



INFLUENCIA DE LA REGIÓN Y TOSTIÓN EN LA IDENTIFICACIÓN DE GRUPOS FUNCIONALES DE CAFÉS COLOMBIANOS MEDIANTE ESPECTROSCOPÍA INFRARROJA

INFLUENCE OF THE REGION AND ROASTING IN THE IDENTIFICATION OF FUNCTIONAL GROUPS OF COLOMBIAN COFFEES BY INFRARED SPECTROSCOPY

Diego Enrique Ochoa Florez ¹

Daniel Salvador Durán Osorio ²

Yanine Yubisay Trujillo Navarro ³

Citación: Ochoa Flórez, D. E., Durán Osorio, D. S., Trujillo Navarro, Y. Y. (2026). Influencia de la región y tosti3n en la identificaci3n de grupos funcionales de caf3s colombianos mediante espectroscopía infrarroja. *Revista de Investigaci3n Agraria y Ambiental*, 17(1), 73- 95. <https://doi.org/10.22490/21456453.9358>

¹ Doctorando en Ciencia y Tecnología de Alimentos, Universidad de Pamplona, Pamplona, Colombia. diego.ochoa12@unipamplona.edu.co

² Doctor en Tecnología, Calidad y Marketing en Industrias Agroalimentarias, Universidad de Pamplona, Pamplona, Colombia. danielduran@unipamplona.edu.co

³ Doctor en Tecnología, Calidad y Marketing en Industrias Agroalimentarias, Universidad de Pamplona, Pamplona, Colombia. yaninetrujillo@unipamplona.edu.co

Autor de correspondencia: diego.ochoa12@unipamplona.edu.co

RESUMEN

Contextualización: El café es uno de los frutos de mayor riqueza funcional y bioactiva. Sin embargo, condiciones como la región de cultivo, manejo poscosecha y calidad del tueste pueden afectar la composición e identificación de grupos funcionales.

Vacío de conocimiento: Actualmente, es incierto cómo afectan la tostión y la región en la presencia de grupos funcionales que se puedan asociar con la presencia de compuestos bioactivos específicos en el grano, por lo cual, las técnicas de espectrofotometría infrarroja surgen como las metodologías de análisis rápido y presuntivo de calidad cafetera.

Propósito: El objetivo de investigación fue evaluar la influencia de la región y tostión en la identificación de grupos funcionales de cafés colombianos analizados mediante espectroscopía infrarroja y quimiometría.

Metodología: Se emplearon cafés colombianos variedad arábica de diferente grado de tostión y región según su tostión: tostión suave (Cauca, Tolima y Nariño), tostión balanceada (Huila, Antioquia y Santander) y tostión fuerte (Caldas, Valle del Cauca y Sierra Nevada). Los cafés fueron analizados mediante espectroscopía infrarroja por reflectancia total atenuada de 4000 a 600 cm^{-1} .

Resultados y conclusiones: De los espectros se identificaron 14 bandas con grupos funcionales de interés que relacionan la presencia de compuestos químicos. Dentro de estos se encontraron alcoholes, anillos aromáticos, cafeína, lípidos, aldehídos, ésteres, ácidos orgánicos (clorogénico), trigonelina, ácidos alifáticos y carbohidratos. De la influencia de la tostión y la región sobre la presencia de grupos funcionales, los cafés de Cauca (tostión suave), Santander (tostión balanceada) y Caldas (tostión fuerte) fueron los de mayor vibración en los 14 picos encontrados en relación con sus homónimos. Sin embargo, el análisis de componentes principales arrojó que los cafés de tostión suave (Tolima, Nariño y Cauca) y tostión fuerte (Caldas) fueron los de mayor influencia sobre los compuestos asociados a los grupos funcionales encontrados, siendo Cauca y Caldas los predominantes en los grupos funcionales, indicando que la región y la tostión afectan significativamente la presencia de grupos funcionales y la composición interna del grano.

Palabras clave: ART-FTIR, café, espectroscopía infrarroja, grupos funcionales, quimiometría, tostión.

ABSTRACT

Contextualization: coffee is one of the fruits with the greatest functional and bioactive richness. However, conditions such as the growing region, post-harvest management and roast quality can affect the composition and identification of functional groups.

Knowledge gap: Currently, it is uncertain how roasting, and region affect the presence of functional groups that can be associated with the presence of specific bioactive compounds in the grain. Therefore, infrared spectrophotometry techniques emerge as the methodologies for rapid and presumptive analysis of coffee quality.

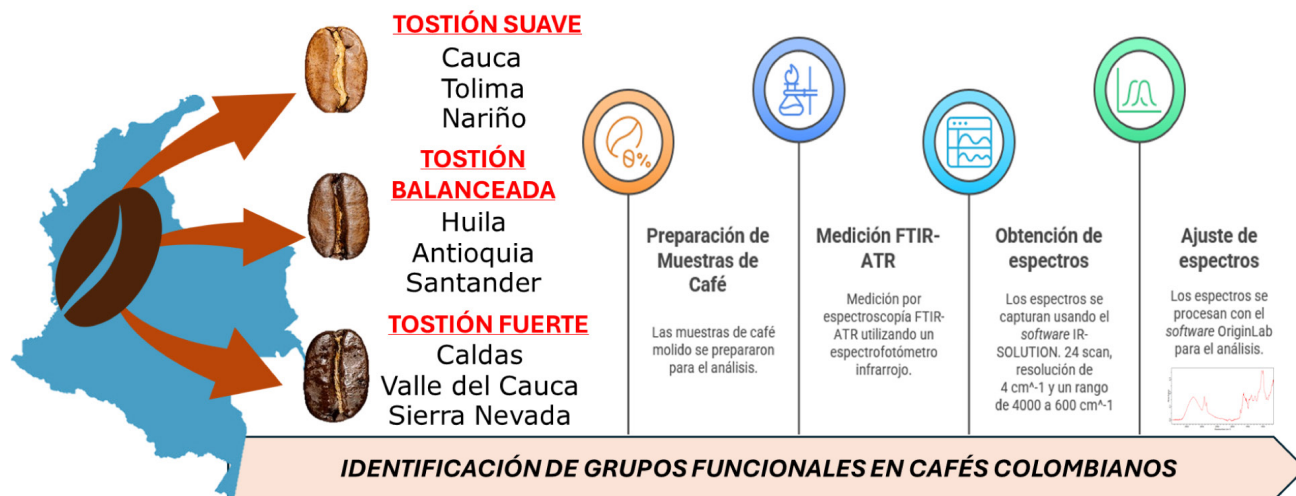
Purpose: objective of the research was to evaluate the influence of the region and roasting in the identification of functional groups of Colombian coffees analysed by infrared spectroscopy and chemometrics.

Methodology: Colombian Arabica coffees of different degrees of roast and region were used according to mild roast (Cauca, Tolima, and Nariño), balanced roast (Huila, Antioquia and Santander) and strong roast (Caldas, Valle del Cauca and Sierra Nevada). The browns were analyzed by attenuated total reflectance infrared spectroscopy from 4000 a 600 cm^{-1} .

Results and conclusions: of the spectra, 14 bands were identified with functional groups of interest that relate the presence of chemical compounds. Among these were found alcohols, aromatic rings, caffeine, lipids, aldehydes, esters, organic acids (chlorogenic), trigonelline, aliphatic acids and carbohydrates. Of the influence of roasting and region on the presence of functional groups, the coffees of Cauca (mild roasting), Santander (balanced roasting) and Caldas (strong roasting) were the ones with the highest vibration in the 14 peaks found in relation to their homonyms. However, the principal component analysis showed that mild roast coffees (Tolima, Nariño and Cauca) and Caldas in strong roasting were the ones with the greatest influence on the compounds associated with the functional groups found. Cauca and Caldas are the predominant in the functional groups, indicating that the region and the roasting significantly affect the presence of functional groups and the internal composition of the grain.

Keywords: ART-FTIR, coffee, infrared spectroscopy, functional groups, chemometrics, roasting.

