# Determinação da origem biossintética de vinagres utilizando-se as técnicas SNIF-NMR, RMN de <sup>1</sup>H e Quimiometria.

Elisangela F. Boffo<sup>1\*</sup> (PG), Leila A. Tavares<sup>1</sup> (PG), Glaucia B. Alcantara<sup>1</sup> (PG), Antonio G. Ferreira<sup>1</sup> (PQ), Marcia M. C. Ferreira<sup>2</sup> (PQ). *efboffo@yahoo.com.br* 

1 Laboratório de Ressonância Magnética Nuclear, Departamento de Química, UFSCar, São Carlos, SP. 2 Instituto de Química, UNICAMP, Campinas, SP.

Palavras Chave: Vinagre, Quimiometria, SNIF-NMR.

## Introdução

Muitos alimentos podem ser adulterados em função do seu alto valor agregado<sup>1</sup> ou de variações climáticas e que acabam afetando a sua produtividade<sup>2</sup>.

O vinagre também pode passar por processos de adulterações como a adição um vinagre oriundo de uma planta C<sub>4</sub>, como a cana de açúcar, de obtenção fácil e de baixo custo em nosso país, para aumentar a produção de um obtido a partir de uma planta C<sub>3</sub>, como a uva, diminuindo o custo dessa produção.

Uma forma de verificar a adição de um produto não declarado é utilizar a técnica SNIF-NMR. Para o vinagre ela é baseada na razão do conteúdo isotópico <sup>2</sup>H/<sup>1</sup>H para a metila do ácido acético, que varia dependendo da planta que o origina (C<sub>3</sub>, C<sub>4</sub> ou CAM).

Outra forma de determinar a origem biossontética dos vinagres é através dos métodos quimiométricos, que se destinam a agrupar amostras que possuam características comuns a um mesmo grupo e distinguí-las das amostras com características diferentes<sup>3</sup>. Além disso, transformam dados complexos em dados mais simples e ressaltam as informações mais relevantes<sup>4</sup>.

#### Resultados e Discussão

Nesse estudo foi possível determinar a relação isotópica  $^2$ H/ $^1$ H dos vinagres originados das plantas  $C_3$  e  $C_4$ , mas não claramente daquele oriundo de uma planta CAM. Além disso, verificou-se que os vinagres obtidos de plantas  $C_3$  não foram adulterados com os de plantas  $C_4$ . Os valores da relação isotópica encontrados são mostrados na tabela 1.

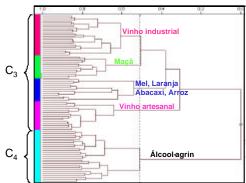
Para os agrins, vinagres obtidos de uma mistura de álcoois da cana e da uva, observou-se valores entre 115,2 – 129,3 ppm. Nessa análise verificou-se que existem diferentes proporções do ácido acético oriundo da cana e da uva nas composições dos vinagres, havendo, portanto, a comercialização sem distinção de produtos comerciais com diferentes qualidades.

**Tabela 1.** Relação isotópica <sup>2</sup>H/<sup>1</sup>H dos vinagres.

Vinagre	Relação <sup>2</sup> H/ <sup>1</sup> H (ppm)

C <sub>3</sub>	98,6 - 111,8
$C_4$	129,5 - 129,9
CAM	106,0
Ác. acético sintético	153,5

Na figura 1 vemos o dendograma onde foram discriminados cinco diferentes grupos para os vinagres analisados. Além de separar os vinagres  $C_3$  e  $C_4$  podemos ver que foi possível separar entre amostras feitas industrialmente e artesanalmente.



**Figura 1.** Amostras de vinagres discriminadas conforme o tipo, pelo HCA.

# Conclusões

Utilizando-se as técnicas de RMN de  $^1$ H e SNIF-NMR, aliadas à quimiometria, discriminamos entre os vinagres obtidos a partir dos ciclos biossintéticos  $C_3$  e  $C_4$ , e também as amostras industriais e artesanais.

### Agradecimentos

CAPES, CNPq e FAPESP.

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> Ogrinc, N.; Kosir, I. J.; Spangenberg, J. E. e Kidric, J. Anal. Bioanal. Chem. **2003**, 76, 424.

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup> Pupin, A. M.; Dennis, M. J.; Parker, I.; Kelly, S.; Bigwood, T. e Toledo, M. C. F. *J. Agric. Food Chem.* **1998**, *46*, 1369.

<sup>&</sup>lt;sup>3</sup> Ferreira, M. M. C. *Quimiometria*, notas de aulas, 2003.

<sup>&</sup>lt;sup>4</sup> Massart, D. L.; Vandeginste, B. G. M; Deming, S. M.; Michotte, Y. e Kaufman, L. *Chemometrics: a textbook*. Amsterdam, Elsevier Science B. V., **2001**.