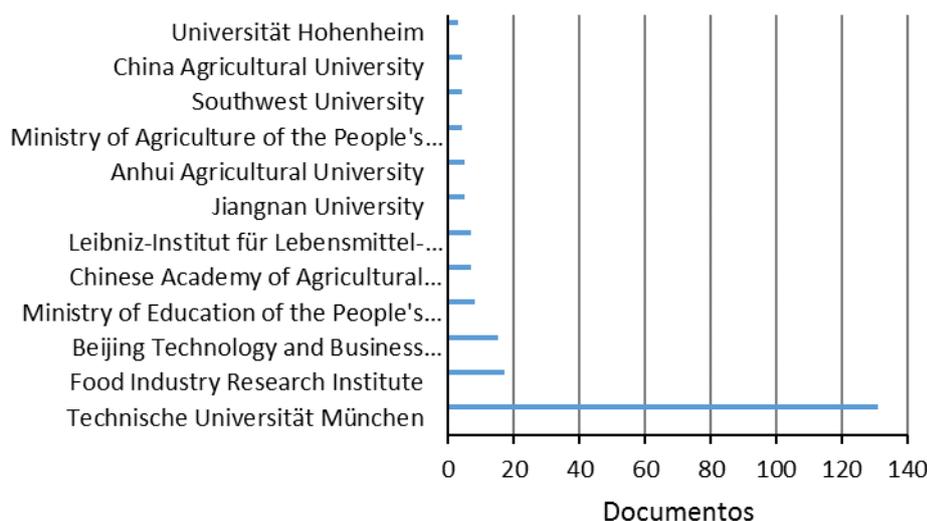


Fig. 3. Número de documentos por filiación según Scopus.

Tabla 1. Productos investigados en Cuba con aplicaciones de la CSM

Producto	Referencia	Citas en Scopus
Aguardiente de mieles uniflorales	Pino & Fajardo, 2011	15
Vino de guayaba	Pino & Queris, 2011	28
Ron añejo	Pino et al., 2012	86
Vino de papaya	Pino & Queris, 2012	8
Miel de mangle negro	Pino, 2012a	16
Ciruela	Pino & Quijano-Célis, 2012	96
Mango cv. Corazón	Pino, 2012b	50
Piña cv. Red Spanish	Pino, 2013a	27
Banano cv. Giant Cavendish	Pino & Febles, 2013	75
Guayaba cv. Red Suprema	Pino & Bent, 2013	32
Papaya cv. Red Maradol	Pino, 2014a	59
Humo líquido	Pino, 2014b	34
Zapote negro	Pino et al., 2014	6
Chirimoya	Pino & Roncal, 2016	8
Banano bocadillo	Pino et al., 2017	11
Mango cv. Ataulfo	Cuevas-Glory et al., 2020	15
Guayaba ácida	Pino & Trujillo, 2021	5

Ciencia sensorial molecular

Algunos de los compuestos aromáticos en un producto alimenticio crean el olor característico de ese alimento y se denominan constituyentes aroma-activos. Algunas sustancias aromáticas que contribuyen significativamente al sabor de los alimentos no pueden ser detectadas por métodos instrumentales debido a sus concentraciones relativamente bajas. Además, los compuestos aromáticos en algunos alimentos son inestables y reactivos, y algunos compuestos pueden transformarse en otros durante la extracción del aroma y el análisis por GC. Estos problemas pueden minimizarse con el uso del método de GC-O. De esta manera, se definen los compuestos aroma-activos importantes para los alimentos y se aclara la relación entre estos compuestos y sus propiedades sensoriales. El diagrama de flujo básico de la ciencia sensorial molecular se muestra en la Figura 4. Solo una cierta fracción de los compuestos aromáticos en un alimento contribuye a su aroma característico, y es necesario combinar la investigación analítica y sensorial para identificar estos sabores esenciales. Los receptores de olores disponibles en la cavidad nasal humana muestran diferencias significativas en selectividad y sensibilidad a sustancias volátiles. Por lo tanto, es necesario validar y respaldar la precisión de los datos cuantitativos obtenidos de GC con métodos sensoriales. Para este propósito, se utiliza un enfoque de la CSM, desarrollado por los grupos de investigación de Schieberle y Hofmann, para verificar los constituyentes aromáticos de los alimentos (Schieberle & Hofmann, 2003, 2005; Frauendorfer & Schieberle, 2006; Schuh & Schieberle, 2006; Stark et al.,

2006; Greger & Schieberle, 2007; Steinhaus & Schieberle, 2007; Söllner & Schieberle, 2009; Ruisinger & Schieberle, 2012; Grosshauser & Schieberle, 2013; Ortner et al., 2013; Wagner et al., 2016, 2017; Schaller & Schieberle, 2020).

