



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA CHAPINGO

DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA
AGROINDUSTRIAL

POSGRADO EN CIENCIA Y TECNOLOGÍA
AGROALIMENTARIA

**COMPUESTOS BIOACTIVOS EN BEBIDA DE
Coffea arabica L.: IMPACTO DEL TOSTADO Y
REGIÓN**

TESIS

**Que como requisito parcial
para obtener el grado de:**

DOCTOR EN CIENCIAS AGROALIMENTARIAS

Presenta:

LINA XIMENA PARRADO MUÑOZ

Bajo la supervisión de DIANA GUERRA RAMÍREZ, DRA.



Chapingo, Estado de México, mayo de 2026



**COMPUESTOS BIOACTIVOS EN BEBIDA DE *Coffea arabica* L.: IMPACTO
DEL TOSTADO Y REGIÓN**

Tesis realizada por **LINA XIMENA PARRADO MUÑOZ** bajo la supervisión del
Comité Asesor indicado, aprobada por el mismo y aceptada como requisito
parcial para obtener el grado de:

DOCTOR EN CIENCIAS AGROALIMENTARIAS

DIRECTOR:


DRA. DIANA GUERRA RAMÍREZ

ASESOR:


DR. JUAN GUILLERMO CRUZ CASTILLO

ASESOR:


DR. JOSÉ GERVASIO PARTIDA SEDAS

ASESOR:


DR. NELSON GUTIERRÉZ GUZMÁN

LECTOR EXTERNO:


DRA. ALMA LETICIA SAUCEDO YÁÑEZ

CONTENIDO

LISTA DE CUADROS	vi
LISTA DE FIGURAS	vii
DEDICATORIAS.....	ix
AGRADECIMIENTOS	x
DATOS BIOGRÁFICOS	xii
GENERAL ABSTRACT.....	xiv
1. INTRODUCCIÓN GENERAL	15
1.1. Objetivo general	17
1.2. Objetivos específicos.....	17
1.3. Hipótesis.....	17
1.4. Organización de la tesis	18
1.5. Literatura citada	19
2. REVISIÓN DE LITERATURA	21
2.1. Importancia cultural y económica del café.....	21
2.2. El café como alimento funcional	22
2.3. Compuestos fitoquímicos del café	25
2.3.1. Los ácidos clorogénicos (ACG)	25
2.3.2. Degradación de los ácidos clorogénicos en otros fenoles volátiles 27	
2.3.3. Cafeína y trigonelina.....	29
2.3.4. Azúcares del café	31
2.4. Poscosecha del café.....	33
2.5. Almendra de café o café verde.....	35
2.6. Tostado del café	36
2.6.1. Medición de color mediante coordenadas CIE L* a* b*	37
2.6.2. Procesos químicos durante el tostado.....	38

2.7.	Importancia del origen geográfico del café	42
2.7.1.	Altitud del cultivo de café	42
2.7.2.	Clima del cultivo de café.....	43
2.7.3.	La genética del café	43
2.8.	Literatura citada	44
3.	ANÁLISIS FT-IR-ATR INTEGRADO A QUIMIOMETRÍA PARA EVALUAR EL EFECTO DEL TOSTADO DE CAFÉ (<i>Coffea arabica</i> L.)	55
3.1.	Resumen	55
3.2.	Introducción	57
3.3.	Materiales y métodos.....	58
3.3.1.	Material vegetal	58
3.3.2.	Análisis por espectroscopía infrarroja -transformada de Fourier (FT-IR-ATR)	59
3.3.3.	Análisis estadístico multivariable	59
3.4.	Resultados y discusión	60
3.4.1.	Análisis del tostado del café por FT-IR-ATR	62
3.4.2.	Análisis quimiométrico de los espectros FT-IR-ART de cafés verdes y tostados.	65
3.5.	Conclusiones	71
3.6.	Agradecimientos.....	71
3.7.	Literatura citada	72
4.	EFFECTO DEL TOSTADO Y ORIGEN GEOGRÁFICO SOBRE LOS COMPUESTOS BIOACTIVOS EN BEBIDA DE <i>Coffea arabica</i> L.....	76
4.1.	Resumen	76
4.2.	Introducción	78
4.3.	Materiales y métodos.....	79
4.3.1.	Material vegetal	79
4.3.2.	Preparación de las bebidas de café	79

4.3.3.	Análisis fisicoquímico: pH, azúcares totales (AT) y azúcares reductores totales (ART)	80
4.3.4.	Determinación de fenoles totales y capacidad antioxidante (CA) FRAP y ABTS.....	80
4.3.5.	Cuantificación de ácidos clorogénicos (ACG), cafeína (CF) y trigonelina (TG) en bebida de café	81
4.3.6.	Análisis estadístico	81
4.4.	Resultados y discusión	81
4.4.1.	Propiedades fisicoquímicas	81
4.4.2.	Fenoles totales y capacidad antioxidante en bebida de café	86
4.4.3.	Contenido de ácidos clorogénicos (ACG), cafeína (CF) y trigonelina (TG) de la bebida de café	90
4.5.	Conclusiones	95
4.6.	Agradecimientos	95
4.7.	Literatura citada	96
5.	CONCLUSIONES GENERALES	102

LISTA DE CUADROS

Cuadro 1. Análisis de varianza del análisis fisicoquímico de bebidas de café..	82
Cuadro 2. Propiedades fisicoquímicas de la bebida de café para un modelo de interacción entre región de origen y nivel de tueste.....	83
Cuadro 3. Análisis de varianza de las propiedades antioxidantes en bebida de café.	86
Cuadro 4. Propiedades antioxidantes de la bebida de café para un modelo de interacción región de origen y nivel de tueste.	87
Cuadro 5. Análisis de varianza del contenido de bioactivos en bebida de café.	90
Cuadro 6. Análisis de compuestos bioactivos de la bebida de café para un modelo de interacción entre región de origen y nivel de tueste.	92

LISTA DE FIGURAS

Figura 1. Isómeros del ácido clorogénico. Se clasifican en tres grupos principales: los ácidos cafeoilquínicos (CQA), ácidos feruloilquínicos (FQA) y los ácidos dicafeoilquínicos (diCQA)	26
Figura 2. Estructuras de los precursores del ácido clorogénico.....	27
Figura 3. Degradación del ácido clorogénico en otros compuestos fenólicos...	28
Figura 4. Fenoles presentes en los compuestos volátiles del café obtenidos a partir de la degradación de derivados del ácido clorogénico.	29
Figura 5. Estructuras de la cafeína (a) y la trigonelina (b)	30
Figura 6. Oxidación de la D-glucosa (azúcar reductor) en presencia del ión Cu^{2+}	32
Figura 7. Hidrólisis de la sacarosa y liberación de azúcares reductores, glucosa y fructosa, que contienen hidroxilo anomérico libre.	33
Figura 8. Defectos del café (Osorio, 2021)	35
Figura 9. Curva de tostado del café	37
Figura 10. Precursores en la formación del sabor del café durante la etapa de tostado (Pereira et al., 2021).	40
Figura 11. Mecanismo de las etapas iniciales de la reacción de Maillard (Pereira et al., 2021).....	41
Figura 12. Espectros FT-IR-ATR de muestras de café verde y café tostado en grano molido (a) y estándares químicos de cafeína, ácido clorogénico y trigonelina (b-d).....	61
Figura 13. Espectro FT-IR-ATR de muestras de café de diferentes regiones: Neiva-Huila, Colombia (C), Huatusco-Veracruz, México (H) y Ecatlán-Puebla, México (P). Cuatro (4) tratamientos de nivel de tueste (T_1 : tueste bajo, T_2 : tueste medio, T_3 : tueste alto, V: café verde).....	63
Figura 14. Gráfico de PCA a partir de espectros FT-IR-ATR para a) cafés tostados y verdes, b) cafés tostados. T_1 : tueste bajo, T_2 : tueste medio, T_3 : tueste alto y V:	

café verde.....	66
Figura 15. Gráfico de PLS-DA a partir de espectros FT-IR-ATR para cafés tostados y verdes. a) Gráfico de marcadores (score plot) en 3D. b) Análisis Biplot del modelo PLS-DA.	67
Figura 16. Gráfico de componentes (a) y test estadístico de permutación del modelo PLS-DA de los espectros FT-IR-ATR para análisis de cáfes verdes y tostados (b).	68
Figura 17. Ranking de variables de importancia en el modelo PLS-DA de los espectros FT-IR-ATR para cafés verdes y tostados	69
Figura 18. Análisis de clúster para agrupamiento de muestras (a) y variables (b) mediante un análisis de Hapmap de los espectros FT-IR.....	70
Figura 19. Cuantificación de cafeína en bebidas de café. T1: tueste bajo, T2: tueste medio, T3: tueste alto, V: café sin tostar. C: Neiva-Huila, Colombia, P: Ecatlán-Puebla, México, H: Huatusco-Veracruz, México.....	94

DEDICATORIAS

A Dios todopoderoso,
a quién encomiendo este logro.

A mi esposo Carlos y a mi hermosa bebé Ximena,
por ser mi fuerza, mi refugio y los amores más grandes e importantes de mi
vida.

A mis padres, Ledy y Fermín, y a mis hermanos, Esteban y Ronaldo,
por su amor incondicional, su apoyo constante, su amor real, por ser mi motor
de vida y mi lugar seguro.

AGRADECIMIENTOS

A México, país que me abrió sus puertas y me permitió crecer académica y personalmente. Que me acogió como extranjera y me permitió construir un camino profesional, un hogar amoroso y un propósito más en la vida.

A la Universidad Autónoma Chapingo (UACH), que ha sido mi casa de formación desde la Maestría y ahora el Doctorado. Mi profundo agradecimiento por hacerme parte de esta honorable y prestigiosa institución.

A la SECIHTI, por el apoyo otorgado a través de la beca académica, que hizo posible mi permanencia y dedicación al posgrado. Fue un soporte fundamental para obtener este logro.

Al Posgrado de Ciencia y Tecnología Agroalimentaria del Departamento de Ingeniería Agroindustrial de la UACH, específicamente al Doctorado en Ciencias Agroalimentarias (DCA), por su enseñanza y conocimiento académico, su excelencia formativa y por guiar mi desarrollo científico.

A la Dra. Diana Guerra Ramírez, por su orientación, paciencia y acompañamiento académico. Su guía constante, confianza y apoyo humano marcaron profundamente este proceso y me dejaron una huella imborrable que llevaré por siempre en mi corazón.

Al Dr. Juan Guillermo Cruz Castillo y al Dr. José Gervasio Partida Sedas, por sus valiosas observaciones, su disponibilidad y su acompañamiento en cada etapa del proyecto como asesores de este trabajo.

Al Dr. Nelson Gutiérrez Guzmán por su apoyo incondicional desde mis inicios como investigadora, abriéndome las puertas al mundo científico; fue mi director de tesis de pregrado y hoy asesor de mi tesis doctoral, infinitas gracias.

Al Laboratorio de Evaluación de la Calidad de Café del Centro Regional Universitario Oriente (CRUO), al Laboratorio del Centro Surcolombiano de Investigación en Café (CESURCAFÉ), a los Laboratorios de Productos Naturales

y Alimentos Funcionales de la UACH, por su apoyo material, técnico, de infraestructura y humano.

A la Dra. Alma Leticia Saucedo Yáñez del Laboratorio Nacional de Investigación y Servicio Agroalimentario y Forestal (LANISAF), por su orientación experta en quimiometría que enriqueció esta investigación.

Al Dr. Ramón Marcos Soto Hernández y al M.C. Rubén San Miguel Chávez del Laboratorio de Fitoquímica del Colegio de Postgraduados, por el apoyo brindado en mi estancia de investigación, por su disposición y contribución invaluable al desarrollo experimental de este trabajo.

DATOS BIOGRÁFICOS



Datos personales

Nombre: Lina Ximena Parrado Muñoz

Fecha de nacimiento: 17 abril 1995

Lugar de nacimiento: Cumaral, Meta, Colombia

CURP: PAML950417MNERXN01

Profesión: Ingeniera Agrícola

Maestría: Maestría en Ciencias en Biotecnología agrícola

Cédula de maestría: 12959724

Desarrollo académico

Bachiller: Colegio Nacionalizado José Antonio Galán, Colombia.

Licenciatura: Universidad Surcolombiana, Colombia.

Maestría: Universidad Autónoma Chapingo, México.

RESUMEN GENERAL

Compuestos bioactivos en bebida de *Coffea arabica* L.: impacto del tostado y región

El café es un alimento funcional, y factores como el nivel de tostado y la región de origen son clave para comprender la calidad funcional de la bebida. El objetivo de este trabajo fue analizar el efecto del tostado y región mediante el análisis de compuestos bioactivos en la bebida de *Coffea arabica* L., de Neiva-Huila, Colombia (C), Huatusco-Veracruz, México (H) y Ecatlán-Puebla, México (P), sometidos a tostado bajo (T_1), medio (T_2), alto (T_3) y café verde (V). Los granos de café fueron analizados por FT-IR-ATR y en las bebidas de café (0.055 g mL^{-1}) se determinaron: pH, azúcares totales (AT), azúcares reductores totales (ART), fenoles totales, capacidad antioxidante (CA: FRAP y ABTS), concentraciones de ácido clorogénico (ACG), cafeína (CF) y trigonelina (TG). En las bandas resultantes de los espectros FT-IR-ATR se encontró la intensificación y atenuación en los grupos funcionales y huella dactilar del café, confirmando la diferencia entre los granos tostados y verdes. Las bandas espectrales más importantes durante la diferenciación (987 , 983 , 991 y 980 cm^{-1}) afectadas por el proceso térmico, siendo la degradación de azúcares y fenólicos, los procesos internos de mayor relevancia. En las bebidas se identificó la degradación de compuestos, con mejores resultados en tostados para bebidas de café de HT_1 (pH: 4.46 ± 0.12 , AT: 2.47 ± 0.24 , fenoles totales: $2.02 \pm 0.12 \text{ mg EAG mL}^{-1}$ y ACG: $1,514.07 \pm 532.76 \text{ } \mu\text{g mL}^{-1}$); en bebidas de CV (fenoles totales: $1.42 \pm 0.09 \text{ mg EAG mL}^{-1}$ y ACG: $1,768.34 \pm 395.10 \text{ } \mu\text{g mL}^{-1}$) y en bebidas de PT_3 ($565.06 \text{ } \mu\text{g mL}^{-1}$) y mayor TG en café verde ($337.31 \pm 34.08 \text{ } \mu\text{g mL}^{-1}$). Una ligera variación pudo afectar los antioxidantes en los cafés tostados de Colombia por el uso de diferentes equipos tostadores. Finalmente, se evidenció que la interacción entre el nivel de tueste y región de origen determinó en gran medida la calidad funcional de la bebida de café.

Palabras clave: azúcares, nivel de tueste; origen geográfico; compuestos fenólicos; propiedades antioxidantes.

GENERAL ABSTRACT

Bioactive compounds in *Coffea arabica* L. brew: impact of roasting and geographical origin

Coffee is a functional food, and factors such as roast level and region of origin are key to understanding the functional quality of the beverage. The objective of this work was to analyze the effect of roasting and region through the analysis of bioactive compounds in the beverage of *Coffea arabica* L., from Neiva-Huila, Colombia (C), Huatusco-Veracruz, Mexico (H), and Ecatlán-Puebla, Mexico (P), subjected to light (T_1), medium (T_2), and dark roasting (T_3), as well as green coffee (V). The coffee beans were analyzed by FT-IR-ATR, and the following parameters were determined in the coffee beverages (0.055 g mL^{-1}): pH, total sugars (TS), total reducing sugars (TRS), total phenols, antioxidant capacity (AC: FRAP and ABTS), and concentrations of chlorogenic acid (CGA), caffeine (CF), and trigonelline (TG). In the resulting bands of the FT-IR-ATR spectra, the intensification and attenuation of functional groups and the coffee "fingerprint" were found, confirming the difference between roasted and green beans. The most important spectral bands during differentiation (987 , 983 , 991 , and 980 cm^{-1}) were affected by the thermal process, with the degradation of sugars and phenolics being the most relevant internal processes. In the beverages, the degradation of compounds was identified, with better results in roasts for coffee beverages from HT_1 (pH: 4.46 ± 0.12 , TS: 2.47 ± 0.24 , total phenols: $2.02 \pm 0.12 \text{ mg GAE mL}^{-1}$, and CGA: $1,514.07 \pm 532.76 \text{ } \mu\text{g mL}^{-1}$); in CV beverages (total phenols: $1.42 \pm 0.09 \text{ mg GAE mL}^{-1}$ and CGA: $1,768.34 \pm 395.10 \text{ } \mu\text{g mL}^{-1}$); and in PT_3 beverages ($565.06 \text{ } \mu\text{g mL}^{-1}$), with higher TG in green coffee ($337.31 \pm 34.08 \text{ } \mu\text{g mL}^{-1}$). A slight variation may have affected the antioxidants in the roasted coffees from Colombia due to the use of different roasting equipment. Finally, it was evidenced that the interaction between roast level and region of origin largely determined the functional quality of the coffee beverage.

Keywords: antioxidant properties; geographic origin; phenolic compounds; roast level; sugars.

1. INTRODUCCIÓN GENERAL

El café es una de las bebidas más consumidas a nivel mundial y constituye una fuente de compuestos bioactivos con potencial nutracéutico (Vilas-Boas *et al.*, 2020; Wu *et al.*, 2022). Durante la extracción del café en agua caliente para su consumo, se liberan diversos componentes solubles, incluidos pigmentos y moléculas bioactivas, entre las que se encuentran principalmente la cafeína y la trigonelina, pero de forma más amplia, compleja y abundante, los compuestos fenólicos, incluidos los ácidos clorogénicos (ACG). La composición química de estos compuestos bioactivos está influenciada por la variedad de café y el nivel de tueste, mientras que el contenido de compuestos en la bebida depende del procedimiento de preparación: cantidad y tamaño del grano de café, cantidad y temperatura del agua, y tiempo de extracción (Yildirim *et al.*, 2023; Maiyah *et al.*, 2026). Los compuestos presentes en las bebidas de café son de gran interés en la constante búsqueda de alimentos funcionales, debido a sus propiedades antioxidantes, que ayudan a mitigar el estrés oxidativo y el riesgo de enfermedades crónicas (Muscolo *et al.*, 2024).

El proceso de tostado es una de las fases más importantes de procesamiento del café; en ella se modifica la composición química del grano (Pinheiro *et al.*, 2021). A medida que avanza el tueste, los aminoácidos y azúcares reductores participan en las reacciones de Maillard, caramelización y la degradación de Strecker, mediante la cual los aminoácidos y dicetonas se transforman en aldehídos, cetonas y dióxido de carbono produciendo compuestos con aromas frutales y florales. Además, la sacarosa se degrada significativamente al sobrepasar los 160 °C (Aguiar *et al.*, 2016). Estas transformaciones originan productos de bajo peso molecular como las melanoidinas que representan aproximadamente el 32 % de los compuestos solubles en la infusión de café y contribuyen a su capacidad

antioxidante, además de la generación de diversos compuestos volátiles responsables del aroma y sabor de la bebida (Ripper *et al.*, 2020). Sin embargo, el incremento del nivel de tostado disminuye el contenido de ácidos clorogénicos, los cuales sufren lactonización, epimerización e isomerización, (Freitas *et al.*, 2023; Sruthi *et al.*, 2021; Worku *et al.*, 2023) con pérdidas estimadas del 8 al 10 % por cada 1 % de pérdida de masa seca (Clifford, 2017), transformándose en compuestos de menor peso molecular que se integran a las melanoidinas (Farah *et al.*, 2012). Estas modificaciones químicas no solo afectan el color y el aroma, sino que también influyen en el contenido de los compuestos bioactivos por degradación de unos y formación de otros, un balance importante en la química de la bebida de café.

Por otro lado, el origen geográfico del café determina la composición fitoquímica inicial del grano, al integrar variables ambientales como la altitud, el clima, la humedad y la composición del suelo que influyen en la bebida final (de Melo Pereira *et al.*, 2019). Se ha observado que el café cultivado a mayor altitud presenta concentraciones más elevadas de fenólicos y trigonelina (Ribeiro *et al.*, 2016), mientras que el cultivo bajo sombra puede favorecer una maduración uniforme y mejorar el perfil sensorial (Worku *et al.*, 2023).

Aunque numerosos estudios han caracterizado la degradación de fitoquímicos y antioxidantes en el grano de café, los estudios en bebidas son escasos, particularmente para las regiones seleccionadas en este estudio. Bajo esta perspectiva, en este trabajo primero se analizaron los granos de café con diferente nivel de tostado y origen geográfico mediante la técnica FT-IR, y posteriormente se analizaron las bebidas de café preparadas con los granos de café previamente molidos, para determinar cómo influye el proceso de tostado y el origen geográfico en la composición de compuestos bioactivos, explicar su variabilidad y orientar acerca de decisiones tecnológicas y productivas.

1.1. Objetivo general

Analizar el efecto del nivel de tostado y el origen geográfico sobre las propiedades fisicoquímicas, fitoquímicas y antioxidantes en bebidas de café (*Coffea arabica* Lind.) mediante técnicas espectroscópicas, espectrofotométricas y cromatográficas, para identificar la variabilidad de los compuestos bioactivos asociada a los factores de estudio.

1.2. Objetivos específicos

- Identificar las bandas características asociadas a los compuestos bioactivos (ácidos clorogénicos, cafeína y trigonelina), mediante espectroscopía infrarroja por transformada de Fourier (FT-IR) en tratamientos de cafés verdes y tostados, para determinar las variaciones espectrales que permitan caracterizar sus diferencias por cambios en el nivel de tueste.
- Caracterizar las propiedades fisicoquímicas, la capacidad antioxidante y la concentración de compuestos bioactivos clave en bebidas de café obtenidas a partir de granos de distintas regiones geográficas y sometidos a diferentes grados de tueste, mediante técnicas espectroscópicas y cromatográficas, con el fin de evaluar el efecto del tueste y su interacción con el origen en la obtención de bebidas con mayor potencial funcional.”

1.3. Hipótesis

El nivel de tostado y el origen geográfico influyen en la composición química y la actividad antioxidante de la bebida de café. Se espera que los cafés con tuestes bajos conserven el mejor balance entre pérdida y ganancia de compuestos químicos de interés funcional manteniendo mayor contenido de fenólicos totales, ácidos clorogénicos (ACG) y azúcares reductores totales (ART). Así mismo, se prevé menor acidez en cafés de tuestes altos con una pérdida alta de fenoles,

azúcares totales (AT), ACG y trigonelina. En cafés colombianos se espera observar mayor contenido de fenólicos en café verde, menor pH y mayor contenido de azúcares, y en cafés de México mayor contenido de trigonelina. Finalmente, se estima que la cafeína sea un compuesto altamente estable frente al aumento del nivel de tueste, con mayor contenido en cafés de México.

1.4. Organización de la tesis

La presente tesis se estructura en cinco capítulos que integran de manera progresiva los fundamentos teóricos, la metodología experimental y los resultados obtenidos a lo largo del estudio.

El **Capítulo 1** aborda la introducción general de este estudio, donde se presenta el contexto científico y tecnológico de la investigación, la justificación y los objetivos, generales y específicos, además de la hipótesis que orienta el desarrollo de la tesis.

El **Capítulo 2** es la revisión de literatura, que reúne los antecedentes teóricos y científicos relacionados con la composición fitoquímica del café, los efectos del tostado y el origen geográfico sobre sus compuestos bioactivos: cafeína, trigonelina, ácidos clorogénicos, azúcares y fenoles en general.

El **Capítulo 3** es el primer artículo de la tesis, titulado “Espectroscopía infrarroja integrada a quimiometría para el análisis del efecto del tostado en café (*Coffea arabica* L.)”, en el cual se evalúan los cambios funcionales del café verde y tostado mediante FT-IR, apoyados en análisis quimiométricos para la interpretación de las variaciones espectrales asociadas al nivel de tueste.

El **Capítulo 4** es el segundo artículo titulado “Efecto del tostado y origen geográfico sobre los compuestos bioactivos en bebida de café”, que aborda la influencia del nivel de tueste y la región de origen sobre los parámetros fisicoquímicos como el pH, azúcares totales (AT), reductores totales (ART); así como las propiedades antioxidantes y la concentración de compuestos bioactivos

clave en las bebidas de *Coffea arabica* L. sometidas a diferentes tratamientos de tueste.

El **Capítulo 5** reúne las conclusiones generales de la tesis e integra de manera sintética los hallazgos más relevantes de la investigación, destacando las implicaciones científicas y tecnológicas del estudio y las perspectivas futuras orientadas al aprovechamiento del café como alimento funcional.

1.5. Literatura citada

- Aguiar J, Estevinho BN, and Santos L (2016) Microencapsulation of natural antioxidants for food application – the specific case of coffee antioxidants—a review. *Trends in Food Science & Technology*. 58: 21–39. <https://doi.org/10.1016/j.tifs.2016.10.012>.
- Clifford MN, Jaganath IB, Ludwing IA, and Crozier A (2017) Chlorogenic acids and the acyl-quinic acids: discovery, biosynthesis, bioavailability and bioactivity. *Natural Product Reports* 34(12): 1391-1421. <https://doi.org/10.1039/c7np00030h>.
- Farah (2012) Coffee Constituents. YF Chu (Ed.), *Coffee: Emerging Health Effects and Disease Prevention* (4th.ed.), John Wiley & Sons, London, UK. 21-58. <https://doi.org/10.1002/9781119949893.ch2>.
- Freitas VV, Rodrigues LLB, Castro GAD, dos Santos MH, Vidigal MCTR, Fernandes SA, and Stringheta PC (2023). Impact of different roasting conditions on the chemical composition, antioxidant activities, and color of *Coffea canephora* and *Coffea arabica* L. samples. *Heliyon* 9(9): 19580. <https://doi.org/10.1016/j.heliyon.2023.e19580>.
- Maiyah N, Kerdpi boon S, Kerr WL, Klaypradit W, Smithisukul C, Supapvanich S (2026) Impact of roasting levels and brewing cycles on bioactive compounds in spent coffee grounds. *Food Chemistry:X* (34): 103661. <https://doi.org/10.1016/j.fochx.2026.103661>.
- Muscolo A, Mariateresa O, Giulio T, Mariateresa R (2024). Oxidative stress: The role of antioxidant phytochemicals in the prevention and treatment of diseases. *International Journal of Molecular Sciences*, 25 (6):3264. <https://doi.org/10.3390/ijms25063264>.
- Pinheiro PF, Pinheiro CA, Osório VM, Pereira LL (2021) Chemical Constituents of Coffee. In: Louzada Pereira, L., Rizzo Moreira, T. (eds) *Quality Determinants in Coffee Production*. Food Engineering Series. Springer, Cham. https://doi.org/10.1007/978-3-030-54437-9_5

- Ribeiro D E, Borem FM, Cirillo MA, Prado MVB, Ferraz VP, Alves HMR, and Taveira JDS (2016) Interaction of genotype, environment, and processing in the chemical composition expression and sensorial quality of Arabica coffee. *African Journal of Agricultural Research* 11(27): 2412–2422. <https://doi.org/10.5897/AJAR2016.10832>.
- Ripper B, Kaiser CR y Perrone D (2020). Use of NMR techniques to investigate the changes in the chemical composition of coffee melanoidins. *Journal of Food Composition and Analysis* 87:103399. <https://doi.org/10.1016/j.jfca.2019.103399>.
- Sruthi NU, Premjit Y, Pandiselvam R, Kothakota A, and Ramesh V (2021). An overview of conventional and emerging techniques of roasting: Effect on food bioactive signatures. *Food Chemistry* 348. <https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2021.129088>. article 129088.
- Vilas-Boas A A, Oliveira A, Jesus D, Rodrigues C, Figueira C, Gomes A, and Pintado M (2020). Chlorogenic acids composition and the impact of in vitro gastrointestinal digestion on espresso coffee from a single-dose capsule. *Food Research International* 134:109223. <https://doi.org/10.1016/j.foodres.2020.109223>.
- Worku M, Astatkie T y Boeckx P (2023). The quality and biochemical composition of Ethiopian coffee varied with growing region and locality. *Journal of Food Composition and Analysis* 115: 105015 <https://doi.org/10.1016/j.jfca.2022.105015>.
- Wu H, Gu H, Amrit BK, Nawaz MA, Barrow CJ, Dunshea FR y Suleria HAR (2022). Effect of processing on bioaccessibility and bioavailability of bioactive compounds in coffee beans. *Food Bioscience* 46. <https://doi.org/10.1016/j.fbio.2021.101373>.
- Yildirim S, Demir E, Gok I, Aboul-Enein HY (2023) Use of electrochemical methods to determine the effect of brewing techniques (espresso, Turkish, and filter coffee) and roasting levels on the antioxidant capacity of coffee beverage. *Journal of Food Science and Technology* 60(7): 1933-1943, 10.1007/s13197-022-05460-x

2. REVISIÓN DE LITERATURA

2.1. Importancia cultural y económica del café

Entre las especies del café *Coffea arabica* L. es la más representativa y utilizada para la preparación de bebidas de café cuyas propiedades, estimulantes, y funcionales han tomado una gran relevancia (Abreu *et al.*, 2024). *Coffea arabica* L. es una especie de gran importancia económica, especialmente dentro de la familia *Rubiaceae*, y constituye un alimento altamente comercializado en el mundo. Durante décadas su producción y consumo han tenido un papel cultural, económico y científico, siendo así, la bebida más consumida globalmente, después del agua y el segundo producto más comercializado, después del petróleo (Acquaticci *et al.*, 2023), por lo que representa una importante fuente de ingresos para numerosos países productores desde principios del siglo XX.

El consumo del café tiene una tradición milenaria, remontándose a África, y persiste como bebida principal para iniciar y sostener las actividades diarias (Ferreira *et al.*, 2019; Oliveira *et al.*, 2018). Su mercado se ha consolidado gracias a la mejora en la calidad, las prácticas agronómicas, la diversificación de productos y su asociación con algunos beneficios para la salud (Desai *et al.*, 2020). No solo es un producto económico global, sino también un alimento con múltiples formas de comercialización: café molido fresco, café instantáneo, mezclas, cápsulas y descafeinado (Gosalvitr *et al.*, 2023).

