

Classificação das frações de destilados de caldo de cana de açúcar fermentado (cachaça). Uma aplicação da espectrometria de massas com ionização *electrospray* e análise de dados multivariados.

Marcus H. Canuto (PG)², Rodinei Augusti (PQ)¹, Fabiana de Moura (IC)¹, Helmut G. L. Siebald (PQ)¹.

¹Depto. de Química - Universidade Federal de Minas Gerais, e-mail: augusti@ufmg.br; ²Depto. de Ciências Básicas -- Faculdades Ciências Biológicas e da Saúde – Universidade Federal dos Vales do Jequitinhonha e Mucuri

Palavras Chave: ESI-MS, análise de componentes principais, frações de cachaças

Introdução

Métodos baseados em respostas de medidas instrumentais podem ser uma alternativa viável para se determinar o momento correto para o corte das frações (cabeça, coração e cauda) de destilados de caldo de cana de açúcar fermentado (cachaça). Estas três frações (constituídas em sua maioria por água e etanol e, em muito menor escala, por compostos secundários, voláteis e não voláteis) possuem composições químicas distintas, em virtude dos diferentes pontos de ebulição e solubilidades em água e etanol dos componentes. A espectrometria de massas com ionização *electrospray* (ESI-MS) possui características apropriadas para a classificação das frações, uma vez que muitas moléculas presentes nestas amostras podem ser detectadas na sua forma protonada $[M + H]^+$. Neste trabalho, realizou-se a diferenciação das frações (cabeça, cauda, dos destilados de caldo de cana de açúcar fermentado através da obtenção dos respectivos ESI-MS. Para a classificação das amostras, os dados obtidos serão tratados pela metodologia PCA (análise de componentes principais).¹

Resultados e Discussão

As análises foram feitas num espectrômetro de massas LCQ Fleet (ThermoScientific, San Jose, CA). Nenhum tratamento prévio foi realizado com as amostras. A voltagem do capilar foi de 40 V e a corrente do spray foi de 5 kV. Uma microseringa foi usada para a introdução direta das amostras num fluxo de $10 \mu\text{L min}^{-1}$. A faixa de varredura das razões massa/carga (m/z) foi de 50 até 1000. As amostras foram submetidas à análises no modo de ionização positivo [ESI(+)-MS]. Um conjunto de 128 amostras foi analisado, representando as frações coletadas dos destilados dos vinhos fermentados de caldo de cana de açúcar. Para cada amostra, um espectro de massas característico foi obtido. Três dornas distintas de aço inox, numa temperatura controlada de 18 °C, foram utilizadas na fermentação, a qual foi conduzida com uma mesma linhagem iniciadora de levedura (UFMG1007).

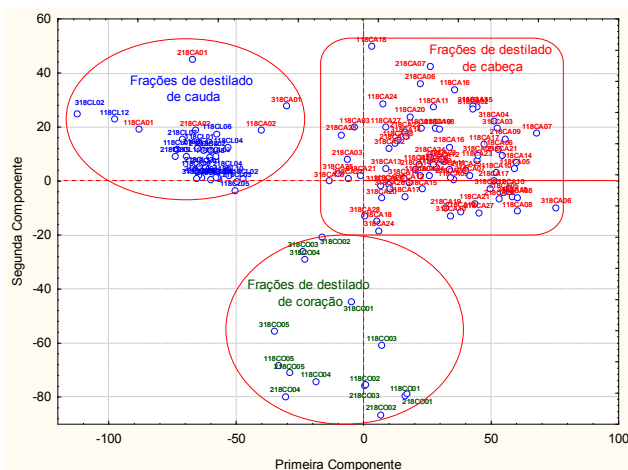


Figura 1. Gráfico de scores para a análise das frações obtidas durante a destilação de caldo de cana de açúcar fermentado em três dornas distintas.

A matriz de dados original foi construída pelas razões m/z dos íons, com suas respectivas intensidades relativas, oriundas dos espectros de massas das 128 amostras. Na análise de componentes principais (PCA), foi verificado que as 4 primeiras PCs descreveram 79% da variância total. O gráfico PC1 x PC2 (Figura 1) agrupou as frações em três grandes grupos: cabeça, cauda, coração. Algumas amostras da fração cabeça foram alocadas no grupo referente à fração cauda, provavelmente devido à contaminações no destilador. A análise do grupamento hierárquico de clusters (HCA) confirmou os resultados anteriores (dendrograma não mostrado).

Conclusões

A técnica ESI-MS, somada à quimiometria, demonstra ser um método rápido e confiável para a caracterização das frações de destilados de caldo de cana de açúcar fermentado, otimizando a produção e qualidade das cachaças produzidas em alambiques artesanais.

Agradecimentos

CNPq e FAPEMIG

¹de Souza, P. P.; Augusti, R.; et al. *Food Chemistry* 2009,115, 1064.