La CSM tiene como objetivo identificar los compuestos responsables del aroma de los alimentos utilizando técnicas de GC y GC-O, a menudo combinadas con OAV, pruebas de omisión y análisis de recombinación del aroma.



Fig. 4. Diagrama de flujo para aplicar la ciencia sensorial molecular.

Métodos de aislamiento de los compuestos aromáticos

En el enfoque de la CSM, los compuestos volátiles se aíslan primero utilizando métodos como extracción líquido-líquido (LLE, por sus siglas en inglés), la destilación-extracción simultáneas (SDE), microextracción en fase sólida (SPME), la extracción por barras de agitación sorbente (SBSE) y evaporación de aroma asistida por disolvente (SAFE). Seleccionar un método de aislamiento adecuado es crucial, ya que impacta significativamente en la precisión y fiabilidad de los datos fundamentales utilizados en las etapas posteriores de la ciencia sensorial molecular (Kilic-Buyukkurt et al., 2023).

En el método LLE, los compuestos aromáticos se extraen con ayuda de un disolvente orgánico con una polaridad similar a la de los compuestos objetivo. Generalmente, se utilizan disolventes volátiles como éter dietílico, *n*-pentano y diclorometano. El método SDE permite la separación de componentes volátiles, así como compuestos relativamente insolubles en agua con un aparato especialmente diseñado. Sin embargo, este método puede llevar a cierta pérdida de aroma debido a la aplicación de altas temperaturas (Majcher & Jelén, 2009). La SPME es un

método analítico rápido y adaptable que consiste en la sorción de los compuestos volátiles en una fibra recubierta, seguida de su liberación y separación dentro de una columna de GC (Pino, 2018). Esta técnica es valorada por su eficiencia en el tiempo y su respeto al medio ambiente, pues elimina el uso de disolventes, aunque tiene algunas limitaciones, como la naturaleza delicada de las fibras de extracción, que requieren un manejo cuidadoso (Xu et al., 2024). Probablemente estas sean las razones por la que este método ha sido ampliamente usado para el estudio del aroma de los alimentos.

De manera similar a la SPME, el método SBSE elimina la necesidad de disolventes. Este enfoque implica enriquecer el material absorbente con ayuda de barras de agitación recubiertas de polidimetilsiloxano, que se sumergen en la muestra acuosa y se utilizan para la extracción mientras se encuentra en estado de agitación (Pino, 2018). Los recobrados son mayores en comparación con la SPME y los límites de detección son en el rango de ng/L para muchos compuestos volátiles y semivolátiles. A pesar de la optimización del método, algunos problemas de repetibilidad se han encontrado con compuestos muy volátiles o muy solubles (Pino, 2012c).

El método SAFE implica la evaporación, extracción y condensación de los compuestos volátiles y semivolátiles. Esto ocurre mediante evaporación a una baja temperatura (< 40 °C) y atrapamiento a una temperatura muy baja debido a un alto vacío (10^{-2} a 10^{-3} Pa) facilitado por un aparato especializado (Engel et al., 1999). Por lo general, no existe un método de aislamiento universal y todos tiene ventajas y desventajas que hay que valorar previamente. Una comparación entre los métodos SPME, SAFE y DSE para el estudio de los compuestos volátiles en botanas de papa indicó que preferiblemente se deben utilizar tanto el método SPME como el SAFE para una completa caracterización (Majcher & Jelén, 2009).

Dado que el aislamiento de los compuestos del aroma sigue siendo un reto, porque no existe un método de aislamiento simple con el que se obtenga una representación exacta del aroma del alimento. Así, el aislamiento puede producir compuestos no presentes en la muestra, denominados 'artefactos', pero el contenido total de volátiles (producido por este aislamiento) en muchos casos es muy difícil de relacionar con el perfil sensorial determinado por catadores expertos o consumidores habituales del alimento. Es por ello que resulta siempre recomendable que se compare sensorialmente el perfil del aroma del extracto con el original del producto (Pino, 2014b).

