



UNIVERSIDADE FEDERAL DA PARAÍBA
CENTRO DE CIÊNCIAS AGRÁRIAS
CURSO QUÍMICA BACHARELADO

MARIA DAS GRAÇAS BATISTA LACERDA

**COMPOSIÇÃO QUÍMICA DA CACHAÇA POR ESPECTROSCOPIA
NO INFRAVERMELHO MÉDIO (MIR)**

AREIA
2024

MARIA DAS GRAÇAS BATISTA LACERDA

**COMPOSIÇÃO QUÍMICA DA CACHAÇA POR ESPECTROSCOPIA
NO INFRAVERMELHO MÉDIO (MIR)**

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado ao Curso Bacharel em Química da Universidade Federal da Paraíba – campus II – como requisito parcial para à obtenção do título de Bacharel em Química.

Orientador: Prof. Dr. Normando Mendes Ribeiro Filho, Ph.D.

Coorientadora: Profa. Dra. Lucina Rocha Sousa

**AREIA
2024**

Catálogo na publicação
Seção de Catalogação e Classificação

L131c Lacerda, Maria Das Gracas Batista.

Composição química da cachaça por espectroscopia no infravermelho médio (MIR) / Maria Das Gracas Batista Lacerda. - Areia, 2024.

59 f. : il.

Orientação: Normando Mendes Ribeiro Filho.

Coorientação: Lucina Rocha Sousa.

TCC (Graduação) - UFPB/CCA.

1. Cachaça. 2. Parâmetros de qualidade. 3. MIR. 4. PCA. I. Ribeiro Filho, Normando Mendes. II. Sousa, Lucina Rocha. III. Título.

UFPB/CCA-AREIA

CDU 54 (02)

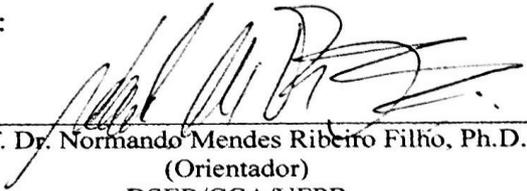
MARIA DAS GRAÇAS BATISTA LACERDA

COMPOSIÇÃO QUÍMICA DA CACHAÇA POR ESPECTROSCOPIA
NO INFRAVERMELHO MÉDIO (MIR)

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado ao Curso de bacharelado em Química da Universidade Federal da Paraíba – campus II – como requisito para a obtenção do título de Bacharel em Química.

Aprovado em: 09/ 05/ 2024.

Banca Examinadora:


Prof. Dr. Normando Mendes Ribeiro Filho, Ph.D.
(Orientador)
DSER/CCA/UEPB


Prof. Dr. Lucina Rocha Sousa
(Co-orientadora)
DQF/CCA/UEPB


Prof. Dr. José Luiz Rufino
(Avaliador 1)
DQF/CCA/UEPB


M.Eng. Thiago Henrique de Albuquerque Baracho
(Avaliador 1)
Responsável técnico do Engenho Triunfo

AGRADECIMENTOS

Este trabalho é dedicado a Deus, e agradeço pelo apoio nos momentos de angústia, por abrir espaços frente às dificuldades e por ser meu guia, desde o princípio, na tarefa de lutar pela minha felicidade. Gratidão a Deus pela conclusão deste trabalho.

Dedico todas as minhas conquistas acadêmicas e pessoais à minha avó Maria Augusta da Silva, carinhosamente conhecida como Dona Tó, por ter me incentivado tanto ainda em vida, por tanto amor e incessantes orações que sempre me impulsionaram.

Dedico esse trabalho a toda minha família, sobretudo meus pais, por sempre acreditarem em mim, mesmo quando eu já duvidava de mim mesma durante essa caminhada. São meus maiores exemplos de pessoas. É com muito amor que lhes dedico este trabalho.

Meu amor, Wanderson Mateus, por estar sempre presente, oferecendo apoio incondicional e incentivando-me a alcançar meus objetivos.