El cultivo del café se produce principalmente en regiones tropicales y subtropicales del “Cinturón Cafetero” (30°S-30°N), siendo *Coffea arabica* L. (arábica) y *Coffea canephora* (robusta) las especies más comercializadas y que representan más del 99 % de la producción mundial. *Coffea arabica* L. es el café más valorado por su calidad, con alrededor del 75 % de la producción total (Cao *et al.*, 2023). Según la Organización Internacional del Café (ICO), Sudamérica concentra gran parte de la producción mundial, con Brasil como líder indiscutible,

le siguen Vietnam, Colombia e Indonesia (ICO, 2022), seguidos por Etiopía, Uganda, Honduras, India, Perú y México (Regazzoni *et al.*, 2016).

La producción mundial de café alcanzó los 171.3 millones de sacos entre los años 2022 y 2023, con un consumo estimado de 3,500 millones de tazas diarias (ICO, 2023; Santos *et al.*, 2021). Según la ICO (2023), se estimó que la tasa de crecimiento de consumo promedio fue del 5 % anual. Del mismo modo, los precios del café verde mostraron un alza en enero 2024 con un promedio de 1.75 USD por libra según el índice compuesto mensual de la ICO (2024).

Estas cifras muestran cómo la industria del café continúa en expansión, impulsada por nuevas tendencias y avances tecnológicos que permiten superar desafíos relacionados con la calidad del grano. Cada vez cobra mayor valor el café de origen único y de alta calidad, tendencia que se ve proyectada con fuerza hacia el futuro para la calidad funcional del café como alimento.

2.2. El café como alimento funcional

El café es una matriz química compleja que contiene más de 2,000 compuestos químicos como carbohidratos, fibras, compuestos nitrogenados, lípidos, minerales, ácidos y ésteres (Abreu *et al.*, 2024). De especial importancia, se encuentran los ácidos clorogénicos (ACG), la cafeína (CF) y la trigonelina (TG) (Sarraguça *et al.*, 2016; Wu *et al.*, 2022), que han mostrado un papel preventivo frente a diversas enfermedades degenerativas comunes en la sociedad moderna, razón por la cual se considera al café como una fuente natural de nutraceuticos (Macheiner *et al.*, 2019; Shahinfar *et al.*, 2021).

Los ACG se relacionan con efectos antioxidantes, antiinflamatorios, anticancerígenos, antimutagénicos, antihipertensivos, hepatoprotectores, cardioprotectores y neuroprotectores, además de mostrar potencial antibacteriano, antidiabético, antiobesidad y prebiótico (Liang y Kitts, 2016); además, junto con la cafeína, los ACG reducen el riesgo de diabetes *mellitus tipo*

2 (Baspinar *et al.*, 2017).

La cafeína, por su parte, es un compuesto muy famoso en la bebida, que actúa como estimulante del sistema nervioso central, pero con otros alcances importantes desde el punto de vista funcional como, favorecedor en la circulación sanguínea y la respiración, lo que se traduce en efectos como la mejora del estado de ánimo, el rendimiento y la sensación de alerta (Soares *et al.*, 2017; Golovinskaia y Wang, 2023). Además, puede promover la actividad del sistema GABAérgico, contribuyendo al equilibrio entre excitación y relajación (Kwon *et al.*, 2015). En relación con la obesidad, la cafeína puede ser altamente favorecedora en la pérdida de peso, al aumentar el gasto energético y reducir la ingesta calórica, por lo que muchos deportistas optan por el consumo de esta bebida (Larsen *et al.*, 2018). Aunque los beneficios de la cafeína son variados, también existe el riesgo de la sensibilidad individual a este compuesto que exige un consumo moderado en las personas que lo padecen (Poole *et al.*, 2017).

Diversos estudios sobre el consumo de la bebida desde el punto de vista nutricional han estudiado el balance favorable de esta, obteniendo como resultado que bebidas con mayor concentración de compuestos fenólicos y ACG, pero asociadas a menor contenido de cafeína son ideales para su consumo regular (Anisa *et al.*, 2017).

La trigonelina es un compuesto predominante en la bebida que posee propiedades importantes como las antidiabéticas y neuroprotectoras, además de mejorar la memoria en pacientes con Alzheimer (Gökçen y Şanlıer, 2019; Torres-Collado *et al.*, 2021). Este compuesto también se transforma en vitamina B3 durante el tostado; esta vitamina es importante para los humanos y ayuda a mantener la salud celular y proteger el ADN, además de contribuir a reducir los niveles de colesterol, ayudar a controlar la diabetes y prevenir enfermedades como cataratas, aterosclerosis y Alzheimer. La deficiencia de niacina puede desencadenar la aparición de pelagra, una afección grave que causa

oscurecimiento de la piel, diarrea severa y demencia (Trugo, 2003; Zhou *et al.* 2012; Garg 2016). La trigonelina tiene una toxicidad baja en comparación con la cafeína, actuando principalmente sobre el sistema nervioso central, la secreción biliar y el intestino (Saldaña *et al.* 1997).

Otros metabolitos del café también aportan efectos funcionales. Las melanoidinas muestran capacidad antioxidante, antimicrobiana y posibles efectos prebióticos (Sarraguça *et al.*, 2016). La vitamina E (tocoferoles y tocotrienoles) y los diterpenos poseen propiedades antioxidantes, antiinflamatorias, anticancerígenas y contribuyen a la estimulación de los mecanismos antioxidantes intracelulares (Park *et al.*, 2016; Macheiner *et al.*, 2019).

Según diversos estudios, la bebida de café se ha consolidado como funcional; el consumo de 2 a 4 tazas diarias se asocia con la disminución de adquirir enfermedades cardiovasculares, *diabetes tipo 2*, obesidad, enfermedad de Parkinson, Alzheimer y diversos tipos de cáncer (Jeszka-Skowron *et al.*, 2016; Poole *et al.*, 2017; Gökçen y Şanlıer, 2019; Torres-Collado *et al.*, 2021). Un metaanálisis reportó una disminución del 10 % en la incidencia de *diabetes tipo 2* por cada taza adicional consumida (Bi *et al.*, 2023). Otemuyiwa *et al.* (2017) demostraron una reducción del riesgo de enfermedades relacionadas con el estrés oxidativo. Muhammad *et al.* (2019) han documentado que el consumo de café está relacionado con la disminución del peso, el índice de masa (IMC) y la grasa corporal. Según Flores *et al.* (2000), estudios epidemiológicos recientes han encontrado una posible asociación entre el beneficio de una ingesta diaria moderada de café y una menor incidencia de cirrosis y suicidio entre adultos, así como una incidencia significativamente menor de la enfermedad de Parkinson. No obstante, la relación entre café y salud no es lineal. Mientras el consumo moderado se asocia con una reducción del 15 % en el riesgo cardiovascular (Rodríguez y López, 2018), ingestas superiores a 6 tazas pueden incrementar el

riesgo (Zhou y Hyppönen, 2019), debido a que las respuestas individuales pueden variar, y el consumo excesivo tiene efectos adversos (Poole *et al.*, 2017; Shahinfar *et al.*, 2021).

Esta revisión subraya, por tanto, la importancia de continuar profundizando en el estudio sobre la bebida y sus compuestos funcionales que son la forma en la que los consumidores acceden y se benefician de estos compuestos funcionales.

2.3. Compuestos fitoquímicos del café

2.3.1. Los ácidos clorogénicos (ACG)

Los ACG del café forman parte de un grupo más amplio de compuestos fenólicos del café (Chaichi *et al.*, 2020). Se clasifican en tres grupos principales mostrados en la Figura 1, los ácidos cafeoilquínicos (CQA: 3-CQA, 4-CQA y 5-CQA), los ácidos dicafeoilquínicos (diCQA: 3,4-diCQA, 3,5-diCQA y 4,5-diCQA) y ácidos feruloilquínicos (FQA: 3-FQA, 4-FQA y 5-FQA) (Vilas-Boas *et al.*, 2020). Los ACG se encuentran en cantidades relativamente altas en el café y confieren sabores y aromas característicos a la bebida (Vilas-Boas *et al.*, 2020; Munyendo *et al.*, 2021). En la (Figura 2) se muestran los precursores de los ACG; su estructura química está formada por ésteres de ácido (-)-quínico con una o dos moléculas de ácidos transcinámicos como el cafeico, ferúlico o *p*-cumárico (Poisson *et al.*, 2017). Un grano típico de café verde arábica contiene alrededor de 45 derivados diferentes de ácidos clorogénicos en forma de series de regioisómeros (Alcântara *et al.*, 2025).

Los CQA, diCQA y FQA representan la mayor parte de los ACG en los granos de café (80 %, 15 % y 5 %, respectivamente) en *Coffea arabica* L. (Poltronieri *et al.*, 2016). Estudios sobre isómeros específicos de ACG mostraron que el 5-CQA era predominante (Ribeiro *et al.*, 2016) y se encontraba principalmente en cerezas inmaduras, mientras que otros como el 3-CQA y 4-CQA aumentaban progresivamente durante la maduración.

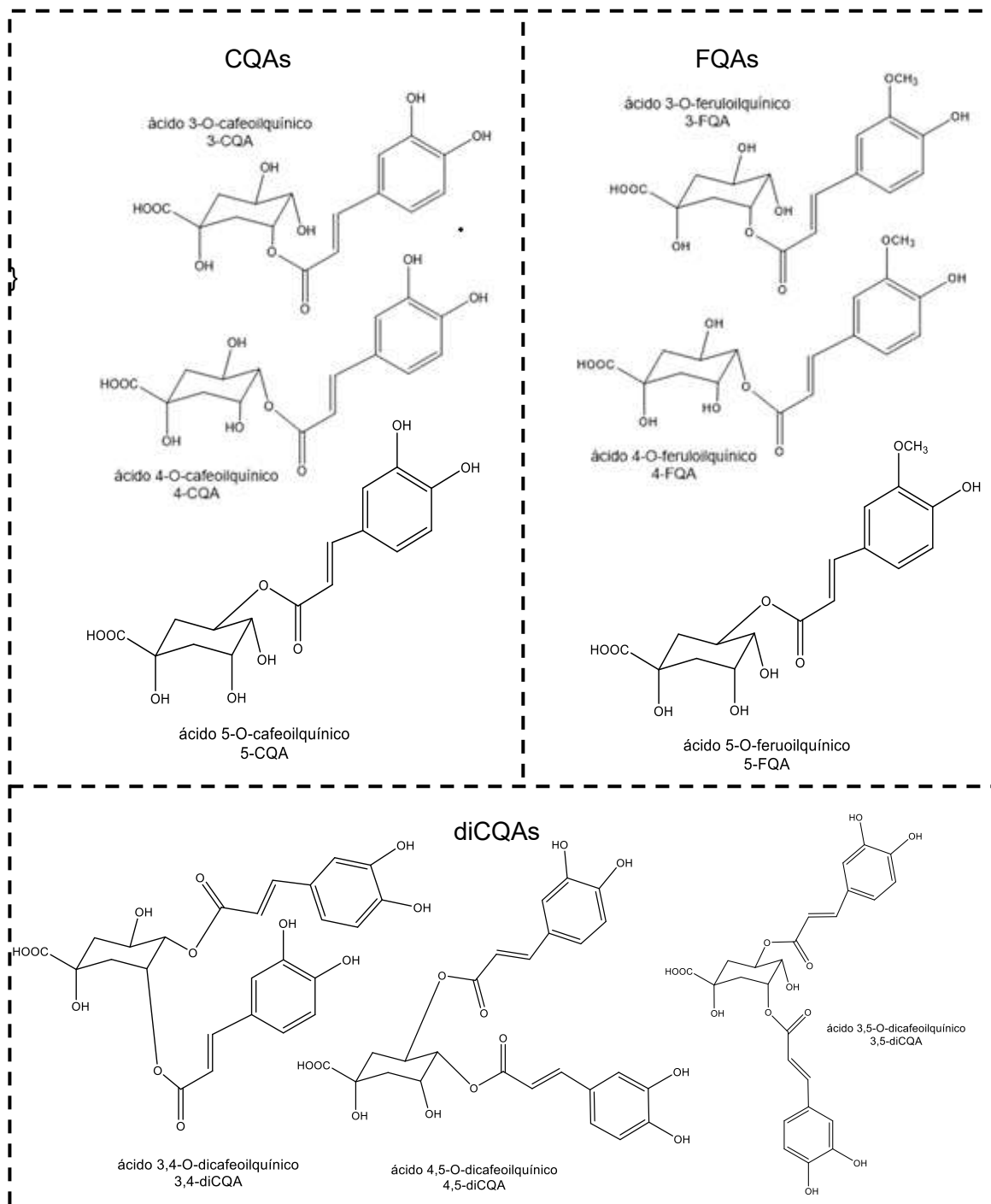


Figura 1. Isómeros del ácido clorogénico. Se clasifican en tres grupos principales: los ácidos cafeoilquínicos (CQA), ácidos feruloilquínicos (FQA) y los ácidos dicafeoilquínicos (diCQA)

Los ACG influyen directamente en las propiedades sensoriales de la infusión, aportando amargor, astringencia y acidez (Rao y Fuller, 2018). Sin embargo, altos niveles de ciertas subclases de ACG, como los ácidos cafeoilquínicos y feruloilquínicos, pueden generar sabores indeseables, probablemente debido a la degradación y a los productos de oxidación formados antes del tueste (Regazzoni *et al.*, 2016).

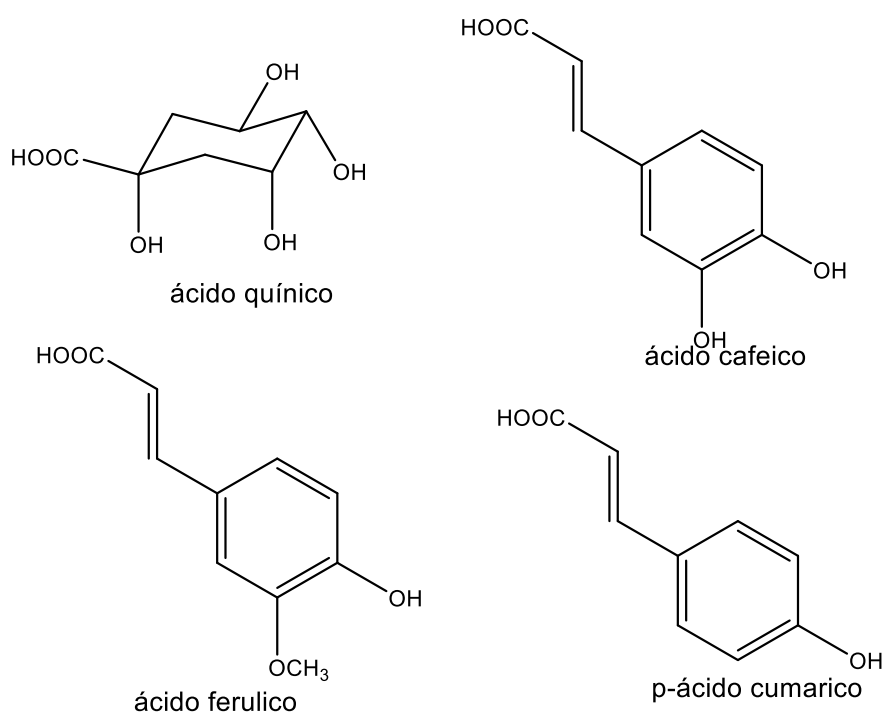


Figura 2. Estructuras de los precursores del ácido clorogénico.

2.3.2. Degradación de los ácidos clorogénicos en otros fenoles volátiles

Durante el tostado, los ácidos clorogénicos experimentan una notable degradación, generando compuestos derivados como ácido cafeico, lactonas clorogénicas y otros fenoles, formados principalmente a través de reacciones de Maillard y Strecker (Pinheiro *et al.*, 2021). Estos productos contribuyen al incremento del amargor, la astringencia y el aroma característicos del café tostado (Ayelign y Sabally, 2013). La principal vía de formación de compuestos

fenólicos en los cafés tostados es la degradación de los ácidos fenólicos libres derivados de los ácidos clorogénicos, que son: ácido *p*-cumárico, ferúlico, quínico y cafeico. El contenido de fenoles libres es pequeño en los granos de café verde (Pinheiro *et al.*, 2021).

Durante el tostado se produce un aumento en el contenido de compuestos fenólicos de carácter volátil, cuya formación está directamente relacionada con la degradación de los ácidos clorogénicos (Figura 3).

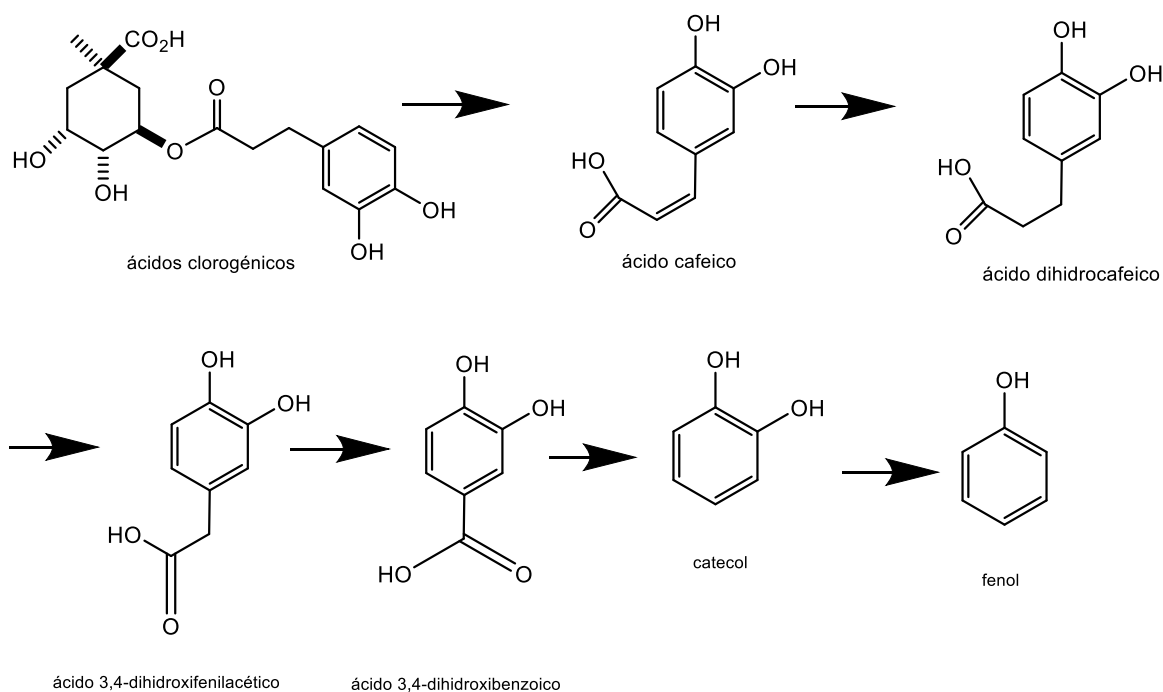


Figura 3. Degradación del ácido clorogénico en otros compuestos fenólicos.

Los fenoles presentes en la mayoría del café tostado son el 4-vinilguayacol (8–20 mg/kg de café tostado), el guayacol (2–3 mg/kg) y el fenol (1.2–2.2 mg/kg). Además de estos tres componentes, los isómeros del cresol (orto, meta y para) también forman parte del grupo de fenoles principales del café tostado (Moreira *et al.*, 2000) (Figura 4).

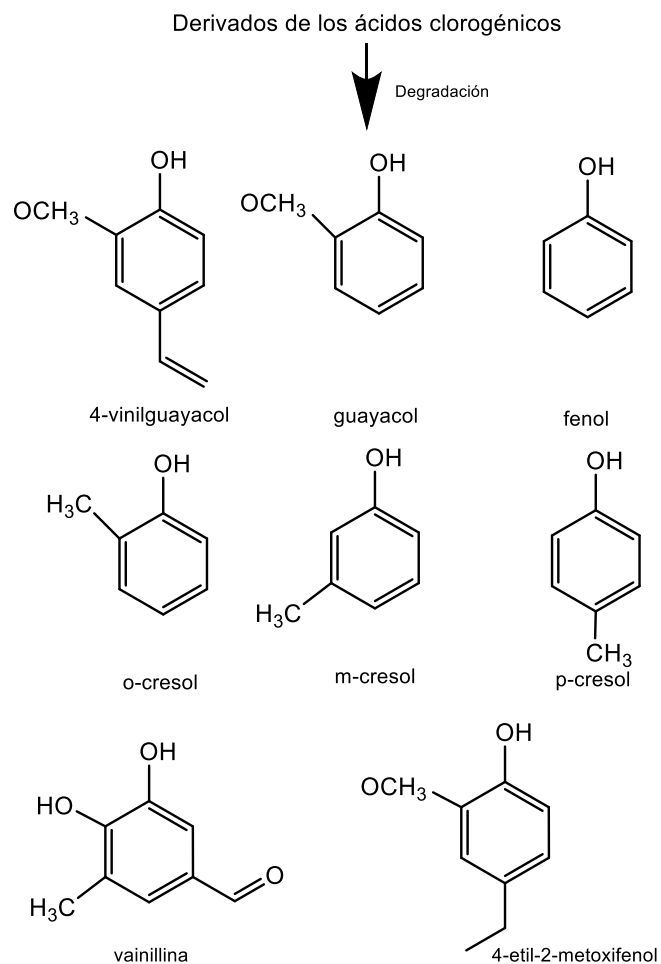


Figura 4. Fenoles presentes en los compuestos volátiles del café obtenidos a partir de la degradación de derivados del ácido clorogénico.

2.3.3. Cafeína y trigonelina

La cafeína (1,3,7-trimetilxantina) es un alcaloide de purina (Figura 5a) de sabor amargo que se encuentra en el café (Ripper *et al.*, 2020). La concentración de cafeína varía según el tipo de grano, el origen y el método de preparación (Angeloni *et al.*, 2019; Campbell y Young, 2017). El contenido promedio de cafeína en *Coffea arabica* L. es cercano al 1.2 % (Martínez *et al.*, 2014). Este alcaloide presenta una gran estabilidad durante el tostado; aunque carece de

olor, aporta amargor y puede influir en el perfil sensorial de la bebida (Monteiro y Trugo, 2005). Asimismo, es uno de los compuestos relacionados con la astringencia, una sensación seca y áspera en la cavidad oral, que contribuye al carácter del café, aunque en concentraciones elevadas puede afectar negativamente su aceptabilidad (Brossard *et al.*, 2016; Shewan *et al.*, 2020). A pesar de su participación en el amargor, se calcula que genera menos del 10 % del amargor total percibido en una taza de café (Poisson *et al.*, 2017). La cafeína se localiza libre en el citoplasma, generalmente asociada al clorogenato de potasio, un complejo de baja solubilidad que condiciona su movilidad a través de los tejidos (Macrae, 1985; Farah y Donangelo, 2006; McLellan *et al.*, 2016). La trigonelina es una N-metil betaína derivada de la metilación enzimática del nitrógeno al ácido nicotínico, de ahí su nombre de ácido N-metil nicotínico (Figura 5b) y puede estar presente en concentraciones de entre 0,6 y 1,3 % en los granos de *Coffea arabica* L. (Freitas *et al.*, 2023; Macrae, 1985). Sus niveles en granos de café verde y tostado se correlacionan fuertemente con la alta calidad del café (Garret *et al.*, 2016).

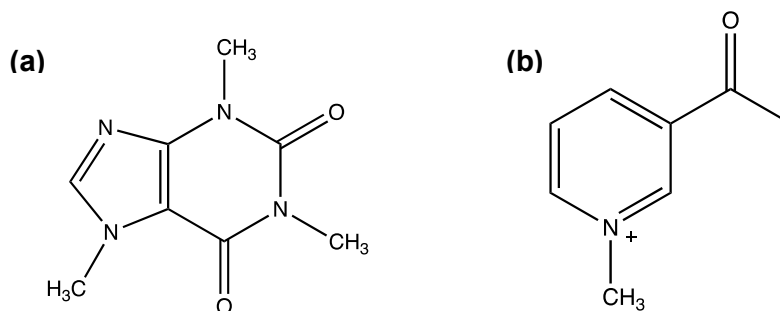


Figura 5. Estructuras de la cafeína (a) y la trigonelina (b)

La trigonelina al ser un derivado de la piridina, la trigonelina actúa como precursor de aroma, contribuyendo a la formación de compuestos de sabor deseables durante el proceso de tostado, como furanos, pirazinas, pirroles y alquilpiridinas (Grzelczyk *et al.*, 2022; Trugo 1984; Monteiro y Trugo 2005, Ky *et al.*, 2001; Campa *et al.*, 2004), mientras que los granos y sus infusiones también

constituyen una fuente importante de ácidos hidroxicinámicos (Hall *et al.*, 2022). Durante el tostado, esta sustancia se desmetila y da lugar a la formación de niacina, también conocida como vitamina B3, vitamina PP o ácido nicotínico (Trugo, 2003).

2.3.4. Azúcares del café

Otros metabolitos que contribuyen a la calidad del café son los azúcares, también denominados carbohidratos o glúcidos, que son moléculas orgánicas constituidas por carbono, hidrógeno y oxígeno (Pinheiro *et al.*, 2021).

Los azúcares constituyen más del 50 % del peso seco total de la semilla (Socala *et al.*, 2020). Dentro de ellos, los polisacáridos representan la mayor proporción del contenido total de carbohidratos (Hall *et al.*, 2022), mientras que los azúcares libres, en particular la sacarosa, han recibido mayor atención por su papel como precursores de compuestos clave para el sabor y aroma tras el tostado (Angeloni *et al.*, 2019).

Desde el punto de vista químico, los azúcares pueden clasificarse en reductores y no reductores (Pinheiro *et al.*, 2021). Se consideran reductores cuando poseen un grupo aldehído libre o una cetona capaz de isomerizarse a aldehído, lo que les permite actuar como agentes reductores frente a sustancias oxidantes, como iones metálicos Cu^{2+} o Fe^{3+} . En esta reacción, el grupo aldehído se oxida mientras el ion metálico se reduce. La glucosa es un ejemplo clásico de azúcar reductor debido a su grupo aldehído libre (Figura 6) (Lehninger *et al.*, 2013).

La sacarosa es un azúcar no reductor; sin embargo, cuando se somete a hidrólisis en un medio ácido, se descompone en glucosa y fructosa, ambas portadoras de un grupo aldehído o funcionalidad equivalente, por lo que se comportan como azúcares reductores (Figura 7). En términos estructurales, un azúcar reductor en su forma cíclica se caracteriza por poseer un hidroxilo anomérico libre (Lehninger *et al.*, 2013).

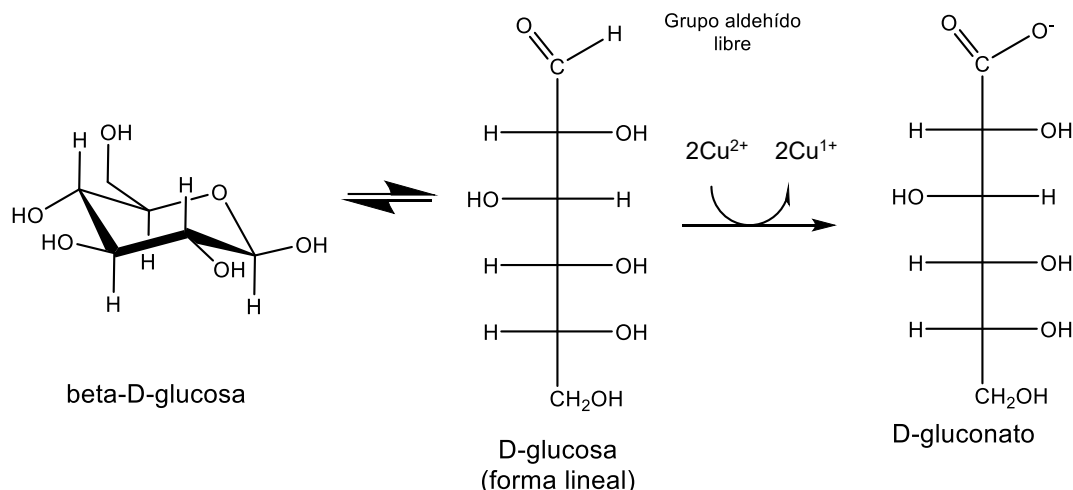


Figura 6. Oxidación de la D-glucosa (azúcar reductor) en presencia del ión Cu^{2+}

La sacarosa se convierte en el azúcar libre más abundante en el grano de café, actuando como fuente esencial de carbono y energía durante la maduración (Garrett *et al.*, 2016), además de contribuir a la generación de compuestos aromáticos durante el tostado (Barbosa *et al.*, 2019). Su concentración en granos verdes puede variar hasta diez veces ($9\text{--}90 \text{ mg g}^{-1}$, dwb), en función de la especie, variedad y condiciones de cultivo, siendo generalmente más alta en *C. arabica* que en *C. canephora* (Cao *et al.*, 2023). La sacarosa se localiza principalmente en el endospermo y presenta una distribución relativamente homogénea (Garrett *et al.*, 2016). Este azúcar está muy influenciado por el tueste, actúa como precursor del sabor y es responsable de la formación del color (Crews y Castle, 2007).

A diferencia de la sacarosa, la glucosa y la fructosa, que también están presentes al final de la maduración del café en concentraciones de $3\text{--}5 \text{ mg g}^{-1}$ (dwb), muestran un patrón distinto, ya que se concentran sobre todo en el perispermo (Campbell y Young, 2017). Se ha demostrado que metabolitos presentes en bajas concentraciones, como los disacáridos del 3-metilbutanoilo ($10\text{--}35 \text{ }\mu\text{g g}^{-1}$), pueden tener mayor impacto en la discriminación sensorial del café que la propia

sacarosa ($\approx 80 \text{ mg}\cdot\text{g}^{-1}$) (Ijanu *et al.*, 2020). Este glucósido del ácido 3-metilbutírico, formado por glucosa y fructosa, muestra una correlación clara con el regusto, un atributo valorado positivamente por catadores profesionales (Iwasa *et al.*, 2015).

