



Análisis de la Fracción Volátil en Acciones Colombianas de *Capsicum spp.* Utilizando HS-SPME-GC-MS y Métodos Estadísticos

Analysis of the Volatile Fraction in Colombian *Capsicum spp.* Accessions Using HS-SPME-GC-MS and Statistical Methods

Mónica Pérez-Beltrán¹, Juan Diego Ramirez¹, Juan González Martínez¹, Guillermo L. Montoya², Juan Camilo Henao-Rojas³, Chiara Carazzone^{1*}

¹ Laboratory of Advanced Analytical Techniques in Natural Products (LATNAP), Chemistry Department, Universidad de los Andes, Bogotá 111711, Colombia. * c.carazzone@uniandes.edu.co

² Facultad de Ingeniería, Diseño y Ciencias Aplicadas. Escuela de Ciencias Aplicadas e Industria Sostenible, Departamento de Ciencias Farmacéuticas y Químicas, Universidad Icesi. Cali, Valle del Cauca 760031, Colombia.

³ Corporación Colombiana de Investigación Agropecuaria–Agrosavia, Centro de Investigación La Selva, Kilómetro 7, Vía a Las Palmas, Vereda Llanogrande, Rionegro 054048, Colombia

Presentación Oral 56

ABSTRACT

Chilli peppers (*Capsicum spp.*) are of outstanding global importance due to their widespread use in various industries, the remarkable diversity of their varieties, and the presence of bioactive compounds [1-3]. The analysis of volatile organic compounds (VOCs) in *Capsicum spp.* is essential to define their aroma and flavor, which are fundamental characteristics for their culinary and commercial applications [4;5]. These compounds serve as chemical markers for quality control and genetic improvement, given their variability under different abiotic and genotypic factors [6;7]. Therefore, their study contributes to optimizing production processes, storage, and traceability of pepper-derived products, enhancing their valorization [7;8].

This study analyzed 26 accessions of *Capsicum spp.* from the AGROSAVIA germplasm bank, including the species *C. annuum*, *C. chinense*, *C. baccatum*, and *C. baccatum var. pendulum*. For this purpose, HS-SPME-GC-MS was used, with extraction and chromatography methods previously optimized using design of experiments (DoE) and quality controls (QC). Preliminary results revealed the presence of esters, monoterpenes, sesquiterpenes, alcohols, and alkanes—chemical families linked to sensory and functional attributes. Mass spectrometry data were also processed using GNPS, and the resulting matrix was refined for subsequent analysis in MetaboAnalyst 6.0. The chemometric analysis of the data showed a clear segregation of the accessions into



groups, primarily associated with the coloration of the samples. Certain species of *C. chinense* with an orange color cluster together with *C. baccatum* species of the same color, suggesting they may share chemical similarities. These results highlight the correlation between the chemical identity of *Capsicum spp.* and biological factors such as species and coloration. Consequently, identifying potential markers to differentiate chemical profiles is proposed, which could be particularly useful in products such as chili powders. This approach promotes the valorization of natural products by linking their unique chemical diversity with practical applications in strategic industries.

Key words:

Capsicum spp., Volatile Organic Compounds (VOCs), HS-SPME-GC-MS, Chemometric Analysis, Chemical Profile

RESUMEN

Los ajíes (*Capsicum spp.*) representan de gran importancia a nivel mundial debido a su uso extendido en diversas industrias, su diversidad de variedades y la presencia de compuestos bioactivos^[1-3]. El análisis de los compuestos orgánicos volátiles (VOCs) en *Capsicum spp.* resulta esencial para definir su aroma y sabor, características fundamentales en su aplicación culinaria y comercial^[4;5]. Además, estos compuestos actúan como marcadores químicos para el control de calidad y el mejoramiento genético, dada su variabilidad bajo distintos factores abióticos y genotípicos^[6;7]. Por lo que su estudio contribuye optimizar procesos productivos, almacenamiento y trazabilidad de productos derivados de ajíes lo que potencia a su valorización^[7;8].