Agradeço imensamente ao meu orientador, Normando Filho, por sua orientação, paciência e conhecimento compartilhado ao longo deste caminho.

Aos meus amigos do LTPA - Luana, Júlia, Maysa e Clara. Em especial ao meu parceiro de laboratório, Levi Felizardo, por todo o companheirismo, troca de conhecimento e momentos compartilhados.

Agradeço à minhas amigas de graduação, Leidy Daiany e Fernanda dos Anjos. Minha trajetória acadêmica sempre contou com a força das minhas melhores amigas, e é por isso que dedico um carinhoso agradecimento a elas.

A todos que me apoiaram e incentivaram, meus sinceros agradecimentos. Que Deus possa retribuir em saúde e realizações a generosidade de cada um de vocês.

RESUMO

A cachaça é uma bebida alcoólica genuinamente brasileira, com o teor alcoólico de 38 a 48 °GL. Entre os atuais desafios, faz-se necessário que a indústria alimentícia, que busca ferramentas precisas para controle de qualidade e determinar suas características. Este trabalho objetivou determinar as características de qualidade das cachaças usando o espectro de infravermelho médio (MIR) com a utilização da calibração multivariada. Foram utilizadas 13 amostras de cachaça e estas foram submetidas a análises de cor, pH, acidez volátil (AV), acidez total (AT), acidez fixa (AF), densidade (D), teor alcoólico (TA), extrato seco (ES), fenólicos totais (FT), ésteres totais (ET) e cobre (Cu). Após as análises-físico químicas, as amostras foram submetidas as medidas espectrofotométricas de refletância difusa usando o MIR (espectrofotômetro Agilent Cary 630 FTIR) com intervalos de 650 a 4000 cm^{-1} , com uma resolução de 4 cm^{-1} . Todas as informações foram adquiridas por meio do software (Resolutions Pro FTIR). Resultados revelam que todas as amostras avaliadas contem TA entre 38-48°GL (% v:v) e Cu <5mg/L, como recomendado pela legislação vigente. A amostra C12 (805 mg/100mL) contém a maior concentração de ES ($p < 0,05$). Em contraste, a amostra C4 (12 mg/100mL) contém a menor concentração de ES ($p < 0,05$). As cachaças cristais apresentam concentrações de ES < 15 mg/100mL, exceto as cachaças C5 (304 mg/100mL) e C11 (314 mg/100mL). Adicionalmente, as amostras de cachaças cristal apresentam concentração de FT menor < 14 mg/100mL, exceto as cachaças C5 e C11 que apresentaram FT > 110 mg/100mL. A cachaça C5 (267 mg/100mL) contém a maior concentração de ET ($p < 0,05$). Em contraste, a amostra C6 (112 mg/100mL) contém a menor concentração de ET ($p < 0,05$). As cachaças cristais apresentaram concentração de ET < 150 mg/100mL, exceto as cachaças C5 e C11 que apresentaram concentrações de ET > 150 mg/100mL. Todas as demais amostras apresentaram diferenças significativas entre suas concentrações de ET de 116 a 212 mg/100mL ET ($p < 0,05$). As amostras C2, C3, C4, C5, C8, C10 e C11 revelaram concentrações de AV > 150 mg/mL. Apenas as cachaças C6 e C7 apresentaram concentrações de AV < 60 mg/mL. Nos espectros gerados pelo MIR foram identificados álcoois (O-H, 3771-3076 cm^{-1}), alcanos (C-H, 3019-2961 cm^{-1}), Grupo carbonila (ésteres) (C=O, 1749-1576 cm^{-1}), ésteres (C-O, 1114-1056 cm^{-1}), ésteres (C-O, 1056-1000 cm^{-1}) e aromáticos (=C-H, 883-825 cm^{-1}). A PCA discriminou as amostras revelando suas similaridades de diferenças. O MIR gerou espectros que tem relação com a composição da cachaça destacando-se álcoois, ésteres e aromáticos. Foram identificadas as similaridades e diferenças entre cachaças classificadas como cristal, descansada e envelhecida. Este trabalho contribuiu para uma compreensão mais completa sobre a aplicação e uso da espectroscopia de infravermelho nas avaliações de parâmetros de qualidade da cachaça.

