

Análise de cafés Arábica e Robusta por ESI(±) FT-ICR MS

Rafael Garrett¹ (PG)*, Boniek G. Vaz² (PG), Ana Maria C. Hovell¹ (PQ), Marcos N. Eberlin² (PQ), Claudia M. Rezende¹ (PQ). *rafagarrett@yahoo.com.br

¹Laboratório de Análise de Aromas, IQ, UFRJ, 21945-970 - RJ, Brasil

²Laboratório ThoMson de Espectrometria de Massas, IQ, Unicamp, 13083-970 - Campinas - SP, Brasil.

Palavras Chave: Café Arábica, café Robusta, ESI, FT-ICR MS.

Introdução

O café é uma das bebidas mais consumidas em todo mundo e as espécies *Coffea arabica* (café Arábica) e a *C. canephora* var. *robusta* (café Robusta) são importantes produtos de exportação. Diversas metodologias já foram empregadas na análise e discriminação de cafés Arábica e Robusta, muitas demandam laborioso preparo de amostra e tempo de análise. Neste contexto, a técnica de ionização por eletronebulização (ESI) acoplada à espectrometria de massas de ressonância ciclôtrônica de íons por transformada de Fourier (FT-ICR MS) surge como uma alternativa para a análise rápida de misturas complexas, como o café, apresentando uma altíssima resolução e exatidão em massa, capaz de distinguir duas substâncias de mesma massa nominal, mas diferente massa exata com erros abaixo de 1ppm¹.

Resultados e Discussão

Cafés Arábica e Robusta preparados do grão torrado através da filtração com água quente em papel de filtro comercial foram analisados por ESI(±) FT-ICR MS. No modo positivo de ionização, 22 íons foram identificados no café Arábica e 21 no café Robusta, onde as substâncias majoritárias em ambos os cafés foram os ácidos cafeoilquínico e feruloilquínico, sacarose, cafeína e trigonelina. No modo negativo de ionização, 23 íons foram identificados no café Arábica e 21 no café Robusta, sendo as substâncias majoritárias, em ambos os cafés, os ácidos cafeoilquínico, feruloilquínico, dicafeoilquínico e quínico. Três diterpenos glicosilados conhecidos como atractilosídeos I (m/z 767.32615 $[M+K]^+$; erro -1,39 ppm), II (m/z 521.21498 $[M+K]^+$; erro -0,46 ppm) e III (m/z 605.27273 $[M+K]^+$; erro -0,78 ppm) foram identificados em ambos os modos de ionização somente no café Arábica. Esses análogos foram descritos pela primeira vez em café na década de 1970 e desde então poucos são os relatos de sua presença². Na Figura 1 encontra-se o espectro de ESI(+) FT-ICR MS do café Arábica e a estrutura química dos atractilosídeos análogos.

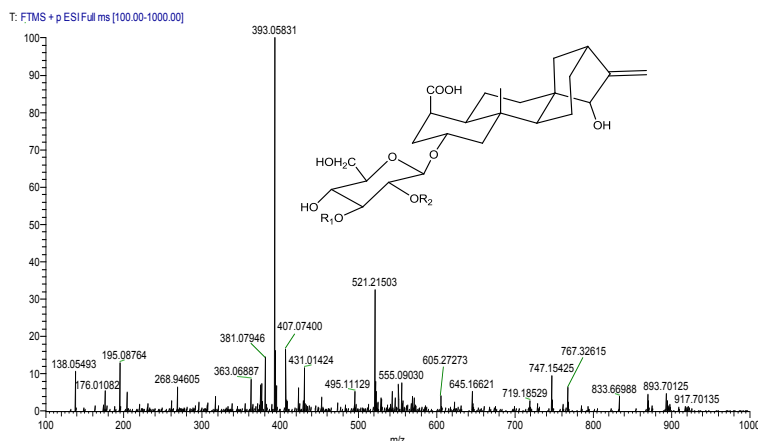


Figura 1. Espectro de massas (ESI(+)) FT-ICR MS do café Arábica, e atractilosídeo análogo I: R₁=glicose, R₂=isovalerato; II: R₁=R₂=H; III: R₁=H, R₂= isovalerato.

Outros conjugados identificados foram cafeoiltriptofano e cafeoil tirosina, em ambos os modos de ionização somente no café Robusta e são considerados marcadores nesta variedade de café³. Muitos íons isotópicos foram identificados nos cafés, por exemplo, o íon m/z 394.06172 corresponde ao aduto $[M+K]^+$ do ácido cafeoilquínico, de fórmula $^{12}C_{15}^{13}C_1H_{18}O_9$ e com erro calculado de apenas 0.30 ppm.

Conclusões

Considerando ambos os modos de ionização, 22 substâncias majoritárias foram identificadas no café Arábica e 20 no café Robusta, com erros calculados <1ppm. Esse é o primeiro estudo de análise de cafés por ESI(±) FT-ICR MS.

Agradecimentos

CNPq, Embrapa-Café.

¹Marshall, A. G.; Hendrickson, C. L.; Jackson, G. S. *Mass Spectrom. Reviews*, **1998**, 17, 1–35.

²Ludwig H.; Obermann H.; Spittler G. *Chemische Berichte*, **1974**, 2409–2424.

³Clifford, M. N.; Knight, S. *Food Chemistry*, **2004**, 87, 457–463.