

Chemical and biological characterization of green and processed coffee beans from *Coffea arabica* varieties

2

3

Javier Gallardo-Ignacio¹, Anislada Santibáñez², Octavio Oropeza-Mariano³, Ricardo Salazar⁴, Rosa Mariana Montiel-Ruiz², Sandra Cabrera-Hilerio⁵, Manasés Gonzáles-Cortazar², Francisco Cruz-Sosa^{1*} and Pilar Nicasio-Torres^{2*}

4

5

¹ Departamento de Biotecnología, Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa, Av. Ferrocarril de San Rafael Atlixco No.186, Col. Leyes de Reforma 1ª Sección, Iztapalapa, C.P. 09310, CDMX, México.

6

7

² Centro de Investigación Biomédica del Sur, Instituto Mexicano del Seguro Social (CIBIS-IMSS), Argentina #1, Centro, Xochitepec 62790, Morelos, México.

8

9

³ Cafecultores MEPHAA de la Montaña, Paraje Montero, Malinaltepec, 41500, Guerrero, México.

10

⁴ CONACYT, Universidad Autónoma de Guerrero, Av. Lázaro Cárdenas S/N, Chilpancingo de los Bravo 39086, Guerrero, México.

11

12

⁵ Laboratorio de Bromatología, Facultad de Ciencias Químicas, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, Av. San Claudio S/N Ciudad Universitaria, Puebla, México.

13

14

* Correspondence: cuhp@xanum.uam.mx (F.C-S.); pisliva@yahoo.com.mx (P.N-T.)

15

16

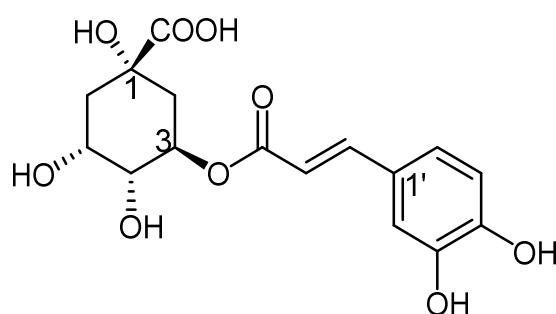


Figure S1. Chemical structure of chlorogenic acid isolated from the infusion of beans *Coffea arabica* variety Oro Azteca

Table S1. ^1H (400 MHz) and ^{13}C NMR (100 MHz) Spectroscopic Data of chlorogenic acid (MeOH-d_4 , δ , ppm, J/Hz)

C Atom	δ ^1H -Experimental	δ ^{13}C -Experimental	Data of [14].	
			δ ^1H	δ ^{13}C
1		70.24		71.06
2a	2.09 (m)	39.44	2.21 (m)	37.65
b	1.92 (dd, 12.1, 12.4 Hz)			
3	5.23 (ddd, 5.1, 5.5, 10.2 Hz)	71.29	5.17	71.06
4	3.62 (d, br, 10.1 Hz)	72.97	4.89	68.48
5	4.12 (s, br)	71.91	4.77	73.90
6a	1.98 (m)	37.21	1.84	36.66
b	1.98 (m)			
1'		126.03		126.05
2'	7.10 (d, 1.4 Hz)	115.06	7.00	114.99
3'		146.07		148.80
4'		148.80		145.71
5'	6.82 (d, 8.1 Hz)	116.25	6.98	116.20
6'	7.03 (dd, 1.5, 8.1 Hz)	121.68	7.00	114.99
7'	7.52 (d, 15.8 Hz)	145.18	7.42	145.71
8'	6.30 (d, 15.9 Hz)	115.20	6.15	114.99
9'		166.74		166.18
COOH		175.88		175.38