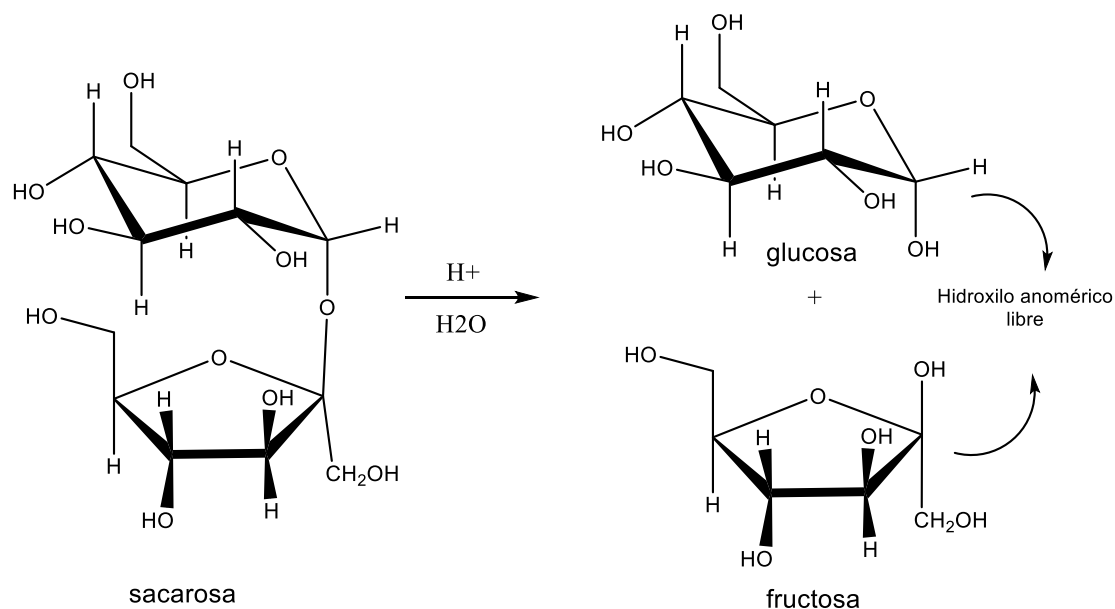


Figura 7. Hidrólisis de la sacarosa y liberación de azúcares reductores, glucosa y fructosa, que contienen hidroxilo anomérico libre.

2.4. Poscosecha del café

La calidad del café se determina por una combinación de diversas etapas que abarcan desde la producción agronómica hasta la preparación final de la bebida (Clemente *et al.*, 2015). Entre los factores que influyen en la calidad del café se incluyen los procesos agrícolas, los métodos de la cosecha, el beneficio del café (beneficio húmedo, semihúmedo y natural) y el secado (Tauchen *et al.*, 2022; Vellema *et al.*, 2015). Existen tres principales técnicas de cosecha, la manual, semimecanizada y mecánica. La elección de la técnica depende de factores como topografía, infraestructura de poscosecha, calidad deseada del café y disponibilidad de mano de obra (Poltronieri y Rossi, 2016).

Para llevar a cabo el beneficio del café es necesario el uso de una máquina despulpadora, usada para remover la piel y la pulpa de las cerezas del café tras la cosecha (Silva *et al.*, 2023). Una vez ocurrido el proceso de despulpado, los granos sin cáscara quedan recubiertos por una capa viscosa llamada mucílago, que se elimina mediante fermentación. Durante este proceso, la microbiota presente degrada la pulpa (Lee *et al.*, 2015), los microorganismos juegan un papel esencial en este paso, en general, las bacterias lácticas y levaduras descomponen los azúcares complejos del mucílago mediante enzimas pectinolíticas, generando metabolitos secundarios beneficiosos (Bressani *et al.*, 2021). La fermentación dura entre 24 y 72 horas y es determinante para la calidad del café lavado, impactando en su perfil de sabor, acidez y complejidad general (Brioschi *et al.*, 2020; Silva *et al.*, 2023). Muchos investigadores han dedicado gran atención a la microbiota del café, ya que la fermentación es un proceso clave en la calidad final de la bebida.

Posteriormente, se lavan los granos fermentados para eliminar los productos de descomposición. El lavado del café consiste en el remojo de los granos; es un proceso que mejora su calidad al lixiviar compuestos que pueden causar amargor o pardeamiento, durante este proceso se eliminan diterpenos, polifenoles y taninos (Lee *et al.*, 2015).

El paso final de la poscosecha del café es el proceso de secado, el cual puede realizarse de manera natural o solar, sobre patios o camas elevadas, o de forma artificial, mediante secadores mecánicos, asegurando que la humedad final de los granos no supere el 12 - 13 % (Park *et al.*, 2023). Es importante mantener los granos en este rango de humedad para evitar la degradación de compuestos bioactivos, la proliferación de microorganismos y la aparición de defectos durante el almacenamiento (Park *et al.*, 2016)

2.5. Almendra de café o café verde

El café verde es el grano de café en su estado natural antes del proceso de tostado. Para obtenerlo, el grano pasa por el proceso de poscosecha, una vez secado, se procede al trillado y clasificación, donde se eliminan restos de cáscara, granos con defectos y se separan por tamaño, para finalmente ser almacenados o comercializados. En la Figura 8 se observan los diferentes defectos y el grano bueno del café.



Figura 8. Defectos del café (Osorio, 2021)

Desde el punto de vista químico, el café verde se caracteriza por sus propiedades funcionales debido a sus compuestos bioactivos. Entre ellos, destacan los ácidos clorogénicos (ACG), representando hasta el 80 % del total de polifenoles del café verde (Barbosa *et al.*, 2019). Los fenólicos totales en granos verdes oscilan entre 4–8.4% (dwb) para *C. arabica* (Freitas *et al.*, 2023). La gran mayoría corresponde a derivados de los ACG, el resto representa apenas un 1% de los fenólicos totales (Barbosa *et al.*, 2019), incluyendo compuestos volátiles y no volátiles simples, libres (no conjugados), como los ácidos: cafeico, vainílico, ferúlico, p-cumárico y

p-hidroxibenzoico (Kwon *et al.*, 2015), además de moléculas fenólicas más complejas (Kurniawan *et al.*, 2017).

2.6. Tostado del café

El tostado del café es el proceso de cocción del grano y cada grupo de café que pasa por este proceso finaliza con un perfil de tueste característico para cada lote. La definición del perfil de tueste depende de la combinación de tiempo y temperatura, ajustada por el personal tostador para alcanzar características deseadas. La temperatura regula la intensidad de las reacciones químicas, mientras que el tiempo que pasa en el proceso de tostado influye en la complejidad del sabor (Seninde y Chambers, 2020). Esta relación se representa en la llamada curva de tueste (Figura 9), que refleja los cambios de temperatura a lo largo del tiempo y constituye la guía principal para equilibrar atributos sensoriales del café (Vilas-Boas *et al.*, 2020).

El tostado de café es un proceso complejo en el que tienen lugar transformaciones físicas y químicas decisivas para la calidad final de la bebida (Cortés-Macías *et al.*, 2023). Estas transformaciones son impulsadas por reacciones de pirólisis, de Maillard, caramelización de azúcares y de degradación de Strecker, que generan tanto compuestos volátiles como no volátiles responsables de los aromas y sabores característicos del café (Cortés-Macías *et al.*, 2023; Sruthi *et al.*, 2021; Seninde y Chambers, 2020). En cuanto a las condiciones de tostado, se utilizan diferentes niveles definidos principalmente por la temperatura (160–240 °C) y la duración del proceso (8–25 min), o en términos de colorimetría, con el fin de obtener el perfil de sabor deseado (Freitas *et al.*, 2023; Park *et al.*, 2023; Sruthi *et al.*, 2021).

Para este proceso se utilizan diferentes tipos de máquinas tostadoras. Las más comunes son las tostadoras de tambor rotatorio, muy usadas en cafés de especialidad, que funcionan a gas o electricidad y permiten un control preciso del

calor en lotes de pocos a varios kilos (Sruthi *et al.*, 2021).

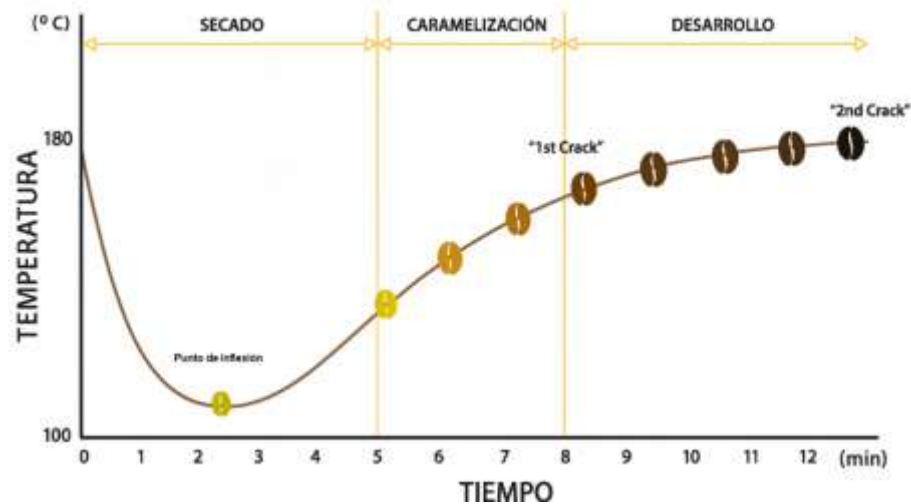


Figura 9. Curva de tostado del café

También existen los tostadores de lecho fluido, que permiten un tostado más rápido y uniforme de los granos de café, aunque son menos frecuentes en producciones artesanales (Seninde y Chambers, 2020). En la industria se emplean tostadores continuos, capaces de procesar varias toneladas por hora con sistemas automatizados de control de temperatura, tiempo, humedad, etc. (Park *et al.*, 2023). Para muestras pequeñas existen tostadores pequeños llamados de prueba, que permiten definir perfiles de tostado a pequeña escala (Cortés-Macías *et al.*, 2023).

2.6.1. Medición de color mediante coordenadas CIE L^* a^* b^*

El color del café ha sido evaluado durante años por expertos en el tostado del café para identificar su calidad como una característica sensorial visual (Londoño-Hernández *et al.*, 2020). Sin embargo, el análisis visual es subjetivo y carece de reproducibilidad (León *et al.*, 2006). Por lo tanto, se han utilizado equipos de colorimetría para estandarizar esta característica física mediante la escala de la Comisión Internacional de Iluminación o Commission Internationale de l'Éclairage (CIE) (Yergenson y Aston, 2020).

Los resultados obtenidos de un equipo de colorimetría se pueden definir como índices de color CIELab (L^* , a^* , b^*). Esta técnica se basa en tres componentes primarios (valores X, Y y Z) que corresponden a la alineación con la visión humana o la respuesta del ojo al color (Marefat *et al.*, 2025). El modelo CIELab fue desarrollado por la CIE en 1976 (Flavier *et al.*, 2022) y actualmente es una de las herramientas más fiables para evaluar las variaciones de color en el tostado del café por ser consistente y objetivo (Sagita *et al.*, 2024). En la medición de color absoluto, el eje a^* simboliza la oposición entre verde y rojo, donde los valores negativos indican dirección del color hacia el verde y los valores positivos hacia el rojo. Para el eje b^* ocurre lo mismo, pero indica el contraste entre azul y amarillo, donde los valores negativos tienden hacia el azul y los positivos hacia el amarillo. Finalmente, la luminosidad o el valor L^* varía de 0 a 100, donde 0 indica el negro absoluto ideal y 100 significa el blanco absoluto ideal (Durmus, 2020).

2.6.2. Procesos químicos durante el tostado

El proceso de tostado del café inicia con la fase de secado, en la que el agua libre se evapora (Seninde y Chambers, 2020). Durante el calentamiento, los granos experimentan cambios estructurales visibles, siendo el *primer crujido* o *primer crack* el indicador inicial de la transición a café tostado. Este fenómeno, acompañado por un chasquido debido a la presión interna del agua y dióxido de carbono, libera vapor de agua, reflejando la expansión interna de los granos (Milani *et al.*, 2017), marcando el inicio del desarrollo aromático y los tuestes claros (Silva *et al.*, 2023).

Los procesos químicos involucrados en el tostado son muchos y sobresalen: (1) reacción de Maillard o pardeamiento no enzimático entre sustancias nitrogenadas, aminoácidos, proteínas, trigonelina, serotonina, carbohidratos, hidroxiácidos y fenoles; (2) Degradación de Strecker; (3) degradación de

aminoácidos individuales, en particular aminoácidos azufrados, hidroxiaácidos y prolina; (4) degradación de la trigonelina; (5) degradación de azúcares (caramelización); (6) degradación de ácidos fenólicos, especialmente del ácido quínico; (7) degradación menor de lípidos; y (8) interacción entre productos intermedios de descomposición (Pinheiro *et al.*, 2021; Coffee Research Institute, 2018).

Conforme avanza el proceso de tostado, el volumen del grano aumenta, el color se oscurece progresivamente (Vilas-Boas *et al.*, 2020); a medida que el tueste progresa, inician las reacciones de Maillard y la caramelización. Los aminoácidos libres y los azúcares reductores se degradan muy rápido; la sacarosa principalmente está presente en niveles de 4–8 % en los granos (Milani *et al.*, 2017). Como resultado de estas transformaciones, se originan numerosos compuestos volátiles característicos del café tostado (Figura 10) (Yeretzian *et al.*, 2002; Kosowska *et al.*, 2017).

La sacarosa, en particular, sufre una degradación marcada por pirólisis (caramelización), fragmentación y reacciones de Maillard en presencia de aminoácidos (de María *et al.*, 1999). La reacción de Maillard se inicia cuando el grupo carbonilo (C=O) de los azúcares reductores es atacado nucleofílicamente por el grupo amino (-NH₂) de aminoácidos o proteínas, formando inicialmente iminas o “bases de Schiff” (Davidek *et al.*, 2008; Nursten, 2005) (Figura 11). Estas iminas pueden ciclizar y originar glucosamina, una molécula inestable e incolora, sin aporte de aroma ni sabor (Pinheiro *et al.*, 2021).

A continuación, las bases de Schiff sufren un reordenamiento de Amadori, que conduce a la formación del producto de Amadori (Li *et al.*, 2014; Nursten, 2005). Este compuesto, tras procesos de enolización y escisión oxidativa, genera intermediarios α -dicarbonílicos, a partir de los cuales pueden formarse melanoidinas (responsables del color oscuro del café) y diversas moléculas volátiles (Freitas *et al.*, 2023; Halford *et al.*, 2010; Nursten, 2005).

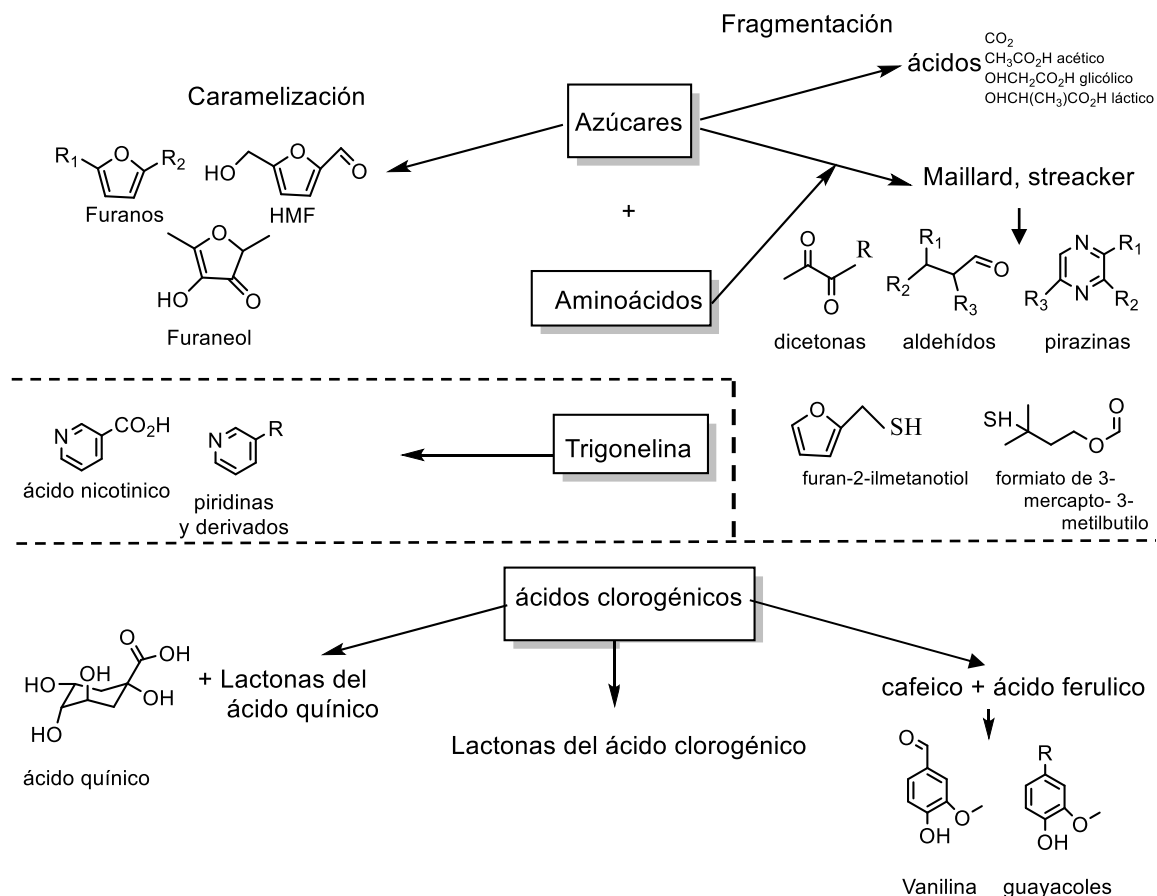


Figura 10. Precursores en la formación del sabor del café durante la etapa de tostado (Pereira *et al.*, 2021).

Las melanoidinas constituyen en promedio un 32 % de los compuestos solubles en la infusión de café (≈ 70 mg/mL) (Ripper *et al.*, 2020). En fases posteriores, los α -dicarbonílicos derivados del producto de Amadori pueden reaccionar con aminoácidos, dando origen a α -aminocetonas y al aldehído de Strecker. Esta etapa se conoce como degradación de Strecker (Nursten, 2005; Van Ba *et al.*, 2012). La autocondensación y oxidación de las α -aminocetonas generadas en esta fase pueden conducir a la formación de pirazinas, compuestos relevantes por su contribución aromática (Nursten, 2005).

Cuando la temperatura sobrepasa los 160 °C, la caramelización se intensifica y la sacarosa se consume casi por completo (Aguiar *et al.*, 2016). La interacción

de azúcares con aminoácidos da lugar a una amplia gama de moléculas que contribuyen a la complejidad sensorial del café (Seninde y Chambers, 2020), aportando notas frutales, florales, así como matices de caramelo, chocolate y nueces (Aguiar *et al.*, 2016; Freitas *et al.*, 2023; Sruthi *et al.*, 2021). Además, durante el tostado, la caramelización de los azúcares favorece la formación de furanos, compuestos fundamentales en el aroma del café (de Maria *et al.*, 1999; Lee *et al.*, 2015; Yang *et al.*, 2016).

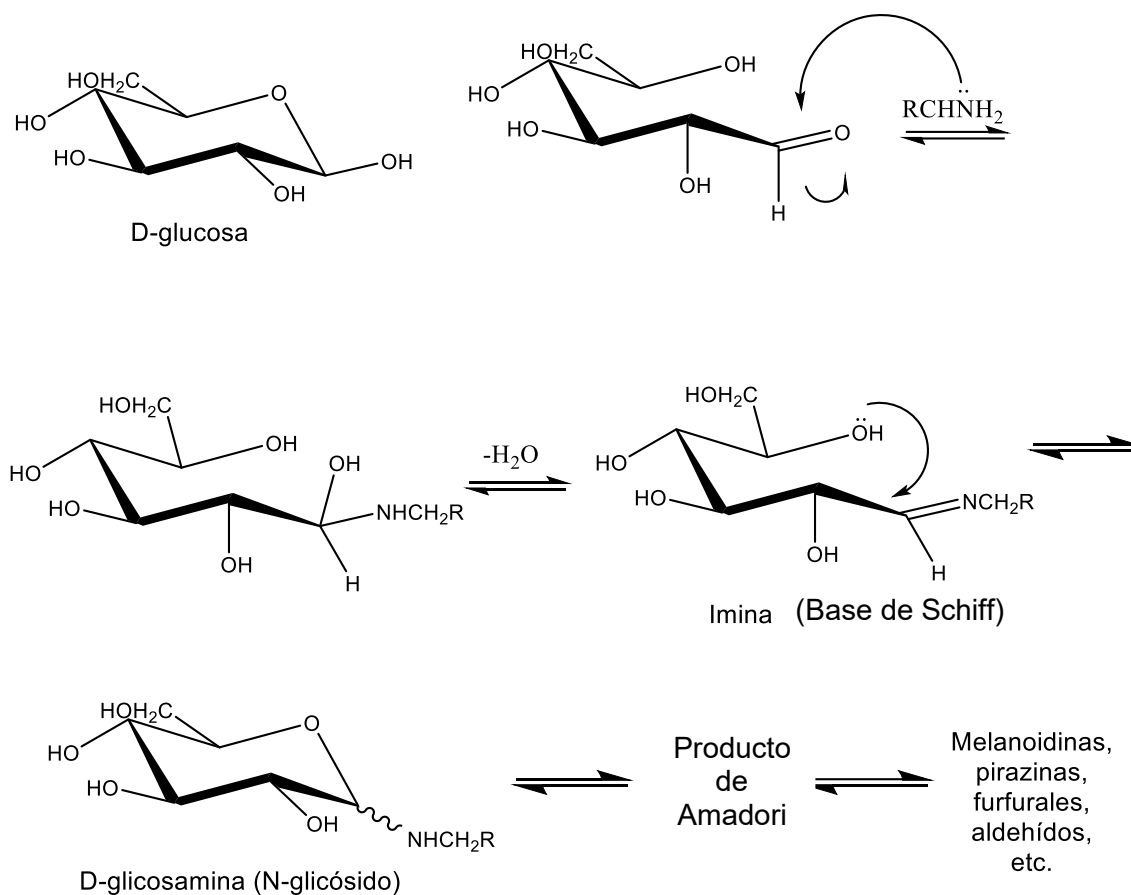


Figura 11. Mecanismo de las etapas iniciales de la reacción de Maillard (Pereira *et al.*, 2021)

Una vez alcanzado el nivel de tueste deseado, los granos deben enfriarse rápidamente para detener las reacciones y preservar la calidad del producto (Grzelczyk *et al.*, 2022). Si esto no ocurre, el proceso continúa y al alcanzar

temperaturas de 200–240 °C, se produce el segundo crack, asociado con los tuestes oscuros. En este punto, los aceites migran hacia la superficie, otorgando brillo característico al grano (Freitas *et al.*, 2023; Sruthi *et al.*, 2021). Este segundo crujido es menos intenso que el primero, asociado a una expansión adicional de los granos y a la liberación continua de vapor y dióxido de carbono (Silva *et al.*, 2023).

2.7. Importancia del origen geográfico del café

El origen geográfico es un factor determinante en la calidad y composición fitoquímica de los granos de café, ya que integra la influencia de variables como el clima, el suelo, las variedades cultivadas, las prácticas agrícolas locales y la estacionalidad (Nóbrega *et al.*, 2023). Todos ellos son responsables de conferir sabores y características únicas a cada región productora (Worku *et al.*, 2023). La interacción entre la variabilidad genética del café y las condiciones de cultivo influye directamente en la composición química de los granos (Magrath y Ghazoul, 2015). Así, los granos procedentes de regiones y variedades reconocidas por producir cafés de alta calidad poseen un valor comercial elevado (Munyendo *et al.*, 2021).

2.7.1. Altitud del cultivo de café

La altitud de las plantaciones es uno de los factores más estudiados, aunque los resultados reportados no siempre coinciden. En general, se considera que la altitud influye en la calidad del café a través de variables como la temperatura, la humedad y la exposición (Ijanu *et al.*, 2020). Algunos estudios sugieren que a mayor altitud se obtienen cafés de mejor calidad. Ribeiro *et al.* (2016), por ejemplo, compararon cafés de variedad *C. arabica* cultivada a 1000 y 1200 m.s.n.m., y observaron que los granos a 1200 m presentaban mayor calidad, atribuida a un incremento en las concentraciones de trigonelina y ácidos clorogénicos (3-CQA). Sin embargo, Dadi *et al.* (2018) reportaron que el cultivo a

menor altitud (700 m s. n. m.), cuando se combina con sistemas de sombreado, también puede mejorar la calidad de la bebida.

2.7.2. Clima del cultivo de café

El clima regional, incluyendo la temperatura, la disponibilidad de agua y el régimen de lluvias, también impacta tanto en la producción como en la calidad, al favorecer la propagación de plagas y enfermedades que interrumpen la floración y el desarrollo del grano (Magrach y Ghazoul, 2015). La agricultura cafetalera es altamente vulnerable al cambio climático, especialmente en países en desarrollo, donde la capacidad de adaptación puede ser limitada (Dadi *et al.*, 2018; Ijanu *et al.*, 2020). Por lo que este factor representa un gran desafío para los productores, ya que genera impacto en la disminución de la oferta mundial de café y por consecuencia pérdidas económicas altas (Ayal *et al.*, 2023).

2.7.3. La genética del café

Las dos especies más cultivadas y apreciadas a nivel mundial son *Coffea arabica* L. y *Coffea canephora*, cada una con características químicas y sensoriales distintivas (Poltronieri y Rossi, 2016; Worku *et al.*, 2023). *C. arabica* L. es la especie más cultivada, representando alrededor del 70% de la producción mundial. Se caracteriza por un perfil sensorial fino y suave, que la convierte en la más valorada por los consumidores. El grano de café presenta alrededor de 50–60% de carbohidratos, 10–15% de proteínas, menos del 2% de lípidos y entre 0.9–1.3% de cafeína (Poisson *et al.*, 2017). Es un cultivo condicionado por altitudes a partir de 700 m.s.n.m., para lograr estabilidad de los rendimientos y la calidad final del grano (Batista *et al.*, 2016). Por lo contrario, otras especies como *C. canephora*, son consideradas un grano de menor calidad sensorial debido a su alto contenido de cafeína (1.6–2.5%) y su sabor amargo, astringente y de baja acidez (Poltronieri y Rossi, 2016). Particularmente esta especie presenta un contenido de sólidos solubles relativamente alto, lo que la hace especialmente

adecuada para la elaboración de café instantáneo (Poisson *et al.*, 2017; Hall *et al.*, 2022) y sus condiciones de cultivo se ven favorecidas en altitudes más bajas que *C. arabica* L. (Girma *et al.*, 2020; Park *et al.*, 2023).

Por lo tanto, los granos de *Coffea arabica* L. son destacados en el mundo cafetalero por su amplia aceptación y mayor preferencia en el mercado global, lo que refleja su importancia económica y social dentro de la industria del café (Worku *et al.*, 2023).

2.8. Literatura citada

- Abreu TL, Silva GS, de Farias Marques ADJ, de Espindola JS, de Assis BBT, Sampaio KB, *et al.* (2024). Organic Arabic coffee husk: Antioxidant and cytoprotective properties and potential impacts on selected human intestinal bacterial populations of individuals with diabetes. *Food Research International* 192. <https://doi.org/10.1016/j.foodres.2024.114730>
- Acquaticci L, Angeloni S, Cela N, Galgano F, Vittori S, Caprioli G and Condelli N (2023). Impact of coffee species, post-harvesting treatments, and roasting conditions on coffee quality and safety-related compounds. *Food Control* 149:109714. <https://doi.org/10.1016/j.foodcont.2023.109714>.
- Aguiar J, Estevinho BN, and Santos L (2016) Microencapsulation of natural antioxidants for food application – the specific case of coffee antioxidants – a review. *Trends in Food Science & Technology* 58: 21–39. <https://doi.org/10.1016/j.tifs.2016.10.012>.
- Alcântara GMRN, Martins LC, Gomes WPC, Dresch D, Rocha FRP, and Melchert WR (2025). Effect of roasting on chemical composition of coffee, *Food Chemistry* 477: 143169. <https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2025.143169>.
- Angeloni G, Guerrini L, Masella P, Bellumori M, Daluiso S, Parenti A and Innocenti M (2019). What kind of coffee do you drink? An investigation into the effects of eight different extraction methods. *Food Research International* 116: 1327–1335. <https://doi.org/10.1016/j.foodres.2018.10.022>.
- Anisa A, Solomon WK, Solomon A (2017) Optimization of roasting time and temperature for brewed hararghe coffee (*Coffea arabica* L.) using central composite design. *International Food Research Journal* 24(6): 2285–2294.
- Ayal DY, Nure A, Tesfaye B, Ture K, Zeleke TT (2023) An appraisal on the determinants of adaptation responses to the impacts of climate variability on coffee Production: Implications for household food security in Nensebo

Woreda, Ethiopia. Climate Services 30.
<https://doi.org/10.1016/j.cliser.2023.100383>.

- Ayalign A. Y. Sabally K (2013) Determination of chlorogenic acids (ACG) in coffee beans using HPLC. American Journal of Research Communication 1(2): 78–91.
- Barbosa M de SG, Scholz MB dos S, Kitzberger CSG y Benassi M de T (2019). Correlation between the composition of green Arabica coffee beans and the sensory quality of coffee brews. Food Chemistry 292: 275–280. <https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2019.04.072>.
- Baspinar B, Eskici G, and Ozcelik AO (2017). How coffee affects metabolic syndrome and its components. Food & Function 8(6): 2089–2101. <https://doi.org/10.1039/c7fo00388a>
- Batista LR, de Souza SC, Batista CS y Schwan RF (2016). Coffee: Types and production. Encyclopedia of Food and Health. <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-384947-2.00184-7>
- Bi X, Yu H, Hu F, Fu X, Li Y, Li Y, Yang Y, Liu D, Li G, Shi R, Dong W (2023) A systematic analysis of the correlation between flavor active differential metabolites and multiple bean ripening stages of Coffea.
- Bressani APP, Martínez SJ, Sarmiento ABI, Borem FM, and Schwan RF (2021). Influence of yeast inoculation on the quality of fermented coffee (*Coffea arabica* var. Mundo Novo) processed by natural and pulped natural processes. International Journal of Food Microbiology 343. <https://doi.org/10.1016/j.ijfoodmicro.2021.109107>
- Brioschi D, Carvalho R, Cássia M, de Gomes T, Veloso R, Catarina M, Kasuya M, Catarina E, Maria J y Rizzo T. (2020) Microbial fermentation affects sensorial, chemical, and microbial profile of coffee under carbonic maceration (July) Food Chemistry. 128296. <https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2020.128296>.
- Brodkorb A, Egger L, Alminger M, Alvito P, Assunção R, Ballance S, *et al.* (2019). INFOGEST static in vitro simulation of gastrointestinal food digestion. Nature Protocols 14(4): 991–1014.
- Brossard N, Cai H, Osorio F, Bordeu E, Chen J (2016) “Oral” tribological study on the astringency sensation of red wines. J. Texture Stud. 47 (5): 392–402. <https://doi.org/10.1111/jtxs.12184>.
- Campa C, Ballester JF, Doulebeau S, Dussert S, Hamon S y Noirot M (2004) Trigonelline and sucrose diversity in wild Coffea species. Food Chemistry, 88: 39–43.

