

## Determinação da autenticidade de cafés torrados via análise multivariada de dados de RMN de $^1\text{H}$ .

Leila A. Tavares<sup>1\*</sup>(PG), Elisângela F. Boffo<sup>1</sup>(PG), Antonio G. Ferreira<sup>1</sup>(PQ), Márcia M. C. Ferreira<sup>2</sup>(PQ).  
leilaley@yahoo.com

1 Laboratório de Ressonância Magnética Nuclear, Departamento de Química, UFSCar, São Carlos, SP.

2 Instituto de Química, UNICAMP, Campinas, SP.

Palavras Chave: Café, Análise multivariada, RMN.

### Introdução

A prática da adulteração ocorre em todo setor especulativo que envolve o interesse econômico. Ela é ainda pior quando se trata da saúde pública, onde modificações e/ou alterações da composição química podem causar danos à população.

Os principais adulterantes do café são os seus sucedâneos, que são: cevada, chicória, trigo, centeio e leguminosas<sup>1</sup>.

Com o intuito de encontrar uma metodologia capaz de determinar possíveis adulterações e assegurar a qualidade desse produto utilizamos as técnicas de RMN de  $^1\text{H}$  e quimiometria, muito utilizadas em conjunto para esse propósito em vários tipos de alimentos como: sucos de laranja, óleo de oliva, vinho, queijo e outros<sup>2-4</sup>. Essas técnicas serão utilizadas para o reconhecimento de padrões dos espectros de RMN para determinar a autenticidade dos cafés com a possível adição de cevada.

### Resultados e Discussão

As amostras estudadas foram divididas em dois conjuntos de dados, um contendo misturas em diferentes proporções de café e cevada e que foram utilizadas na construção dos modelos de previsão, necessárias aos métodos de classificação e calibração. O outro conjunto contendo as amostras testes, cujas composições de algumas delas eram conhecidas pelo analista, mas não pelos modelos de previsão, e também amostras de cafés torrados e moídos adquiridas no comércio.

A análise de componentes principais (PCA) foi aplicada ao primeiro conjunto de dados para uma análise exploratória. Os parâmetros foram otimizados e então utilizados nos outros métodos de análise (SIMCA, KNN, PLS e PCR).

No método de PCA as amostras foram discriminadas, por PC1, em 2 grupos como mostra a figura 1. Um grupo (em vermelho) contendo as amostras com maior proporção de cevada, e outro (em azul) com maior proporção de café, sendo o primeiro com maior variação e espalhamento entre as amostras.

Para a classificação das amostras foram aplicados os métodos SIMCA e KNN. O método KNN se

mostrou altamente eficiente na previsão das classes das amostras “desconhecidas”, acertando 100%, enquanto o SIMCA acertou somente cerca de 7%.

Para a determinação do teor de cevada adicionado às amostras de café foram feitas as análises de PCR e PLS. Ambos os métodos foram igualmente eficientes nas previsões, determinando as composições com um erro máximo de 11,4% no PLS, e 12,0% no PCR.

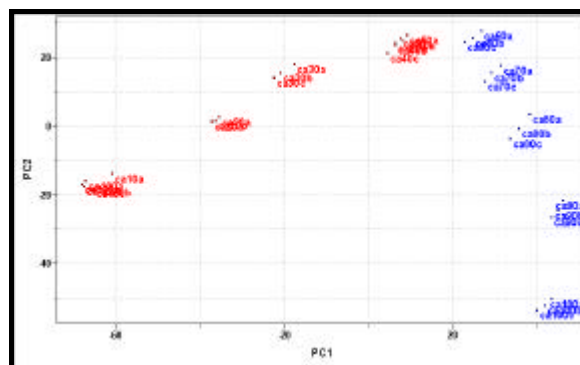


Figura 1. Gráfico de scores (PC1 x PC2, 48,3 e 17,8% de variância, respectivamente) dos cafés com diferentes proporções de cevada.

### Conclusões

A análise quimiométrica dos dados de RMN de  $^1\text{H}$  mostrou-se eficaz na determinação da autenticidade de cafés com a possível adição de cevada, podendo ser utilizada como uma poderosa ferramenta para a detecção desse tipo de adulteração.

### Agradecimentos

CAPES, CNPq e FAPESP.

<sup>1</sup> Menezes Jr, J. B. F. *Rev. Adolfo Lutz* **1952**, *12*, 111.

<sup>2</sup> Vogels, J. T. W. E.; Terwel, L.; Tas, A. C.; Van der Berg, F.; Dukel, F. e Van de Greef. *J. Agric. Food Chem.*, **1996**, *44*, 175.

<sup>3</sup> Vlahov, G. *Progress NMR Spect.* **1999**, *35*, 341.

<sup>4</sup> Curtis, S. A.; Curini, R.; Delfini, M.; Brosio, E.; D'Ascenzo, F. e Bocca, B. *Food Chem.* **2000**, *71*, 495.