RESUMEN GRÁFICO



Fuente: elaboración propia

1 INTRODUCCIÓN

El café arábico (*Coffea arabica* L.), cultivado principalmente en las regiones montañosas del norte de Tailandia, se ha convertido en una de las especies de café comerciales más conocidas (Preedalikit et al., 2023). Por su parte, regiones como Etiopía es una de las regiones productoras de café más grandes de África. En Etiopía, el café representa entre el 60 % y el 70 % de los ingresos nacionales en divisas y el sustento de alrededor del 20 % al 25 % de la población, directa o indirectamente (Tadesse et al., 2020). Sin embargo, Colombia es el tercer país mayor productor de café, seguido por Brasil y Vietnam (Rojas-Ospina et al., 2024).

Actualmente, este fruto genera alta atención, ya que su calidad se ve afectada según la región de origen y manejo poscosecha (Cortés-Macías et al., 2022). Dentro de los

parámetros de calidad cafetera, la presencia de grupos funcionales que relacionen compuestos químicos es un indicador de calidad, asociado a la región de cultivo y condiciones de procesamiento como el tostado (Kungsuwan et al., 2023; Wołosia et al., 2023). El café tiene muchos compuestos que impulsan el aroma y el sabor del café preparado. Los alcaloides, proteínas, polisacáridos poliméricos, cafeína, ácidos, lípidos y carbohidratos (sacarosa, glucosa, fructosa) añaden características sensoriales a la bebida. Algunos estudios reportan que la composición cambia entre especies de café y también antes y después del proceso de tueste (Mendes dos Santos et al., 2021). La pulpa de la cereza del café variedad arábica es abundante en cafeína y polifenoles, siendo el ácido clorogénico el principal compuesto fenólico (Nemzer et al., 2021a).

Recientes estudios en la identificación de perfiles de fitoquímicos en *C. arábica* identificó hasta 219 compuestos, compuestos por isómeros de ácidos clorogénicos (CGA), flavonoides, alcaloides, eicosanoil-5-hidroxi-triptamida (EHT), atractiligenina y derivados de carboxiatractiligenina (Nemzer et al., 2021b). También se han identificado otros compuestos, aunque en cantidades menores, a saber: trigonelina, teobromina, teofilina, ácido protocatequico, ácido gálico, quercetina, catequina, epicatequina, procianidina y rutina (Castaldo et al., 2020). A continuación, se abarcan los principales compuestos bioactivos del café y su interés en la industria alimentaria.

El ácido clorogénico tiene una alta biodisponibilidad entre los humanos y muestra una variedad de funciones biológicas importantes que incluyen efectos antioxidantes y antiinflamatorios, antimutagénicos, anticancerígenos y protectores del daño del ADN (Preedalikit et al., 2023). Los diterpenos se describen como alcoholes pentacíclicos, debido a la fusión de unidades de isopreno para formar un esqueleto de veinte carbonos de kauren. Kahweol y cafestol son los dos principales diterpenos que se han aislado de granos, infusiones y aceites de café verde y tostado (Munyendo et al., 2021). Debido a sus complejidades biológicas y de procesamiento, el café tiene una matriz muy compleja que complica su análisis volátil. La diversidad de componentes de la matriz del café (por ejemplo, carbohidratos y lípidos) y otros compuestos no volátiles (por ejemplo, trigonelina y melanoidinas) requiere

procedimientos de limpieza sustanciales para reducir el ruido de fondo analítico y el desgaste de la máquina sin comprometer la recuperación de compuestos volátiles de interés (Marín-San Román et al., 2020).

De otra parte, se relaciona que las condiciones de procesamiento del café afectan la composición de material volátil durante su preparación, y varios estudios documentan el impacto de los métodos de preparación del café, como el tostado en la liberación de aromas (Barron et al., 2012; Itobe et al., 2015). Finalmente, dentro de los compuestos de mayor interés, la cafeína tiene la capacidad de prevenir el estrés oxidativo, dada su alta capacidad antioxidante pero voluble según el origen y condiciones de tueste (Preedalikit et al., 2023).

En relación con los anteriores, la identificación de grupos funcionales mediante espectrofotometría infrarroja ha permitido la clasificación de nuevos cafés (Baqueta et al., 2023), la evaluación de compuestos sensoriales (Belchior et al., 2019) y la identificación de granos defectuosos (Craig et al., 2012). Sin embargo, esta técnica ha incurrido en la identificación presuntiva de compuestos que permitan establecer la calidad interna y composición bioactiva del grano (Maiyah et al., 2025). Por lo anterior, el objetivo de investigación fue evaluar la influencia de la región y tueste en la identificación de grupos funcionales de cafés colombianos analizados mediante espectroscopía infrarroja (ATR-FTIR) y quimiometría.

2 MATERIALES Y MÉTODOS

Obtención de los cafés de estudio

Se emplearon cafés variedad arábica colombianos de diferentes regiones de origen y grados de tostión ya especificado y estandarizado por una casa comercial, la cual establece la denominación de los cafés y su grado de tostión. Las muestras de café fueron agrupadas según su tostión y origen así: tostión suave (Cauca, Tolima y Nariño), tostión balanceada (Huila, Antioquia y Santander) y tostión fuerte (Caldas, Valle del Cauca y Sierra Nevada). Dentro de los criterios de selección se tuvieron en cuenta las regiones de mayor producción cafetera según lo reportado por MinAgricultura (2022). Estos cafés fueron adquiridos de una casa comercial colombiana en tres presentaciones con loteado distinto para garantizar el muestreo y fueron llevados a las instalaciones del laboratorio de investigaciones del grupo de Bioingeniería Alimentaria de la Universidad de Pamplona, Colombia.

Análisis espectroscópico (FTIR - ATR) y quimiométrico

El análisis espectroscópico FTIR se realizó por ATR (reflectancia total atenuada) (Manrique y Gutiérrez, 2018), empleando un espectrofotómetro infrarrojo (marca Thermo Scientific, modelo NICOLET iS150-FT-IR, y el accesorio ATR PIKE MIRacle con cristal de diamante). El análisis se realizó por triplicado a $20 \pm 0,5$ °C y 70 % HR; posteriormente,

se dispuso cada muestra de café molido en el cristal para su medición con la realización previa de *background* con el fin de eliminar el ruido por el medio. La obtención de los espectros se realizó mediante el *software* IR-SOLUTION a 24 scan, resolución de 4 cm^{-1} y un rango de 4000 a 600 cm^{-1} (Masek et al., 2020; Tsiaka et al., 2023). Con respecto al análisis quimiométrico, los espectros obtenidos fueron ajustados mediante el *software* OriginLab, realizando suavizado, ajuste de línea base y normalizado (Baqueta et al., 2023; Belchior et al., 2019; Ni et al., 2022).

Análisis estadístico de datos

El análisis estadístico de las absorbancias de los picos asociados a grupos funcionales fue realizado mediante el paquete estadístico Minitab Statistical Software, realizando análisis descriptivo anova de un factor con prueba de comparaciones de Fisher con un nivel de confianza del 95 %. Posteriormente, se realizó un análisis de componentes principales, determinando la influencia de los grupos funcionales asociados a compuestos específicos en las muestras de café, según su grado de tostión. En complemento al análisis de componentes principales, se realizó un análisis factorial por medio de la medida de Kaiser-Meyer-Olkin (KMO), estableciendo factores de mancomunidad para la selección de componentes principales por el criterio de raíz latente (valores propios o eigenvalores $> 1,0$). Finalmente, se determinó el porcentaje de similitud espec-

troscópico de las muestras mediante análisis de conglomerado elaborado a partir de

las absorbancias de los grupos funcionales identificados

3 RESULTADOS Y DISCUSIÓN

Análisis espectroscópico vibracional e identificación de grupos funcionales

En la figura 1 se observan las características espectroscópicas de los cafés de región

según su grado de tostión, (a) tostión suave, (b) tostión balanceada y (c) tostión fuerte.