Diferentes métodos de cuantificación se han usado, pero sin dudas, el ensayo por dilución isotópica es el más exacto para este parámetro (Pino, 2012c). Según esta técnica, a la muestra del alimento se le adiciona una cantidad conocida del odorante con un isótopo "marcado" y se procede al aislamiento de los compuestos volátiles. Los compuestos aislados son analizados por GC-MS para diferenciar al compuesto original en la muestra y el compuesto "marcado" de acuerdo a algún ion particular del espectro de masas. La cantidad relativa del analito se calcula a partir del área de los dos picos registrados y la cantidad adicionada del analito "marcado" (Söllner & Schieberle, 2009; Ruisinger & Schieberle, 2012).

Métodos olfatométricos

La aplicación de la GC-O en el análisis del aroma y sabor de los alimentos representa una técnica valiosa para caracterizar los compuestos activos en el olor, así como los que influyen en el carácter, responsables del olor característico de un alimento (d'Acampora-Zellner et al., 2008). En el análisis olfatométrico en el que se emplea la nariz humana como detector, se pueden identificar los constituyentes aroma-activos que afectan el sabor de los alimentos.

En el contexto del diseño GC-O o GC-MS-O, el puerto olfativo (de olfateo) opera en paralelo con un espectrómetro de masas (MS) o con un detector de ionización de llama (FID). Este diseño permite que los compuestos aromáticos dentro de los extractos se dirijan simultáneamente tanto al FID como al MS, facilitando su identificación y permitiendo también la detección olfativa humana mediante el olfateo (d'Acampora-Zellner et al., 2008).

Todos los procedimientos de olfatometría están basados en la inyección de un extracto. Si se asumen recobrados cuantitativos, estas alternativas brindan una solución que es más representativa de la composición del olor y sabor en la matriz que en la fase vapor que rodea al alimento. Dado que solamente los compuestos volátiles del espacio de cabeza son los que se perciben por la nariz, un aromagrama basado en un extracto no representará cuantitativamente el perfil del olor del producto. Adicionalmente, si el extracto debe ser concentrado antes del análisis, ocurrirán pérdidas de los compuestos más volátiles. Además, el disolvente usado para las diluciones sucesivas puede enmascarar los primeros picos cromatográficos que eluyen (Pino, 2012c).

En la GC-O se utilizan principalmente tres técnicas diferentes: análisis de dilución de extracto de aroma (AEDA), frecuencia de detección (DF) y análisis de intensidad directa (OSME) (Kilic-Buyukkurt, 2024). De estos, AEDA es la técnica más utilizada para la identificación de los compuestos aroma-activos de muchos alimentos. Este método incluye la creación de diluciones en serie del extracto en proporciones como 1:2 o 1:3, seguido de la evaluación por un mínimo de dos evaluadores experimentados. Cada compuesto aromático se olfatea hasta que no se detecta olor, anotando el factor de dilución, denominado FD, en el que el aroma se vuelve indetectable

como específico para ese compuesto. Al concluir el análisis, los compuestos aromáticos con mayores FD se definen como los compuestos aroma-activos que contribuyen más al perfil aromático (Greger & Schieberle, 2007). El método DF puede involucrar hasta evaluadores no entrenados que participan en sesiones de olfateo. El conteo de los evaluadores que identifican el mismo olor en tiempos de retención coincidentes al olfatear el extracto se denomina frecuencia de detección. La intensidad de un compuesto aromático se determina por el número de individuos que lo perciben (Botelho et al., 2007). Los compuestos activos en el aroma con frecuencias de detección más altas se presumen tener una presencia más pronunciada, correlacionándose con la intensidad del compuesto aromático (Gou et al., 2021). En la técnica DF, más de un miembro (≥ 3) evalúa el mismo extracto de aroma no diluido.

El método OSME se basa en el principio de que los evaluadores registran en tiempo real los cambios en las características del olor y la intensidad del olor. Este método fue diseñado para obtener información de intensidad en una sola corrida experimental. Se ha planteado que hay una buena reproducibilidad de las intensidades de los picos, mientras que se encontraron variaciones de la sensibilidad en diferentes días (Pino, 2013b).