Palavras-chave: cachaça; parâmetros de qualidade; MIR; PCA.

ABSTRACT

Cachaça is a genuinely Brazilian alcoholic drink, with an alcohol content of 38 to 48 °GL. Among the current challenges, it is necessary for the food industry, which seeks precise tools for quality control and to determine its characteristics. This work aimed to determine the quality characteristics of cachaças using the mid-infrared spectrum (MIR) using multivariate calibration. 13 samples of cachaça were used and these were subjected to analyzes of color, pH, volatile acidity (AV), total acidity (AT), fixed acidity (AF), density (D), alcoholic content (TA), dry extract (ES), total phenolics (TF), total esters (ET) and copper (Cu). After physical-chemical analyses, the samples were subjected to diffuse reflectance spectrophotometric measurements using the MIR (Agilent Cary 630 FTIR spectrophotometer) at intervals of 650 to 4000 cm^{-1} , with a resolution of 4 cm^{-1} . All information was acquired using software (Resolutions Pro FTIR). Results reveal that all samples evaluated contain TA between 38-48°GL (% v:v) and Cu <5mg/L, as recommended by current legislation. Sample C12 (805 mg/100mL) contains the highest concentration of ES ($p < 0.05$). In contrast, sample C4 (12 mg/100mL) contains the lowest concentration of ES ($p < 0.05$). Crystal cachaças have ES concentrations < 15 mg/100mL, except cachaças C5 (304 mg/100mL) and C11 (314 mg/100mL). Additionally, samples of crystal cachaças present a lower TF concentration < 14 mg/100mL, except for cachaças C5 and C11 which presented TF > 110 mg/100mL. Cachaça C5 (267 mg/100mL) contains the highest concentration of ET ($p < 0.05$). In contrast, sample C6 (112 mg/100mL) contains the lowest concentration of ET ($p < 0.05$). Crystal cachaças had ET concentrations < 150 mg/100mL, except for cachaças C5 and C11, which had ET concentrations > 150 mg/100mL. All other samples showed significant differences between their ET concentrations from 116 to 212 mg/100mL ET ($p < 0.05$). Samples C2, C3, C4, C5, C8, C10 and C11 revealed AV concentrations > 150 mg/mL. Only C6 and C7 cachaças presented AV concentrations < 60 mg/mL. In the spectra generated by MIR, alcohols (O-H, 3771-3076 cm^{-1}), alkanes (C-H, 3019-2961 cm^{-1}), carbonyl group (esters) (C=O, 1749-1576 cm^{-1}), esters (C-O, 1114-1056 cm^{-1}), esters (C-O, 1056-1000 cm^{-1}) and aromatics (=C-H, 883-825 cm^{-1}). PCA discriminated the samples revealing their similarities and differences. The MIR generated spectra that are related to the composition of the cachaça, highlighting alcohols, esters and aromatics. The similarities and differences between cachaças classified as crystal, rested and aged were identified. This work contributed to a more complete understanding of the application and use of infrared spectroscopy in the assessment of cachaça quality parameters.