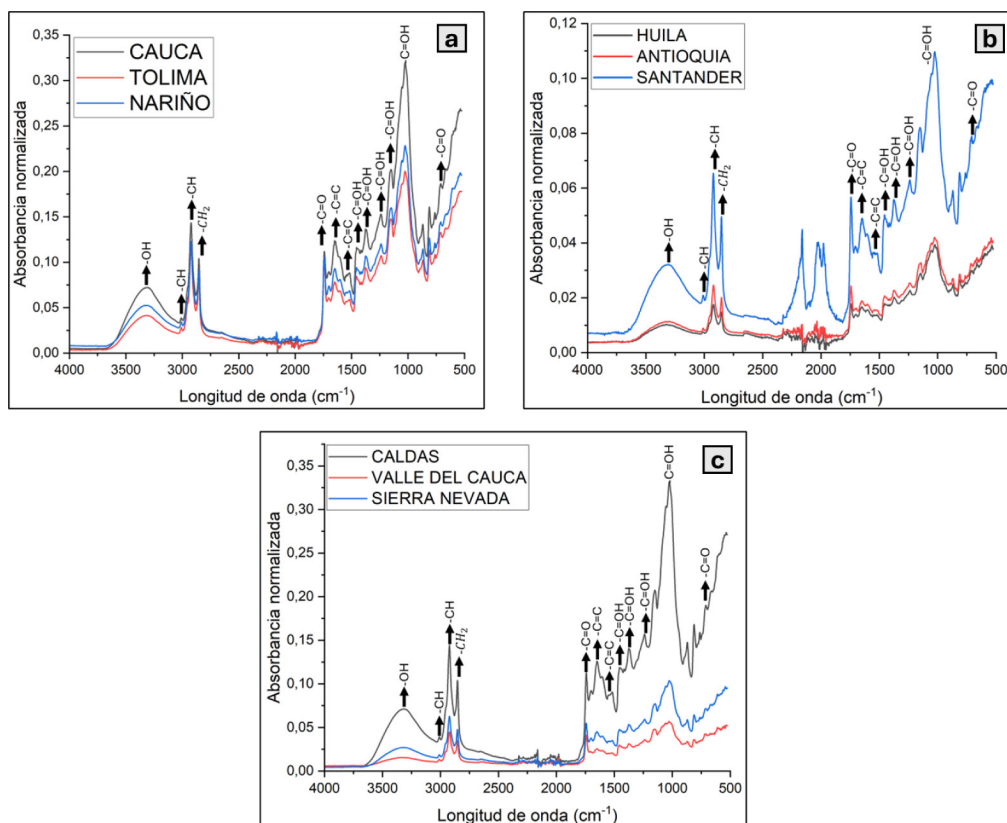


Figura 1. Características espectroscópicas de los cafés de región según su grado de tostión, (a) tostión suave, (b) tostión balanceada y (c) tostión fuerte.

Fuente: elaboración propia

A partir de las secciones a, b y c de la figura 1, se evaluaron los picos de interés y la banda de vibración de los grupos funcionales presentes. Según los espectros y los pi-

cos, se identificaron 14 bandas que asocian grupos funcionales de interés relacionados con la presencia de compuestos específicos. En relación con lo anteriormente expuesto,

las absorbancias de los grupos funcionales fueron analizadas estadísticamente, con el fin de establecer las diferencias entre los cafés de cada grado de tostión. En la tabla

1 se observan los resultados de absorbancia equivalentes a la vibración de los grupos funcionales identificados en los picos de la figura 1.

Tabla 1.

Absorbancias de los grupos funcionales de los cafés de análisis para cada grado de tostión

Longitud de onda cm^{-1}	Grupo funcional	Compuesto asociado	Absorbancia tostión suave			p-valor
			Cauca	Tolima	Nariño	
3313	-OH	Alcoholes y agua	$0,072 \pm 0,001^a$	$0,041 \pm 0,000^b$	$0,052 \pm 0,003^c$	0,000
3010	-CH	Anillos aromáticos	$0,038 \pm 0,004^a$	$0,027 \pm 0,007^b$	$0,033 \pm 0,007^c$	0,000
2925	-CH	Cafeína y lípidos	$0,139 \pm 0,007^a$	$0,115 \pm 0,006^b$	$0,119 \pm 0,006^c$	0,000
2854	$-\text{CH}_2$	Ácidos grasos	$0,102 \pm 0,006^a$	$0,084 \pm 0,005^b$	$0,089 \pm 0,005^c$	0,000
1780	C=O	Aldehídos, ésteres y ácidos alifáticos como el clorogénico	$0,025 \pm 0,001^a$	$0,020 \pm 0,008^b$	$0,024 \pm 0,001^c$	0,000
1657	C=C	Cafeína	$0,118 \pm 0,002^a$	$0,075 \pm 0,001^b$	$0,090 \pm 0,001^c$	0,000
1589	C=C	Trigonelina	$0,096 \pm 0,002^a$	$0,064 \pm 0,001^b$	$0,075 \pm 0,001^c$	0,000
1450	C-OH	Ácido clorogénico	$0,114 \pm 0,004^a$	$0,081 \pm 0,001^b$	$0,092 \pm 0,001^c$	0,000
1381	C-OH	Ácido clorogénico	$0,130 \pm 0,005^a$	$0,089 \pm 0,004^b$	$0,102 \pm 0,004^c$	0,000
1250	C=O y -OH	Carbohidratos, alcoholes, ésteres, ácidos carboxílicos y anhídridos	$0,148 \pm 0,002^a$	$0,102 \pm 0,001^b$	$0,114 \pm 0,001^c$	0,000
1237	C-OH	Sacarosa	$0,152 \pm 0,009^a$	$0,107 \pm 0,003^b$	$0,119 \pm 0,001^c$	0,000
1150	C-OH	Ácido clorogénico	$0,201 \pm 0,002^a$	$0,147 \pm 0,002^b$	$0,159 \pm 0,001^c$	0,000
1065	C-OH	Arabinogalactanos, ácido clorogénico y quínico	$0,279 \pm 0,006^a$	$0,179 \pm 0,003^b$	$0,203 \pm 0,004^c$	0,000
721	C=O	Carbohidratos	$0,177 \pm 0,005^a$	$0,128 \pm 0,003^b$	$0,139 \pm 0,004^c$	0,000

Longitud de onda cm^{-1}	Grupo funcional	Compuesto asociado	Absorbancia tosti3n balanceada			p-valor
			Huila	Antioquia	Santander	
3313	-OH	Alcoholes y agua	0,010 \pm 0,001 ^a	0,011 \pm 0,001 ^b	0,032 \pm 0,001 ^c	0,000
3010	-CH	Anillos aromáticos	0,007 \pm 0,001 ^a	0,008 \pm 0,001 ^b	0,020 \pm 0,002 ^c	0,000
2925	-CH	Cafeína y lípidos	0,017 \pm 0,000 ^a	0,023 \pm 0,001 ^b	0,063 \pm 0,003 ^c	0,000
2854	-CH ₂	Ácidos grasos	0,014 \pm 0,007 ^a	0,019 \pm 0,001 ^b	0,048 \pm 0,002 ^c	0,000
1780	C=O	Aldehídos, ésteres y ácidos alifáticos como el clorogénico	0,006 \pm 0,000 ^a	0,008 \pm 0,000 ^b	0,015 \pm 0,000 ^c	0,000
1657	C=C	Cafeína	0,016 \pm 0,000 ^a	0,018 \pm 0,000 ^b	0,047 \pm 0,000 ^c	0,000
1589	C=C	Trigonelina	0,015 \pm 0,000 ^a	0,016 \pm 0,000 ^b	0,040 \pm 0,000 ^c	0,000
1450	C-OH	Ácido clorogénico	0,017 \pm 0,001 ^a	0,020 \pm 0,000 ^b	0,049 \pm 0,001 ^c	0,000
1381	C-OH	Ácido clorogénico	0,019 \pm 0,001 ^a	0,021 \pm 0,002 ^b	0,053 \pm 0,001 ^c	0,000
1250	C=O y -OH	Carbohidratos, alcoholes, ésteres, ácidos carboxílicos y anhídridos	0,021 \pm 0,000 ^a	0,024 \pm 0,000 ^b	0,060 \pm 0,001 ^c	0,000
1237	C-OH	Sacarosa	0,022 \pm 0,000 ^a	0,025 \pm 0,001 ^b	0,062 \pm 0,002 ^c	0,000
1150	C-OH	Ácido clorogénico	0,028 \pm 0,002 ^a	0,032 \pm 0,000 ^b	0,082 \pm 0,001 ^c	0,000
1065	C-OH	Arabinogalactanos, ácido clorogénico y quínico	0,035 \pm 0,001 ^a	0,038 \pm 0,000 ^b	0,098 \pm 0,001 ^c	0,000
721	C=O	Carbohidratos	0,028 \pm 0,000 ^a	0,031 \pm 0,000 ^b	0,007 \pm 0,000 ^c	0,000
Longitud de onda cm^{-1}	Grupo funcional	Compuesto asociado	Absorbancia tosti3n fuerte			p-valor
			Caldas	Valle del Cauca	Sierra Nevada	
3313	-OH	Alcoholes y agua	0,071 \pm 0,000 ^a	0,015 \pm 0,000 ^b	0,026 \pm 0,001 ^c	0,000
3010	-CH	Anillos aromáticos	0,038 \pm 0,004 ^a	0,013 \pm 0,001 ^b	0,018 \pm 0,005 ^c	0,000