La elección del método GC-O es de suma importancia para la correcta caracterización de una matriz, ya que la aplicación de diferentes métodos a una muestra real idéntica puede seleccionar y clasificar de forma distinta los compuestos activos en el olor según su potencia o intensidad del olor. Comúnmente, los métodos de frecuencia de detección y de intensidad posterior dan como resultado relaciones similares de intensidad/concentración del olor, mientras que el análisis de dilución investiga y atribuye potencias de olor (d'Acampora-Zellner et al., 2008).

Determinación de los valores de actividad del olor

La primera etapa en la estimación de la importancia de un compuesto volátil en un alimento en particular es el cálculo de la relación entre su concentración y su concentración umbral del olor (cuando el olor es percibido nasalmente y retronasalmente) o de su concentración umbral de olor (cuando el olor es evaluado solo nasalmente). El resultado se denota como OAV y este es calculado sobre la base de sus concentraciones umbrales en un medio semejante al del alimento (Quijano-Céllis et al., 2012). Después de obtener la información de los compuestos aroma-activos se calculan los OAV de los compuestos aroma-activos detectados. Los OAV determinan y evalúan la contribución de cada una de las sustancias aromáticas en lugar de sus cantidades en los alimentos. Un OAV mayor que la unidad indica que el compuesto afecta el aroma y sabor del alimento. Cuanto mayor sea el OAV de una sustancia aromática, mayor será su influencia en estos atributos. Todos los constituyentes con un OAV mayor que uno se añaden a una matriz (aceite, agua, alcohol, etc.) en las concentraciones determinadas por los resultados cuantitativos y se crea una recombinación del aroma para determinar la precisión de estos resultados cuantitativos. Si se mira a la concentración umbral de un compuesto como una cantidad separada, el OAV de ese compuesto da el número de concentraciones umbrales de tales compuestos presentes en el alimento. Este valor da una indicación de la importancia de un compuesto al aroma. Sin embargo, al menos dos simplificaciones de este concepto deben ser mencionadas: asumir que la intensidad percibida es proporcional al OAV y el uso frecuente de concentraciones umbrales determinados en medios modelo diferentes al del propio alimento. A pesar de estas limitaciones, el concepto de OAV es aún muy usado como una herramienta poderosa en las investigaciones del aroma y sabor de los alimentos (Kilic-Buyukkurt, 2024).

Recombinación del aroma y pruebas de omisión

Las técnicas que incluyen no solo GC-O y análisis cuantitativo, sino también análisis del OAV, pruebas de perfil descriptivo, recombinación del aroma y experimentos de omisión, se han utilizado extensivamente y con éxito para investigar los compuestos clave del aroma de los alimentos (Greger & Schieberle, 2007; Gao et al., 2014; Schaller & Schieberle, 2020).

Las pruebas de recombinación del aroma se aplican utilizando datos cualitativos y cuantitativos, ya que puede haber algunas pérdidas de aroma durante la extracción de aroma y el análisis de GC-O (Schieberle & Hofmann, 2011). La recombinación del aroma se basa en mezclar e imitar las sustancias aromáticas presentes en los alimentos en concentraciones reales cuantificadas y en la percepción de esta matriz por el olfato humano. Después del estudio de recombinación del aroma, se aplican las pruebas de omisión para evaluar el impacto de la eliminación de constituyentes aromáticos específicos en el aroma y sabor. Finalmente, se determina cuánto contribuye cada compuesto eliminado de la matriz al aroma y sabor del alimento (Söllner & Schieberle, 2009; Ruisinger & Schieberle, 2012; Schaller & Schieberle, 2020).