- Campbell R y Young SP (2017) Central nervous system stimulants: Basic pharmacology and relevance to anaesthesia and critical care. *Anaesthesia and Intensive Care Medicine* 19(1): 20–24. <https://doi.org/10.1016/j.mpaic.2017.10.008>
- Cao L, Han W, Lee SG, and Shin JH (2023). Anti-inflammatory activity of chlorogenic acid on macrophages: A simplified simulation of pharmacokinetics following ingestion using a windup syringe pump. *Applied Sciences* 13: 627. <https://doi.org/10.3390/app13010627>
- Cao X, Wu H, Viejo CG, Dunshea FR y Suleria HAR (2023). Effects of postharvest processing on aroma formation in roasted coffee – a review (John Wiley and Sons Inc). In *International Journal of Food Science and Technology* 58 (3): 1007–1027. <https://doi.org/10.1111/ijfs.16261>.
- Chaichi M, Ghasemzadeh-Mohammadi V, Hashemi M, Mohammadi A (2015) Furanic compounds and furfural in different coffee products by headspace liquid- phase micro-extraction followed by gas chromatography–mass spectrometry: Survey and effect of brewing procedures. *Food Additives & Contaminants* 8(1): 73–80. <https://doi.org/10.1080/19393210.2014.981601>
- Clemente JM, Martínez HEP, Alves LC, Finger FL, and Cecon PR (2015) Effects of nitrogen and potassium on the chemical composition of coffee beans and on beverage quality. *Acta Scientiarum. Agronomy*. <https://doi.org/10.4025/actasciagron.v37i3.19063>.
- Coffee Research Institute (2018). Coffee chemistry: Coffee aroma. Accessed 30 October 2018.
- Cortés-Macías ET, López CF, Gentile P, Girón-Hernández J López AF (2023). Impact of post-harvest treatments on physicochemical and sensory characteristics of coffee beans in Huila, Colombia. *Postharvest Biology and Technology* 187. <https://doi.org/10.1016/j.postharvbio.2022.111852>.
- Crews C y Castle L (2007) A review of the occurrence, formation and analysis of furan in heat-processed foods. *Trends in Food Science & Technology*, 18(7): 365–372.
- Dadi D, Mengistie E, Terefe G, Getahun T, Haddis A, Birke W, Beyene A, Luis P, Van der Bruggen B (2018) Assessment of the effluent quality of wet coffee processing wastewater and its influence on downstream water quality. *Ecohydrol. Hydrobiol*. <https://doi.org/10.1016/j.ecohyd.2017.10.007>.
- Davidek T, Gouézec E, Devaud S, and Blank I (2008) Origin and yields of acetic acid in pentose-based Maillard reaction systems. *Annals of the New York Academy of Sciences* 1: 241–243.

- de Maria CAB, Moreira RFA e Trugo LC (1999) Componentes voláteis do café torrado. Parte I: compostos heterocíclicos 22. São Paulo: Química Nova. <https://doi.org/10.1590/S0100-40421999000200013>.
- Desai NM, Gilbert Stanley J, and Murthy PS (2020) Green coffee nanoparticles: Optimisation, in vitro bioactivity and bio-release property. Journal of Microencapsulation. <https://doi.org/10.1080/02652048.2019.1692946>
- Durmus D (2020) CIELAB color space boundaries under theoretical spectra and 99 test color samples. Color. Res. Appl. 45. 796-802.
- Farah A. Y. Donangelo CM (2006) Phenolic compounds in coffee. Brazilian Journal of Plant Physiology 18(1): 23–36.
- Ferreira T, Shuler J, Guimaraes R, Farah A (2019). In: Farah, A., Farah, A. (Eds.), Introduction to coffee plant and genetics, Coffee: Production, Quality and Chemistry (P. 0). The Royal Society of Chemistry. <https://doi.org/10.1039/9781782622437-00001>.
- Flavier K, McLellan J, Botoy T, Waterman KC (2022). Accelerated shelf life modeling of appearance change in drug products using ASAP prime®. Pharm. Dev. Technol. 27. 740-748.
- Flores GB, Andrade F, and Lima DR (2000) Can coffee help be fighting the drug problem? Preliminary results of a Brazilian youth drug study. Acta Pharmacologica Sinica 21(12): 1059–1070.
- Freitas VV, Rodrigues LLB, Castro GAD, dos Santos MH, Vidigal MCTR, Fernandes SA and Stringheta PC (2023). Impact of different roasting conditions on the chemical composition, antioxidant activities, and color of *Coffea canephora* and *Coffea arabica* L. samples. Heliyon 9(9): 19580. <https://doi.org/10.1016/j.heliyon.2023.e19580>
- Garg SK (2016) Green coffee bean. In R. C. Gupta (Ed.), Nutraceuticals, efficacy, safety, and toxicity, 653–667. London: Academic.
- Garrett R, Rezende CM, and Ifa DR (2016). Revealing the spatial distribution of chlorogenic acids and sucrose across coffee bean endosperm by desorption electrospray ionization-mass spectrometry imaging. LWT - Food Science and Technology 65: 711–717. <https://doi.org/10.1016/j.lwt.2015.08.062>
- Girma, B., Gure, A., & Wedajo, F. (2020). Influence of altitude on caffeine, 5-caffeoyl quinic acid, and nicotinic acid contents of arabica coffee varieties. Journal of Chemistry, 1–7. <https://doi.org/10.1155/2020/3904761>
- Gokcen BB, Sanlier N (2019). Coffee consumption and disease correlations. Critical Reviews in Food Science and Nutrition 59(2): 336–348.

<https://doi.org/10.1080/10408398.2017.1369391>

- Golovinskaia O, Wang CK (2023) The hypoglycemic potential of phenolics from functional foods and their mechanisms. *Food Sci. Hum. Wellness* 12 (4): 986–1007. <https://doi.org/10.1016/j.fshw.2022.10.020>.
- Gosalvitr P, Cuéllar-Franca RM, Smith R, and Azapagic A (2023) An environmental and economic sustainability assessment of coffee production in the UK. *Chemical Engineering Journal* 465: 142793. <https://doi.org/10.1016/j.cej.2023.142793>
- Grzelczyk J, Fiurasek P, Kakkar A y Grazyna B (2022). Evaluation of the thermal stability of bioactive compounds in coffee beans and their fractions modified in the roasting process. *Food Chemistry* 387. <https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2022.132888>.
- Halford N, Curtis TY, Muttucumaru N, Postles J y Mottram DS (2010) Sugars in crop plants. *Annals of Applied Biology* 158(1): 1–25.
- Hall RD, Trevisan F, and de Vos RC (2022). Coffee berry and green bean chemistry—Opportunities for improving cup quality and crop circularity. *Food Research International* 151. <https://doi.org/10.1016/j.foodres.2021.110825>.
- ICO (2022) International Coffee Day. 2022. Available online: <https://icocoffee.org/international-coffee-day>
- ICO (2023) Coffee Report and Outlook (CRO). Int. Coffee Organ. ICO 1–39. Available online: <https://icocoffee.org/international-coffee-day>
- ICO (2024) Coffee Report and Outlook. Retrieved from <https://www.icocoffee.org/documents/cy2023–24/cmr-0124-e.pdf>. Accessed on February 27, 2024.
- Ijanu, E. M., Kamaruddin, M. A., & Norashiddin, F. A. (2020). Coffee processing wastewater treatment: A critical review on current treatment technologies with a proposed alternative (Springer Verlag). In *Applied Water Science* 10 (1). <https://doi.org/10.1007/s13201-019-1091-9>.
- Ijanu EM, Kamaruddin MA, Norashiddin FA (2020). Coffee processing wastewater treatment: a critical review on current treatment technologies with a proposed alternative. *Appl. Water Sci.* 10 (11). <https://doi.org/10.1007/s13201-019-1091-9>.
- Iwasa K, Setoyama D, Shimizu H, Seta H, Fujimura Y, Miura D, *et al.* (2015). Identification of 3-Methylbutanoyl Glycosides in Green *Coffea arabica* Beans as Causative Determinants for the Quality of Coffee Flavors. *Journal of Agricultural and Food Chemistry* 63(14): 3742–3751. <https://doi.org/10.1021/jf5054047>

- Jeszka-Skowron M, Sentkowska A, Pyrżyńska K, and De Peña MP (2016) Chlorogenic acids, caffeine content, and antioxidant properties of green coffee extracts: Influence of green coffee bean preparation. *European Food Research and Technology* 242(8): 1403–1409.
- Kosowska M, Majcher MA y Fortuna T (2017). Volatile compounds in meat and meat products. *Food Science and Technology* 37(1): 1–7.
- Kurniawan MF, Andarwulan N, Wulandari N and Rafi M (2017) Metabolomic approach for understanding phenolic compounds and melanoidin roles on antioxidant activity of Indonesian robusta and arabica coffee extracts. *Food Science and Biotechnology*, 26(6): 1475–1480. <https://doi.org/10.1007/s10068-017-0228-6>
- Kwon DJ, Jeong HJ, Moon H, Kim HN, Cho JH, Lee JE, *et al.* (2015). Assessment of green coffee bean metabolites dependent on coffee quality using a ¹H NMR-based metabolomics approach. *Food Research International* 67: 175–182. <https://doi.org/10.1016/j.foodres.2014.11.010>
- Ky CL, Louarn J, Dussert S, Guyot B, Hamon S, and Noirot M (2001) Caffeine, trigonelline, chlorogenic acids, and sucrose diversity in wild *Coffea arabica* L. and *C. canephora* P. accessions. *Food Chemistry* 75: 223–230.
- Larsen SC, Mikkelsen ML, Frederiksen P y Heitmann BL (2018). Habitual coffee consumption and changes in measures of adiposity: A comprehensive study of longitudinal associations. *International Journal of Obesity* 42(4): 880–886. <https://doi.org/10.1038/ijo.2017.310>
- Lee LW, Cheong MW, Curran P, Yu B, Liu SQ (2015) Coffee fermentation and flavor - An intricate and delicate relationship. *Food Chemistry* 185: 182–191.
- Lehninger AL, Nelson DL y Cox MM (2013). *Lehninger principles of biochemistry*. New York: W.H. Freeman.
- León K, Mery D, Pedreschi F, León J (2006) Color measurement in L*a*b* units from RGB digital images. *Food Res.* 39. 1084-1091, <https://doi.org/10.1016/j.foodres.2006.03.006>
- Li C, Wang H, Juárez M, and Ruan ED (2014). Structural characterization of Amadori rearrangement product of glucosylated n- α -acetyl-lysine by nuclear magnetic resonance spectroscopy. *International Journal of Spectroscopy* 2014: 1–6.
- Liang N, Kitts DD (2016). Role of chlorogenic acids in controlling oxidative and inflammatory stress conditions. *Nutrients* 8(16). <https://doi.org/10.3390/nu8010016>

- Londoño-Hernandez L, Ruiz HA, Ramírez TC, Ascacio JA, Rodríguez-Herrera R, Aguilar, CN (2020) Fungal detoxification of coffee pulp by solid-state fermentation. *Biocatal. Agric. Biotechnol.*, 23. Article 101467. <https://doi.org/10.1016/j.bcab.2019.101467>
- Macheiner L, Schmidt A, Schreiner M, and Mayer HK (2019) Green coffee infusion as a source of caffeine and chlorogenic acid. *Journal of Food Composition and Analysis* 84. Article 103307. <https://doi.org/10.1016/j.jfca.2019.103307>
- Macrae R (1985) Nitrogenous compounds. In R. J. Clarke & R. Macrae (Eds.), *Coffee 1. Chemistry*:115–152. London.
- Magrach A y Ghazoul J (2015) Climate and pest-driven geographic shifts in global coffee production: Implications for forest cover, biodiversity and carbon storage. *PLoS One* 10(7): 0133071. <https://doi.org/10.1371/journal.pone.0133071>.
- Marefat S, Shayanfar A, Monajjemzadeh F (2025) Developments in image-based colorimetric analysis methods and applications of CIElab color space in pharmaceutical sciences: A narrative review, *International Journal of Pharmaceutics*: X 10. <https://doi.org/10.1016/j.ijpx.2025.100434>.
- Martínez HEP, Clemente JM, de Lacerda JS, Neves YP e Pedrosa AW (2014) Nutrição mineral do cafeeiro e qualidade da bebida. *Revista Ceres* 61: 838–848.
- McLellan TM, Caldwell JA, and Lieberman HR (2016) A review of caffeine's effects on cognitive, physical, and occupational performance. *Neuroscience & Biobehavioral Reviews* 71: 294–312.
- Milani M, Montorsi L, and Terzi S (2017). Numerical analysis of the heat recovery efficiency for the post- combustion flue gas treatment in a coffee roaster plant. *Energy* 141: 729–743. <https://doi.org/10.1016/j.energy.2017.09.098>
- Monteiro MC e Trugo LC (2005) Determinação de compostos bioativos em amostras comerciais de café torrado. *Química Nova* 28(4): 637–641.
- Moreira RFA e Trugo LC (2020) Componentes voláteis do café torrado. Parte II. Compostos alifáticos, alicíclicos e aromáticos. *Química Nova* 23(2): 195–203.
- Muhammad HFL, Sulistyoningrum DC, Huriyati E, Lee YY, and Manan Wan Muda WA (2019). The interaction between coffee: Caffeine consumption, UCP2 gene variation, and adiposity in adults – a cross-sectional study. *Journal of Nutrition and Metabolism* 7: 960654. <https://doi.org/10.1155/2019/9606054>.
- Munyendo LM, Njoroge DM, Owaga EE, and Mugendi B (2021). Coffee

- phytochemicals and post-harvest handling – a complex and delicate balance. *Journal of Food Composition and Analysis* 102. <https://doi.org/10.1016/j.jfca.2021.103995>. article 103995.
- Nóbrega RO, da Silva SF, Fernandes DDS, Lyra WS, de Araújo TKL, Diniz PHGD, and Araújo MCU (2023) Classification of instant coffees based on caffeine content and roasting degree using NIR spectrometry and multivariate analysis. *Microchemical Journal* 190. <https://doi.org/10.1016/j.microc.2023.108624>. article 108624.
- Nursten HE (2005). The Maillard reaction [electronic resource]: chemistry, biochemistry, and implications: 214. Cambridge: Royal Society of Chemistry.
- Oliveira NAD, Cornelio-Santiago HP, Fukumasu H, Oliveira ALD (2018) Green coffee extracts rich in diterpenes – process optimization of pressurized liquid extraction using ethanol as solvent. *J. Food Eng.* 224: 148–155. <https://doi.org/10.1016/j.jfoodeng.2017.12.021>.
- Osorio V (2021) La calidad del café. En el Centro Nacional de Investigaciones de Café, Guía más agronomía, más productividad, más calidad (3.^a ed., pp. 219–234). Cenicafé. https://doi.org/10.38141/10791/0014_12
- Otemuyiwa IO, Williams MF, and Adewusi SA (2017). Antioxidant activity of health tea infusions and effect of sugar and milk on in-vitro availability of phenolics in tea, coffee, and cocoa drinks. *Nutrition and Food Science* 47: 458–468.
- Park GH, Song HM y Jeong JB (2016). The coffee diterpene kahweol suppresses cell proliferation by inducing cyclin D1 proteasomal degradation via ERK1/2, JNK, and GSK3 β -dependent threonine-286 phosphorylation in human colorectal cancer cells. *Food and Chemical Toxicology* 95: 142–148. <https://doi.org/10.1016/j.fct.2016.07.008>
- Park JB, Peters R y Novotny JA (2023) Impact of roasting on javamide-I/-II in Arabica and Robusta coffee beans. *Food Chemistry* 412. <https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2023.135586>.
- Pereira, LL *et al.* (2021). Roasting Process. In: Louzada Pereira, L., Rizzo Moreira, T. (eds) *Quality Determinants In Coffee Production*. Food Engineering Series. Springer, Cham. https://doi.org/10.1007/978-3-030-54437-9_7
- Pinheiro PF, Pinheiro CA, Osório VM, Pereira LL (2021) Chemical Constituents of Coffee. In: Louzada Pereira, L., Rizzo Moreira, T. (eds) *Quality Determinants in Coffee Production*. Food Engineering Series. Springer, Cham. https://doi.org/10.1007/978-3-030-54437-9_5.

- Poisson L, Blank I, Dunkel A, and Hofmann T (2017). The chemistry of roasting: Decoding flavor formation. In B. Folmer (Ed.), *The craft and science of coffee*: 273–309. London: Academic Press.
- Poltronieri P e Rossi F (2016). Challenges in specialty coffee processing and quality assurance. *Challenges* 7: 19. <https://doi.org/10.3390/challe7020019>
- Poole R, Kennedy OJ, Roderick P, Fallowfield JA, Hayes PC, and Parkes J (2017) Coffee consumption and health: Umbrella review of meta-analyses of multiple health outcomes. *BMJ* 359. <https://doi.org/10.1136/bmj.j5024>
- Rao NZ, Fuller M (2018). Acidity and antioxidant activity of cold brew coffee. *Scientific Reports* 8(1): 1–9. <https://doi.org/10.1038/s41598-018-34392-w>.
- Ribeiro DE, Borem FM, Cirillo MA, Prado MVB, Ferraz VP, Alves HMR y Taveira JDS (2016). Interaction of genotype, environment, and processing in the chemical composition expression and sensorial quality of Arabica coffee. *African Journal of Agricultural Research* 11(27): 2412–2422. <https://doi.org/10.5897/AJAR2016.10832>
- Ripper B, Kaiser CR y Perrone D (2020). Use of NMR techniques to investigate the changes on the chemical composition of coffee melanoidins. *Journal of Food Composition and Analysis* 87: 103399. <https://doi.org/10.1016/j.jfca.2019.103399>
- Rodríguez-Artalejo F, and López-García E (2018) Coffee consumption and cardiovascular disease: A condensed review of epidemiological evidence and mechanisms. *Journal of Agricultural and Food Chemistry* 66(21): 5257–5263. <https://doi.org/10.1021/acs.jafc.7b04506>
- Sagita D, Mardjan SS, Suparlan, Purwandoko PB, Widodo S (2024) Low-cost IoT-based multichannel spectral acquisition systems for roasted coffee beans evaluation: Case study of roasting degree classification using machine learning. *Journal of Food Composition and Analysis* 133. <https://doi.org/10.1016/j.jfca.2024.106478>.
- Saldaña MDA, Mazzafera P and Mohamed RS (1997) Extração dos alcaloides: cafeína e trigonelina dos grãos de café com CO₂ supercrítico. *Ciência e Tecnologia dos Alimentos* 17(4): 371–376.
- Santos DI, Martins CF, Amaral RA *et al* (2021) Pineapple (*Ananas comosus* L.) by-products valorization: novel bio ingredients for functional foods. *Molecules* 26:3216. <https://doi.org/10.3390/molecules26113216>
- Sarraguça M C, Páscoa RNMJ, Lopo M, Sarraguça JMG, and Lopes JA (2016) Bioactive compounds in coffee as health promoters. In L. R. Da Silva & B.

- Silva (Eds.), *Natural Bioactive Compounds from Fruits and Vegetables as Health Promoters Part II*: 80–220. Xarja: Bentham Science Publishers.
- Seninde DR y Chambers E (2020). Coffee flavor: A review. *Beverages*, 6(3): 44. <https://doi.org/10.3390/beverages6030044>.
- Shahinfar H, Jayedi A, Khan TA y Shab-Bidar S (2021). Coffee consumption and cardiovascular diseases and mortality in patients with type 2 diabetes: A systematic review and dose–response meta-analysis of cohort studies. *Nutrition, Metabolism and Cardiovascular Diseases* 31(9): 2526–2538.
- Shewan HM, Pradal C, Stokes JR (2020). Tribology and its growing use toward the study of food oral processing and sensory perception. *J. Texture Stud.* 51 (1): 7–22. <https://doi.org/10.1111/jtxs.12452>.
- Silva MQM, Valente IM, Almeida PJ and Santos JR (2023). Carbon dioxide spectrophotometric determination in whole roasted coffee beans using a total analysis system after super-modified simplex optimization. *Journal of Food Composition and Analysis* 115. <https://doi.org/10.1016/j.jfca.2022.104978>.
- Soares S, Brandao E, Mateus N, de Freitas V (2017) Sensorial properties of red wine polyphenols: astringency and bitterness. *Crit. Rev. Food Sci. Nutr.* 57 (5): 937–948. <https://doi.org/10.1080/10408398.2014.946468>.
- Socała K, Szopa A, Serefko A, Poleszak E, Wlaź P (2020) Neuroprotective effects of coffee bioactive compounds: A review. *Int. J. Mol. Sci.* 22 (107).
- Sruthi NU, Premjit Y, Pandiselvam R, Kothakota A, and Ramesh V (2021). An overview of conventional and emerging techniques of roasting: Effect on food bioactive signatures. *Food Chemistry* 348. <https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2021.129088>. article 129088.
- Tauchen J, Klou P, Popelka P (2022). Effect of method of processing specialty coffee beans (natural, washed, honey, fermentation, maceration) on bioactive and volatile compounds. *LWT- Food Sci. Technol.* 172: 114245. <https://doi.org/10.1016/j.lwt.2022.114245>.
- Torres-Collado L, Compan-Gabucio LM, González-Palacios S, Notario-Barandiaran L, Oncina-Cánovas A, Vioque J, and García-de la Hera M (2021) Coffee consumption and all-cause, cardiovascular, and cancer mortality in an adult Mediterranean population. *Nutrients* 13(4): 1241. <https://doi.org/10.3390/nu13041241>
- Trugo LC (1984) PhD Thesis, University of Reading, England.
- Trugo LC (2003) Coffee analysis. In B. Caballero, L. C. Trugo, & P. M. Finglas (Eds.), *Encyclopedia of food science and nutrition* 2 (2):498. Oxford: Oxford

Academic Press.

- Van Ba H, Hwang I, Jeong D, Touseef A (2012). Principle of Meat Aroma Flavors and Future Prospect.
- Vellema W, Buritica Casanova A, Gonzalez C, D'Haese M (2015) The effect of specialty coffee certification on household livelihood strategies and specialisation. *Food Policy* 57: 13–25. <https://doi.org/10.1016/j.foodpol.2015.07.003>.
- Vilas-Boas AA, Oliveira A, Jesus D, Rodrigues C, Figueira C, Gomes A, and Pintado M (2020). Chlorogenic acids composition and the impact of in vitro gastrointestinal digestion on espresso coffee from single-dose capsule. *Food Research International* 134: 109223. <https://doi.org/10.1016/j.foodres.2020.109223>
- Worku M, Astatkie T y Boeckx P (2023). Quality and biochemical composition of Ethiopian coffee varied with growing region and locality. *Journal of Food Composition and Analysis* 115. <https://doi.org/10.1016/j.jfca.2022.105015>. article 105015.
- Wu H, Gu J, Amrit, BK, Nawaz MA, Barrow, Dunshea CJ, Dunshea FR, and Suleria HAR (2022). Effect of processing on bioaccessibility and bioavailability of bioactive compounds in coffee beans. *Food Bioscience* 46: 101373. <https://doi.org/10.1016/j.fbio.2021.101373>. ISSN 2212-4292.
- Yang N, Liu C, Liu X, Degn TK, Munchow M y Fisk I (2016). Determination of volatile marker compounds of common coffee roast defects. *Food Chemistry* 211: 206–214.
- Yergenson N y, Aston DE (2020). Online determination of coffee roast degree toward controlling acidity. *J. Infrared Spectrosc.* 28. 175-185, <https://doi.org/10.1177/0967033520924493>
- Yeretzian C, Jordan A, Badoud R y Lindinger W (2002). From the green bean to the cup of coffee: Investigating coffee roasting by on-line monitoring of volatiles. *European Food Research and Technology* 214(2): 92–104.
- Zhou J, Chan L and Zhou S (2012) Trigonelline: A plant alkaloid with therapeutic potential for diabetes and central nervous system disease. *Current Medicinal Chemistry* 19(21): 3523–3531.
- Zhou A y Hypponen E (2019) Long-term coffee consumption, caffeine metabolism genetics, and risk of cardiovascular disease: A prospective analysis of up to 347,077 individuals and 8368 cases. *American Journal of Clinical Nutrition* 109(3): 509–516. <https://doi.org/10.1093/ajcn/nqy297>.

3. ANÁLISIS FT-IR-ATR INTEGRADO A QUIMIOMETRÍA PARA EVALUAR EL EFECTO DEL TOSTADO DE CAFÉ (*Coffea arabica* L.)

3.1. Resumen

El café es una de las bebidas más consumidas a nivel mundial, y su potencial nutracéutico depende en gran medida del proceso de tostado y de su origen geográfico. El objetivo de este estudio fue analizar la influencia del tostado sobre los cambios químicos que ocurren en los grupos funcionales de compuestos bioactivos en granos de *Coffea arabica* L., utilizando espectroscopía FT-IR integrada con análisis quimiométrico. Los espectros FT-IR-ATR se realizaron a partir de muestras de café de: Neiva-Huila, Colombia (C); Ecatlán-Puebla, México (P); y Huatusco-Veracruz, México (H), en tres niveles de tostado (T_1 , T_2 , T_3) y un nivel verde/sin tostar (V). Posteriormente se analizaron las bandas características de los grupos funcionales y los cambios en los tratamientos verdes y tostados; para estudiar finalmente la variabilidad estadística mediante quimiometría. Los resultados mostraron que a medida que aumentó el nivel de tostado, las bandas en 1700 cm^{-1} y 1640 cm^{-1} se intensificaron, se identificaron cambios en la región de $2800\text{--}3000\text{ cm}^{-1}$ y disminuyeron las bandas O-H ($3200\text{--}3550\text{ cm}^{-1}$). Además, las bandas de los tratamientos verdes y tostados se separaron demostrando diferencias estadísticas. Se observó la separación de tratamientos por variables (bandas espectrales) en la huella dactilar del café verde ($980\text{ a }995\text{ cm}^{-1}$) y del café tostado ($950\text{ a }961$ y 1013 cm^{-1}) por las bandas características de los azúcares del café. Finalmente, se identificaron las bandas más importantes en el análisis de cafés verdes de tostados (987 , 983 , 991 y 980 cm^{-1}) características de los azúcares, por los cambios químicos que ocurren dentro del grano a raíz de la reacción de Maillard. Aunque la técnica FT-IR-ART integrada a quimiometría no permitió la diferenciación entre niveles de tueste, sí es una herramienta rápida y no destructiva que permite monitorear el comportamiento de los granos de café verde a tostado.

Palabras clave: azúcares, bandas espectrales, espectrometría, reacción de Maillard.

Tesis de Doctorado en Ciencias Agroalimentarias, Universidad Autónoma Chapingo

Autor: M.C. Lina Ximena Parrado Muñoz

Director de tesis: Dra. Diana Guerra Ramírez

Artículo enviado a: Revista Facultad Nacional de Agronomía Medellín (*estatus actual: enviado*)

FT-IR-ATR ANALYSIS INTEGRATED WITH CHEMOMETRICS TO EVALUATE THE EFFECT OF COFFEE ROASTING (*Coffea arabica* L.)

Abstract

Coffee is one of the most widely consumed beverages in the world, and its nutraceutical potential depends largely on the roasting process and its geographic origin. The objective of this study was to analyze the influence of roasting on the chemical changes occurring in the functional groups of bioactive compounds in *Coffea arabica* L. beans, using FT-IR spectroscopy integrated with chemometric analysis. FT-IR-ATR spectra were obtained from coffee samples from Neiva-Huila, Colombia (C); Ecatlán-Puebla, Mexico (P); and Huatusco-Veracruz, Mexico (H), across three roasting levels (T_1 , T_2 , T_3) and a green/unroasted level (V). Subsequently, the characteristic bands of the functional groups and the changes between green and roasted treatments were analyzed, followed by a study of statistical variability through chemometrics. The results showed that as the roasting level increased, the bands at 1700 cm^{-1} and 1640 cm^{-1} intensified, changes were identified in the $2800\text{--}3000\text{ cm}^{-1}$ region, and the O–H bands ($3200\text{--}3550\text{ cm}^{-1}$) decreased. Furthermore, the bands for green and roasted treatments were clearly separated, demonstrating statistical differences. A separation of treatments was observed based on variables (spectral bands) within the fingerprint of green coffee ($980\text{ to }995\text{ cm}^{-1}$) and roasted coffee ($950\text{ to }961$ and 1013 cm^{-1}), corresponding to the characteristic bands of coffee sugars. Finally, the most significant bands for distinguishing green from roasted coffees (987 , 983 , 991 , and 980 cm^{-1}) were identified as sugar-related markers, resulting from the chemical changes occurring within the bean due to the Maillard reaction. Although the FT-IR-ATR technique integrated with chemometrics did not allow for differentiation between roasting levels, it proved to be a fast and non-destructive tool for monitoring the behavior of coffee beans from green to roasted states.

Keywords: Maillard reaction, spectral bands, spectrometry, sugars.

Doctoral Thesis: Doctorado en Ciencias Agroalimentarias, Universidad Autónoma Chapingo

Author: M.C. Lina Ximena Parrado Muñoz

Thesis Director: Dra. Diana Guerra Ramírez

Submitted to: Revista Facultad Nacional de Agronomía Medellín. (current status: submitted).

3.2. Introducción

La espectroscopia FT-IR es una técnica empleada en el análisis químico para la identificación cualitativa de grupos funcionales de compuestos específicos dentro de matrices químicas complejas, como los alimentos (Huaccha-Herrera et al., 2024). Este análisis permite detectar cambios estructurales en los grupos funcionales provocados por diversos tratamientos, incluyendo cambios de temperatura durante los procesos de cocción o tostado en alimentos, como en el café. El tostado del café afecta directamente a la química del grano y sus bioactivos, como la cafeína, la trigonelina, los ácidos clorogénicos y los compuestos polifenólicos (Pacheco-Coello & Rabottini-Villamizar, 2022).

Las reacciones químicas producidas durante el tostado, como la pirólisis, la degradación térmica y las reacciones de Maillard, provocan la descomposición o transformación de compuestos químicos. Los ácidos clorogénicos disminuyen progresivamente con el aumento de temperatura, reduciendo la capacidad antioxidante del grano (Huaccha-Herrera et al., 2024). La trigonelina, por su parte, se degrada a compuestos volátiles que influyen en el aroma y sabor del café, como el ácido nicotínico y derivados furánicos (Vásquez-Villeda et al., 2021). Asimismo, aunque la cafeína es térmicamente más estable, su contenido también puede variar ligeramente dependiendo del nivel de tueste (Pacheco-Coello y Rabottini-Villamizar, 2022).