Longitud de onda cm^{-1}	Grupo funcional	Compuesto asociado	Absorbancia tostión fuerte			p-valor
			Caldas	Valle del Cauca	Sierra Nevada	
2925	- CH	Cafeína y lípidos	0,141 \pm 0,007 ^a	0,043 \pm 0,002 ^b	0,061 \pm 0,003 ^c	0,000
2854	-CH ₂	Ácidos grasos	0,102 \pm 0,006 ^a	0,034 \pm 0,002 ^b	0,047 \pm 0,002 ^c	0,000
1780	C=O	Aldehídos, ésteres y ácidos alifáticos como el clorogénico	0,026 \pm 0,001 ^a	0,010 \pm 0,002 ^b	0,014 \pm 0,006 ^c	0,000
1657	C=C	Cafeína	0,125 \pm 0,002 ^a	0,024 \pm 0,002 ^b	0,044 \pm 0,002 ^c	0,000
1589	C=C	Trigonelina	0,100 \pm 0,002 ^a	0,022 \pm 0,004 ^b	0,038 \pm 0,003 ^c	0,000
1450	C-OH	Ácido clorogénico	0,117 \pm 0,007 ^a	0,028 \pm 0,005 ^b	0,046 \pm 0,007 ^c	0,000
1381	C-OH	Ácido clorogénico	0,135 \pm 0,004 ^a	0,029 \pm 0,001 ^b	0,051 \pm 0,000 ^c	0,000
1250	C=O y -OH	Carbohidratos, alcoholes, ésteres, ácidos carboxílicos y anhídridos	0,151 \pm 0,001 ^a	0,033 \pm 0,004 ^b	0,056 \pm 0,005 ^c	0,000
1237	C-OH	Sacarosa	0,156 \pm 0,001 ^a	0,035 \pm 0,007 ^b	0,059 \pm 0,002 ^c	0,000
1150	C-OH	Ácido clorogénico	0,207 \pm 0,004 ^a	0,047 \pm 0,007 ^b	0,076 \pm 0,007 ^c	0,000
1065	C-OH	Arabinogalactanos, ácido clorogénico y quínico	0,290 \pm 0,006 ^a	0,053 \pm 0,001 ^b	0,093 \pm 0,001 ^c	0,000
721	C=O	Carbohidratos	0,181 \pm 0,005 ^a	0,042 \pm 0,001 ^b	0,069 \pm 0,002 ^c	0,000

Letras diferentes entre filas presentan diferencias mínimas significativas en un nivel del 0,05.

Fuente: elaboración propia

Según lo reportado por Aung Moon et al. (2024), el pico en 3313 cm^{-1} se asocia al estiramiento de los enlaces -OH (Barrios-Rodríguez et al., 2021b), por la presencia de agua principalmente (Tsiaka et al., 2023); sin

embargo, algunos autores han relacionado la presencia de alcoholes generados por procesos fermentativos en el grano. La literatura expone que valores altos de absorbancia en 3313 cm^{-1} indica mayor cantidad de agua

ligada en el grano, relacionándose con la calidad del tueste y la presencia de compuestos fisicoquímicos (Pereira et al., 2021).

En 3010 cm^{-1} hubo vibración simétrica del estiramiento de $-\text{CH}$ en enlaces dobles *cis* (Aung Moon et al., 2024) asociado al estiramiento de $-\text{CH}$ en anillos aromáticos (Tsiaka et al., 2023). Los picos a 2925 y 2854 cm^{-1} se atribuyeron al estiramiento antisimétrico de los grupos $-\text{CH}_2$ y $-\text{CH}_3$ (Flores-Valdez et al., 2020) en lípidos (Barrios-Rodríguez et al., 2021a), cafeína (Barrios-Rodríguez et al., 2021a; Jiménez-Ochoa et al., 2022) y ácidos grasos (Aung Moon et al., 2024). Las variaciones de estos grupos funcionales pueden causar una elevación en la oxidación y degradación de lípidos, lo que lleva a una reducción en la intensidad de las vibraciones de estiramiento $-\text{CH}_2$ y $-\text{CH}_3$, acelerando así alteraciones internas en el grano (Tsiaka et al., 2023).

En 1780 cm^{-1} se observa el estiramiento del enlace $-\text{C}=\text{O}$, indicando ésteres alifáticos (Tsiaka et al., 2023), ácidos clorogénicos e inclusive cafeína (Yusmanizar et al., 2019). Así mismo, se asocian aldehídos, ésteres y ácidos alifáticos (Munyendo et al., 2022). Lo anterior, dada la presencia de compuestos aromáticos del café, como ésteres relacionados con aromas frutales en el grano (Belchior et al., 2019).

En las bandas 1657 cm^{-1} se encontró la vibración de estiramiento $-\text{C}=\text{C}$ en *cis*-olefinas como la cafeína (Aung Moon et al., 2024), al igual que en 1589 cm^{-1} con presencia de trigonelina (Barrios-Rodríguez et al., 2021a; Munyendo et al., 2022). Estos dos compuestos son responsables de la calidad organoléptica del café y la producción de sa-

bores, especialmente el aroma a café tostado (Belchior et al., 2019). También se encontró presencia de ácido clorogénico en las bandas 1450 , 1381 , 1150 y 1065 cm^{-1} con huella dactilar del grupo funcional flexión $-\text{C}-\text{OH}$ en ácidos orgánicos (Barrios-Rodríguez et al., 2021b) y arabinogalactanos en 1065 cm^{-1} (Tsiaka et al., 2023). La presencia de este ácido carbónico (ácido clorogénico) se debe a su abundante contenido en los granos de café, el cual puede variar según la intensidad y variables con las que se realice el tueste (Debona et al., 2021).

La región de 1250 cm^{-1} permite establecer la clasificación del grano con respecto a su grado de tostión, dado que se correlaciona con los modos de vibración de las moléculas de carbohidratos, alcoholes, ésteres, ácidos carboxílicos y anhídridos. Estos componentes químicos desempeñan un papel crucial en la evaluación de las propiedades organolépticas del café, junto con los ésteres y las cetonas. Los ácidos, por su parte, producen compuestos volátiles que evocan aromas que recuerdan a los del vinagre, el chocolate y el caramelo que se desarrollan tras la tostión. Con respecto a la identificación de carbohidratos, en 1237 cm^{-1} la vibración $-\text{C}-\text{OH}$ corresponde a compuestos específicos como la sacarosa (Aung Moon et al., 2024; Stanek et al., 2021). Mientras que, en 721 cm^{-1} expresa la vibración $-\text{C}-\text{O}$ asociada con la presencia de monosacáridos propios del grano como la fructosa y glucosa.

