AVALIAÇÃO DO PERFIL QUÍMICO DE CAFÉS ARÁBICA CONVENCIONAIS E ESPECIAIS CULTIVADOS NA REGIÃO NORTE DO PARANÁ

Felipe Taid Kussano (PIBIC/CNPq/FA/UEM), Eduardo Jorge Pilau (Orientador), Vinicius Ribeiro Montes (Co-orientador). E-mail: felipetaidkussano@gmail.com.

Universidade Estadual de Maringá, Centro de Ciências Exatas, Maringá, PR.

Área e subárea do conhecimento: Química Analítica/ Instrumentação Analítica

Palavras-chave: quimiometria, metabolômica, espectroscopia.

RESUMO

O café apresenta elevada importância econômica e cultural, e sua composição química pode ser influenciada por fatores como manejo agrícola, origem e grau de torra. O presente trabalho avaliou o perfil químico de 12 amostras (6 convencionais e 6 especiais) de cafés arábicas, cultivados em sistemas especiais e convencionais de mercado, por meio de uma abordagem multitécnica. Foram empregadas espectroscopia no infravermelho próximo (NIR), espectroscopia de emissão atômica por plasma de micro-ondas (MP-AES) e espectrometria de massas de alta resolução acoplada à cromatografia líquida (UHPLC-QTOF-MS/MS), com extrações aquosa e orgânica e aquisição nos modos de ionização positivo e negativo. Os dados foram tratados utilizando ferramentas de redução de dimensionalidade, como a análise de componentes principais (PCA). As análises por UHPLC-QTOF-MS/MS nos modos positivo, nas frações aquosa e orgânica, apresentaram maior distinção entre os grupos de cafés especiais e convencionais, com os dois primeiros componentes principais explicando aproximadamente 47,0% e 40,1% da variância total, respectivamente. A análise dos loadings indicou que sinais associados a moléculas de maior massa molecular contribuíram para a separação dos grupos, evidenciando diferenças no perfil químico das amostras relacionadas às características dos cafés avaliados.

INTRODUÇÃO

O café destaca-se como uma das bebidas mais consumidas mundialmente, exercendo papel central nas dinâmicas econômicas, sociais e culturais de diversos países (OIC, 2024). Sua composição química pode fornecer informações relevantes para a avaliação da qualidade, diferenciação de amostras e rastreabilidade de sua origem e sistema de produção (Farah; Donangelo, 2006).

Nesse contexto, a utilização de diferentes técnicas analíticas permite acessar informações complementares sobre a composição química do café. Técnicas espectroscópicas e espectrométricas, quando associadas a ferramentas quimiométricas, possibilitam explorar diferentes dimensões do perfil químico das

amostras e identificar padrões relacionados às suas características. A espectroscopia no infravermelho próximo (NIR) destaca-se pela rapidez, simplicidade operacional e caráter não destrutivo, fornecendo informações globais relacionadas à composição química das amostras (Pasquini, 2018). Por sua vez, a espectrometria de emissão atômica por plasma de micro-ondas permite a determinação multielementar de forma relativamente rápida, fornecendo informações sobre a composição mineral das amostras, aspecto relevante para a diferenciação de cafés produzidos sob diferentes sistemas agrícolas (Santos; Santos; Conti, 2010). Complementarmente, a espectrometria de massas de alta resolução acoplada à cromatografia líquida possibilita a caracterização abrangente de metabólitos e outros constituintes orgânicos, explorando diferenças no perfil molecular entre as amostras.

A combinação dessas técnicas pode ser particularmente relevante para a caracterização de cafés, uma vez que cada abordagem fornece informações associadas a diferentes componentes da matriz (Baqueta *et al*., 2024). Enquanto o NIR apresenta uma visão global da composição química, o MP-AES permite investigar a distribuição dos elementos minerais e a UHPLC-QTOF-MS/MS fornece informações mais detalhadas sobre o perfil de metabólitos e outros compostos de menor abundância. A integração dessas informações pode, portanto, ampliar a capacidade de discriminação das amostras quando comparada à utilização de uma única técnica analítica.