En cuanto a la aplicación de la técnica FT-IR, estudios recientes han demostrado su utilidad para identificar bandas espectrales características asociadas a grupos funcionales presentes en alcaloides (como la cafeína y la trigonelina), compuestos fenólicos y ácidos orgánicos, permitiendo así correlacionar estos datos con las propiedades sensoriales y funcionales del café (Vásquez-Villeda et al., 2021; Domínguez-Pérez et al., 2019). A la fecha se cuenta con estudios utilizando la técnica FT-IR para evaluar los cambios durante el tostado de compuestos como cafeína, trigonelina, polifenoles y ácidos clorogénicos en *Coffea arabica* L., sin embargo, no se tienen reportes evaluando diferentes tipos de tostado comparándolo con el café verde, un análisis del café de las regiones de Veracruz, Puebla y Colombia.

Por lo tanto, el objetivo de esta investigación fue analizar los cambios en los espectros FT-IR para caracterizar el proceso de tostado y evaluar la factibilidad de la identificación de las señales características de cafeína, trigonelina y ácidos clorogénicos en granos de café verde y con tres niveles de tostado, provenientes de regiones diferentes, mediante estudios quimiométricos para aportar evidencias sobre los cambios estructurales que sufren dichos compuestos durante el tostado y que inciden en la calidad y potencial funcional del café.

3.3. Materiales y métodos

3.3.1. Material vegetal

Se recolectó café (*Coffea arabica* L.) en estado de "pergamino seco", previamente procesado mediante beneficio húmedo de poscosecha y secado solar, de tres regiones productoras: Neiva-Huila, Colombia (C) 2.94° N, 75.28° O, Huatusco-Veracruz, México (H) 19.15° N, 96.95° O y Ecatlán-Puebla, México (P) 20.05° N, 97.60° O. Se recolectaron tres muestras de cada región. Los granos colombianos (C) fueron sometidos a tostado en Neiva-Huila (Colombia) y los granos mexicanos (H y P) en Huatusco, Veracruz (México) mediante el uso de dos tostadoras con el apoyo de personal técnico especializado en tostado de café; una tostadora de tambor convencional y una tostadora de tambor eléctrico modelo EVO (CoffeeTech; año 2022), respectivamente. Se seleccionaron muestras de granos de café en cuatro etapas, grano verde (V) y granos tostados (tueste bajo, tueste medio y tueste alto) que fueron monitoreados mediante coordenadas CIE $L^*a^*b^*$ para asegurar la homogeneidad: el tueste bajo, T_1 ($L^* = 25 \pm 2.0$, $a^* = 7 \pm 1.0$, $b^* = 8 \pm 1.0$), el tueste medio, T_2 ($L^* = 23 \pm 2.0$, $a^* = 6 \pm 1.0$, $b^* = 7 \pm 1.0$) y el tueste alto, T_3 ($L^* = 20 \pm 2.0$, $a^* = 5 \pm 1.0$, $b^* = 4 \pm 1.0$). Una vez aplicados los tratamientos, las muestras fueron codificadas como CV, CT₁, CT₂ y CT₃; HV, HT₁, HT₂ y HT₃; y PV, PT₁, PT₂ y PT₃. Finalmente, los granos verdes (previamente liofilizados) y los granos tostados se sellaron al vacío y se almacenaron a temperatura ambiente hasta su molienda para el posterior análisis.

3.3.2. Análisis por espectroscopía infrarroja -transformada de Fourier (FT-IR-ATR)

Los granos molidos de café verde y con diferentes niveles de tostado se analizaron en un espectrómetro infrarrojo por transformada de Fourier (FT-IR) (Cary 630, Agilent Technologies, Santa Clara, CA, USA) equipado con un accesorio de reflectancia total atenuado (ATR) universal. También se obtuvieron los espectros FT-IR-ATR de estándares de cafeína (Sigma-Aldrich CAS 58-08-2; $\geq 98.5\%$ de pureza), trigonelina (Sigma-Aldrich CAS 535-83-1 $\geq 97\%$ de pureza) y ácido clorogénico 3-O-cafeoilquínico (3-CQA) (Sigma-Aldrich CAS 327-97-9; $\geq 95\%$ de pureza). Cada muestra (aproximadamente 0.1 g) se colocó en contacto con el cristal de diamante con un ajuste de geometría a una calibración de fuerza de 60 unidades, siguiendo la metodología propuesta por Martínez-Velasco *et al.* (2018). Se determinó la transmitancia en el intervalo de 600 cm^{-1} a 3800 cm^{-1} . Posteriormente se identificaron las bandas características de los grupos funcionales en los granos de café molidos (verdes y tostados) y se compararon cualitativamente con estándares de cafeína, trigonelina y ácido clorogénico (3-O-cafeoilquínico).

3.3.3. Análisis estadístico multivariable

Los datos FT-IR-ATR se organizaron en un archivo CSV de Excel (Microsoft Office® 365) como una matriz compuesta por 860 filas como promedios de números de onda y 72 columnas correspondientes a 36 tratamientos (por triplicado). Inicialmente los datos se procesaron mediante la segunda derivada con el fin de reducir los efectos de la línea base y aumentar la sensibilidad con el software MestReNova 15.0. Posteriormente, los datos se analizaron mediante un Análisis de Componentes Principales (ACP) como técnica exploratoria para identificar la variabilidad de las muestras y un Análisis Discriminante de Mínimos Cuadrados Parciales (PLS-DA) para identificar las variables diferenciables y obtener el gráfico de marcadores (scores). Finalmente, se construyó un análisis de agrupamiento (clúster) mediante un dendrograma y un mapa de calor (heatmap) para observar la formación de grupos por variables. Este análisis se

realizó con la plataforma en línea del software estadístico MetaboAnalyst 6.0 y el módulo “Statistical Analysis One Factor” (Pang *et al.*, 2024).

3.4. Resultados y discusión

Los espectros de FT-IR-ATR son una herramienta analítica ampliamente utilizada para caracterizar la huella dactilar química del café. En la Figura 12 se muestran los espectros obtenidos a partir de todas las muestras verdes y tostadas de las diferentes regiones: Neiva-Huila, Colombia, Huatusco-Veracruz-México y Puebla-México (Figura 12a). Así como los espectros de los estándares de cafeína (Figura 12b), ácido clorogénico (3-O-cafeoilquínico) (Figura 12c) y trigonelina (Figura 12d). Los cambios en los espectros se observan en las regiones de 3600 a 2854 cm^{-1} y de 1800 a 600 cm^{-1} . Los espectros revelan un patrón muy similar entre las muestras del estudio con una matriz química relativamente constante; sin embargo, la intensidad de trigonelina (b-d).

algunas bandas varían con el tueste, indicando variabilidad en la intensidad y el desplazamiento de las bandas. En la Figura 12a se evidencia alta similitud entre los espectros de todas las muestras, particularmente en la región huella (1800–600 cm^{-1}), lo que indica una composición química global, consistente y propia de la matriz del café (Barrios- Rodríguez *et al.* (2021)). La superposición de espectros y la conservación del patrón de bandas evidencian una buena reproducibilidad instrumental y de muestreo, destacando al FT-IR-ATR como una herramienta rápida y confiable para identificar patrones en las muestras.

1.1.1. Compuestos químicos relacionados con la actividad funcional del café

La cafeína contiene grupos amida y aminas en el anillo de la xantina, el imidazol unido a un anillo de purina formando un heterocíclico y tres metilos unidos a átomos de nitrógeno en el anillo purínico (Tavares y Sakata, 2012). Las principales bandas asociadas con la cafeína (Figura 12b) corresponden a un estiramiento del enlace C-H en el anillo aromático en 3100 cm^{-1} y la banda C-H en 2950 cm^{-1} , perteneciente al grupo metilo -CH₃ del N-CH₃ (Assis *et al.*, 2018). La banda en 1700 cm^{-1} del estiramiento del grupo carbonilo (C=O) perteneciente a la xantina. En 1600 cm^{-1} la banda C=C del anillo aromático unido al C-N es señal clave usada para la cuantificación de la cafeína (Craig *et al.*, 2018).

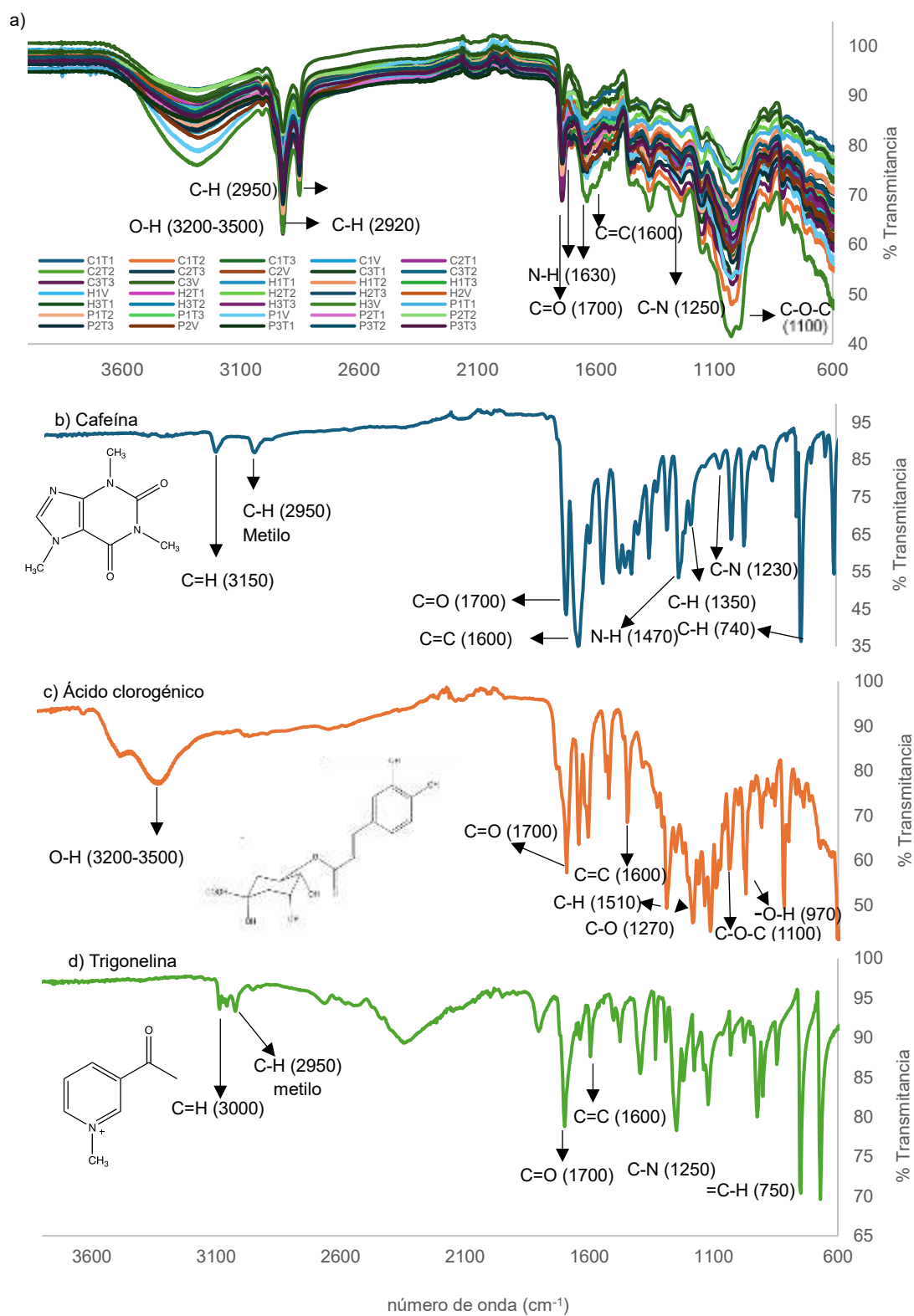


Figura 12. Espectros FT-IR-ATR de muestras de café verde y café tostado en grano molido (a) y estándares químicos de cafeína, ácido clorogénico y

trigonelina (b-d).

En 1350 cm^{-1} la flexión C-H de los hidrógenos en los grupos metilo ($-\text{CH}_3$). La banda en 1230 cm^{-1} de los enlaces C-N de los N-CH₃. Finalmente, en 740 cm^{-1} se observan las vibraciones de los enlaces C-H en los anillos. Resultados similares fueron demostrados por Barrios-Rodríguez *et al.* (2021), Assis *et al.* (2018) y Craig *et al.* (2014).

Los ácidos clorogénicos (ACG) son los principales compuestos fenólicos del café (Tripetch y Borompichaichartkul, 2019); son ésteres de ácido caféico y del ácido quínico. Particularmente para el ácido 3-O-cafeoilquínico se esperan bandas asociadas con el grupo fenol ($-\text{OH}$ del anillo bencénico), un grupo carboxilo ($-\text{COOH}$) y un enlace éster ($-\text{COO}$) (Clifford *et al.*, 2017). En los espectros, el ácido clorogénico 3-O-cafeoilquínico (Figura 12c) se asoció con las bandas en 1700 cm^{-1} y en 1270 cm^{-1} del estiramiento del C=O y C-O del grupo éster. Una banda entre 3200 y 3500 cm^{-1} es atribuida al estiramiento O-H. En 1600 y 1440 cm^{-1} se muestran dos picos asociados al enlace (C=C) del anillo aromático y una banda de 1500 cm^{-1} a la flexión C-H de éster. La región de 1450 a 1250 cm^{-1} se relaciona con los ácidos clorogénicos (Craig *et al.*, 2018). Finalmente, en 1100 cm^{-1} el estiramiento C-O-C está relacionado con el grupo éster. Resultados similares fueron demostrados por Barrios-Rodríguez *et al.* (2018).

La trigonelina presentó bandas asociadas a estiramientos de grupos funcionales (Figura 12d) de la piridina (anillo heterocíclico con N), del grupo metilo ($-\text{CH}_3$) y del grupo carboxílico ($-\text{COOH}$). Se encontraron bandas en 2900 cm^{-1} para los grupos metileno (CH_2) o metilo (CH_3) relacionados con el estiramiento de C-H. Para el enlace C=O se observa una banda en 1700 cm^{-1} . En 1600 cm^{-1} la banda de estiramiento del anillo aromático (C=C). En 1250 cm^{-1} la banda de estiramiento del enlace C-N, correspondiente a la presencia del grupo amina.

3.4.1. Análisis del tostado del café por FT-IR-ATR

La Figura 13 refleja el análisis de las bandas de los espectros debido a transformaciones químicas inducidas por el calor de los tratamientos tostados frente a los granos verdes. Las bandas de los espectros FT-IR-ATR de café verde y café tostado muestran diferencias claras que reflejan las transformaciones

químicas que ocurren durante el proceso de tostado.

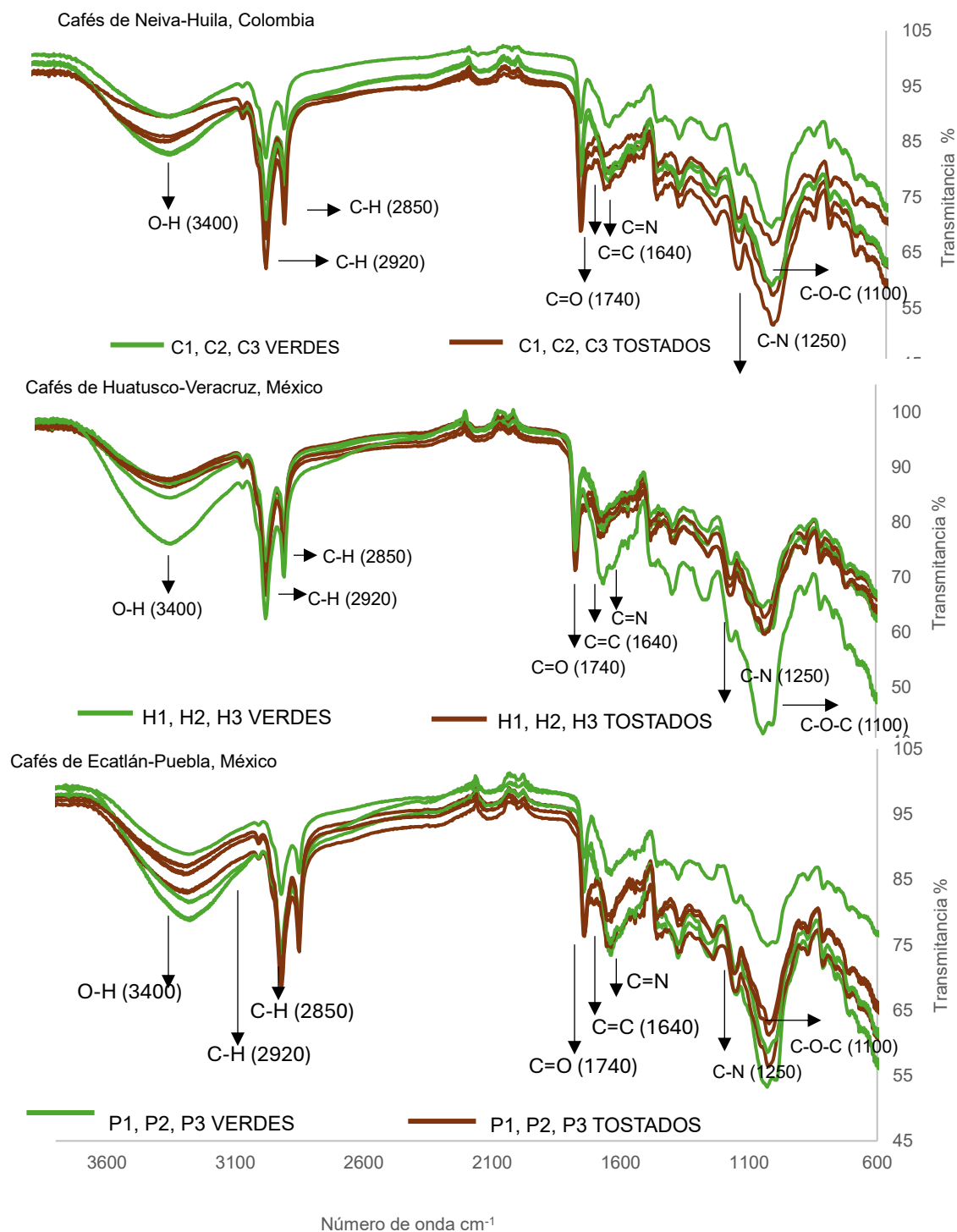


Figura 13. Espectro FT-IR-ATR de muestras de café de diferentes regiones: Neiva-Huila, Colombia (C), Huatusco-Veracruz, México (H) y Ecatlán-Puebla, México (P). Cuatro (4) tratamientos de nivel de tueste (T₁: tueste bajo, T₂: tueste medio, T₃: tueste alto, V: café verde).

En el café verde, las bandas de estiramiento C=O en 1700 cm^{-1} son intensas. En el café tostado las bandas O-H se reducen en intensidad pronunciadas, que indican pérdida de agua y posible formación de productos derivados de la reacción de Maillard y la caramelización de los azúcares (Sabur-Badmos *et al.*, 2020). Se observan varias bandas que corresponden a los compuestos orgánicos presentes en los granos, como carbohidratos, proteínas, ácidos orgánicos, y lípidos (Craig *et al.*, 2018). En 2920 cm^{-1} y 2850 cm^{-1} se observan bandas de los enlaces C-H (alifáticas) de lípidos y carbohidratos. En 1740 cm^{-1} una banda de C=O asociada a ácidos y ésteres, particularmente en los lípidos (Barbin *et al.*, 2014; Varão Silva *et al.*, 2021), y en 1640 cm^{-1} se observa la banda de C=C, relacionada con los compuestos fenólicos y otros compuestos aromáticos. Resultados similares fueron obtenidos por Craig *et al.* (2018), Reis *et al.* (2017) y Craig *et al.* (2014). Bandas de 1200 hasta 800 cm^{-1} asociadas con el contenido de carbohidratos (Capek *et al.*, 2014; Link *et al.*, 2014). En los de cafés tostados, se observa que la banda del O-H se contrae ($3200\text{-}3400\text{ cm}^{-1}$), ya que muchos de los grupos hidroxilo pueden haberse descompuesto o modificado debido a la pérdida de agua o transformación de los ácidos clorogénicos (Sabur-Badmos *et al.*, 2020), aunque este resultado suele verse afectado en mayor parte por la pérdida de humedad durante el tueste. En 2920 cm^{-1} y 2850 cm^{-1} la intensidad de las bandas de C-H se ve modificada debido a la ruptura de lípidos y la reconfiguración de carbohidratos (Link *et al.*, 2014). En 1730 cm^{-1} la banda de C=O se intensifica, ya que los compuestos como los ácidos clorogénicos se descomponen y se transforman en lactonas y otros compuestos carbonilados (Tripetch y Borompichaichartkul, 2019). En $1600\text{-}1500\text{ cm}^{-1}$ las bandas que corresponden a vibraciones de C=C se modifican debido a los cambios de la estructura de los compuestos aromáticos (Farah, 2012). En 1400 a 800 cm^{-1} se observan bandas relacionadas con los fenoles y productos de la reacción de Maillard, que se intensifican durante el tostado (Link *et al.*, 2014).

3.4.2. Análisis quimiométrico de los espectros FT-IR-ART de cafés verdes y tostados.

El análisis de PCA (Análisis de Componentes Principales) aplicado a espectros FT-IR-ATR de muestras de café verde y café tostado se muestra en la Figura 14. Los modelos de PCA mostraron dos componentes principales que explican el 76 % de la varianza de los datos de cafés tostados y verdes (Figura 14a), y 63.9 % de la varianza de los datos para cafés tostados únicamente (Figura 14b). Los cafés verdes y tostados mostraron diferencias significativas en el *score plot* (Figura 14a), lo que podría estar explicado por la variabilidad de la composición química de los granos una vez ocurrido el proceso de tostado (proceso térmico). Según Varão Silva *et al.* (2021). Estos autores sugieren que las características del café verde se asocian comúnmente con bandas específicas relacionadas con los ácidos clorogénicos, proteínas y carbohidratos, mientras que las del café tostado están relacionadas con los compuestos formados durante el tostado, como las melanoidinas, acrilamidas y compuestos volátiles/aromáticos responsables del aroma (Tripetch y Borompichaichartkul, 2019). Por lo tanto, el PC1 del *score plot* podría estar relacionado con la variabilidad de los compuestos más abundantes que permanecen tras el tostado, como los azúcares y los ácidos clorogénicos; mientras que el PC2 podría estar relacionado con los compuestos generados tras el tostado.

Las flechas en el espectro (Figura 14a) indican bandas espectrales con las variables asociadas a cada grupo funcional, evidencian las variables correlacionadas y las variables inversamente relacionadas. Las bandas alrededor de $\sim 1000\text{ cm}^{-1}$ (flechas hacia el grupo azul) están asociadas a carbohidratos y estructuras originales del grano. Mientras, las bandas en la zona $\sim 1700\text{ cm}^{-1}$ (más horizontales) están asociadas a productos de Maillard y CGA lactonas que aumentan con el tostado.

Los cafés tostados se agruparon en el *score plot* (Figura 14b) mostrando características similares, sin una clara distinción. Esto sugiere que las diferencias espectrales entre niveles de tueste no son muy marcadas o que la variabilidad interna de las muestras dentro de cada nivel de tueste es mayor que las

diferencias entre los mismos.

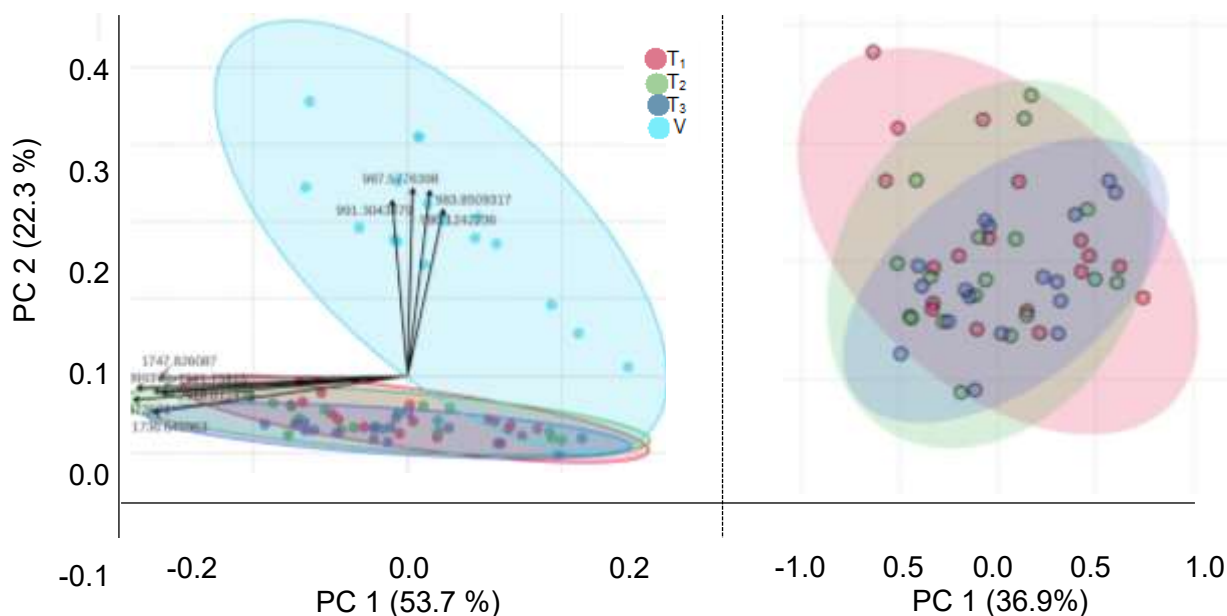


Figura 14. Gráfico de PCA a partir de espectros FT-IR-ATR para a) cafés tostados y verdes, b) cafés tostados. T₁: tueste bajo, T₂: tueste medio, T₃: tueste alto y V: café verde.

Estos resultados indican que el análisis de componentes principales PCA evidencia que el principal factor de diferenciación es el proceso de tostado, es decir, tratamientos verdes vs tratamientos tostados, más que el nivel de tueste, lo cual sugiere que las transformaciones químicas iniciales del proceso de tueste dominan la variabilidad espectral FT-IR-ATR. Esta limitación del PCA para generar agrupamientos se presenta cuando las muestras bajo estudio son estrechamente similares (Saucedo *et al.*, 2024).

Por otra parte, para el modelo del PCA en el que claramente hay agrupamientos (Figura 14a), es potencialmente útil aplicar métodos multivariantes como el PLS-DA para identificar variables diferenciables. En consecuencia, se realizó un análisis PLS-DA para las muestras de café, conocido también como análisis discriminante de mínimos cuadrados parciales, con la finalidad de maximizar la separación entre grupos previamente definidos (café verde vs tostado, e incluso T₁, T₂, T₃) e identificar las variables de FT-IR responsables de dicha discriminación. Los resultados del PLS-DA se observan en la Figura 15.

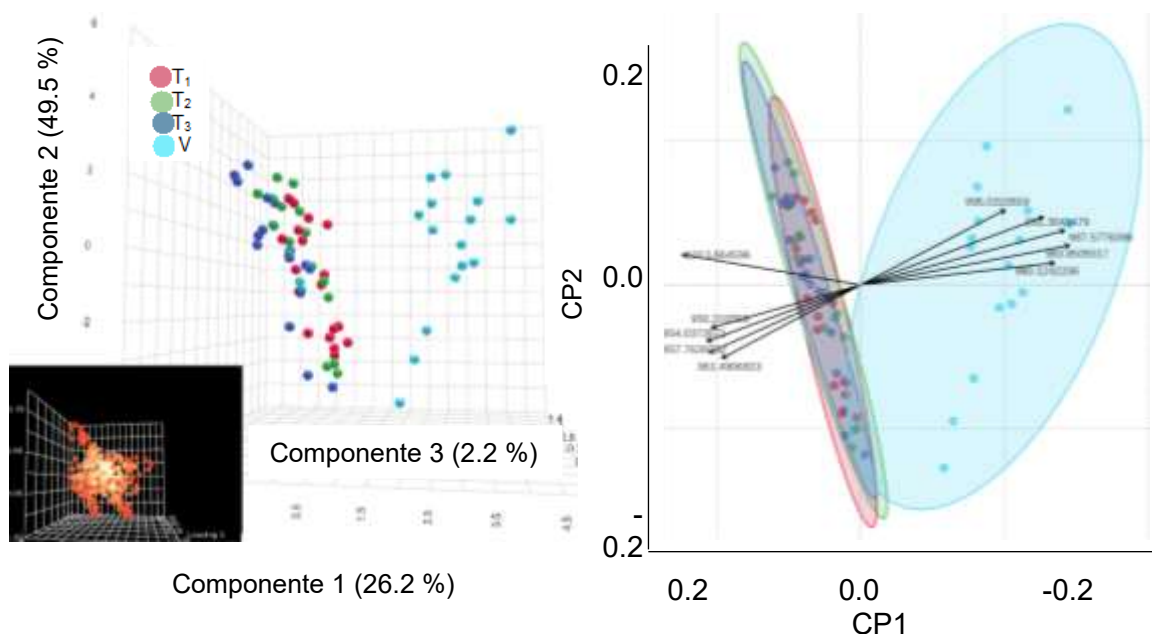


Figura 15. Gráfico de PLS-DA a partir de espectros FT-IR-ATR para cafés tostados y verdes. a) Gráfico de marcadores (score plot) en 3D. b) Análisis Biplot del modelo PLS-DA.

La figura 15a muestra el gráfico de contribución o gráfico de puntuaciones del modelo con una varianza acumulada del 77,9 % con tres componentes. Se observa una separación consistente en múltiples componentes latentes y no solo en las dos componentes del Biplot (Figura 15b). El PLS-DA logró identificar una discriminación clara entre café verde y café tostado. En los cafés verdes, las bandas visibles (~ 995 , 991 , 987 , 983 , 980 cm^{-1}) están más asociadas a carbohidratos y polisacáridos no transformados (C–O) de las estructuras originales del grano verde. Se comprueba nuevamente, las elipses de los cafés tostados se superponen bastante, mostrando que no hay una discriminación clara entre T_1 , T_2 y T_3 .