En general, los valores presentados en la tabla 6 muestran que los cafés de mayor vibración en los 14 grupos funcionales para cada grado de tostión fueron: Cauca (tostión

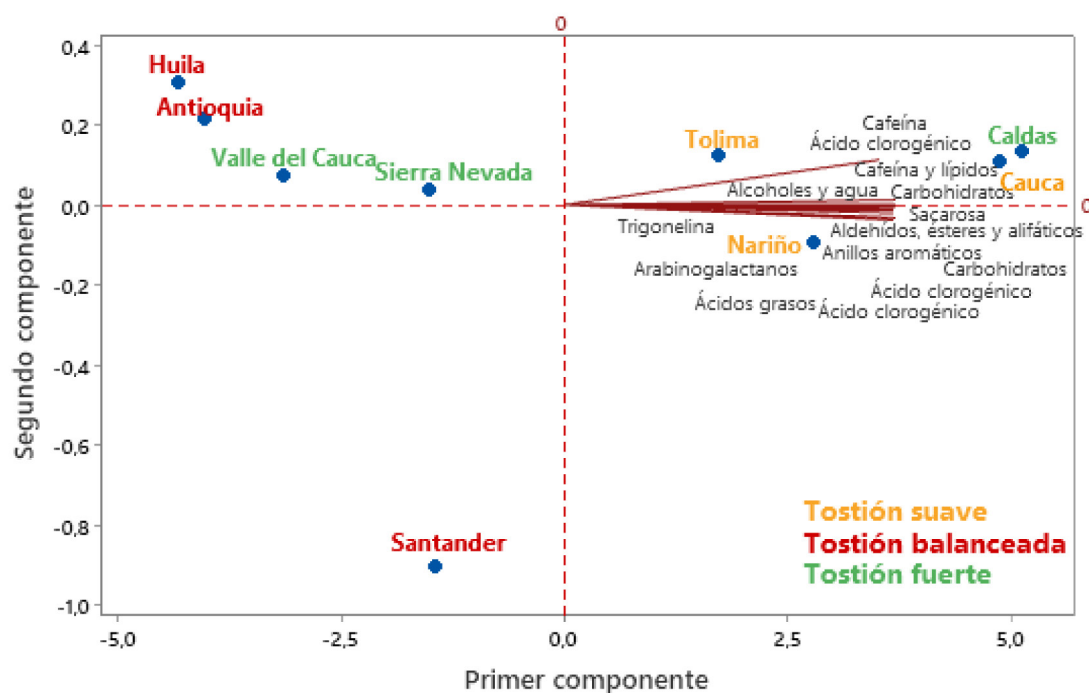
suave), Santander (tostión balanceada) y Caldas (tostión fuerte). Sin embargo, el análisis estadístico arrojó diferencias mínimas significativas en todos los grupos funcionales en un p-valor de 0,000. Así mismo, entre los tres cafés de cada grado de tostión no se presentaron similitudes, indicando que la región de origen incide en la presencia de grupos funcionales de los cafés, según lo expresado por Alcantara et al. (2025), Pramudita et al. (2017) y Tsiafitsa et al. (2022). Las variaciones asociadas en las características espectroscópicas también se relacionan con las propiedades intrínsecas del grano, como la composición fisicoquímica, las características metabólicas, la oxidación de lípidos y la presencia de compuestos importantes. Dentro de estos compuestos resaltan carbohidratos, proteínas, lípidos, cafeína, ácido clorogénico y trigonelina, correspondientes a las huellas dactilares de los grupos funcionales identificados (Aung Moon et al., 2024), permitiendo la diferenciación de los cafés según su grado de tostión y su región de origen.

3.2. Análisis quimiométrico y relación espectroscópica de las muestras de café

Con el fin de establecer la agrupación de las muestras de café según su grado de tostión y la influencia de los compuestos rela-

cionados con los grupos funcionales identificados, la figura 2 muestra dicha agrupación mediante un análisis de componentes principales. En este caso, el primer componente principal (PC1) es el eje que más variabilidad explica en los datos y está fuertemente influenciado por los carbohidratos (0,269), la sacarosa (0,269) y los ácidos clorogénicos (0,269), indicando que estas variables están altamente correlacionadas y son responsables de la diferenciación entre las muestras. Este patrón se observa en la disposición de las regiones: Caldas, Tolima y Cauca aparecen asociadas con estos compuestos, mientras que Santander y Sierra Nevada se sitúan en el extremo opuesto. El segundo componente principal (PC2) contribuye a la diferenciación de las muestras en el eje vertical y está principalmente influenciado por los aldehídos, ésteres y compuestos alifáticos (-0,298), los anillos aromáticos (-0,255) y los ácidos grasos (-0,113). Esto sugiere que, en regiones como Huila y Antioquia, ubicadas en la parte superior, existe una mayor presencia de estos compuestos, los cuales están relacionados con las propiedades volátiles y el perfil sensorial del café. En contraste, Santander, en la parte inferior de la figura, presenta menores concentraciones de estos compuestos, lo que indica un perfil químico distinto (Marín-San Román et al., 2020).

Figura 2. Análisis de componentes principales, influencia de los compuestos con respecto a los cafés de región, según su grado de tosti3n



Fuente: elaboración propia

En cuanto al efecto del grado de tosti3n, se observa que los cafés con mayor contenido de ácidos clorogénicos y carbohidratos (Caldas, Tolima y Cauca) están relacionados con tosti3nes suaves o balanceadas, ya que estos compuestos tienden a degradarse a temperaturas más altas (Pimpley et al., 2020). Por otro lado, Nariño y Santander muestran una mayor concentración de aldehídos, ésteres y ácidos grasos, que son productos de la degradación térmica de precursores durante la tosti3n fuerte. Este efecto se corrobora con los valores de los vectores propios, donde los aldehídos, ésteres y compuestos alifáticos tienen un alto valor positivo en (0,535), lo que sugiere su formación en etapas avanzadas del proceso térmico (De Souza Costa et al., 2024).

La trigonelina (-0,012 en PC2 y 0,269 en PC1) también juega un papel importante en la diferenciación de las muestras. Su presencia en cafés de Nariño y Santander sugiere que estas regiones podrían contener granos con mayor predisposición a la formación de compuestos aromáticos derivados de su degradación, como la pirazina, que es responsable de las notas tostadas y de caramelo en el café (Aung Moon et al., 2024). Asimismo, la cafeína (-0,087 en PC2 y 0,267 en PC1) es otro compuesto que influye en la separación de muestras, con una mayor presencia en los cafés de Caldas y Tolima, lo que sugiere que en estas regiones la composición química favorece la retención de este alcaloide tras el tostado. Otro hallazgo es la fuerte correlación de los carbohidratos (0,888 en PC2), lo

que indica que son determinantes para diferenciar las muestras en función de la región y el proceso de tostión. Este comportamiento está relacionado con la caramelización y la reacción de Maillard, procesos clave en el desarrollo del sabor del café (Iriondo-De-Hond et al., 2021).

En complemento al análisis de componentes principales, el análisis factorial realizado sobre la composición química del café, en relación con los valores de cargas factoriales y coeficientes de puntuación, se obtuvo un índice KMO de 0,621, lo que indica una fuerte estructura subyacente dominada por un único factor principal. En este contexto, la mayoría de las variables presentan cargas factoriales muy altas en el factor 1, con valores cercanos a 0,99, lo que indica que prácticamente toda la variabilidad de la composición química del café puede explicarse a través de una única dimensión. Esto es consistente con los resultados previos obtenidos en el análisis de componentes principales (PCA), en los cuales se observó que la primera componente principal explicaba la mayor parte de la varianza de los datos, sugiriendo que los compuestos químicos del café están altamente correlacionados.

La única variable que muestra un comportamiento diferenciado en este análisis factorial es la concentración de carbohidratos, que exhibe una carga factorial más alta en el factor 2 (0,311), lo que sugiere que este factor captura información específica sobre la variabilidad de los azúcares y polisacáridos en el café. Este hallazgo es coherente con los resultados del PCA, donde los carbohidratos se ubicaban en una región distinta den-

tro del espacio de componentes principales, indicando que su comportamiento en la matriz química del café es diferente al del resto de compuestos analizados. Este hecho puede atribuirse a su participación en las reacciones de Maillard y en la formación de compuestos aromáticos durante el tostado, procesos que afectan de manera diferencial a los carbohidratos, en comparación con otras moléculas como alcoholes, aldehídos y compuestos fenólicos (Todhanakasem et al., 2025).

La presencia de comunalidades de valor 1,000 en todas las variables sugiere que el modelofactorial explica la totalidad de la varianza de cada una de ellas. Esto es un resultado inusual, pues en la mayoría de los estudios factoriales se espera que algunas variables tengan porciones de varianza no explicadas por los factores extraídos. La varianza explicada refuerza aún más esta estructura, ya que el factor 1 captura el 97,8 % de la variabilidad total, mientras que los factores restantes aportan menos del 2%. Este resultado implica que los compuestos químicos analizados están influenciados mayormente por un único eje de variabilidad, lo que se alinea con los hallazgos del PCA, donde el primer componente, presenta la composición primordial del grano.