Aplicaciones de la CSM

En un estudio previo con aplicación del enfoque de la CSM se determinaron los compuestos aroma-activos de muestras de miel de mangle prieto, que es una miel monofloral de alta cotización en el mercado internacional (Pino, 2012a). Después de extraer las muestras de miel utilizando el método SPME, un total de 17 compuestos

aroma-activos fueron identificados a través del método olfatométrico AEDA. Como el método SPME no genera un extracto que pueda ser diluido para estimar la contribución sensorial de cada odorante, el proceso utilizado en el estudio consistió en realizar diluciones sucesivas de la muestra de miel en una proporción de 1:4 con una miel sintética antes de aplicar la SPME. La miel sintética se preparó con fructosa, glucosa, maltosa y sacarosa en concentraciones similares a la de la miel original. De los compuestos identificados, la (*E*)- β -damascenona, nonanal y decanal fueron los que presentaron los valores de FD más altos. A través del cálculo del OAV de los compuestos volátiles, se encontró que estos tres odorantes y el octanal tenían valores de OAV superiores a 800 y estaban asociados con notas de miel. Se realizaron experimentos de reconstitución de aroma con los 17 compuestos aroma-activos, según AEDA, en la miel sintética y la recombinación preparada se encontró altamente similar al aroma de la miel de mangle prieto (resultados no publicados). La prueba de omisión eliminando al benzaldehído con OAV<1 indicó que solo una pequeña fracción de los catadores pudo discernir la diferencia. Por lo tanto, se concluyó que este compuesto no contribuye significativamente al aroma de esta miel.

Aunque el método principal para obtener compuestos volátiles relacionados con el "ahumado" es la pirólisis térmica de la celulosa, hemicelulosa y lignina, no se ha realizado ninguna investigación sobre el uso de materiales celulósicos, como residuos agrícolas y subproductos, en lugar de madera. La cáscara de arroz es uno de los más importantes, debido a su volumen de producción, y se han propuesto más de 25 posibles usos para este subproducto, pero hasta el momento la atención de los investigadores no se ha centrado en su pirólisis térmica para producir saborizante de humo. En otro estudio, se obtuvo un saborizante de humo acuoso a partir de cáscara de arroz (Pino, 2014b). Los compuestos volátiles fueron aislados mediante extracción con disolvente y su identificación y composición fue estudiada mediante GC-MS y GC-FID. Se aislaron un total de 93 compuestos volátiles, pero solamente 14 de ellos resultaron aroma-activos por el método olfatométrico AEDA. Los resultados de la prueba de perfil sensorial revelaron una gran similitud entre el extracto de aroma aislado y la recombinación preparada, pues todos los descriptores de olor fueron considerados casi iguales en el perfil aromático original y en la mezcla modelo, con la excepción de las notas de olor dulce y fenólico, que los catadores describieron como más intensas en el aroma original del saborizante de humo líquido en comparación con la mezcla recombinada. La consideración de la contribución real de otros compuestos altamente volátiles parece constituir un desafío importante para la recombinación de este aroma de saborizante de humo líquido.

Tendencias emergentes y futuro de la CSM

Con los avances en tecnologías ómicas y la incorporación de herramientas como la inteligencia artificial, se anticipa que el análisis sensorial molecular seguirá avanzando. Estas tendencias prometen mejorar la precisión en la identificación y caracterización de compuestos aromáticos, lo que ampliará las aplicaciones de la CSM en campos como la personalización de alimentos y el diseño de sabores personalizados.

CONCLUSIONES

Desde que se iniciaron en 1997 las investigaciones relacionadas con la ciencia sensorial molecular, en estos 28 años ha ocurrido un crecimiento progresivo de las investigaciones sobre el aroma y sabor de los alimentos, destacándose países como Alemania, China, EE.UU. y Cuba.

En esta revisión, se delinearon los pasos operativos fundamentales de la ciencia sensorial molecular. Esta se centra en identificar los compuestos responsables de los aromas distintivos de los alimentos con el uso de técnicas de GC-MS y GC-O, a menudo en combinación con valores de actividad de olor, análisis de recombinación de aroma y pruebas de omisión. Inicialmente, los compuestos aromáticos se extraen del alimento utilizando métodos adecuados, seguidos de la identificación y caracterización de los compuestos más aroma-activos mediante métodos olfatométricos. Posteriormente, se calculan los valores de actividad de olor de estos compuestos aroma-activos. Finalmente, se evalúan pruebas de recombinación de aroma y omisión, basadas en la concentración de cada compuesto aromático en el producto, a través del análisis del perfil sensorial. La ciencia sensorial molecular encuentra aplicación en una amplia gama de muestras de alimentos. Se requieren más estudios utilizando este enfoque para determinar con mayor precisión los principales odorantes en los alimentos.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Belitz, H.-D., Grosch, W., & Schieberle, P. (2009). *Food Chemistry*. Heidelberg, Germany: Springer-Verlag.
- Botelho, G., Caldeira, I., Mendes-Faia, A., Clímaco, M. C. (2007). Evaluation of two quantitative gas chromatography-olfactometry methods for clonal red wines differentiation. *Flavour and Fragrance Journal*, 22, 414-420.
- Capozzi, F., & Bordoni, A. (2013). Foodomics: a new comprehensive approach to food and nutrition. *Genes & Nutrition*, 8, 1-4.