Por lo tanto, en la Figura 15b se observan claramente dos grupos de variables, a la derecha bandas espectrales de $\sim 980\text{--}1000 \text{ cm}^{-1}$ asociadas al verde principalmente carbohidratos y estructura original del café y a la izquierda ($\sim 950\text{--}965 \text{ cm}^{-1}$) bandas asociadas a tostados posiblemente debido a degradación de azúcares y formación de nuevos enlaces (Maillard).

Para evaluar la calidad del modelo PLS-DA se realizó un gráfico de componentes (Figura 16a) mediante los parámetros accuracy, R^2 y Q^2 , donde X representa el

número de componentes (LV) y y el desempeño del modelo.

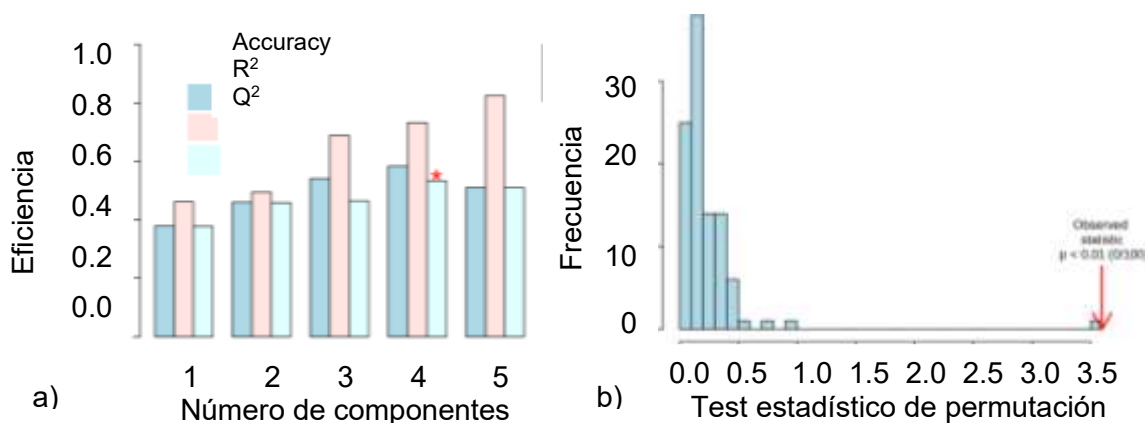


Figura 16. Gráfico de componentes (a) y test estadístico de permutación del modelo PLS-DA de los espectros FT-IR-ATR para análisis de cáfes verdes y tostados (b).

El R^2 muestra lo que se explica con el modelo y su ajuste, el Q^2 es la validación cruzada (que tanto predice el modelo), y la precisión (“accuracy”) es el porcentaje de acierto o presición. Se observa que a medida que aumenta la precisión, el valor de R^2 aumenta, llegando a ~ 0.8 , y Q^2 aumenta inicialmente, para luego estabilizarse en ~ 0.5 , mostrando una buena capacidad explicativa y predictiva del modelo con cuatro componentes. Por lo tanto, en un LV de 4 componentes, se observa una buena precisión con un valor cercano a 0.6, con un buen ajuste R^2 mayor a 0.7 y un modelo con capacidad predictiva aceptable mayor a 0.5.

La Figura 16b muestra el test de permutación, y se observa que nuestro modelo PLS-DA se encuentra muy lejos a la derecha en 3.5 con $p < 0.01$ (0/100) que significa, que de 100 modelos aleatorio, ninguno fue mejor que nuestro modelo y la probabilidad de que el modelo sea por azar es $< 1\%$, por lo tanto, la prueba de permutación demuestra que el modelo no puede diferenciar entre muestras de café tostado.

La figura 17 muestra el VIP score o ranking de variables, en este caso, las bandas del FT-IR según su importancia en el modelo PLS-DA. Todas las bandas se muestran entre 3 y 5 en la escala VIP y todas estas son las encargadas de la separación de los cáfes tostados y verdes. A la derecha de la figura se observan las bandas más importantes del modelo (987, 983, 991, 980 cm^{-1}) indicando un papel muy importante del tostado en la separación, ya que indican los grupos C-

O de carbohidratos y polisacáridos principalmente.

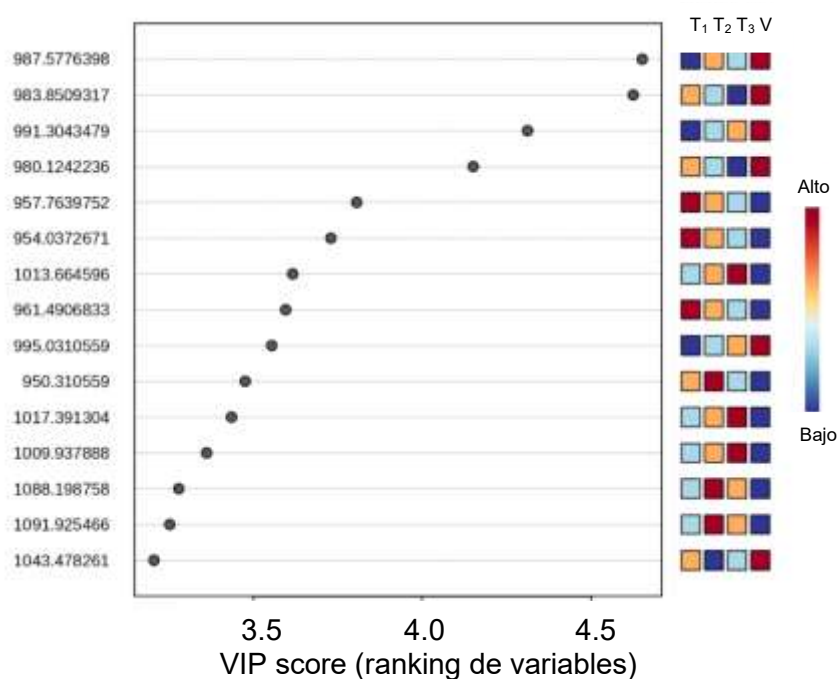


Figura 17. Ranking de variables de importancia en el modelo PLS-DA de los espectros FT-IR-ATR para cafés verdes y tostados.

A continuación se presenta el mapa de calor (heatmap) que muestra la intensidad relativa de cada banda, donde rojo es alto y azul es bajo, y esto indica que las primeras bandas (987, 983, 991, 980 cm^{-1}) son muy intensas en los cafés verdes. Seguidas de las bandas: 957 y 954 cm^{-1} , que son muy débiles para cafés verdes y más fuertes para los tostados, relacionadas con la degradación de azúcares y formación de productos de Maillard. Por lo tanto, se demuestra que las diferencias en estas estructuras C-O son determinantes en la separación entre el café verde y cafés tostados.

Finalmente, se realizó un análisis de clúster (Figura 18) para identificar el agrupamiento jerárquico de las muestras de café y de las bandas espectrales(variables de estudio) mediante un dendrograma (Figura 18a) y un heatmap o mapas de calor (Figura 18b).

La Figura 18a muestra el agrupamiento de las muestras por su similitud química basándose en las variables del estudio (bandas espectrales). Hacia la derecha se observan las muestras más parecidas, a la vez que las agrupaciones entre sí y a la izquierda se observan las muestras más diferentes. El café verde forma un

grupo separado (letras azul claro), y el dendrograma muestra cómo se une con los demás grupos muy separado, es decir, es un grupo químicamente distinto. Mientras el grado de tostado no muestra grupos distintos, sino perfiles muy similares.

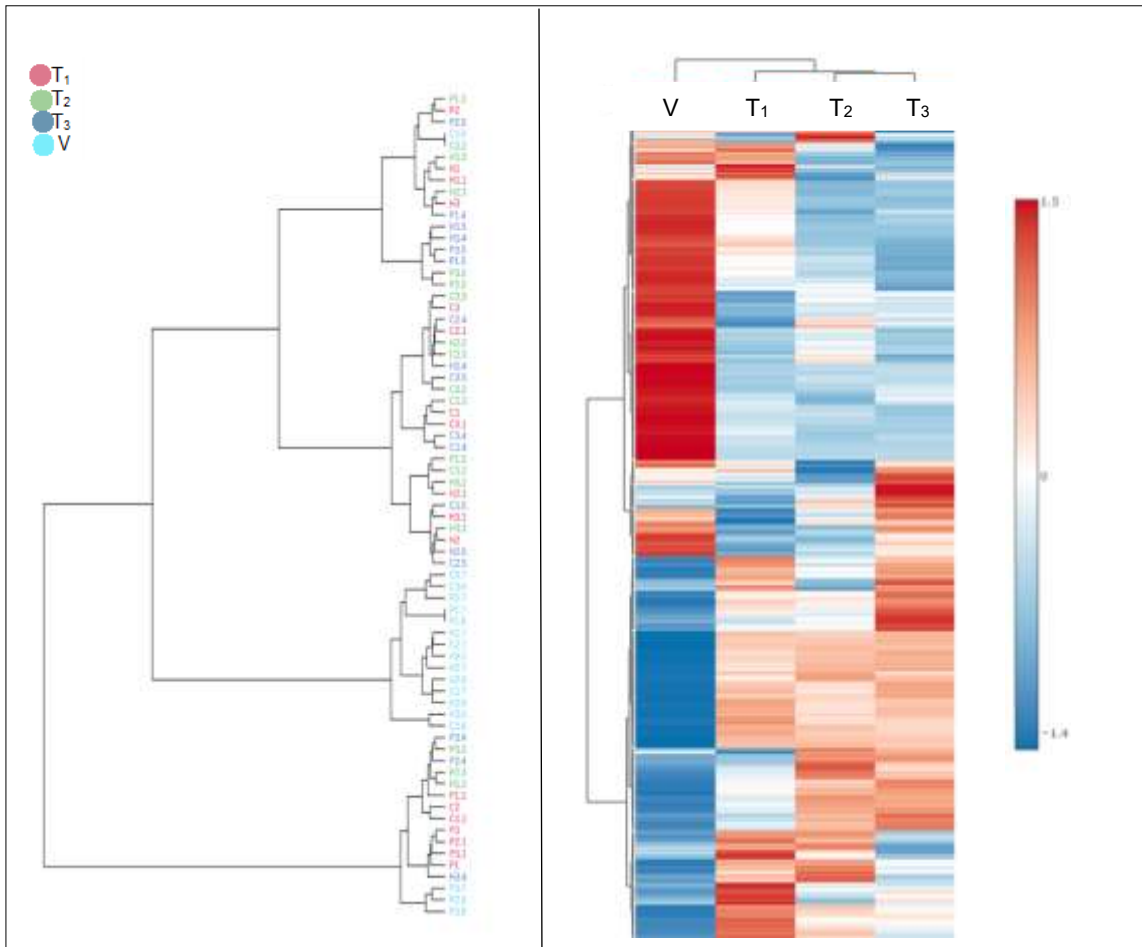


Figura 18. Análisis de clúster para agrupamiento de muestras (a) y variables (b) mediante un análisis de Hapmap de los espectros FT-IR-ATR.

La figura 18b muestra un mapa de calor con dendrograma (heatmap con clustering) que combina la intensidad de señales FTIR, el agrupamiento de las muestras y el agrupamiento de variables. Las filas muestran los tratamientos (V, T₁, T₂, T₃) y las filas muestran las bandas espectrales FT-IR, los colores de las bandas demuestran su intensidad de la escala heatmap (rojo: alta intensidad, azul: baja intensidad, blanco: intermedio) y significa la intensidad de la presencia de cada banda en cada tratamiento. Nuevamente se observa como los cafés verdes se separa de los cafés tostados, con patrones muy diferentes. Los cafés

tostados (T1, T2 T3) muestra cambios sutiles entre tratamientos, muy graduados y mayor homogeneidad. El tratamiento de café verde muestra zonas muy fuertes de intensidad alta y zonas de intensidad baja muy bien definidas, lo que puede relacionarse con carbohidratos intactos y probablemente ACG. Mientras que en tostados se estarían perdiendo las estructuras originales.

3.5. Conclusiones

El tueste del café es un proceso térmico capaz de inducir transformaciones estructurales químicas en sus compuestos bioactivos. Las variaciones observadas en los grupos funcionales de los espectros FT-IR de muestras de café verde y tostado reflejaron cambios en las bandas, como el estiramiento y la flexión que podría atribuirse a los enlaces característicos de compuestos bioactivos como azúcares y ACG principalmente. El análisis de quimiometría reveló variaciones en la intensidad de las bandas de absorción, lo que reflejó diferencias significativas entre los cafés verdes y los tostados, además de evidenciar que estas diferencias se deben principalmente a las variaciones en la huella dactilar del café en zonas de azúcares y carbohidratos intactos en el café verde y sus transformaciones en el café tostado. Por lo tanto, los cambios químicos del café verde al tostado pueden ser atribuidos al proceso térmico.

Estos hallazgos confirman la utilidad del FT-IR como una técnica analítica rápida y no destructiva con potencial para la caracterización cualitativa de muestras y cambios en el proceso de tueste, sin necesidad de métodos más complejos a menos que el objetivo lo justifique.

3.6. Agradecimientos

Quiero expresar mi más profundo agradecimiento a la Secretaría de Ciencia, Humanidades, Tecnología e Innovación (SECIHTI) por la beca académica otorgada a mi persona, cuyo apoyo fue fundamental para el desarrollo de esta investigación y mi formación como doctora. Agradezco a la Dra. Alma Leticia Saucedo Yáñez, del Laboratorio Nacional de Investigación y Servicio Agroalimentario y Forestal (LANISAF), por su valiosa orientación y apoyo científico para el tratamiento de datos de FT-IR-ATR y el desarrollo de los

modelos quimiométricos de PCA y PLS-DA. Asimismo, expreso mi gratitud al Laboratorio de Evaluación de la Calidad de Café del Centro Regional Universitario Oriente (CRUO) en Huatusco, Veracruz, México y al Laboratorio del Centro Surcolombiano de Investigación en Café (CESURCAFÉ) en Neiva-Huila, Colombia, por brindarme su apoyo técnico, sus conocimientos y el espacio para la culminación de esta investigación.

3.7. Literatura citada

- Assis C, Oliveira LS, and Sena MM (2018). Variable selection applied to the development of a robust method for the quantification of coffee blends using mid infrared spectroscopy. *Food Analytical Methods* 11(2):578–588. <https://doi.org/10.1007/s12161-017-1027-7>.
- Barbin F, De Souza Madureira FAL, Sun, D, Nixdorf SL, and Hirooka EY (2014) Application of infrared spectral techniques on quality and compositional attributes of coffee: an overview. *Food Research International* 61: 23-32. <https://doi.org/10.1016/j.foodres.2014.01.005>
- Barrios-Rodríguez YF, Rojas Reyes CA, Triana Campos JS, Girón-Hernández J Rodríguez-Gamir J (2021). Infrared spectroscopy coupled with chemometrics in coffee post-harvest processes as complement to the sensory analysis. *LWT* 145. <https://doi.org/10.1016/j.lwt.2021.111304>.
- Capek P, Paulovičová E, Matulová M, Mislovičová D, Navarini L, and Suggi-Liverani F (2014) *Coffea arabica* instant coffee-chemical view and immunomodulating properties. *Carbohydrate Polymers* 103: 418-426. <https://doi.org/10.1016/j.carbpol.2013.12.068>
- Clemente JM, Martinez HEP, Pedrosa AW, Neves YP, and Cecon, Jifon JL (2028). Boron, Copper, and Zinc affect the productivity, cup quality, and chemical compounds in coffee beans. *Journal of Food Quality*. <https://doi.org/10.1155/2018/7960231>
- Clifford MN, Jaganath IB, Ludwing IA, and Crozier A (2017) Chlorogenic acids and the acyl-quinic acids: discovery, biosynthesis, bioavailability and bioactivity. *Natural Product Reports* 34(12):1391-1421. <https://doi.org/10.1039/c7np00030h>.
- Correia RM, Tosato F, Domingos E, Rodrigues RRT, Aquino LFM, Filgueiras PR, Lacerda Jr. V y Romão W (2018). Portable near infrared spectroscopy applied to quality control of Brazilian coffee. 176 (1):59-68. <https://doi.org/10.1016/j.talanta.2017.08.009>

- Craig AP, Botelho BG, Oliveira LS, and Franca AS (2018). Mid infrared spectroscopy and chemometrics as tools for the classification of roasted coffees by cup quality. *Food Chemistry* 245:1052–1061. <https://doi.org/10.1016/J.FoodChem.2017.11.066>
- Craig AP, Franca AS, Oliveira LS, Irudayaraj J, and Ileleji K (2014) Application of elastic net and infrared spectroscopy in the discrimination between defective and non-defective roasted coffees 128: 393–400. <https://doi.org/10.1016/j.talanta.2014.05.001>
- Domínguez-Pérez LA, Lagunes-Gálvez LM, Barajas-Fernández J, Olán-Acosta MA, García-Alamilla R y García-Alamilla P (2019) Caracterización vibracional de grupos funcionales en granos de cacao durante el tostado usando espectroscopía de infrarrojo por transformada de Fourier. *Acta universitaria* 29. <https://doi.org/10.15174/au.2019.2172>
- Farah (2012) Coffee Constituents. Y.-F. Chu (Ed.), *Coffee: Emerging Health Effects and Disease Prevention* (4th.ed.), John Wiley & Sons, London, UK:21-58, <https://doi.org/10.1002/9781119949893.ch2>.
- Grzelczyk J, Fiurasek P, Kakkar A y Budryn G (2022). Evaluation of the thermal stability of bioactive compounds in coffee beans and their fractions modified in the roasting process. *Food Chemistry* 387(1):132888. <https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2022.132888>
- Huaccha-Herrera C, Ordoñez-Gómez E y Villanueva-Tiburcio JE (2024) Efecto del proceso de tostado en el contenido de polifenoles totales, actividad antioxidante y evaluación sensorial del café producido en Perú. *Ciencia y Tecnología Agropecuaria* 25(3). https://doi.org/10.21930/rcta.vol25_num3_art:3508
- Link JV, Lemes ALG, Marquetti I, dos Santos Scholz MB, and Bona E (2014) Geographical and genotypic classification of arabica coffee using Fourier transform infrared spectroscopy and radial-basis function networks. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems* 135:150-156. <https://doi.org/10.1016/j.chemolab.2014.04.008>
- Macheiner L, Schmidt A, and Mayer HK (2021) A novel basis for monitoring the coffee roasting process: Isomerization reactions of 3-caffeoylquinic and 4-caffeoylquinic acids. *LWT* 152. <https://doi.org/10.1016/j.lwt.2021.11234>
- Martínez-Velasco A, Lobato C, Hernández RC, Román BE, Alvarez RA, and Vernon CEJ (2018). High intensity ultrasound treatment of faba bean (*Vicia faba* L.) protein: Effect on surface properties, foaming ability, and structural changes. *Ultrasonics Sonochemistry* 44:97–105. <https://doi.org/10.1016/j.ultsonch.2018.02.007>.

- Pacheco-Coello F y Rabottini-Villamizar T (2022) cafeína, compuestos fenólicos y actividad antioxidante en granos de café orgánico (*Coffea arabica*, var. Caturra) OMETIDOS A TRES TIEMPOS DE TOSTADO, NIRGUA, ESTADO YARACUY, VENEZUELA. Saber: Revista Multidisciplinaria del Consejo de Investigacion 34:20–27. <https://doi.org/10.5281/zenodo.7724878>.
- Pang, Z., Lu, Y., Zhou, G., Hui, F., Xu, L., Viau, C., Spigelman, A., MacDonald, P., Wishart, D., Li, S. y Xia, J. (2024). MetaboAnalyst 6.0: hacia una plataforma unificada para el procesamiento, análisis e interpretación de datos metabolómicos. Nucleic Acids Research (doi: 10.1093/nar/gkae253)
- Reis N, Franca AS, and Oliveira LS (2013) Performance of diffuse reflectance infrared Fourier transform spectroscopy and chemometrics for detection of multiple adulterants in roasted and ground coffee. LWT - Food Science and Technology 53(2):395-401. <https://doi.org/10.1016/j.lwt.2013.04.008>.
- Reis N, Botelho BG, Franca AS, and Oliveira LS (2017) Simultaneous detection of multiple adulterants in ground roasted coffee by ATR-FTIR spectroscopy and data fusión. Food Analytical Methods 10(8):2700-2709. <https://doi.org/10.1007/s12161-017-0832-3>.
- Sabur-Badmos, Maotian-Fu, Granato D y Kuhnert N (2020) Classification of Brazilian roasted coffees from different geographical origins and farming practices based on chlorogenic acid profiles. Food Research International (134). <https://doi.org/10.1016/j.foodres.2020.109218>.
- Saadi S, Nacer NE, Ariffin AA, Ghazali HM, Abdulkarim SM, Boo HC, Miskandar MS, Saari N, Hamid AA y Anwar F (2023) Discrimination of food adulteration by means of PCR and FTIR. Food and Humanity 1:1362-1378. <https://doi.org/10.1016/j.foohum.2023.10.008>
- Tavares C y Sakata RK (2012) Cafeína para el tratamiento del dolor. Revista Brasileira de Anestesiologia. 62 (3). <https://doi.org/10.1590/S0034-70942012000300011>
- Tripetch P y Borompichaichartkul C (2019). Effect of packaging materials and storage time on changes of colour, phenolic content, chlorogenic acid, and antioxidant activity in arabica green coffee beans (*Coffea arabica* L. cv. Catimor). Journal of Stored Products Research 84. <https://doi.org/10.1016/j.jspr.2019.101510>
- Varão Silva T, Pérez-Rodríguez M, Romero de Oliveira N, de Santana H, and de Almeida LC (2021) Tracing commercial coffee quality by infrared spectroscopy in tandem with pattern recognition approaches. Vibrational Spectroscopy, 116. <https://doi.org/10.1016/j.vibspec.2021.103295>

Vásquez Villeda K E, Sierra Dubón EA y Herrera Cifuentes W A (2021)
Evaluación de propiedades químicas del grano de café y características
en copa al modificar la fermentación en proceso húmedo. Ciencia Latina
Revista Científica Multidisciplinar 5(5):9379-9401.
https://doi.org/10.37811/cl_rcm.v5i5.991

4. EFECTO DEL TOSTADO Y ORIGEN GEOGRÁFICO SOBRE LOS COMPUESTOS BIOACTIVOS EN BEBIDA DE *Coffea arabica* L.

4.1. Resumen

El potencial nutracéutico de una bebida de café depende de las transformaciones químicas inducidas por el tostado y el origen geográfico; el café producido en comunidades aisladas y de otras regiones, donde se tienen escasos controles de calidad, carece de estudios. El objetivo de esta investigación fue analizar la influencia del nivel de tostado y la región de origen sobre las propiedades fisicoquímicas, antioxidantes y compuestos bioactivos en bebida de *Coffea arabica* L., de tres regiones: Neiva-Huila, Colombia (C), Ecatlán-Puebla, México (P) y Huatusco-Veracruz, México (H), y sometidas a diferentes niveles de tostado. bajo, medio y alto (T_1 , T_2 y T_3). Para las bebidas preparadas a una concentración de 0.055 g de café por mililitro de agua, se determinaron los siguientes parámetros: pH, azúcares totales (AT), azúcares reductores totales, propiedades antioxidantes y concentraciones de ácido clorogénico, cafeína, trigonelina. Todas las variables excepto la cafeína y el pH mostraron disminución progresiva con el aumento del tueste. Las bebidas de tueste bajo colectadas en H mostraron una menor acidez (pH: 4.46 ± 0.12), un mayor contenido de azúcares (2.47 ± 0.24 y 1.47 ± 0.15 mg EG mL⁻¹, totales y reductores, respectivamente), una mayor concentración de compuestos fenólicos (2.02 ± 0.12 mg EAG mL⁻¹), en particular del ácido clorogénico ($1,514.70 \pm 532.76$ µg mL⁻¹). Sin embargo, en los tratamientos verdes las bebidas de café de Neiva-Huila, Colombia tuvieron una mayor concentración de compuestos fenólicos (1.42 ± 0.09 mg EAG mL⁻¹) y de ácido clorogénico ($1,768.34 \pm 395.10$ µg mL⁻¹) y por tanto una mayor capacidad antioxidante (8.92 ± 1.37 y 9.02 ± 1.15 µmol ET mL⁻¹ por los ensayos FRAP y ABTS, respectivamente). Las muestras de café verde de México mostraron mayor contenido de trigonelina, y las tostadas, mayor contenido de cafeína. En general, el nivel de tueste, la región de origen y su interacción fueron significativos en el comportamiento de los compuestos funcionales de las bebidas de café.

Palabras clave: nivel de tostado; origen geográfico; compuestos fenólicos; propiedades antioxidantes; trigonelina.

Tesis de Doctorado en Ciencias Agroalimentarias, Universidad Autónoma Chapingo

Autor: M.C. Lina Ximena Parrado Muñoz

Director de tesis: Dra. Diana Guerra Ramírez

Artículo enviado a: Revista Facultad Nacional de Agronomía Medellín (estatus actual: enviado).

EFFECT OF ROAST LEVEL AND GEOGRAPHIC ORIGIN ON THE BIOACTIVE COMPOUNDS IN *Coffea arabica* L. BREW

Abstract

The nutraceutical potential of a coffee brew depends on the chemical transformations induced by roasting and geographic origin; coffee produced in isolated communities and other regions, where quality controls are scarce, lacks sufficient studies. The objective of this research was to analyze the influence of roast level and region of origin on the physicochemical properties, antioxidants, and bioactive compounds in *Coffea arabica* L. brew from three regions: Neiva-Huila, Colombia (C); Ecatlán-Puebla, Mexico (P); and Huatusco-Veracruz, Mexico (H), subjected to different roasting levels: light, medium, and dark (T_1 , T_2 , and T_3). For the coffee brew prepared at a concentration of 0.055 g of coffee per milliliter of water, the following parameters were determined: pH, total sugars (TS), total reducing sugars, antioxidant properties, and concentrations of chlorogenic acid, caffeine, and trigonelline. All variables, except for caffeine and pH, showed a progressive decrease as the roast level increased. Light-roast coffee brew collected in H showed lower acidity (pH: 4.46 ± 0.12), higher sugar content (2.47 ± 0.24 and 1.47 ± 0.15 mg GE mL⁻¹, total and reducing, respectively), and a higher concentration of phenolic compounds (2.02 ± 0.12 mg GAE mL⁻¹), particularly chlorogenic acid ($1,514.70 \pm 532.76$ µg mL⁻¹). However, in the green treatments, coffee brew from Neiva-Huila, Colombia, had a higher concentration of phenolic compounds (1.42 ± 0.09 mg GAE mL⁻¹) and chlorogenic acid ($1,768.34 \pm 395.10$ µg mL⁻¹), and thus a higher antioxidant capacity (8.92 ± 1.37 and 9.02 ± 1.15 µmol TE mL⁻¹ via FRAP and ABTS assays, respectively). Green coffee samples from Mexico showed higher trigonelline content, while roasted samples showed higher caffeine content. In general, the roast level, the region of origin, and their interaction were significant in the behavior of the functional compounds in the coffee brew.

Keywords: Antioxidant properties; compounds; geographic origin; phenolic compounds; roast level; trigonelline.

Doctoral Thesis: Doctorado en Ciencias Agroalimentarias, Universidad Autónoma Chapingo

Author: M.C. Lina Ximena Parrado Muñoz

Thesis Director: Dra. Diana Guerra Ramírez

Submitted to: Revista Facultad Nacional de Agronomía Medellín. (current status: submitted).

4.2. Introducción

El café es una de las bebidas más consumidas en el mundo debido a su sabor, aroma y propiedades estimulantes y funcionales (Wu *et al.*, 2022). Se trata de una matriz química compleja compuesta por macronutrientes, micronutrientes y fitoquímicos como los ácidos fenólicos, principalmente los ácidos clorogénicos, la cafeína y la trigonelina (Jeszka *et al.*, 2020; Valduga *et al.*, 2019). Gracias a la presencia de estos compuestos bioactivos, las infusiones obtenidas a partir de granos molidos se consideran bebidas funcionales (Paiva *et al.*, 2019). La composición química y el valor nutricional del café dependen de factores genéticos, edáficos y ambientales, así como de las prácticas agrícolas, el procesamiento de los granos y el proceso de tostado del café (Pacetti *et al.*, 2015).

El tostado de los granos de café constituye una etapa crítica, ya que el nivel de tueste determina el desarrollo del aroma, sabor y color del grano, así como del tipo y cantidad de compuestos funcionales (Wu *et al.*, 2022). Las condiciones de tiempo y temperatura de tostado sobre la acción ejercida en el grano modifican las características físicas y químicas del café mediante reacciones como la de Maillard, la caramelización y la degradación térmica de Strecker, las cuales transforman significativamente la composición química del grano (de Melo Pereira *et al.*, 2019; Somporn *et al.*, 2011).

Estas transformaciones repercuten directamente en la concentración de compuestos fenólicos y antioxidantes de la bebida de café (Król *et al.*, 2020). Por ello, el efecto del tueste y región de origen del grano sobre la composición bioactiva y las propiedades funcionales del café ha sido ampliamente estudiado (Freitas *et al.*, 2024; de Souza Costa *et al.*, 2024; Vieira-Porto *et al.*, 2024; Díaz *et al.*, 2018), el café producido en las comunidades relativamente aisladas y de otras regiones, donde se tienen escasos controles de calidad, carece de estudios, en consecuencia, persisten vacíos de conocimiento sobre la interacción entre el nivel de tostado y origen geográfico. El objetivo de esta investigación fue analizar la influencia del nivel de tostado y la región de origen sobre las propiedades fisicoquímicas, antioxidantes y el contenido de compuestos bioactivos clave de

bebidas elaboradas a partir de *Coffea arabica* L., con granos colectados de tres regiones: Neiva-Huila, Colombia (C), Ecatlán-Puebla, México (P) y Huatusco-Veracruz, México (H), y sometidos a diferentes niveles de tostado. con el fin de establecer la relación entre estos factores y su potencial nutracéutico.