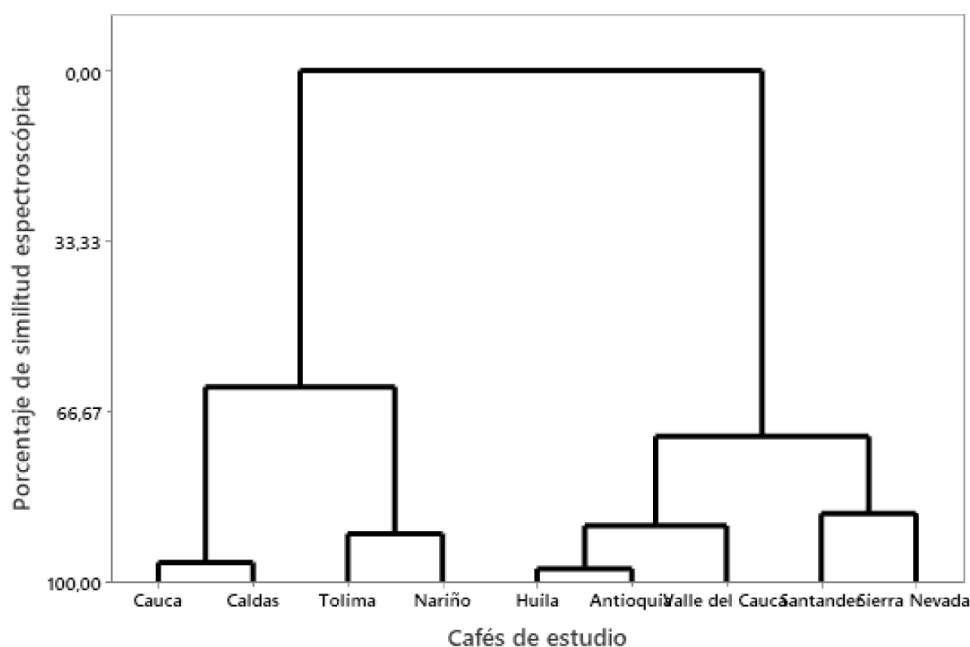
Los valores de puntuación muestran que algunas moléculas presentan comportamientos diferenciados en factores secundarios. Por ejemplo, la variable “Alcoholes y Agua” tiene puntuaciones altas en el factor 7 (8,354) y muy negativas en el Ffactor 8 (-103,411), lo que sugiere que esta variable está diferenciándose del resto en dimensiones menos dominantes, posiblemente debido

a su volatilidad o retención de humedad durante el procesamiento. De manera similar, los carbohidratos presentan una fuerte puntuación en el factor 2 (2,520), lo que refuerza la hipótesis de que esta variable tiene un comportamiento diferenciado respecto a los demás compuestos químicos. En contraste, la cafeína y la trigonelina muestran valores extremos en los factores menos influyentes, lo que puede indicar que su variabilidad no está estrictamente ligada a la composición química del grano, sino a factores externos,

como el origen del café o las condiciones de procesamiento.

Con base en el análisis de conglomerados jerárquicos (Figura 3), realizado a partir de los espectros obtenidos de muestras de café provenientes de nueve regiones colombianas, se identificaron agrupamientos que evidencian patrones de similitud funcional vinculados tanto al origen geográfico como al nivel de tostión.

Figura 3. Análisis de conglomerados jerárquicos, similitud espectroscópica de las muestras de café según su origen y grado de tostión



Fuente: elaboración propia

El dendrograma construido con base en la similitud espectroscópica muestra una clara diferenciación entre dos macrogrupos principales. El primero está conformado por las muestras de Cauca, Caldas, Tolima y Nariño,

las cuales fueron amalgamadas en los primeros pasos del análisis con niveles de similitud superiores al 89 %, indicando una alta homogeneidad en la composición de grupos funcionales detectados por espectroscopía.

Este grupo presenta una particularidad relevante: a pesar de que contiene cafés con diferentes grados de tostión (Cauca y Tolima con tostión suave; Caldas con tostión fuerte), la cercanía geográfica y las posibles similitudes agroecológicas podrían haber influido en la expresión composicional de los metabolitos funcionales, superando el efecto del tratamiento térmico.

El segundo macrogrupo está compuesto por las muestras de Huila, Antioquia, Valle del Cauca, Santander y Sierra Nevada. Dentro de este grupo, Huila y Antioquia presentaron la mayor similitud espectral (97,53 %), lo que sugiere una composición funcional casi idéntica, posiblemente atribuible a condiciones de cultivo y procesamiento compartidas. Posteriormente, estas muestras se agruparon con las de Valle del Cauca, Santander y Sierra Nevada, conformando un clúster cuya similitud fue menor (alrededor del 71,6 %), lo que indica una mayor dispersión interna en cuanto a la presencia de grupos funcionales. Al comparar ambos macrogrupos, se observa que la fusión final ocurre en un nivel de semejanza del 61,91 %, lo que evidencia que estos dos conjuntos de muestras tienen perfiles espectrales marcadamente distintos, reflejando diferencias composicionales relevantes que podrían asociarse con el origen regional, las condiciones edafoclimáticas y, en menor medida, con el proceso de tostión.

La partición final del análisis muestra una distancia promedio desde el centroide relativamente baja (0,166), así como una distancia máxima de 0,267, lo cual sugiere que, a pesar de la existencia de dos grandes agrupamien-

tos diferenciados, el conjunto de muestras presenta una cohesión aceptable desde el punto de vista espectroscópico. Estos hallazgos indican que la técnica utilizada permite discriminar entre perfiles funcionales de cafés de distintas regiones, y que las señales espectrales pueden ser útiles como trazadores químicos de origen geográfico. En términos científicos, se puede afirmar que las diferencias en la huella espectral de los cafés analizados no responden únicamente al grado de tostión, sino que reflejan un patrón regional distintivo, posiblemente influenciado por la combinación de ecotipos locales, prácticas de cultivo y factores agroambientales específicos de cada zona productora. Este resultado refuerza la utilidad del análisis multivariado y espectroscópico como herramienta de caracterización química integral y diferenciación geográfica en estudios de calidad y autenticidad del café.

Finalmente, las características espectroscópicas identificadas mediante el análisis infrarrojo permiten establecer las diferencias que existen entre las muestras a pesar de tener el mismo grado de tostión. De acuerdo con los picos de la figura 1 y la intensidad de las vibraciones de los grupos funcionales según las absorbancias normalizadas de la tabla 1, se observa que los cafés de Cauca (tostión suave), Santander (tostión balanceada) y Caldas (tostión fuerte) presentan un grado de tostión en menor intensidad en temperatura y tiempo en comparación con las demás regiones de cada grado de tostión. Si bien estos cafés indican mayor vibración de los grupos funcionales, se relaciona con tostiones menos intensas, las cuales preservan los grupos funcionales que pueden de-

gradarse tras las condiciones del proceso de tueste, mientras que los cafés que presentan menor vibración se asocian con condiciones

más intensas y prologadas según Tsiaka et al. (2023).

4 CONCLUSIONES

Se identificaron 14 bandas espectrales vinculadas a grupos funcionales clave en los cafés analizados, confirmando la presencia de compuestos como alcoholes, anillos aromáticos, cafeína, lípidos, aldehídos, ésteres, ácidos orgánicos (incluyendo ácido clorogénico), trigonelina, ácidos alifáticos y carbohidratos. La intensidad de estas bandas fue mayor en cafés de Cauca (tostión suave), Santander (tostión balanceada) y Caldas (tostión fuerte), lo que indica una mayor concentración de estos compuestos.

El análisis de componentes principales mostró que los cafés con tostión suave (Tolima, Nariño y Cauca) y los de tostión fuerte (Caldas) concentraron la mayor variabilidad en la presencia de grupos funcionales, destacando el efecto combinado de la región y el tipo de tostión sobre la composición química. En particular, los cafés de Cauca y Caldas sobresalieron por su alta riqueza funcional, lo que evidencia que la procedencia geográfica y el grado de tostión no solo modifican la cantidad, sino también la diversidad de compuestos funcionales del grano.

RECOMENDACIONES

Se recomienda ampliar la investigación mediante técnicas instrumentales de análisis cuantitativo, con el propósito de complementar los resultados obtenidos sobre la caracterización funcional y bioactiva de los cafés, así como profundizar en la influencia de la región de origen y el nivel de tostión. Dado que la espectroscopía empleada en este estudio se basa en un enfoque cualitativo, los espectros obtenidos no

permiten cuantificar con precisión la concentración de compuestos específicos. La incorporación de métodos como cromatografía líquida de alta resolución (HPLC), espectrometría de masas (MS) o resonancia magnética nuclear (RMN) permitiría validar y fortalecer la interpretación de los grupos funcionales identificados, aportando mayor robustez a las conclusiones del estudio.