Keywords: cachaça; quality parameters; MIR; PCA.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 –	Localização de Areia, na Paraíba, limite entre municípios	14
Figura 2 -	Espectro eletromagnético	20
Figura 3 -	Tipos de vibração molecular observados em moléculas diatômicas	21
Figura 4 -	Curva padrão de ácido gálico.	27
Figura 5 -	Curva analítica de para determinação de cobre, expressa em mg/L.	30
Figura 6 -	Tipo de vibração, frequência e intensidade dos grupos funcionais já identificados usando MIR simplificada	31
Figura 7 -	Mapa de calor das análises físico-químicas	34
Figura 8 -	Espectrogramas MIR obtidos das cachaças para identificação dos grupos funcionais.	41
Figura 9 -	(A) ACP loading plot demonstrando as variações dos parâmetros físico-químicas da cachaça e (B) APC score plot demonstrando as variações dos parâmetros físico-químicas da cachaça e picos das bandas identificados através do espectrograma do MIR.	43
Figura S1 -	Somatória da PCA	58
Figura S2	Correlação dos parâmetros na PC1, PC2* e PC3	58

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 -	Classes de compostos regulamente encontrado na cachaça	14
Tabela 2 -	Composição química e requisitos de qualidade da cachaça estabelecidas pela legislação brasileira	15
Tabela 3 -	Valores obtidos da absorbância e o resultado da concentração.	27
Tabela 4 -	Classificação, indicação de maturação, cor e tonalidade indicada análise de cor expressa em CC (Cor da cachaça).	28
Tabela 5 -	Valores obtidos da absorbância e o resultado da concentração.	30
Tabela 6 -	Classificação, indicação de maturação, cor e tonalidade das cachaças indicada análise de cor expressa em CC	33
Tabela 7 -	Características físico-químicas da cachaça	35
Tabela 8 -	Identificação dos grupos funcionais.	41
Tabela 9 -	Matriz de correlação (Pearson (n)) entre 12 parâmetros obtidos de 13 cachaças.	44

SUMÁRIO

1 INTRODUÇÃO	9
2 REVISÃO DE LITERATURA	11
2.1 ORIGEM DA CACHAÇA NO BRASIL.....	11
2.2 PRODUÇÃO DE CACHAÇA EM AREIA-PB	11
2.3 COMPOSIÇÃO QUÍMICA E REQUISITOS DE QUALIDADE	12
2.3.1. Graduação alcoólica e Densidade	13
2.3.2. Acidez	14
2.3.3. pH	14
2.3.4. Extrato Seco	15
2.3.5. Fenólicos Totais	15
2.3.6. Cor	16
2.3.7. Ésteres	16
2.3.8. Aldeídos	17
2.3.9. Cobre	17
2.4. ESPECTROSCOPIA NO INFRAVERMELHO	17
2.4.1. Espectroscopia no Infravermelho Médio (MIR)	19
2.5 QUIMIOMETRIA.....	20
2.5.1. Análise de Componente Principal (CPA)	20
3. METODOLOGIA	21
3.1. AMOSTRAGEM	21
3.2. ANÁLISES FÍSICO-QUÍMICAS.....	21
3.2.1. Acidez Total (AT)	21
3.2.2. Acidez fixa (AF)	22
3.2.3 Acidez Volátil (AV)	22
3.2.4 Extrato Seco (ES)	23
3.2.5 Teor Alcoólico (TA)	23
3.2.6 Densidade	23
3.2.7. pH	24
3.2.8. Ésteres Totais (ET)	24
3.2.9. Fenólicos Totais (FT)	25
3.2.10 Cor	26
3.2.11. Aldeídos (AL)	27
3.2.12. Cobre	28
3.3 ANÁLISE ESPECTRAL	29
3.4. Análise estatística	30
4 RESULTADOS E DISCUSSÃO	31
4.1ANÁLISE DE COR DAS CACHAÇAS	31
4.2. PARÂMETROS FÍSICO-QUÍMICOS	33
4.3 ANÁLISE ESPECTRAL	39
4.4 Análise de Componente Principal (ACP)	41
6 CONCLUSÃO	47

1 INTRODUÇÃO

O mercado de bebidas alcoólicas está em constante expansão. Muitos países tem suas bebidas alcoólicas típicas; porém, nem todos tem seus produtos alcoólicos com visibilidade mundial. Bebidas como cerveja, vinho, whiskey, gim, saquê, rum, tequila e vodka são muito conhecidas considerando os seus países de origem e suas características sensoriais. No Brasil, a cachaça é uma bebida alcoólica típica e genuinamente brasileira, produzida a partir o caldo de cana-de-açúcar que faz parte do patrimônio genético e cultural brasileiro.