Diante disso, este trabalho propõe a aplicação integrada de técnicas analíticas complementares, incluindo espectroscopia no infravermelho próximo, espectrometria de emissão atômica por plasma de micro-ondas e espectrometria de massas de alta resolução acoplada à cromatografia líquida, associadas a ferramentas quimiométricas, para investigar a composição química e a capacidade de discriminação de 12 amostras de café árabicas. A utilização conjunta dessas abordagens busca avaliar se a combinação de diferentes dimensões do perfil químico pode fornecer informações relevantes para a diferenciação e rastreabilidade das amostras.

MATERIAIS E MÉTODOS

As amostras de café especiais foram obtidas em lojas especializadas em cafés especiais em Maringá, Paraná, ou obtidas com pequenos produtores da região. As amostras convencionais foram adquiridas em supermercados. Previamente a qualquer análise, todo o material foi submetido à padronização granulométrica com partículas menores que 400 µm. Para a determinação elementar, as amostras passaram por digestão ácida e foram analisadas em triplicata, para determinação de um perfil mineral. Para a caracterização metabolômica, foram preparados extratos aquosos e orgânicos por procedimento de extração baseado no método de Folch modificado, posteriormente analisados por UHPLC-QTOF-MS/MS, nos modos de ionização positivo e negativo. As amostras também foram analisadas por NIR, e os espectros foram submetidos pré-processamento, incluindo a aplicação da primeira

derivada de Savitzky-Golay. Os dados obtidos pelas diferentes técnicas foram avaliados por PCA, com tratamento computacional em ambiente R, e integrados por Mzmine, permitindo investigar a contribuição de cada bloco analítico para a diferenciação das amostras.

RESULTADOS E DISCUSSÃO

Entre os blocos analíticos avaliados, os dados obtidos por UHPLC-QTOF-MS/MS no modo de ionização positivo apresentaram maior capacidade de discriminação das amostras. A PCA do modo positivo com a fração aquosa demonstrou uma distribuição diferenciada dos grupos, com os dois primeiros componentes explicando 47,0% da variância total (PC1 = 32,7% e PC2 = 14,3%), indicando que o perfil de metabólitos detectado nesse modo de ionização contribuiu de forma relevante para a diferenciação das amostras (Figura 1).