CONTRIBUCIÓN DE LA AUTORÍA

Primer, segundo y tercer autor: participaron activamente en la metodología,

investigación, análisis de datos, conceptualización y escritura del manuscrito original.

AGRADECIMIENTOS

Agradecimientos a la Universidad de Pamplona como casa de estudios del doctorado en Ciencia y Tecnología de Alimentos a la que está asociado en autor 1. Así mismo, a la Universidad Autónoma de Bucaramanga como entidad ejecutora y fi-

nanciera del plan “Formación de capital humano a nivel doctoral para atender las demandas territoriales de la región Centro Oriente: Santander, Norte de Santander, Boyacá, Cundinamarca, Bogotá”, del cual el autor 1 es beneficiario.

AGRADECIMIENTO

A la Universidad Autónoma de Bucaramanga como entidad ejecutora y financiera del plan “Formación de capital humano a nivel doctoral para atender las demandas territoriales de la región Centro Orien-

te: Santander, Norte de Santander, Boyacá, Cundinamarca, Bogotá” del cual el autor 1 es beneficiario. A la Universidad de Pamplona, donde se ejecutó la presente investigación.

USO DE INTELIGENCIA ARTIFICIAL

No aplica.

CONFLITO DE INTERESES

Los autores declaran no tener ningún conflicto de intereses.

LITERATURA CITADA

Alcantara, G. M. R. N., Martins, L. C., Gomes, W. P. C., Dresch, D., Rocha, F. R. P. & Melchert, W. R. (2025). Effect of roasting on chemical composition of coffee. *Food Chemistry*, 477 143169. <https://doi.org/10.1016/J.FOODCHEM.2025.143169>

Aung Moon, S., Wongsakul, S., Kitazawa, H., Kittiwachana, S. & Saenggrayap, R. (2024). Application of ATR-FTIR for Green Arabica Bean Shelf-Life Determination in Accelerated Storage. *Foods* 13, (15), 2331. <https://doi.org/10.3390/FOODS13152331>

- Baqueta, M. R., Valderrama, P., Mandrone, M., Poli, F., Coqueiro, A., Costa-Santos, A. C., Rebellato, A. P., Luz, G. M., Rocha, R. B., Pallone, J. A. L. & Marini, F. (2023). ¹H NMR, FAAS, portable NIR, benchtop NIR, and ATR-FTIR-MIR spectroscopies for characterizing and discriminating new Brazilian Canephora coffees in a multi-block analysis perspective. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 240, 104907. <https://doi.org/10.1016/J.CHEMOLAB.2023.104907>
- Barrios-Rodríguez, Y., Collazos-Escobar, G. A. & Gutiérrez-Guzmán, N. (2021a). ATR-FTIR for characterizing and differentiating dried and ground coffee cherry pulp of different varieties (*Coffea Arabica* L.). *Engenharia Agrícola*, 41(1), 70–77. <https://doi.org/10.1590/1809-4430-ENG.AGRIC.V41N1P70-77/2021>
- Barrios-Rodríguez, Y. F., Rojas Reyes, C. A., Triana Campos, J. S., Girón-Hernández, J., & Rodríguez-Gamir, J. (2021b). Infra-red spectroscopy coupled with chemometrics in coffee post-harvest processes as complement to the sensory analysis. *LWT*, 145, 111304. <https://doi.org/10.1016/j.lwt.2021.111304>
- Barron, D., Pineau, N., Matthey-Doret, W., Ali, S., Sudre, J., Germain, J. C., Kolodziejczyk, E., Pollien, P., Labbe, D., Jarisch, C., Dugas, V., Hartmann, C. & Folmer, B. (2012). Impact of crema on the aroma release and the in-mouth sensory perception of espresso coffee. *Food & Function*, 3(9), 923-930. <https://doi.org/10.1039/C2FO30046J>
- Belchior, V., Botelho, B. G., Oliveira, L. S. & Franca, A. S. (2019). Attenuated Total Reflectance Fourier Transform Spectroscopy (ATR-FTIR) and chemometrics for discrimination of espresso coffees with different sensory characteristics. *Food Chemistry*, 273, 178-185. <https://doi.org/10.1016/J.FOODCHEM.2017.12.026>
- Castaldo, L., Narváez, A., Izzo, L., Graziani, G. & Ritieni, A. (2020). In Vitro Bioaccessibility and Antioxidant Activity of Coffee Silverskin Polyphenolic Extract and Characterization of Bioactive Compounds Using UHPLC-Q-Orbitrap HRMS. *Molecules* 2020, Vol. 25, Page 2132, 25(9), 2132. <https://doi.org/10.3390/MOLECULES25092132>
- Cortés-Macías, E. T., Fuentes-López, C., Gentile, P., Girón-Hernández, J. & Fuentes-López, A. (2022). Impact of post-harvest treatments on physicochemical and sensory characteristics of coffee beans in Huila, Colombia. *Postharvest Biology and Technology*, 187, 111852. <https://doi.org/10.1016/J.POSTHARVBIO.2022.111852>
- Craig, A. P., Franca, A. S. & Oliveira, L. S. (2012). Evaluation of the potential of FTIR and chemometrics for separation between defective and non-defective coffees. *Food Chemistry*, 132(3), 1368-1374. <https://doi.org/10.1016/J.FOODCHEM.2011.11.121>
- De Souza Costa, A. M., Lirio Soares, K., De Souza Silveira, L., Verdin Filho, A. C., Louzada Pereira, L., Moreira Osório, 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, 113791. <https://doi.org/10.1016/J.FOODRES.2023.113791>
- Debona, D. G., Oliveira, E. C. da S., Ten Caten, C. S., Guarçoni, R. C., Moreira, T. R., Pereira, L. L. & Moreli, A. P. (2021). Sensory analysis and mid-infrared spectroscopy for discriminating roasted specialty coffees. *Coffee Science*, 16. <https://doi.org/10.25186/v16i.1878>
- Debona, D. G., Pereira, L. L., da Luz, J. M. R., Lyrio, M. V. V., Guimarães, C. V., Simmer, M. M. B., Agnoletti, B. Z., Frinhani, R. Q., da Silva Oliveira, E. C. & de Castro, E. V. R. (2024). Mid-infrared spectroscopy and physicochemical analyses in the characterization of coffee roasting stages. *European Food Research and Technology*, 1-15. <https://doi.org/10.1007/s00217-024-04627-4>
- Flores-Valdez, M., Meza-Márquez, O. G., Osorio-Revilla, G. & Gallardo-Velázquez, T. (2020). Identification and Quantification of Adulterants in Coffee (*Coffea arabica* L.) Using FT-MIR Spectroscopy Coupled with Chemometrics. *Foods*. <https://doi.org/10.3390/foods9070851>
- Iriondo-DeHond, A., Rodríguez Casas, A. & del Castillo, M. D. (2021). Interest of Coffee Melanoidins as Sustainable Healthier Food Ingredients. *Frontiers in Nutrition*, 8, 730343. <https://doi.org/10.3389/fnut.2021.730343>
- Itobe, T., Nishimura, O. & Kumazawa, K. (2015). Influence of milk on aroma release and aroma perception during consumption of coffee beverages. *Food Science and Technology Research*, 21(4), 607-614. <https://doi.org/10.3136/FSTR.21.607>
- Jiménez-Ochoa, J. P., Barrios-Rodríguez, Y. F., Bahamón-Monje, A. F. & Gutiérrez-Gúzman, N. (2022). Physicochemical and sensory characteristics of dehydrated coffee pulp in function of drying temperature. *Revista Brasileira de Engenharia Agrícola e Ambiental*, 26(12), 894-900. <https://doi.org/10.1590/1807-1929/AGRIAMBI.V26N12P894-900>
- Kungsuwan, K., Sawangrat, C., Ounjaijean, S., Chaipoot, S., Phongphisutthinant, R. & Wiriyacharee, P. (2023). Enhancing Bioactivity and Conjugation in Green Coffee Bean (*Coffea arabica*) Extract through Cold Plasma Treatment: Insights into Antioxidant Activity and Phenolic-Protein Conjugates. *Molecules*, 28(20), 7066. <https://doi.org/10.3390/MOLECULES28207066>
- Maiyah, N., Kerdpi boon, S., Supapvanich, S., Kerr, W. L., Sriprom, P., Chotigavin, N., Klaypradit, W. & Puttongsiri, T. (2025). Recovering bioactive compounds and antioxidant capacity of medium roasted spent coffee grounds through varied hydrothermal brewing cycles. *Journal of Agriculture and Food Research*, 20, 101789. <https://doi.org/10.1016/J.JAFR.2025.101789>
- Manrique, C. A. y Gutiérrez, N. (2018). Evaluación del proceso de clasificación de café (*Coffea arabica* L.) por el método de la espectroscopia infrarroja FTIR. *Rev.*