A cachaça é o destilado mais antigo das américas (Gerk et al., 2022). Sendo composta majoritariamente por água e etanol, a cachaça também possui uma série de compostos secundários pertencentes a diferentes grupos orgânicos, incluindo ácidos, álcoois, aldeídos e ésteres (BRASIL, 2005). Portanto, caracteriza-se por conter graduação alcoólica de 38% a 48% a 20°C (BRASIL, 2022). A composição química e os requisitos de qualidade para cachaça no Brasil são fixados pelo Ministério da Agricultura Pecuária e Abastecimento (MAPA), através da Instrução Normativa 539, de 26/12/2022, estabelece limites mínimos e máximos para ácidos, ésteres, aldeídos, furfural, álcoois superiores, acidez volátil e coeficientes congêneres. Esses padrões têm como objetivo uniformizar a cachaça e garantir a segurança dos consumidores. Segundo Miranda et al. (2007), essa padronização é crucial para que a cachaça atenda aos padrões internacionais de excelência, sendo bem recebida no mercado global.

Na legislação atual, a determinação dos parâmetros de qualidade das bebidas é conduzida através de métodos analíticos convencionais e instrumentais, como volumetria, gravimetria e cromatografia (Bernardes, 2015). No entanto, essas abordagens são frequentemente trabalhosas, demoradas e prejudiciais, demandando o uso de reagentes agressivos, tanto para os analistas quanto para o meio ambiente. Além disso, algumas dessas análises são onerosas, desestimulando os produtores a regularizarem suas produções, em meio aos impostos aplicados (Cecchi, 2003). Uma alternativa para solucionar tais desafios é o desenvolvimento de métodos instrumentais de análise mais acessíveis, rápidos e econômicos, potencialmente incentivando a legalização de muitos produtores ao simplificar o controle de qualidade da cachaça (Bernardes, 2015). Essa abordagem pode contribuir significativamente para a indústria, promovendo a qualidade e a conformidade regulatória do produto.

Uma das principais características dos métodos instrumentais de análise, como NIR, MIR, UV/Vis, GCMS e HPLC, é a geração de uma grande quantidade de dados; portanto, a

manipulação destes dados necessita de técnicas e ferramentas que permitissem a extração das informações obtidas de forma prática, eficiente e base estatística (Correia et al., 2007). Entre várias técnicas a de espectroscopia de infravermelho médio (MIR) permite a determinação e caracterização das propriedades químicas das substâncias ao analisar os seus espectros de absorção na faixa do infravermelho. Isso é realizado identificando os movimentos vibracionais e rotacionais das ligações moleculares (Pavia et al., 2015). Esta técnica se destaca pela sua rapidez, baixo custo e pela exigência mínima de preparação das amostras. Além disso, ela oferece alta sensibilidade e seletividade, tornando a instrumentação facilmente acessível em laboratórios. Vale destacar que se trata de um método não intrusivo, ambientalmente amigável, que não resulta na geração de resíduos tóxicos (Skoog et al., 2006). Adicionalmente, a quimiometria, é uma área da Química que utiliza ferramentas matemáticas e estatísticas para analisar dados químicos de natureza multivariada e seus principais métodos incluem a método de superfície de resposta (MSR), análise de componente principal (ACP), calibração multivariada e o reconhecimento de padrões (Ferreira, 1999; Ribeiro, 2007). Essas abordagens são fundamentais para uma análise eficiente e interpretação dos resultados, contribuindo significativamente para o avanço da ciência e tecnologia analítica.