En este estudio se analizaron 26 accesiones de *Capsicum spp.* del banco de germoplasma de AGROSAVIA, incluyendo las especies *C. annuum*, *C. chinense*, *C. baccatum* y *C. baccatum var. pendulum*. Para ello, se utilizó HS-SPME-GC-MS con métodos de extracción y cromatografía que fueron previamente optimizados mediante diseño de experimentos (DoE) utilizando los controles de calidad (QC). Los resultados preliminares revelan la presencia de ésteres, monoterpenos, sesquiterpenos, alcoholes y alcanos, familias químicas vinculadas a atributos sensoriales y funcionales. Además, los datos de espectrometría de masas fueron procesados utilizando GNPS y la matriz resultante fue depurada para su posterior análisis en MetaboAnalyst 6.0. El análisis quimiométrico de los datos mostró una clara segregación de las accesiones en grupos asociados principalmente por la coloración de las muestras. Se observa que algunas especies de *C. chinense* con tonalidad naranja se agruparon con especies de *C. baccatum* de la misma coloración, sugiriendo similitudes químicas.

Estos resultados destacan la correlación entre la identidad química de *Capsicum spp.* y factores biológicos como especie y coloración. A continuación, se plantea la identificación de marcadores potenciales para diferenciar perfiles químicos, lo que puede resultar especialmente útiles en productos como polvos de ají. Este enfoque impulsa la valorización de productos naturales al vincular su diversidad química única con aplicaciones prácticas en industrias estratégicas.



Palabras clave:

Capsicum spp., Compuestos Orgánicos Volátiles (VOCs), HS-SPME-GC-MS, Análisis Quimiométrico, Perfil Químico, Marcadores Volátiles

Agradecimientos/Acknowledgements

Agradecemos a AGROSAVIA por proveer las muestras de *Capsicum spp.* utilizadas en este estudio, y reconocemos el apoyo financiero brindado por la Universidad de los Andes, sin el cual esta investigación no habría sido posible.

Referencias/References

- [1] HERNÁNDEZ-PÉREZ, T., *et al.* (2020). Capsicum Annuum (Hot Pepper): An Ancient Latin-American Crop with Outstanding Bioactive Compounds and Nutraceutical Potential. A Review. *Comprehensive Reviews in Food Science and Food Safety* **19**(6): 2972-2993. [[DOI](#)]
- [2] LOZADA, D. N., *et al.* (2022). Chile Pepper (Capsicum) Breeding and Improvement in the “Multi-Omics” Era. *Frontiers in Plant Science* **Volume 13 - 2022**. [[DOI](#)]
- [3] VILLA-RIVERA, M. G. y OCHOA-ALEJO, N. Chili Pepper Carotenoids: Nutraceutical Properties and Mechanisms of Action. *Molecules*. (2020).
- [4] SOUSA, E. T., *et al.* (2006). Multivariate Optimization and Hs-Spme/Gc-Ms Analysis of Vocs in Red, Yellow and Purple Varieties of Capsicum Chinense Sp. Peppers. *Microchemical Journal* **82**(2): 142-149. [[DOI](#)]
- [5] TAITI, C., *et al.* (2019). Correlation between Volatile Compounds and Spiciness in Domesticated and Wild Fresh Chili Peppers. *Food and Bioprocess Technology* **12**(8): 1366-1380. [[DOI](#)]
- [6] ÁNGELES-LÓPEZ, Y. I., *et al.* (2025). What Do We Know About Capsicum Volatilome? *Chemistry & Biodiversity* **22**(3): e202401444. [[DOI](#)]
- [7] HENG, Z., *et al.* (2023). Characterization of Odor-Contributing Volatile in Capsicum Chinense ‘Jt-1’ fruits During Development and Transcriptome Analysis of Key Fruit-Aroma Formation Periods. *Scientia Horticulturae* **309**: 111691. [[DOI](#)]
- [8] JIANG, Q., *et al.* (2024). Unraveling the Impact of Disinfection Treatment on the Microbial Community Successions and Quality Attributes of Green Peppers (Capsicum Annuum L.) During Storage. *Food Research International* **196**: 115020. [[DOI](#)]