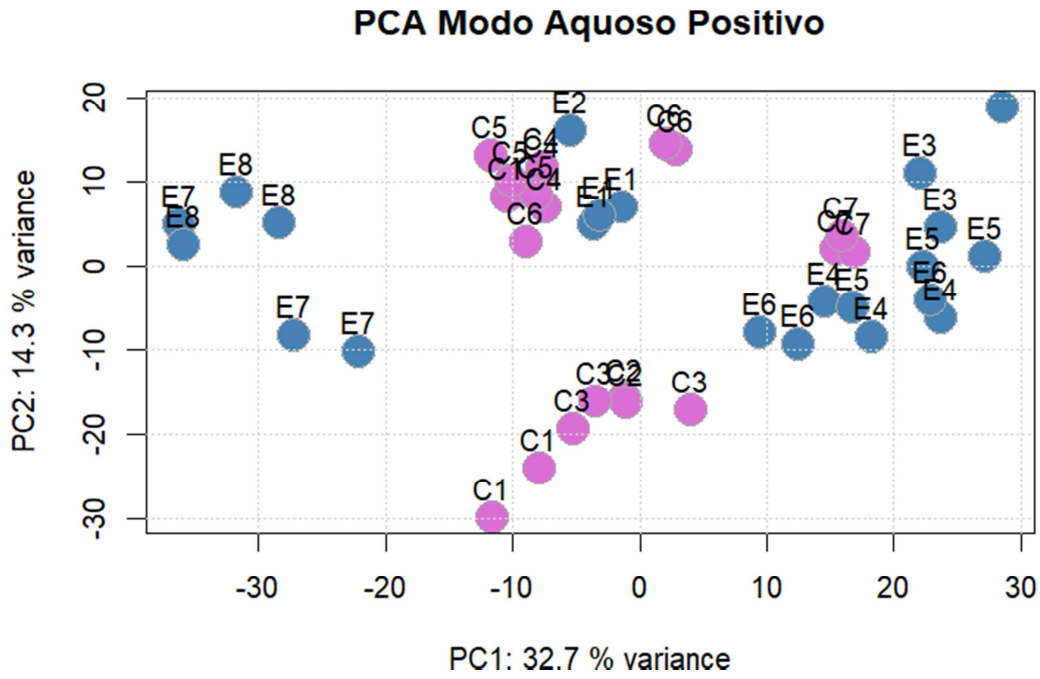


Figura 1. PCA do conjunto de amostras no modo positivo da fase aquoso obtido através do UHPLC-QTOF-MS/MS. E = cafés especiais; C = cafés convencionais.

Os dados obtidos por UHPLC-QTOF-MS/MS no modo de ionização positivo apresentaram maior capacidade de discriminação das amostras. A PCA do modo positivo com a fração orgânica demonstrou uma distribuição diferenciada dos grupos, com os dois primeiros componentes explicando 40,1% da variância total (PC1 = 27,2% e PC2 = 12,9%), indicando que o perfil de metabólitos detectado nesse modo de ionização contribuiu de forma relevante para a diferenciação das amostras.

CONCLUSÕES

A abordagem multi técnica permitiu caracterizar diferentes dimensões do perfil químico dos cafés avaliados e demonstrou que a qualidade do café pode constituir um fator de diferenciação nas análises globais. A combinação de NIR, e UHPLC-QTOF-MS/MS e MPAES com técnicas de quimiometria mostrou-se adequada para a investigação de matrizes complexas como o café, fornecendo informações complementares sobre sua composição química e sobre potenciais marcadores de diferenciação entre sistemas produtivos.

AGRADECIMENTOS

Agradecemos ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq), à Universidade Estadual de Maringá (UEM) e ao Departamento de Química pelo apoio ao desenvolvimento deste projeto de iniciação científica.

REFERÊNCIAS

BAQUETA, M. R. *et al*. Multiplatform Path-ComDim study of Capixaba, indigenous and non-indigenous Amazonian Canephora coffees. **Food Chemistry**, [S. l.], v. 463, p. 141485, jan. 2024. Disponível em: https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2024.141485. Acesso em: 11 set. 2026.

FARAH, A.; DONANGELO, C. M. Phenolic compounds in coffee 1. Braz. J. **Plant Physiol**., [S. l.], v. 18, n. 1, p. 23–36, 2006.

ORGANIZAÇÃO INTERNACIONAL DO CAFÉ (OIC). Relatório sobre o Desenvolvimento do Café de 2022-23 da OIC: visão geral. [S. l.]: **Organização Internacional do Café**, 2024. Disponível em: https://www.icocoffee.org/documents/cy2024-25/ed-2477p-overview-cdr-2022-23.pdf. Acesso em: 11 set. 2026.

PASQUINI, C. Near infrared spectroscopy: a mature analytical technique with new perspectives – a review. Analytica Chimica Acta, [S. l.], v. 1026, p. 8–36, 2018. Disponível em: https://doi.org/10.1016/j.aca.2018.04.004. Acesso em: 11 set. 2026.

SANTOS, J. S. D.; SANTOS, M. L. P. D.; CONTI, M. M. Comparative study of metal contents in Brazilian coffees cultivated by conventional and organic agriculture applying principal component analysis. **Journal of the Brazilian Chemical Society**, [S. l.], v. 21, n. 8, p. 1468–1476, 2010. Disponível em: https://doi.org/10.1590/S0103-50532010000800009. Acesso em: 11 set. 2026.