Apesar do potencial tecnológico, os produtores de cachaça enfrentam desafios significativos, como a falta de laboratórios qualificados e limitações na execução de análises físico-químicas para controle dos processos, o que afeta o padrão e qualidade do produto. A regulamentação do Ministério da Agricultura, Pecuária e Abastecimento (MAPA) estabelece padrões para garantir a segurança e uniformidade da cachaça, mas métodos de análise convencionais são laboriosos e onerosos. Nesse contexto, este estudo propõe a aplicação da espectroscopia de infravermelho médio (MIR) com calibração multivariada para caracterizar a qualidade da cachaça de forma rápida e eficiente. Espera-se que os resultados contribuam para melhorar o controle de processos e análises de qualidade da cachaça, para que o setor possa, cada vez mais, melhorar seu controle de processo e produto.

2 REVISÃO DE LITERATURA

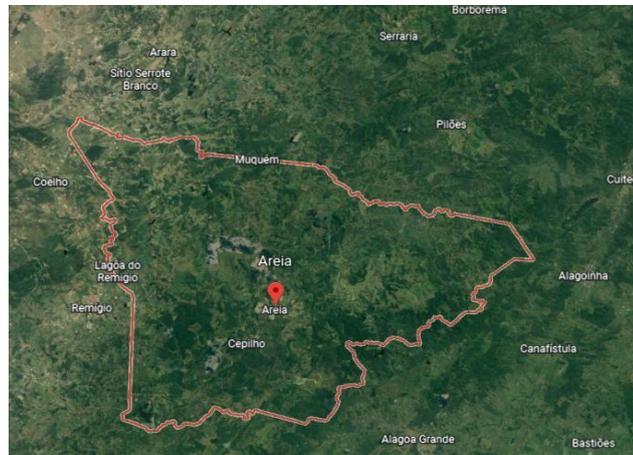
2.1 ORIGEM DA CACHAÇA NO BRASIL

A história da cachaça no Brasil está profundamente entrelaçada com a cultura nacional, sendo sua origem associada à produção de cana-de-açúcar e ao contexto da escravidão após a chegada dos europeus em 1500. Uma das versões mais antigas sobre sua origem remonta ao estado de Pernambuco, onde um escravo acidentalmente deixou fermentar o líquido conhecido como "cagaça", resíduo da fervura do caldo de cana. Esse líquido evaporou e condensou, formando gotas de cachaça nos tetos do engenho, dando origem ao termo "pinga" (Feijó; Maciel, 2002). Essa rica história ilustra a profunda conexão entre a cachaça e a cultura brasileira, destacando sua importância como um patrimônio cultural e histórico do país.

2.2 PRODUÇÃO DE CACHAÇA EM AREIA-PB

A produção de cachaça em Areia, na Paraíba, é uma tradição enraizada na cultura local, desempenhando um papel essencial na economia regional. O processo envolve a colheita da cana-de-açúcar, sua moagem para obtenção do caldo, a fermentação e a destilação, resultando na cachaça característica da região (Farias et al., 2015). Localizada na microrregião do brejo paraibano, a cidade de Areia possui um *terroir* único, incluindo fatores como tipo de solo, clima e variedade de cana-de-açúcar cultivada, que influenciam significativamente nas características sensoriais da cachaça local (Miranda et al., 2014). Em 19 de abril de 2021, Areia recebeu o título de "Capital Paraibana da Cachaça" pela Lei nº 11.873, trazendo reconhecimento nacional e internacional à cidade e atraindo turistas interessados em visitar os engenhos locais e degustar as diversas cachaças produzidas na região, muitos dos quais adquirem garrafas como lembranças para amigos e familiares.

Figura 1 - Localização de Areia, na Paraíba, limite entre municípios.



Fonte: Google Earth (2024).