- Cengiz, N., Guclu, G., Kelebek, H., & Selli, S. (2023). GC–MS-Olfactometric characterization of key odorants in rainbow trout by the application of aroma extract dilution analysis: Understanding locational and seasonal effects. *Food Chemistry*, 407, 135137. Disponible en <https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2022.135137>
- Cuevas-Glory, L. F., Sauri-Duch, E., Sosa-Moguel, O., & Pino, J. A. (2020). Characterization of odor-active compounds in mango ‘Ataulfo’ (*Mangifera indica* L.) fruit. *Chemical Papers*, 74(11), 4025-4032.
- Frauentorfer, F., & Schieberle, P. (2006). Identification of the key aroma compounds in cocoa powder based on molecular sensory correlations. *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, 54, 5521-5529.
- d’Acampora-Zellner, B., Dugo, P., Dugo, G., & Mondello, L. (2008). Gas chromatography–olfactometry in food flavour analysis. *Journal of Chromatography A*, 1186, 123-143.
- Engel, W., Bahr, W., & Schieberle, P. (1999). Solvent assisted flavour evaporation – a new and versatile technique for the careful and direct isolation of aroma compounds from complex food matrices. *European Food Research and Technology*, 20, 237-241.
- Gao, W., Fan, W., & Xu, Y. (2014). Characterization of the key odorants in light aroma type Chinese liquor by gas chromatography–olfactometry, quantitative measurements, aroma recombination, and omission studies. *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, 62, 5796-5804.
- Gou, M., Bi, J., Chen, Q., Wu, X., Fauconnier, M. L., & Qiao, Y. (2021). Advances and perspectives in fruits and vegetables flavor based on molecular sensory science. *Food Reviews International*, 39(6), 3066-3079.
- Greger, V., & Schieberle, P. (2007). Characterization of the key aroma compounds in apricots (*Prunus armeniaca*) by application of the molecular sensory science concept. *Journal of Agriculture and Food Chemistry*, 55, 5221-5228.
- Grosshauser, S., & Schieberle, P. (2013). Characterization of the key odorants in pan-fried white mushrooms (*Agaricus bisporus* L.) by means of molecular sensory science: Comparison with the raw mushroom tissue. *Journal of Agriculture and Food Chemistry*, 61, 3804-3813.
- Kilic-Buyukkurt, O., Kelebek, H., Bordiga, M., Keskin, M., & Selli, S. (2023). Changes in the aroma and key odorants from white garlic to black garlic using approaches of molecular sensory science: A review. *Heliyon*, 9, e19056. Disponible en <https://doi.org/10.1016/j.heliyon.2023.e19056>
- Kilic-Buyukkurt, O. (2024). Application of molecular sensory analysis in determining food flavor: a review. *Journal of Raw Material to Processed Foods*, 5(1), 1-10.
- Ling, M., Chai, R., Xiang, X., Li, J., Zhou, P., Shi, Y., Duan, C., & Lan, Y. (2023). Characterization of key odor-active compounds in Chinese Dornfelder wine and its regional variations by application of molecular sensory science approaches. *Food Chemistry*, 17, 100598. Disponible en <https://doi.org/10.1016/j.fochx.2023.100598>
- Liu, C., Yang, P., Wang, H., & Song, H. (2022a). Identification of odor compounds and odor-active compounds of yogurt using DHS, SPME, SAFE, and SBSE/GC-O-MS. *LWT - Food Science and Technology*, 154, 112689. Disponible en <https://doi.org/10.1016/j.lwt.2021.112689>
- Liu, W., Zhang, Y., Ma, R., & Yu, M. (2022b). Comparison of aroma trait of the white-fleshed peach ‘Hu Jing Mi Lu’ and the yellow-fleshed peach ‘Jin Yuan’ based on odor activity value and odor characteristics. *Horticulturae*, 8, 245. Disponible en <https://doi.org/10.3390/horticulturae8030245>
- Majcher, M., & Jelén, H. H. (2009). Comparison of suitability of SPME, SAFE and SDE methods for isolation of flavor compounds from extruded potato snacks. *Journal of Food Composition and Analysis*, 22, 606-612.
- Ortner, E., Granvogl, M., & Schieberle, P. (2013). Elucidation of thermally induced changes in key odorants of white mustard seeds (*Sinapis alba* L.) and rapeseeds (*Brassica napus* L.) using molecular sensory science. *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, 64, 8179-8190.
- Pino, J. A., & Fajardo, M. (2011). Volatile composition and key flavour compounds of spirits from unifloral honeys. *International Journal of Food Science and Technology*, 46(5), 994-1000.
- Pino, J. A., & Queris, O. (2011). Characterization of odor-active compounds in guava wine. *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, 59, 4885-4890.
- Pino, J. A., Tolle, S., Gök, R., & Winterhalter, P. (2012). Characterization of odour-active compounds in aged rum. *Food Chemistry*, 132, 1436-1441.
- Pino, J. A., & Queris, O. (2012). Characterization of odour-active compounds in papaya (*Carica papaya* L.) wine. *International Journal of Food Science and Technology*, 47, 262-268.
- Pino, J. A. (2012a). Analysis of volatile compounds of black mangrove (*Avicennia germinans* L.) honey by solid-phase microextraction combined with gas chromatography-mass spectrometry and gas chromatography-olfactometry. *International Journal of Food Science and Technology*, 47, 1688-1694.
- Pino, J. A. (2012b). Odour-active compounds in mango (*Mangifera indica* L. cv. Corazón). *International Journal of Food Science and Technology*, 47, 1944-1950.
- Pino, J. A. (2012c). Avances en el aislamiento de volátiles en frutas y determinación de su contribución sensorial. Parte I. *Ciencia y Tecnología de Alimentos*, 22(3), 60-68.