- Ingeniería y Región*, 20. <https://journalusco.edu.co/index.php/iregion/article/view/1890/3128>
- Marín-San Román, S., Rubio-Bretón, P., Pérez-Álvarez, E. P., & Garde-Cerdán, T. (2020). Advancement in analytical techniques for the extraction of grape and wine volatile compounds. *Food Research International*, 137, 109712. <https://doi.org/10.1016/J.FOODRES.2020.109712>
- Masek, A., Latos-Brozio, M., Kałużna-Czaplińska, J., Rosiak, A. & Chrzescjanska, E. (2020). Antioxidant Properties of Green Coffee Extract. *Forests*, 11 (5), 557. <https://doi.org/10.3390/F11050557>
- Mendes dos Santos, É. M., Malvezzi de Macedo, L., Lacelendola Tundisi, L., Artem Ataide, J., Camargo, G. A., Alves, R. C., Oliveira, M. B. P. P. & Gava Mazzola, P. (2021). Coffee by-products in topical formulations: A review. *Trends in Food Science & Technology*, 111, 280-291. <https://doi.org/10.1016/J.TIFS.2021.02.064>
- MinAgricultura. (2022). *Área, Producción y Rendimiento Nacional de café*. . <https://www.agronet.gov.co/estadistica/paginas/home.aspx?cod=1>
- Munyendo, L. M., Njoroge, D. M., Owaga, E. E. & Mugendi, B. (2021). Coffee phytochemicals and post-harvest handling—A complex and delicate balance. *Journal of Food Composition and Analysis*, 102, 103995. <https://doi.org/10.1016/J.JFCA.2021.103995>
- Munyendo, L., Njoroge, D., & Hitzmann, B. (2022). The Potential of Spectroscopic Techniques in Coffee Analysis—A Review. *Processes*, 10(1). <https://doi.org/10.3390/pr10010071>
- Nemzer, B., Abshiru, N. & Al-Taher, F. (2021a). Identification of Phytochemical Compounds in Coffea arabica Whole Coffee Cherries and Their Extracts by LC-MS/MS. *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, 69(11), 3430–3438. <https://doi.org/10.1021/acs.jafc.0c05937>
- Nemzer, B., Kalita, D. & Abshiru, N. (2021b). Quantification of Major Bioactive Constituents, Antioxidant Activity, and Enzyme Inhibitory Effects of Whole Coffee Cherries (Coffea arabica) and Their Extracts. *Molecules*, 2021, 26(14), 4306. <https://doi.org/10.3390/MOLECULES26144306>
- Ni, Z., Bi, H., Jiang, C., Sun, H., Zhou, W., Tian, J. & Lin, Q. (2022). Investigation of co-combustion of sewage sludge and coffee industry residue by TG-FTIR and machine learning methods. *Fuel*, 309, 122082. <https://doi.org/10.1016/J.FUEL.2021.122082>
- Pereira, L. L., Debona, D. G., Pinheiro, P. F., de Oliveira, G. F., ten Caten, C. S., Moksunova, V., Kopanina, A. V., Vlasova, I. I., Talskikh, A. I., & Yamamoto, H. (2021). Quality Determinants in Coffee Production. *Food Engineering Series*. <https://doi.org/10.1007/978-3-030-54437-9>
- Pimpley, V., Patil, S., Srinivasan, K., Desai, N. & Murthy, P. S. (2020). The chemistry of chlorogenic acid from green coffee and its role in attenuation of obesity and diabetes. *Preparative Biochemistry & Biotech-*

- nology*, 50(10), 969-978. <https://doi.org/10.1080/10826068.2020.1786699>
- Pramudita, D., Araki, T., Sagara, Y. & Tambunan, A. H. (2017). Roasting and Colouring Curves for Coffee Beans with Broad Time-Temperature Variations. *Food and Bioprocess Technology*, 10, 1509-1520. <https://doi.org/10.1007/s11947-017-1912-5>
- Preedalikit, W., Chittasupho, C., Leelapornpisid, P., Potprommanee, S. & Kiattisin, K. (2023). Comparison of Biological Activities and Protective Effects on PAH-Induced Oxidative Damage of Different Coffee Cherry Pulp Extracts. *Foods*, 12(23), 4292. <https://doi.org/10.3390/FOODS12234292>
- Rojas-Ospina, A., Zuñiga-Collazos, A. & Castillo-Palacio, M. (2024). Factors influencing environmental sustainability performance: A study applied to coffee crops in Colombia. *Journal of Open Innovation: Technology, Market, and Complexity*, 10(3), 100361. <https://doi.org/10.1016/J.JOITMC.2024.100361>
- Stanek, N., Zarębska, M., Biłos, Ł., Barabosz, K., Nowakowska-Bogdan, E., Semenik, I., Błaszczewicz, J., Kulesza, R., Matejuk, R. & Szkutnik, K. (2021). Influence of coffee brewing methods on the chromatographic and spectroscopic profiles, antioxidant and sensory properties. *Scientific Reports*, 11(1), 1-13. <https://doi.org/10.1038/S41598-021-01001-2>
- Tadesse, T., Tesfaye, B. & Abera, G. (2020). Coffee production constraints and opportunities at major growing districts of southern Ethiopia. *Cogent Food & Agriculture*, 6(1). <https://doi.org/10.1080/23311932.2020.1741982>
- Todhanakasem, T., Van Tai, N., Kunyane, K. & Pitinidhipat, N. (2025). Physicochemical characteristics and metabolite content of roasted arabica coffee in relation to consumer preference. *LWT*, 217, 117438. <https://doi.org/10.1016/J.LWT.2025.117438>
- Tsiafita, A., Oikonomopoulou, V., Stramarkou, M., Krokida, M., & Papassiopi, N. (2022). Effect of heat treatment on physicochemical and sensory properties of selected coffee varieties. *European Food Research and Technology*, 248, 2009-2020. <https://doi.org/10.1007/s00217-022-04025-8>
- Tsiaka, T., Kritsi, E., Bratakos, S. M., Sotiroudis, G., Petridi, P., Savva, I., Christodoulou, P., Strati, I. F., Zoumpoulakis, P., Cavouras, D. & Sinanoglou, V. J. (2023). Quality Assessment of Ground Coffee Samples from Greek Market Using Various Instrumental Analytical Methods, In Silico Studies and Chemometrics. *Antioxidants*, 12(6), 1184. <https://doi.org/10.3390/antiox12061184>
- Wołosiak, R., Pakosz, P., Druzynska, B. & Janowicz, M. (2023). Antioxidant Activity of Coffee Components Influenced by Roast Degree and Preparation Method. *Applied Sciences*, 13(4), 2057. <https://doi.org/10.3390/AP13042057>
- Yusmanizar, Setiasih, I. S., Nurjanah, S., Muhaemin, M., Nurhadi, B., Rosniawaty, S. & Munawar, A. A. (2019). Fast and Non-De-

structive Prediction of Moisture Content and Chologenic Acid of Intact Coffee Beans Using Near Infrared Reflectance Spectroscopy. *IOP Conference Series: Ma-*

terials Science and Engineering, 506(1), 012033. <https://doi.org/10.1088/1757-899X/506/1/012033>

Conflicto de intereses

Los autores declaran no tener ningún conflicto de intereses.



Licencia de Creative Commons

Revista de Investigación Agraria y Ambiental is licensed under a Creative Commons Reconocimiento - No Comercial - Compartir Igual 4.0 Internacional License.