4.3. Materiales y métodos

4.3.1. Material vegetal

Las muestras de *Coffea arabica* L. procesadas en beneficio húmedo y secado solar fueron obtenidas en café pergamino seco de tres regiones: Neiva-Huila, Colombia (C) 2.94° N, 75.28° O, Huatusco-Veracruz, México (H) 19.15° N, 96.95° O y Ecatlán-Puebla, México (P) 20.05° N, 97.60° O. Los granos fueron procesados en dos tostadoras, en Neiva, Huila, Colombia se procesaron los cafés colombianos en tostadora de tambor convencional y en Huatusco, Veracruz, México se procesaron los cafés mexicanos en tostadora de tambor eléctrico modelo EVO FZ94 2022. Se aplicaron cuatro (4) tratamientos: tres (3) niveles de tostado: café verde sin tostar (V) y tres niveles de tostado, que fueron controlados por su color: tostado bajo, T₁ ($L^* = 25 \pm 2.0$, $a^* = 7 \pm 1.0$, $b^* = 8 \pm 1.0$), tostado medio, T₂ ($L^* = 23 \pm 2.0$, $a^* = 6 \pm 1.0$, $b^* = 7 \pm 1.0$) y tostado alto, T₃ ($L^* = 20 \pm 2.0$, $a^* = 5 \pm 1.0$, $b^* = 4 \pm 1.0$). Las muestras se etiquetaron de la siguiente manera: (CV, CT₁, CT₂, CT₃, HV, HT₁, HT₂, HT₃, PV, PT₁, PT₂ y PT₃). Posteriormente se almacenaron al vacío a temperatura ambiente, hasta su análisis.

4.3.2. Preparación de las bebidas de café

Las bebidas elaboradas con café verde y tostado se elaboraron conforme a la “Golden Cup Standard” o estándar de taza dorada de la Specialty Coffee Association (SCA) mediante un proceso de extracción convencional. Una muestra de 5.5 g de café se mezcló con 100 mL de agua desionizada a 93 °C, la mezcla se dejó reposar durante 10 min (SCA, 2015), posteriormente se filtró con filtro de cafetera comercial y se dejó reposar a temperatura ambiente, finalmente se realizaron los análisis de laboratorio.

4.3.3. Análisis fisicoquímico: pH, azúcares totales (AT) y azúcares reductores totales (ART)

Para cada bebida se determinó el pH en potenciómetro digital (PH700, Apera instruments, Columbus, OH, USA). Los azúcares totales (AT) y azúcares reductores totales (ART) se analizaron por espectrofotometría con lector de microplacas multidetector con el software Gen5 (Biotek Instruments Inc., Winoosky, VT, USA) siguiendo la metodología propuesta por Parrado-Muñoz *et al.* (2024) adaptada a bebidas de café. Para AT se midió la absorbancia a 490 nm y para ART a 540 nm. Se usó glucosa como referencia y se prepararon curvas de calibración en rangos de concentraciones de 15.2 a 75.3 $\mu\text{g mL}^{-1}$ para AT y de 0.2 a 1.0 mg mL^{-1} para ART. Los resultados fueron expresados en miligramos equivalentes de glucosa por mililitro de bebida extraída (mg EG mL^{-1}). Todas las mediciones se realizaron por triplicado.

4.3.4. Determinación de fenoles totales y capacidad antioxidante (CA) FRAP y ABTS

La cuantificación de fenoles totales y la capacidad antioxidante (CA) mediante los ensayos ABTS (ensayo de decoloración con el radical catiónico ABTS $\bullet$ +) y FRAP (Ferric Reducing/Antioxidant Power) se evaluaron siguiendo las metodologías adaptadas a microplacas por Hernández-Rodríguez *et al.* (2019). El contenido de fenoles totales se determinó por el método de Folin-Ciocalteu, se usó ácido gálico como referencia y la curva de calibración en un intervalo de concentraciones de 2.5 a 29 $\mu\text{g mL}^{-1}$, las absorbancias se midieron a 760 nm y los resultados fueron expresados en miligramos equivalentes de ácido gálico por mililitro de bebida (mg EAG mL^{-1}). Para el ensayo ABTS y FRAP se utilizó trolox como antioxidante de referencia en concentraciones de 4.99 a 59.93 μM para ABTS y 3.8 a 46 μM para FRAP y se midió la absorbancia a 734 nm y 595 nm, respectivamente. Los resultados se expresaron en micromoles equivalentes de Trolox por mililitro de bebida ($\mu\text{mol ET mL}^{-1}$). Todas las lecturas y mediciones se realizaron por triplicado en un lector de microplacas multidetector con el software Gen5 (Biotek Instruments Inc. Winoosky, VT, USA).

4.3.5. Cuantificación de ácidos clorogénicos (ACG), cafeína (CF) y trigonelina (TG) en bebida de café

Los ácidos clorogénicos (ACG), la cafeína (CF) y la trigonelina (TG) se cuantificaron mediante cromatografía líquida de alta resolución (HPLC) conforme a la metodología propuesta por Flores-Hernández *et al.* (2023), con ligeras modificaciones. Para el análisis, 3 mL del extracto de la bebida diluida 1:10 se colocaron en viales ámbar y se filtraron con PTFE (0.45 μm , 13 mm). Las muestras se analizaron en un cromatógrafo de líquidos Agilent 1100 con inyector automático y detector de arreglo de diodos. Para ACG se utilizó una columna Hypersil™ ODS (125 $\times$ 4 mm, 5 μm), con una fase móvil de agua: acetonitrilo (65:35, v/v) ajustada a pH 2.5 con ácido trifluoroacético, a un flujo de 1 mL min⁻¹. Para CF y TG se utilizó una columna Nucleosil 100-5C18 Nautilus y la fase móvil de agua: acetonitrilo (75:25, v/v) a un flujo de 0.8 mL min⁻¹. La detección se llevó a cabo a 254 nm para ACG y a 273 nm para CF y TG. El tiempo de corrida fue de 27.5 min y 6 min respectivamente para ambos procesos, con un volumen de inyección de 20 μL . Todas las mediciones se hicieron por triplicado.

4.3.6. Análisis estadístico

Los resultados se evaluaron mediante un diseño completamente al azar con arreglo factorial, nivel de tostado (T), origen geográfico (R) y su interacción (R $\times$ T) sobre las propiedades fisicoquímicas, fitoquímicas y antioxidantes en bebidas de café. Para evaluar la significancia de los factores individuales y la interacción se utilizaron los modelos ANOVA. Finalmente se presentaron los valores medios $\pm$ desviación estándar para obtener la comparación de medias y gráficos de barras. Las diferencias entre los valores medios se establecieron mediante la prueba de Tukey ($p \leq 0.05$) utilizando el software estadístico InfoStat/L versión 2020.

4.4. Resultados y discusión

4.4.1. Propiedades fisicoquímicas

Los modelos ANOVA del Cuadro 1 para las propiedades fisicoquímicas se

obtuvieron con el fin de entender si los factores: región de origen (R), nivel de tueste (T) y su interacción (R x T), mostraban significancia. Para todos los modelos anova con número total de muestra (N) = 108 (3x3x4x3), los coeficientes de determinación (R^2) fueron mayores a 0.76 evidenciando que los modelos explican más del 76 % de la variabilidad del estudio fisicoquímico en las bebidas de café. El modelo correspondiente a los azúcares reductores totales (ART) presentó el mayor R^2 (0.84), seguido por el pH (0.79) y los azúcares totales (AT) con 0.76. Los coeficientes de variación (C_v) fueron de 6 % para pH, 11.85 % para ART y 21.92 % para AT, lo que indica una mayor estabilidad y reproducibilidad en la medición de pH y ART.

Cuadro 1. Análisis de varianza del análisis fisicoquímico de bebidas de café.

Variables	Estadísticos		p-valor / factores		
	R^2	C_v	R	T	R x T
pH	0.79	6.00 %	< 0.0001 ***	< 0.0001 ***	< 0.0001 ***
AT	0.76	21.92 %	0.0100 *	< 0.0001 ***	0.0013 *
ART	0.84	11.85 %	0.8226 ns	< 0.0001 ***	0.0063 *

*** Altamente significativo. * Significativo. ns: no significativo. N: Tamaño de la muestra, R^2 : Coeficiente de determinación. C_v : Coeficiente de variación. AT: Azúcares totales. ART.: Azúcares reductores totales. R: región de origen. T: nivel de tueste. R x T: interacción región por tueste.

Para pH y AT, el análisis de varianza (Cuadro 1) mostró que tanto la región de origen (R) como el nivel de tueste (T) presentaron efectos significativos de manera independiente, así como en su interacción (R x T). Para ART no se encontró significancia respecto a la región de origen (R) de forma independiente con un p-valor de 0.8226. Sin embargo, el efecto de la interacción sí presenta significancia sobre las tres variables fisicoquímicas, es decir, el nivel de tueste sobre el pH, los AT y los ART en las bebidas de café depende también de la región de origen.

Los valores medios ($\pm$ la desviación estándar) y la prueba de Tukey ($\alpha = 0.05$) para las variables pH y azúcares (AT y ART) respecto a la interacción R x T en las bebidas elaboradas a partir de granos de café verde y tostado se presentan en el Cuadro 2.

Cuadro 2. Propiedades fisicoquímicas de la bebida de café para un modelo de interacción entre región de origen y nivel de tueste.

Muestra	pH	AT (mg EG mL ⁻¹)	ART (mg EG mL ⁻¹)
Factores	R x T	R x T	R x T
CV	5.38 ± 0.54 ^{bc}	4.61 ± 0.76 ^a	0.56 ± 0.03 ^d
CT ₁	5.13 ± 0.26 ^b	2.12 ± 0.17 ^c	1.32 ± 0.10 ^{abc}
CT ₂	5.45 ± 0.12 ^{bcd}	1.85 ± 0.23 ^c	1.31 ± 0.11 ^{abc}
CT ₃	5.58 ± 0.12 ^b	1.80 ± 0.13 ^c	1.23 ± 0.07 ^{abc}
HV	6.10 ± 0.25 ^a	3.49 ± 0.79 ^b	0.68 ± 0.25 ^d
HT ₁	4.46 ± 0.12 ^e	2.47 ± 0.24 ^c	1.47 ± 0.15 ^a
HT ₂	4.87 ± 0.12 ^{de}	2.13 ± 0.17 ^c	1.22 ± 0.13 ^{bc}
HT ₃	5.21 ± 0.16 ^{bcd}	1.87 ± 0.25 ^c	1.09 ± 0.13 ^c
PV	6.58 ± 0.50 ^a	3.60 ± 1.39 ^b	0.69 ± 0.07 ^d
PT ₁	4.53 ± 0.29 ^e	1.86 ± 0.43 ^c	1.36 ± 0.15 ^{ab}
PT ₂	4.91 ± 0.15 ^{cde}	1.71 ± 0.17 ^c	1.22 ± 0.13 ^{bc}
PT ₃	5.42 ± 0.44 ^b	1.70 ± 0.26 ^c	1.12 ± 0.10 ^{bc}
DMS	0.50	0.97	0.23

Medias con una letra común en superíndice de una misma columna no son significativamente diferentes ($p > 0.05$). AT: Azúcares totales. ART.: Azúcares reductores totales. EG: Equivalente de glucosa. C: Neiva-Huila, Colombia, H: Huatusco-Veracruz, México, P: Ecatlán-Puebla, México. R xT: interacción región por tueste.

Como se muestra en el Cuadro 2, las bebidas más ácidas se registraron en las muestras de tueste bajo de Ecatlán-Puebla, México y Huatusco-Veracruz, México (PT₁ y HT₁) con un pH de 4.53 y 4.46 respectivamente ($p \leq 0.05$). Del mismo modo, las bebidas menos ácidas del estudio (mayor pH) se registraron para las bebidas elaboradas con café verde de las regiones HV y PV, con valores de 6.10 y 6.58 para Huatusco-Veracruz, México y Ecatlán-Puebla, México ($p \leq 0.05$) respectivamente. Estos resultados podrían estar influenciados por la baja extracción de compuestos ácidos ligados a estructuras complejas del café verde que impidió su detección. Finalmente se observó en bebidas de café verde de Neiva-Huila, Colombia (CV) valores más bajos de pH (5.38) ($p \leq 0.05$).

Se observó un patrón de disminución de pH de VT₁ ($p \leq 0.05$). Esta misma

tendencia fue reportada por Rune *et al.* (2023) y se explica considerando los cambios químicos que ocurren al inicio del proceso de tostado, en el cual la degradación de azúcares y la deshidratación del grano favorecen la formación de ácidos volátiles, como el acético y el fórmico (Freitas *et al.*, 2024), responsables de la mayor acidez en T₁. Se observó un patrón de aumento de pH desde T₁ a T₃. Esto se debe a la descomposición y volatilidad de los ácidos, y la generación de compuestos nitrogenados de carácter alcalino. Según reportes de la literatura, algunas piridinas derivadas de la trigonelina contribuyen al incremento del pH en los tuestes medios (T₂) y altos (T₃) (Somporn *et al.*, 2011). Estos resultados evidencian que la acidez del café no depende únicamente del contenido total de ácidos, sino también de su grado de transformación térmica y de la capacidad de extracción de estos en la bebida.

Los resultados de pH altos en el café verde podrían estar relacionados con la unión de los ácidos clorogénicos a las paredes celulares de la semilla de café verde, formando interacciones complejas con iones metálicos y otros componentes (Mehari *et al.*, 2020). Además, la unión covalente de dichos ácidos a los polisacáridos de la pared celular no permite su extracción en las condiciones que se aplicaron.

Los AT (Cuadro 2) muestran una tendencia de degradación lineal a medida que aumenta la intensidad del tueste ($p \leq 0.05$). Las bebidas obtenidas a partir de granos verdes de Neiva-Huila, Colombia (CV) presentaron mayor concentración con 4.61 ± 0.76 mg EG mL⁻¹ mientras que las de Ecatlán-Puebla, México de tuestes altos (PT₃) registraron los valores más bajos (1.70 ± 0.26 mg EG mL⁻¹). Sin embargo, este valor bajo mostró similitud estadística con todos los tratamientos tostados. Es decir, aunque no se encontraron diferencias estadísticas entre T₁, T₂ y T₃, sí se encontró frente a los tratamientos verdes (V) debido a la alta variabilidad encontrada entre ellos, lo que conllevó a una diferencia mínima significativa (DMS) alta que afectó la diferencia entre medias de los tratamientos tostados, pero sí se evidencia disminución de AT entre niveles de tueste, aunque significativamente no sean diferentes. Sin embargo, el Cuadro 2 permite observar la degradación de AT frente al factor térmico. El

comportamiento de la disminución progresiva en tratamientos de tostado confirma la transformación térmica de la sacarosa y otros azúcares simples, además de las reacciones de caramelización y Maillard, que transforman estos compuestos en otros más complejos o simplemente son degradados (Cardoso *et al.*, 2023). Los cambios durante el proceso de tostado contribuyen al desarrollo del color y aroma característicos del café, cambiando la composición química del grano, pero reduciendo la cantidad de azúcares solubles disponibles en la bebida final (Król *et al.*, 2020).

Los ART (Cuadro 2) aumentaron significativamente de V a T₁. Para el tratamiento HT₁ se obtuvo el valor más alto y los tratamientos verdes de las tres regiones mostraron el valor más bajo ($p \leq 0.05$). Sin embargo, el tratamiento HT₁ no presentó diferencias estadísticas con los tratamientos de tueste bajo de Neiva-Huila, Colombia (CT₁) y Ecatlán-Puebla, México (PT₁). Los resultados de ART mostraron un patrón de degradación uniforme con el aumento del tostado, es decir, desde T₁ hacia T₃ ($p \leq 0.05$).

El incremento inicial de azúcares en ART se atribuye a la hidrólisis parcial de polisacáridos y sacarosa (azúcares no reductores). Durante el inicio del tostado, se origina glucosa y fructosa (azúcares reductores) (Król *et al.*, 2020). Sin embargo, conforme se incrementa la temperatura y tiempo de tostado, estos compuestos son consumidos en reacciones de condensación y pardeamiento no enzimático (Hall *et al.*, 2022), lo que explica la disminución observada en los tratamientos tostados. Este fenómeno también ocurre para AT. Resultados similares reportados por Somporn *et al.* (2011) y Król *et al.* (2020), quienes describen la reducción de ART con el incremento de la temperatura de tostado, debido a interacción no enzimática entre ART y aminoácidos dando lugar a una amplia variedad de productos intermedios y finales, entre ellos las melanoidinas, compuestos muy importantes en la bebida de café que controlan gran parte de procesos químicos internos en el grano, siendo pigmentos de alto peso molecular responsables del oscurecimiento del grano y del desarrollo del aroma y sabor característicos del café tostado, así como compuestos con actividad antioxidante (Muzykiewicz-Szymanska *et al.*, 2021).

4.4.2. Fenoles totales y capacidad antioxidante en bebida de café

En el Cuadro 3 se presentan los parámetros estadísticos correspondientes a los modelos ANOVA para fenoles totales y capacidad antioxidante por los ensayos ABTS y CA FRAP.

Cuadro 3. Análisis de varianza de las propiedades antioxidantes en bebida de café.

Variables	Estadísticos		p-valor / factores		
	R ²	C _v	R	T	R x T
Fenoles totales	0.89	8.67 %	< 0.0001 ***	< 0.0001 ***	< 0.0001 ***
FRAP	0.83	10.16 %	< 0.0001 ***	< 0.0001 ***	< 0.0001 ***
ABTS	0.88	7.24 %	< 0.0001 ***	< 0.0001 ***	< 0.0001 ***

*** Altamente significativo. R²: Coeficiente de determinación, C_v: Coeficiente de variación.

Los factores, región de origen (R), nivel de tueste (T) y su interacción (R x T) se analizaron para entender su significancia. Para un número de muestra total (N) de 108 (3 x 3 x 4 x 3) se observa (Cuadro 3) que los coeficientes de variación o errores experimentales (C_v) fueron menores o iguales al 10 % para todas las variables. En particular, el ensayo ABTS mostró el menor C_v (7.29 %), seguido de fenoles totales (8.67 %) y el ensayo FRAP (10.16 %). En el mismo análisis se observó un coeficiente de determinación (R²) que se mantuvo entre el 83-88 % de la variabilidad de los modelos ANOVA evaluados. Finalmente se observó que el contenido de fenoles totales y la capacidad antioxidante por los ensayos ABTS y FRAP estuvieron influenciados por la región de origen (R), el nivel de tueste (N) y su interacción R x T (p < 0.0001). Por lo tanto, el nivel de tueste en estas variables depende de la región de origen.

Las medias ($\pm$ desviación estándar) para fenoles totales y la capacidad antioxidante por los ensayos ABTS y FRAP de la bebida de café mediante la prueba de Tukey (α = 0.05) se presentan en el Cuadro 4.

Los valores de capacidad antioxidante FRAP variaron entre 6.46 y 13.00 $\mu\text{mol ET mL}^{-1}$. Se observó que las bebidas de café de tueste bajo de Huatusco, Veracruz, México (HT₁) mostraron la mayor capacidad antioxidante por el ensayo

FRAP ($p \leq 0.05$), y los valores no muestran diferencias estadísticas con las muestras del mismo nivel de tostado de Neiva-Huila, Colombia (CT₁) y Ecatlán-Puebla, México (PT₁).

Cuadro 4. Propiedades antioxidantes de la bebida de café para un modelo de interacción región de origen y nivel de tueste.

Muestra	ABTS ($\mu\text{mol ET mL}^{-1}$)	FRAP ($\mu\text{mol ET mL}^{-1}$)	Fenoles totales (mg EAG mL ⁻¹)
Factores	R x T	R x T	R x T
CV	9.02 $\pm$ 1.15 ^d	8.97 $\pm$ 1.37 ^d	1.42 $\pm$ 0.09 ^{de}
CT ₁	11.53 $\pm$ 0.40 ^{bc}	12.42 $\pm$ 0.84 ^{ab}	2.04 $\pm$ 0.10 ^a
CT ₂	7.83 $\pm$ 0.73 ^d	8.56 $\pm$ 0.66 ^{de}	1.74 $\pm$ 0.17 ^{bc}
CT ₃	9.05 $\pm$ 0.79 ^d	6.99 $\pm$ 0.79 ^f	1.58 $\pm$ 0.07 ^{cd}
HV	8.98 $\pm$ 1.03 ^d	7.42 $\pm$ 1.13 ^{ef}	0.92 $\pm$ 0.11 ^f
HT ₁	14.00 $\pm$ 0.60 ^a	13.00 $\pm$ 0.65 ^a	2.02 $\pm$ 0.12 ^a
HT ₂	12.31 $\pm$ 0.74 ^b	11.14 $\pm$ 1.06 ^{bc}	1.88 $\pm$ 0.16 ^{ab}
HT ₃	13.82 $\pm$ 0.64 ^a	9.66 $\pm$ 1.41 ^{cd}	1.75 $\pm$ 0.16 ^{bc}
PV	8.91 $\pm$ 0.77 ^d	6.46 $\pm$ 0.62 ^f	0.95 $\pm$ 0.14 ^f
PT ₁	12.18 $\pm$ 0.90 ^b	11.81 $\pm$ 1.47 ^{ab}	1.71 $\pm$ 0.23 ^{bc}
PT ₂	10.84 $\pm$ 0.80 ^c	9.90 $\pm$ 0.55 ^{cd}	1.44 $\pm$ 0.10 ^{de}
PT ₃	11.64 $\pm$ 0.58 ^{bc}	8.69 $\pm$ 0.66 ^{de}	1.31 $\pm$ 0.08 ^e
DMS	1.23	1.53	0.21

Las medias con una letra común en superíndice de una misma columna no son significativamente diferentes ($p > 0.05$). EAG: Equivalente de ácido gálico, ET: equivalentes de trolox. T₁: tueste bajo, T₂: tueste medio, T₃: tueste alto, V: Café verde sin tostar. C: Neiva-Huila, Colombia, H: Huatusco-Veracruz, México, P: Ecatlán-Puebla, México.

Por otro lado, las muestras de tuestes altos de Neiva-Huila, Colombia (CT₃) y cafés verdes de Huatusco-Veracruz, México (HV) y Ecatlán-Puebla, México (PV) tuvieron los valores más bajos de capacidad antioxidante ($p \leq 0.05$). Según estos resultados se demostró un patrón de disminución de la capacidad antioxidante FRAP en bebidas de café con el aumento del tueste. Estos resultados coinciden con los reportes de Agunbiade *et al.* (2022), quienes observaron una reducción en la capacidad antioxidante de los granos conforme aumentó el nivel de tostado, atribuida a la degradación térmica de los ACG y otros compuestos bioactivos

responsables del poder reductor del café (Garret y Rezende, 2016).

En el Cuadro 4 se observa que el contenido fenólico total en las bebidas de café mostró diferencias significativas asociadas con la interacción entre la región de origen y el nivel de tostado ($p \leq 0.05$). Los valores oscilaron entre 0.92 y 2.04 mg EAG mL⁻¹. El mayor contenido fenólico se observó en las muestras sometidas a tueste bajo (T₁), de las bebidas elaboradas con café proveniente de Huatusco-Veracruz, México y Neiva-Huila, Colombia ($p \leq 0.05$). Los valores más bajos se registraron en los tratamientos de café verde, aunque en los tratamientos tostados, el tueste alto de las bebidas de Ecatlán-Puebla, México (PT₃) fueron los más bajos ($p \leq 0.05$). No se observan diferencias estadísticas entre varias bebidas de tueste medio (T₂) y bajo (T₁) para las tres regiones. Se siguió un patrón similar a FRAP, donde las muestras con tueste bajo mostraron la mayor concentración de compuestos fenólicos y los tratamientos elaborados con café verde la menor concentración ($p \leq 0.05$). Además, se identificó el aumento de la concentración de compuestos fenólicos totales en la primera etapa del tostado de V hacia T₁ en las tres regiones, explicado por la formación de nuevos compuestos fenólicos y productos intermedios derivados de las reacciones de Maillard, además de la liberación de ácidos clorogénicos de la matriz celular del grano verde tras el calor del tostado (Farah, 2012).

La capacidad por el ensayo ABTS aumentó desde el café verde (V) al tueste bajo (T₁) en las tres regiones ($p \leq 0.05$), los valores más altos correspondieron a las bebidas elaboradas con café de tueste bajo de Huatusco-Veracruz, México HT₁ (14 µmol ET mL⁻¹), sin mostrar diferencia estadística con HT₃. Se observó una tendencia de disminución en T₂ conforme incrementó el nivel de tostado y aumento nuevamente en los tuestes altos (T₃) ($p \leq 0.05$). Feng *et al.* (2022) interpretan en los granos de café el aumento en tuestes altos (T₃) como la ganancia de otros compuestos antioxidantes producidos durante el tostado, las melanoidinas, y aunque en un primer momento, las bebidas elaboradas con café de tostado medio (T₂) disminuyen su capacidad antioxidante ABTS con la pérdida de los ACG, conforme aumenta el tueste en T₃, esta aumenta, siendo capaz de detectar otros antioxidantes.

Los valores más bajos de capacidad antioxidante ABTS se presentaron en bebidas de tueste medio de Neiva-Huila, Colombia (CT₂) y café verde de Ecatlán-Puebla, México (PV) ($p \leq 0.05$). Según Cardoso *et al.* (2023), el tostado inicial de los granos de café favorece la despolimerización de ácidos clorogénicos y la formación de nuevos productos fenólicos derivados de las reacciones de Maillard, razón por la que aumenta de tratamientos verdes a tuestes bajos, no obstante, conforme avanza el tostado, los compuestos fenólicos se degradan o volatilizan, lo que explica la reducción de T₁ a T₂ (Babková *et al.*, 2020).

La concentración de compuestos fenólicos totales en las bebidas de café verde podría estar subestimada debido a que su liberación en la infusión estaría limitada por la matriz celular compacta, cerosa y rica en polisacáridos que dificulta la penetración del agua caliente durante la preparación de la infusión por lo que no es posible detectar los compuestos antioxidantes internos en estas matrices (Mehari *et al.*, 2020). Según Fuller y Rao (2017) los ácidos clorogénicos, se encuentran fuertemente asociados a proteínas y a la pared celular, además de formar complejos con iones metálicos y otros componentes, por ello, su extracción acuosa es limitada.

Para las bebidas de café verde, a pesar de que los tratamientos de bebidas de Neiva-Huila, Colombia (CV) iniciaron con mayor potencial (Cuadro 4), el método de transferencia de calor llevado a cabo en el proceso de tostado fue un factor determinante y aunque no se evaluó la tostadora como factor de variación, se entiende que esta variable mostró una gran variación en los modelos, razón por la cual, los cafés de colombianos mostraron un descenso mayor de antioxidantes con el aumento del tueste, explicado por la repercusión del equipo tostador usado en el procesamiento de los granos.

Los granos de café de Neiva-Huila, Colombia (C), fueron tostados en un equipo tostador de tambor y los cafés de México (H y P), en un tostador de tambor eléctrico. El tostador de tambor utiliza principalmente conducción y presenta transferencia de calor más lenta, lo que obliga a tiempos de tueste más largos para alcanzar el mismo nivel de tueste con otros equipos (Mark Al-Shemmeri *et al.*, 2023). La tostadora convencional es más antigua que la tostadora eléctrica,

lo que pudo influir en el tostado de los granos. Estas diferencias deben ser consideradas de forma relevante, ya que la química del grano de café es altamente sensible a cambios térmicos (Brown y Lattimer, 2013) y al estar más tiempo dentro de un equipo, los compuestos fenólicos de los cafés de Neiva-Huila, Colombia (C) sufrieron posiblemente una degradación termolábil más severa frente a los de México (H y P).

En el cuadro 4 se observa que los valores de capacidad antioxidante por el ensayo ABTS fueron más altos frente a los FRAP ($p \leq 0.05$). Según Feng *et al.* (2022) el reactivo ABTS es capaz de reaccionar tanto con compuestos hidrofílicos como lipofílicos, lo que le genera mayor alcance en la matriz química del café. Por su parte, el reactivo FRAP es más selectivo e incluso no detecta todos los antioxidantes que el ABTS sí logra captar.

4.4.3. Contenido de ácidos clorogénicos (ACG), cafeína (CF) y trigonelina (TG) de la bebida de café

El análisis de varianza para los ácidos clorogénicos (ACG), la cafeína (CF) y la trigonelina (TG) se muestra en el Cuadro 5. Con un total de muestra (N) de 72 (3 x 3 x 4 x 2), el coeficiente de determinación (R^2) para TG, ACG y CF demostró que los modelos explicaron el 67 %, 79 % y 87 % de variabilidad respectivamente. El error experimental o coeficiente de variación (C_v) fue mayor en ACG con el 22.03 %, seguido de TG y CF con 13.88 % y 13.08 % respectivamente, lo que explica mejor reproducibilidad de los datos para CF y TG.

Cuadro 5. Análisis de varianza del contenido de bioactivos en bebida de café.

Variables	Estadísticos		p-valor / factores		
	R^2	C_v	R	T	R x T
ACG	0.79	22.03 %	< 0.0001 ***	< 0.0001 ***	< 0.0016 *
CF	0.67	13.08 %	< 0.0001 ***	< 0.0001 ***	0.2238 ns
TG	0.87	13.88 %	0.0002 *	< 0.0001 ***	< 0.0001 ***

***Altamente significativo. *Significativo. N: Tamaño de la muestra, R^2 : Coeficiente de determinación. C_v : Coeficiente de variación.

En ACG y TG se encontró que la región de origen (R), el nivel de tueste (T) y su

interacción (R x T) mostraron un efecto significativo sobre las variables dependientes. Sin embargo, para CF no se encontró significancia en la interacción (p -valor = 0.2238), por lo que el modelo R x T no explica la variabilidad de los datos, pero sí mostró significancia de forma independiente de R y T ($p < 0.0001$).

El Cuadro 6 muestra la comparación de medias ($\pm$ desviación estándar) de prueba de Tukey ($\alpha = 0.05$) para la interacción R x T de ACG y TG, revelando diferencias significativas claras. Los ácidos clorogénicos (ACG) mostraron un comportamiento similar a los fenoles totales (Cuadro 4), con la única diferencia de mayor concentración en los tratamientos de bebidas elaboradas con grano verde, debido a la diferencia metodológica entre la identificación de compuestos por cromatografía líquida vs espectrofotometría. Por lo tanto, los cafés verdes presentaron las mayores concentraciones de CGA del estudio, siendo Neiva-Huila, Colombia (CV) el de los valores de ACG más elevados, similar estadísticamente a los de Huatusco-Veracruz, México (HV) ($p \leq 0.05$).

Los valores de ACG variaron entre 559.00 ± 55.61 a $1,768.34 \pm 395.10 \mu\text{g mL}^{-1}$, este contenido representa aproximadamente 1.01 a $3.21 \text{ g } 100 \text{ g}^{-1}$ (datos promedios calculados usando la concentración de extracción 0.055 g mL^{-1}), resultados muy similares a los reportados por Viencz *et al.* (2023) con valores de 3.93 a $6.37 \text{ g } 100 \text{ g}^{-1}$, 5.75 g de CGA 100 g^{-1} (Portela *et al.* 2021) y $2 \text{ g } 100 \text{ g}^{-1}$ (Klikarová *et al.*, 2022).