- Pino, J. A., & Quijano-Célis, C. E. (2012). Study of the volatile compounds from plum (*Prunus domestica* L. cv. Horvin) and estimation of their contribution to the aroma. *Ciência e Tecnologia de Alimentos (Brazil)*, 32(1), 76-83.
- Pino, J. A. (2013a). Odour-active compounds in pineapple (*Ananas comosus* [L.] Merrill cv. Red Spanish). *International Journal of Food Science and Technology*, 48, 564-570.
- Pino, J. A. (2013b). Avances en el aislamiento de volátiles en frutas y determinación de su contribución sensorial. Parte II. *Ciencia y Tecnología de Alimentos*, 23(1), 67-70.
- Pino, J. A., & Febles, Y. (2013). Odour-active compounds in banana fruit cv. Giant Cavendish. *Food Chemistry*, 141, 795-801.
- Pino, J. A., & Bent, L. (2013). Odour-active compounds in guava (*Psidium guajava* L. cv. Red Suprema). *Journal of the Science and Food Agriculture*, 93, 3114-3120.
- Pino, J. A. (2014a). Odour-active compounds in papaya fruit cv. Red Maradol. *Food Chemistry*, 146, 120-126.
- Pino, J. A. (2014b). Characterization of volatile compounds in a smoke flavouring from rice husk. *Food Chemistry*, 153, 81-86.
- Pino, J. A., Ortiz-Vázquez, E., Sauri-Duch, E., & Cuevas-Glory, L. F. (2014). Characterization of aroma-active compounds in black sapote (*Diospyros digyna* Jacq.). *Acta Alimentaria*, 43(4), 547-552.
- Pino, J. A., & Roncal, E. (2016). Characterisation of odour-active compounds in cherimoya (*Annona cherimola* Mill.) fruit. *Flavour and Fragrance Journal*, 31, 143-148.
- Pino, J. A., Winterhalter, P., & Castro-Benítez, M. (2017). Odour-active compounds in baby banana fruit (*Musa acuminata* AA Simmonds cv. Bocadillo). *International Journal of Food Properties*, 20, 1448-1455.
- Pino, J. A. (2018). *El Aroma de las Frutas Cubanas*. La Habana: Editorial Científico-Técnica.
- Pino, J. A., & Trujillo, R. (2021). Characterization of odour-active compounds of sour guava (*Psidium acidum* [DC.] Landrum) fruit by gas chromatography-olfactometry and odour activity value. *Flavour and Fragrance Journal*, 36(2), 207-212.
- Quijano-Célis, C. E., Echeverri-Gil, D., & Pino, J.A. (2012). Characterization of odour-active compounds in yellow pitaya (*Hylocereus megalanthus* [Haw.] Britton et Rose). *Revista CENIC Ciencias Químicas*, 43, 1-12.
- Ruisinger, B., & Schieberle, P. (2012). Characterization of the key aroma compounds in rape honey by means of the molecular sensory science concept. *Journal of Agriculture and Food Chemistry*, 60, 4186-4194.
- Schaller, T., & Schieberle, P. (2020). Comparison of the key aroma compounds in fresh, raw ginger (*Zingiber officinale* Roscoe) from China and roasted ginger by application of aroma extract dilution analysis. *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, 68, 15292-15300.
- Scharbert, S., & Hofmann, T. (2005). Molecular definition of black tea taste by means of quantitative studies, taste reconstitution, and omission experiments. *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, 53, 5377-5384.