Para todos los tratamientos se observó un patrón de disminución de ACG por el aumento del tueste, tal y como ocurrió con los fenoles totales ($C > T_1 > T_2 > T_3$). Este comportamiento confirma que el proceso de tostado modifica de manera importante la concentración de ACG, observándose su degradación conforme aumenta la intensidad térmica (Valerio-Ávila *et al.*, 2025; Trugo y Macrae, 1984). Esto puede estar relacionado con la matriz química del grano de café, que favorece la extracción de compuestos hidrosolubles en tuestes bajos, mientras que, en condiciones térmicas intensas, los ACG son susceptibles a la degradación (Valerio-Ávila *et al.*, 2025). Según Pinheiro *et al.* (2021) a medida que aumenta el tueste los ACG sufren cambios estructurales por las reacciones

de oxidación, hidrólisis e isomerización, dando como resultado una pérdida progresiva de ACG, que son transformados en compuestos de menor peso molecular como lactonas y derivados fenólicos.

Cuadro 6. Análisis de compuestos bioactivos de la bebida de café para un modelo de interacción entre región de origen y nivel de tueste.

Muestra	ACG ($\mu\text{g mL}^{-1}$)	TG ($\mu\text{g mL}^{-1}$)
Factores	R x T	R x T
CV	1768.34 $\pm$ 395.10 ^a	342.29 $\pm$ 82.54 ^b
CT ₁	949.25 $\pm$ 116.82 ^{cd}	319.16 $\pm$ 47.29 ^{bc}
CT ₂	891.76 $\pm$ 119.53 ^{cd}	297.79 $\pm$ 24.72 ^{bcd}
CT ₃	631.45 $\pm$ 47.71 ^d	252.25 $\pm$ 14.71 ^{cdef}
HV	1596.40 $\pm$ 118.25 ^{ab}	506.27 $\pm$ 75.02 ^a
HT ₁	1514.07 $\pm$ 532.76 ^{ab}	288.16 $\pm$ 30.17 ^{abcdef}
HT ₂	1191.35 $\pm$ 310.89 ^{bc}	216.49 $\pm$ 51.49 ^{ef}
HT ₃	617.77 $\pm$ 114.30 ^d	222.70 $\pm$ 26.14 ^{def}
PV	1298.17 $\pm$ 74.31 ^{bc}	566.17 $\pm$ 24.39 ^a
PT ₁	868.66 $\pm$ 76.59 ^{cd}	337.31 $\pm$ 34.08 ^{bc}
PT ₂	613.31 $\pm$ 152.98 ^d	308.79 $\pm$ 49.04 ^{bcd}
PT ₃	559.00 $\pm$ 55.61 ^d	205.62 $\pm$ 7.72 ^f
DMS	450.41	87.74

Medias con una letra común en superíndice de una misma columna no son significativamente diferentes ($p > 0.05$). ACG: ácidos clorogénicos. TG: trigonelina, R: factor región de origen, T: factor nivel de tueste, T₁: tueste bajo, T₂: tueste medio, T₃: tueste alto, V: Café verde sin tostar, C: Neiva-Huila, Colombia, H: Huatusco-Veracruz, México, P: Ecatlán-Puebla, México.

Además, al hidrolizarse o isomerizarse, contribuyen significativamente al aroma y sabor del producto final y, por lo tanto, son responsables de la astringencia de la bebida (Farah y Donangelo, 2006; Ayelign y Sabally 2013).

Los valores más bajos de ACG se mostraron en las bebidas de tueste alto (T₃) de las tres regiones (T₃) con similitud estadística a las de tueste medio de Ecatlán-Ecatlán-Puebla, México (PT₂). Los cafés de Huatusco-Veracruz, México presentaron las mejores concentraciones de ACG para café tostado, seguido de las de Neiva-Huila, Colombia y finalmente las de Ecatlán-Puebla, México ($p \leq$

0.05).

El mayor contenido de ACG en cafés verdes de Neiva-Huila, Colombia (CV) podría estar asociado con las características propias del origen, como altitud, condiciones edafoclimáticas del mismo país y la densidad del grano. Sin embargo, los cafés México, podrían mostrar mayor contenido de fenólicos y ACG en tratamientos tostados, por el tipo de cultivo orgánico y bajo sombra, ya que, además, la falta de insumos sintéticos puede estimular en cultivos orgánicos rutas biosintéticas, en particular la del ácido shiquímico para biosintetizar fenilpropanoides, como los ACG, flavonoides y otros fenoles, (Kwon *et al.*, 2010; Tajik *et al.*, 2017; Naveed *et al.*, 2018). Los ACG son metabolitos antioxidantes en las plantas de café (Lafarga *et al.*, 2020; Farah y Donangelo, 2006), que la protegen frente a la radiación UV, además de regular su lignificación y maduración (Lafarga *et al.*, 2020; Sharma *et al.*, 2012). Además, como se mencionó anteriormente, el contenido de ACG también puede verse afectado por el efecto de la tostadora usada en el procesamiento de los granos. Este efecto no se midió en este estudio, pero se sugiere que es posiblemente un factor significativo en la variabilidad de los datos.

La trigonelina (TG) mostró diferencias significativas notables en la interacción de los factores región de origen y nivel de tueste (Cuadro 6). Se observó un patrón importante de disminución de este compuesto a medida que aumentó el tueste en las tres regiones ($V > T_1 > T_2 > T_3$). Las bebidas con mayor contenido de trigonelina fueron los cafés verdes de México (H y P) ($p \leq 0.05$). Los cafés de tueste alto (T_3) de las tres regiones mostraron los valores más bajos de trigonelina ($p \leq 0.05$), evidenciando la pérdida de este compuesto por acción del calor del tostado (Munyendo *et al.*, 2021).

Los valores de trigonelina variaron de 205.62 ± 7.92 a $566.17 \pm 75.02 \mu\text{g mL}^{-1}$ (Cuadro 6), resultados similares a los reportados por Mori *et al.* (2020) donde observaron contenidos de trigonelina en cafés de Brasil de 206 a $413 \mu\text{g mL}^{-1}$, similares a los valores de trigonelina de este estudio ($0.37 - 1.02 \text{ g } 100 \text{ g}^{-1}$), calculados usando la concentración de 0.055 g mL^{-1} . Otros valores muy similares a los reportados en la literatura 0.07 a $0.68 \text{ g } 100 \text{ g}^{-1}$ (Dias y Benassi, 2015,

Kalschne *et al.*, 2019), 0.60 a 1.15 g 100 g⁻¹ (Viencz *et al.*, 2023) y 0,62 y 1,27 g 100 g⁻¹ (Wale *et al.*, 2024) fueron similares.

La Figura 19 muestra el contenido de cafeína (CF) en las bebidas de café evaluadas, donde se identifica un patrón de crecimiento a medida que aumenta el tueste ($p \leq 0.05$). Con los valores más altos en cafés de tueste alto (T₃) de México. Los cafés de Neiva, Colombia, presentaron los valores más bajos de cafeína.

Los valores de cafeína variaron entre 308.00 y 565.06 µg mL⁻¹, los cuales representan un valor aproximado de 0.56 a 1.02 g 100 g⁻¹. Resultados similares a los reportados por Wale *et al.* (2024) con 0.78 y 1.55 % g 100 g⁻¹.

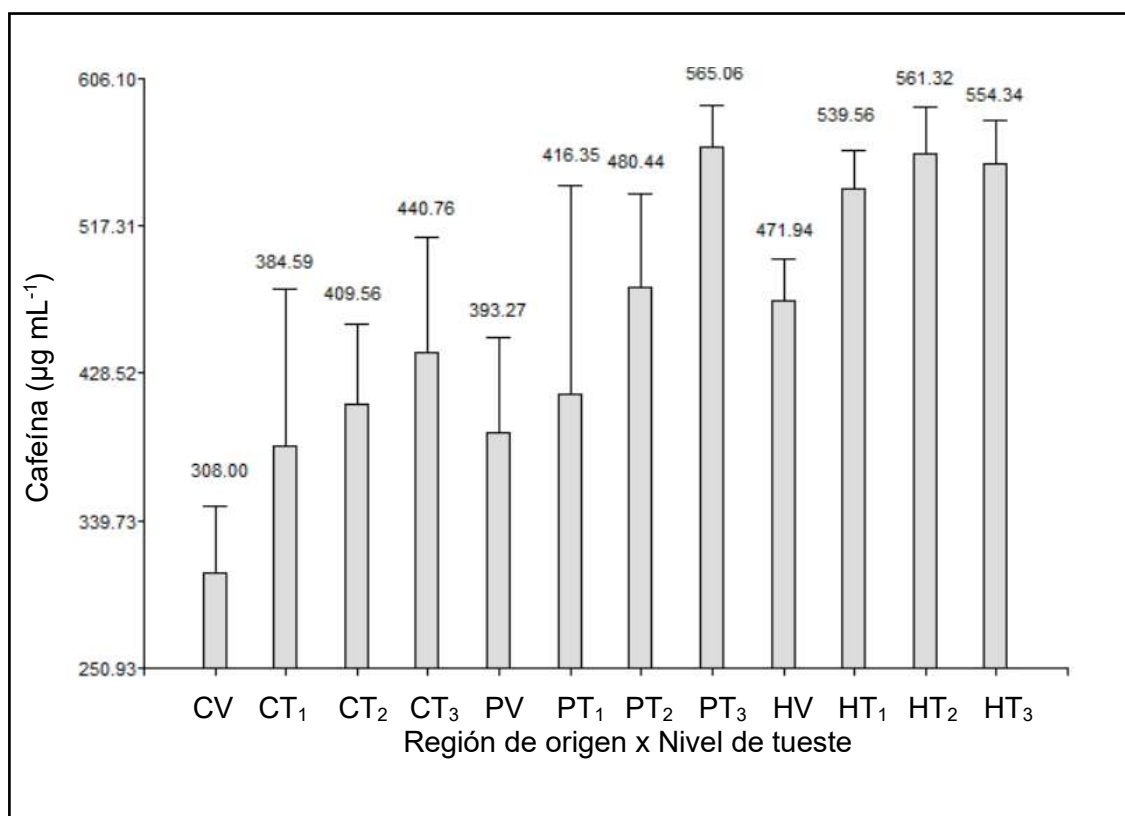


Figura 19. Cuantificación de cafeína en bebidas de café. T1: tueste bajo, T2: tueste medio, T3: tueste alto, V: café sin tostar. C: Neiva-Huila, Colombia, P: Ecatlán-Puebla, México, H: Huatusco-Veracruz, México.

A diferencia de lo que les ocurre a los fenoles totales, los ácidos clorogénicos y la trigonelina, la cafeína es demasiado estable frente al calor, por lo tanto, también lo será al tueste (Munyendo *et al.*, 2021). A medida que el grano pierde agua y masa durante el tueste, se vuelve más ligero, y aunque la cafeína no se

destruye ni aumenta, se observa que la concentración de cafeína parece aumentar ligeramente (Figura 19), esto es debido al aumento de la concentración por pérdida de peso, aunque en realidad la cafeína se está manteniendo estable (Wale *et al.*, 2024).

4.5. Conclusiones

Los resultados de esta investigación confirman que el nivel de tueste, la región de origen y la interacción son importantes para determinar el perfil de acidez, azúcares, compuestos fenólicos y compuestos bioactivos en la bebida de *Coffea arabica* L. Se evidenció que las transformaciones químicas del tostado en el grano impactan directamente en las propiedades de la bebida de café.

Se demostró que el tueste bajo representa un punto de equilibrio ideal; en este tueste, la posible formación de nuevas moléculas antioxidantes compensa la degradación térmica de los ácidos clorogénicos, lo que se traduce en niveles óptimos de capacidad antioxidante. Por el contrario, los tuestes medios y altos mostraron una caída progresiva en las variables de estudio. Un tueste alto da como resultado bebidas menos ácidas, con una carga notablemente menor de azúcares y antioxidantes. Los ácidos clorogénicos y la trigonelina evidenciaron un patrón de disminución con el aumento del nivel de tueste mientras la cafeína se mantuvo relativamente estable.

En cuanto al origen, los cafés de Huatusco-Veracruz, México destacaron por presentar el mayor potencial funcional en bebidas tostadas y los cafés de Neiva-Huila, Colombia en bebidas de café verde, sugiriendo una influencia clara de las condiciones agroclimáticas del lugar y posiblemente un factor diferencial en el equipo tostador.

Para futuros estudios, se recomienda estandarizar el factor del equipo de tostado y la persona tostadora o incluirlo formalmente como una variable de estudio adicional.

4.6. Agradecimientos

Con profundo agradecimiento, reconozco a la Secretaría de Ciencia, Humanidades, Tecnología e Innovación (SECIHTI) por la beca otorgada, cuyo

apoyo fue fundamental para hacer posible esta investigación y continuar mi formación académica. Extiendo mi sincera gratitud a la Universidad Autónoma de Chapingo, al Centro Regional Universitario Oriente (CRUO) y al Centro Surcolombiano de Investigación en café (CESURCAFÉ) por abrirme sus puertas, brindarme su acompañamiento, conocimientos y el espacio para crecer como investigadora. Manifiesto igualmente mi gratitud al M.C. Rubén San Miguel Chávez y al Dr. Ramón Marcos Soto Hernández, por su valiosa guía, sus aportes y el acompañamiento brindado en el laboratorio de Fitoquímica del Colegio de Postgraduados, elementos que resultaron esenciales para la realización de esta investigación.

4.7. Literatura citada

- Agunbiade, H.O., Fagbemi, T.N., & Aderinola, T.A. (2022). Antioxidant properties of beverages from graded mixture of green/roasted coffee and Hibiscus sabdariffa calyx flours. *Applied Food Research*, 2 (2). <https://doi.org/10.1016/j.afres.2022.100163>
- Mark Al-Shemmeri, Kit Windows-Yule, Estefania Lopez-Quiroga, Peter J. Fryer. (2023). Coffee bean particle motion in a rotating drum measured using Positron Emission Particle Tracking (PEPT). *Food Research International*, 163, 112253. <https://doi.org/10.1016/j.foodres.2022.112253>
- Ayelnig, A., & Sabally, K. (2013). Determination of chlorogenic acids (CGA) in coffee beans using HPLC. *American Journal of Research Communication*, 1(2), 78–91.
- Bahamón Monje, A.F., Parrado, L.X., & Gutiérrez-Guzmán, N. (2018). Atr-ftir for discrimination of espresso and americano coffee pods. *Coffee Science*, 13(4), 550 – 558. coffeescience.ufra.br/index.php/Coffeescience/article/view/1499/PDF1499
- Bobková, A., Hudáček, M., Jakabová, S., Belej, L., Capcarová, M., Čurlej, J., Bobko, M., Árvay, J., Jakab, I., Čapla, J., ...Demianová, A. (2020). The effect of roasting on the total polyphenols and antioxidant activity of coffee. *Journal of Environmental Science and Health*, 55, 1-6. <https://doi.org/10.1080/03601234.2020.1724660>.
- Brown, S.L & Lattimer, B.Y. (2013). Transient gas-to-particle heat transfer measurements in a spouted bed. *Experimental Thermal and Fluid Science*, 44, 883-892, <https://doi.org/10.1016/j.expthermflusci.2012.10.004>

- Cardoso, W.S., Rodrigues, D.S., Coelho, L.V.S., Louzada, P.L., Bassini, F.D. & Flávia de Abreu Pinheiro. (2023). Maillard reaction precursors and arabica coffee (*Coffea arabica* L.) beverage quality. Food and Humanity, 1, 1-7. doi: <https://doi.org/10.1016/j.foohum.2023.01.002>
- Clifford, M.N., Jaganath, I.B., Ludwing, I.A., & Crozier, A. (2017). Chlorogenic acids and the acyl-quinic acids: discovery, biosynthesis, bioavailability and bioactivity. Natural Product Reports, 34(12), 1391-1421. <https://doi.org/10.1039/c7np00030h>.
- de Melo Pereira, G. V., de Carvalho Neto, D. P., Magalhaes Júnior, A. I., Vásquez, Z. S., Medeiros, A. B. P., Vandenberghe, L. P. S., ...Socol, C.R. (2019). Exploring the impacts of postharvest processing on the aroma formation of coffee beans – a review. Food Chemistry, 272, 441–452. <https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2018.08.061>.
- de Souza Costa, A.M., Soares, A.L., de Souza Silveira, L., Verdin. F.A., Louzada, P., Moreira, O.V., Fronza, M., ...Scherer, R. (2024). Influence of maturation and roasting on the quality and chemical composition of new conilon coffee cultivar by chemometrics. Food Research International, 176, <https://doi.org/10.1016/j.foodres.2023.113791>
- Dias RCE y Benassi MT (2015) Discrimination between Arabica and Robusta coffees using hydrosoluble compounds: Is the efficiency of the parameters dependent on the roast degree. Beverages 1:127-139. <https://doi.org/10.3390/beverages1030127>
- Díaz, F.O., Ormaza, A.M. and Rojano, B.A. (2018). Efecto de la Tostión del Café (*Coffea arabica* L. var. Castillo) sobre el Perfil de Taza, Contenido de Compuestos Antioxidantes y la Actividad Antioxidante. Información Tecnológica. 29(4), 31-42.
- Farah, A., & Donangelo, C. M. (2006). Phenolic compounds in coffee. Brazilian Journal of Plant Physiology, 18(1), 23–36.
- Farah. (2012). Coffee Constituents. Y.-F. Chu (Ed.), Coffee: Emerging Health Effects and Disease Prevention (4.ed.), John Wiley & Sons, London, UK. 21-58, <https://doi.org/Doi:10.1002/9781119949893.ch2>.
- Feng, J., Berton-Carabin, C.C., Fogliano, V., Schroën, K (2022). Maillard reaction products as functional components in oil-in-water emulsions: A review highlighting interfacial and antioxidant properties. Trends in Food Science & Technology, 121, 129-141. <https://doi.org/10.1016/j.tifs.2022.02.008>
- Flores-Hernández BK, Arévalo-Galarza ML, San Miguel-Chávez R, Espinosa Zaragoza S, Pérez-Díaz ND, Aguilar- Rincón VH. 2023. Post-harvest characteristics of mango fruits (*Mangifera* sp.) From Soconusco, Chiapas. Agrociencia. doi.org/10.47163/agrociencia. v57i1.2546
- Freitas, V.V., Rodrigues B.L.L., Días, C.G.A, Almeida, L.F., Crepalde, L.T., dos Barros Kobi, H., Teixeira, R.V.M.C., dos Santos, M.H., Fernandes, S.A.,

- Maitan-Alfenas, G.P., ...Stringheta, P.C. (2024). Influence of roasting levels on chemical composition and sensory quality of Arabica and Robusta coffee: A comparative study. Food Bioscience. 59. <https://doi.org/10.1016/j.fbio.2024.104171>
- Fuller, M. & Rao, N.Z. (2017). The Effect of Time, Roasting Temperature, and Grind Size on Caffeine and Chlorogenic Acid Concentrations in Cold Brew Coffee. Scientific Reports, 7(1), 17979. Doi:10.1038/s41598017182474.
- Garrett, C.M., & Rezende, D.R. (2016). Revealing the spatial distribution of chlorogenic acids and sucrose across coffee bean endosperm by desorption electrospray ionization-mass spectrometry imaging. LWT, 65, 711-717. <https://doi.org/10.1016/j.lwt.2015.08.062>
- Hall, R. D., Trevisan, F., & de Vos, R. C. (2022). Coffee berry and green bean chemistry—Opportunities for improving cup quality and crop circularity. Food Research International, 151. <https://doi.org/10.1016/j.foodres.2021.110825>.
- Hao JW, Wang WT, Chen ND, Shen Y (2025) Identification of 13 natural antioxidants in green calyx plum using AAPH, ABTS, and FRAP-coupled HPLC-DAD via QTOF-MS/MS. Food Chemistry 477: 143568. <https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2025.143568>.
- Hernández-Rodríguez, G., Espinosa-Solares, E., Pérez-López, A., Salgado-Escobar, I., & Guerra-Ramírez, D. (2019). Antioxidant capacity of capulin (*Prunus serotina* subsp. *capuli* (Cav). McVaugh) fruit at different stages of ripening. Ecosistemas y Recursos Agropecuarios, 6(16), 35-44. <https://doi.org/10.19136/era.a6n16.1947>
- Jeszka, S.M., Frankowski, R., & Zgoła, A. (2020). Comparison of methylxantines, trigonelline, nicotinic acid, and nicotinamide contents in brews of green and processed Arabica and Robusta coffee beans – influence of steaming, decaffeination, and roasting processes on coffee beans. Lebensmittel-Wissenschaft & Technologie. 125. <https://doi.org/10.1016/j.lwt.2020.109344>
- Kalschne DL, Viegas MC, De Conti AJ, Corso MP, Benassi MT (2019). Effect of steam treatment on the profile of bioactive compounds and antioxidant activity of defective roasted coffee (*Coffea canephora*). LWT 99: 364-370. <https://doi.org/10.1016/j.lwt.2018.09.080>
- Klikarová J, Řeháková B, Česlová L (2022) Evaluation of regular and decaffeinated (un)roasted coffee beans using HPLC and multivariate statistical methods J. Food Compos. Anal. 114: 104841. <https://doi.org/10.1016/j.jfca.2022.104841>
- Król, K., Gantner, M., Tatarak, A. & Hallmann, E. (2020). The content of polyphenols in coffee beans as roasting, origin and storage effect. European Food Research and Technology, 246, 33-39. <https://doi.org/10.1007/s00217-019-03388-9>

- Kwon, S.-H., Lee, H.-K., Kim, J.-A., Hong, S.-I., Kim, H.-C., Jo, T.-H., ..., Jang, C.-G. (2010). Neuroprotective effects of chlorogenic acid on scopolamine-induced amnesia via anti-acetylcholinesterase and anti-oxidative activities in mice. *European Journal of Pharmacology*, 649(1–3), 210–217.
- Mehari, B., Chandravanshi, B.S., Redi-Abshiro, M., Combrinck, S. McCrindle, R. & Atlabachew, M. (2020). Polyphenol contents of green coffee beans from different regions of Ethiopia. *International Journal of Food Properties*, 24 (1), 17-27. <https://doi.org/10.1080/10942912.2020.1858866>
- Mori ALB, Viegas MC, Ferrão MAG, Fonseca AFA, Ferrão RG, Benassi MT (2020) Coffee brews composition from *Coffea canephora* cultivars with different fruit-ripening seasons. *Br. Food J.* 122: 827-840. <https://doi.org/10.1108/BFJ-03-2019-0203>
- Munyendo LM, Njoroge DM, Owaga EE, Mugendi B (2021) Coffee phytochemicals and post-harvest handling - a complex and delicate balance. *J. Food Compos. Anal.* 102: 1-11, <https://doi.org/10.1016/j.jfca.2021.103995>
- Muzykiewicz-Szymańska, A., Nowak, A., Wira, D., & Klimowicz, A. (2021). The effect of brewing process parameters on antioxidant activity and caffeine content in infusions of roasted and unroasted arabica coffee beans originated from different countries. *Molecules*, 26, 3681 <https://doi.org/10.3390/molecules26123681>
- Naveed, M., Hejazi, V., Abbas, M., Kamboh, A. A., Khan, G. J., Shumzaid, M., ..., Xiaohui, Z. (2018). Chlorogenic acid (CGA): A pharmacological review and call for further research. *Biomedicine & Pharmacotherapy*, 97, 67–74.
- Pacetti, D., Lucci, P. & Frega, N.G. (2015). Chapter 13 - Unsaponifiable matter of coffee. *Coffee in health and disease prevention*, 119-127. <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-409517-5.00013-9>
- Paiva, C., Beserra, B., Reis, C., Dorea, J.T, Da Costa, T. & Amato, A.A. (2019). Consumption of coffee or caffeine and serum concentration of inflammatory markers: A systematic review. *Critical Reviews in Food Science and Nutrition*, 59 (4), 652-663. <https://doi.org/10.1080/10408398.2017.1386159>.
- Parrado Muñoz, L.X., Guerra-Ramírez, D., Cruz-Castillo, J.G., Martínez-Solis, J., & Peña-Ortega, M.G. (2024). Bioactive compounds and physicochemical attributes of loquat fruits in Mexico. *Revista Facultad Nacional de Agronomía*, 77(2), 10789-10796. <https://doi.org/10.15446/rfnam.v77n2.105976>
- Peña-Correa, R.F., Mogol, B.A., van Boekel, M.A.J.S., Fogliano, V. (2022). Fluidized bed roasting of cocoa nibs speeds up processing and favors the formation of pyrazines. *Innovative Food Science & Emerging Technologies*. 79, 103062. <https://doi.org/10.1016/j.ifset.2022.103062>.

- Pinheiro, P.F., Pinheiro, C.A., Osório, V.M., Pereira, L.L. (2021). Chemical Constituents of Coffee. In: Louzada Pereira, L., Rizzo Moreira, T. (eds) Quality Determinants in Coffee Production. Food Engineering Series. Springer, Cham. https://doi.org/10.1007/978-3-030-54437-9_5.
- Portela CS, Almeida IF, Mori ALB, Yamashita F, Benassi MT (2021) Brewing conditions impact on the composition and characteristics of cold brew Arabica and Robusta coffee beverages. LWT 143: 111090. <https://doi.org/10.1016/j.lwt.2021.111090>
- Somporn, A., Kamtuo, P., Theerakulpisut, S. & Siriamornpun. (2011). Effects of roasting degree on radical scavenging activity, phenolics and volatile compounds of Arabica coffee beans (*Coffea arabica* L. cv. Catimor). International Journal of Food Science and Technology, 46 (11), 2287-2296. <https://doi.org/10.1111/j.1365-2621.2011.02748.x>
- Specialty Coffee Association (SCA). (2015). Coffee Brewing Handbook: A systematic guide to brewing coffee. Specialty Coffee Association of America.
- Tajik, N., Tajik, M., Mack, I., & Enck, P. (2017). The potential effects of chlorogenic acid, the main phenolic components in coffee, on health: A comprehensive review of the literature. European Journal of Nutrition, 56(7), 2215–2244.
- Valduga, A.T., Gonçalves, I.L, Magri, E., & Delalibera, J.R. (2019). Chemistry, pharmacology and new trends in traditional functional and medicinal beverages. Food Research International, 120, 478-503. <https://doi.org/10.1016/j.foodres.2018.10.091>
- Vieira-Porto, A.C., Cunha, S.C., Rosa, E.C., DePaula, J., Cruz, A.G., Freitas-Silva, O., Fernandes, J.O., ...Farah, A. (2024). Chemical composition and sensory profiling of coffees treated with asparaginase to decrease acrylamide formation during roasting. Food Research International. 186. <https://doi.org/10.1016/j.foodres.2024.114333>
- Wu, H; Gu, H; Amrit, B.K; Nawaz, M.A.; Barrow, C.J.; Dunshea, F.R. & Suleria, H.A.R. (2022). Effect of processing on bioaccessibility and bioavailability of bioactive compounds in coffee beans. Food Bioscience. 46. <https://doi.org/10.1016/j.fbio.2021.101373>.
- Valerio-Avila, J., Peralta Matute, K., Amador-Zelaya, C., Reyes Morales, O., Cruz, M. P., Ruiz Cardona, J., Marcía-Fuentes, J. A. (2025). Importancia de los polifenoles en el café. (2025). Innovare, Revista de Ciencia y Tecnología, 14(1), 1-6. <https://doi.org/10.69845/innovare.v14i1.471>
- Trugo L. C. and Macrae R. 1984. A study of the effect of roasting on the chlorogenic acid composition of coffee using HPLC. Food Chemistry 15: 219-227.
- Sharma, P., Jha, A. B., Dubey, R. S., Pessarakli, M. 2012. Reactive oxygen species, oxidative damage, and antioxidative defense mechanism in plants under

stressful conditions. J. Exp. Bot. 2012, 217037.
<https://doi.org/10.1155/2012/217037>

- Lafarga, T., Villaró, S., Rivera, A., Bobo, G., Aguiló-Aguayo, I. 2020. Bioaccessibility of polyphenols and antioxidant capacity of fresh or minimally processed modern or traditional lettuce (*Lactuca sativa* L.) varieties. J. Food Sci. Technol. 57, 754–763. <https://doi.org/10.1007/s13197-019-04108-7> L
- Wale K, Tolessa K, Atlabachew M, Mehari B, Alemayehu M, Mengistu DA, Kerisew B (2024) Level of caffeine, trigonelline and chlorogenic acids in green coffee (*Coffea arabica* L.) beans from Amhara region, Ethiopia Journal of Agriculture and Food Research 16: 101082 <https://doi.org/10.1016/j.jafr.2024.101082>
- Wu, H., Liu, Z., Lu, P., Barrow, C., Dunshea, F. R., & Suleria, H. A. R. (2022). Bioaccessibility and bioactivities of phenolic compounds from roasted coffee beans during in vitro digestion and colonic fermentation. Food Chemistry. Volume 386, 132794, <https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2022.132794>

5. CONCLUSIONES GENERALES

Esta investigación demostró que el nivel de tostado, el origen geográfico y su interacción son factores determinantes en el contenido de compuestos bioactivos en la bebida de café (*Coffea arabica* L.).

El análisis espectroscópico FT-IR-ATR y quimiometría de granos de café molidos reveló que el tostado induce transformaciones químicas evidenciadas por desplazamientos e intensificación de bandas asociadas a compuestos bioactivos, diferenciación entre cafés verdes y tostados, bandas importantes en el estudio del tostado en café, especialmente atribuidas a las bandas funcionales y a la huella dactilar de los azúcares y los ácidos clorogénicos. Estos resultados confirman la utilidad del FT-IR como herramienta rápida y no destructiva para la caracterización, autenticidad y diferenciación de las muestras en función de los niveles de tueste, proporcionando información valiosa sin necesidad de técnicas analíticas complejas.

El análisis de espectrofotometría y cromatografía de las bebidas de café permitió demostrar que el aumento en la intensidad térmica del tostado provocó una disminución progresiva del contenido de azúcares y compuestos bioactivos, especialmente los fenólicos incluidos los ácidos clorogénicos, mientras que el origen geográfico condicionó de manera inicial la calidad funcional de las bebidas de café.

Estos resultados demuestran que el tostado y la región de origen no solo definen la calidad sensorial del café, sino que determinan la calidad funcional de la bebida.