- Schieberle, P., & Hofmann, T. (2003). Die molekulare Welt des Lebensmittelgenusses: Auf den Geschmack gekommen. [El mundo molecular del disfrute de la comida]. *Chemie in unserer Zeit*, 37, 388-401.
- Schieberle, P., & Hofmann, T. (2011). Mapping the combinatorial code of food flavors by means of molecular sensory science approach. En H. Jelen (Ed.), *Food Flavors. Chemical, Sensory and Technological Properties* (pp. 413-438). Boca Raton, USA: CRC Press.
- Schuh, C., & Schieberle, P. (2006). Characterization of the key aroma compounds in the beverage prepared from Darjeeling black tea: quantitative differences between tea leaves. *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, 54, 916-924.
- Song, H., & Liu, J. (2018). GC-O-MS technique and its applications in food flavor analysis. *Food Research International*, 114, 187-198.
- Söllner, K., & Schieberle, P. (2009). Decoding the key aroma compounds of a Hungarian-type salami by molecular sensory science approaches. *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, 57, 4319-4327.
- Stark, T., Bareuther, S., & Hofmann, T. (2006). Molecular definition of the taste of roasted cocoa nibs (*Theobroma cacao*) by means of quantitative studies and sensory experiments. *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, 54, 5530-5539.
- Steinhaus, P., & Schieberle, P. (2007). Characterization of the key aroma compounds in soy sauce using approaches of molecular sensory science. *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, 55, 6262-6269.
- Vrzal, T., & Olšovská, J. (2019). Sensomics – basic principles and practice. *KvasnyPrumysl*, 65, 166-173.
- Wagner, J., Granvogl, M., & Schieberle, P. (2016). Characterization of the key aroma compounds in raw licorice (*Glycyrrhiza glabra* L.) by means of molecular sensory science. *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, 64, 8388-8396.
- Wagner, J., Schieberle, P., & Granvogl, M. (2017). Characterization of the key aroma compounds in heat-processed licorice (*Succus Liquiritiae*) by means of molecular sensory science. *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, 65, 132-138.

Wang, S.-L., Lin, S.-Y., Du, H.-T., Qin, L., Lei, L.-M., & Chen, D. (2021). An insight by molecular sensory science approaches to contributions and variations of the key odorants in shiitake mushrooms. *Foods*, *10*, 622. Disponible en <https://doi.org/10.3390/foods10030622>

Wu, Q., Zhou, Z., Zhang, Y., Huang, H., Ou, X., & Sun, Y. (2023). Identification of key components responsible for the aromatic quality of Jinmudan black tea by means of molecular sensory science. *Foods*, *12*, 1794. Disponible en <https://doi.org/10.3390/foods12091794>

Xu, K., Zhang, Z., Jiang, K., Yang, A., Wang, T., Xu, L., Li, X., Zhang, X., Meng, F., & Wang, B. (2024). Elucidating the effect of different processing methods on the sensory quality of chestnuts based on multi-scale molecular sensory science. *Food Chemistry*, *431*, 136989. Disponible en <https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2023.136989>

En este artículo no existen conflicto de interes entre los autores.