2.3 COMPOSIÇÃO QUÍMICA E REQUISITOS DE QUALIDADE

A cachaça, uma das bebidas alcoólicas mais emblemáticas do Brasil, é produzida a partir da cana-de-açúcar e passa por um complexo processo de fermentação e destilação que resulta em uma variedade de compostos químicos. A análise da composição química da cachaça é fundamental para garantir a qualidade e autenticidade da bebida (Franco et al., 2019). Sendo ela composta principalmente por água, etanol e uma gama de compostos minoritários que contribuem para sua complexidade sensorial. Os compostos secundários incluem ésteres, aldeídos, ácidos, furfural, entre outros, que conferem aroma, sabor e características únicas à cachaça (Borges et al., 2016). As estruturas químicas e os principais compostos e os referentes grupos como exemplos são apresentados na tabela 1.

Tabela 1: Classes de compostos regulamente encontrado na cachaça.

Classe de compostos	Grupo
Álcool, fenol	OH
Aldeído	COH
Éster	COOR
Ácido carboxílico	COOH

Fonte: Adaptado de Atkins e Jones, 2012.

A legislação, definida pelo Ministérios de Agricultura, Pecuária e Abastecimento (MAPA) estabelece os Padrões de Identidade e Qualidade da aguardente de cana comercializada em todo o território nacional e da Cachaça comercializada em todo território nacional e para exportação (BRASIL, 2022). Essas regulamentações estabelecem critérios para parâmetros como teor alcoólico, acidez volátil, ésteres, metanol, entre outros, que devem ser atendidos para que a cachaça seja considerada de qualidade e segura para o consumo (BRASIL, 2022). A Cachaça deverá obedecer aos limites dos parâmetros físico-químicos a seguir:

Tabela 2: Composição química e requisitos de qualidade da cachaça estabelecidas pela legislação brasileira

PARÂMETRO	Min	Max
Graduação alcoólica, expressa em %, em v/v, a 20 °C	38	48
Acidez volátil, expressa em ácido acético, em mg/100 mL de álcool anidro	-	150
Ésteres totais, expresso em acetato de etila, em mg/100 mL de álcool anidro	-	200
Aldeídos totais, em acetaldeído, em mg/100 mL de álcool anidro	-	30
Soma de Furfural e Hidroximetilfurfural, em mg/100 mL de álcool anidro	-	5
Soma dos álcoois isobutílico (2-metil propanol), isoamílicos (2-metil-1-butanol +3 metil-1-butanol) e n-propílico (1-propanol), em mg/100 mL de álcool anidro	-	360
Coefficiente de congêneres, em mg/100 mL de álcool anidro	200	650
Açúcares totais (para cachaça), em g/L (expressos em glicose)	-	≤ 6
Açúcares totais (para cachaça adoçada), em g/L (expressos em glicose)	>6,0	<30
Compostos fenólicos totais (para bebida envelhecida)	Presente	
Cobre	5 mg/L	

Fonte: MAPA, 2022.

2.3.1. Graduação alcoólica e Densidade

A graduação alcoólica, ou teor alcoólico de uma bebida é determinada pela porcentagem volumétrica de álcool puro nela presente e deve ser expressa em graus Gay-Lussac (quantidade em mililitros de álcool absoluto contida em 100 mL de mistura hidroalcoólica) ou em porcentagem. Para ser considerada cachaça, que é uma denominação brasileira, a graduação alcoólica deve estar entre 38 e 48% V/V (BRASIL, 2022). O progresso do envelhecimento e o desenvolvimento do aroma da cachaça sofrem impactos adversos quando há um aumento no teor alcoólico (Piggott et al., 1989). Para garantir a conformidade com os padrões legais, é essencial verificar o teor alcoólico do destilado. Isso não apenas possibilita a correta rotulagem dos produtos, mas também garante sua autenticidade e adequação ao consumo autorizado.

Segundo Matoso (2013), uma maneira de determinar o teor alcoólico é por meio da densidade relativa em relação à água. Bebidas fermentadas ou mistas, como licores, exigem destilação, e a densidade é medida no destilado (Zenebon et al., 2008). A medição da densidade dos líquidos pode ser realizada através da determinação da massa do líquido que ocupa um volume conhecido (método do picnômetro) e por métodos de flutuação (Braga, 2007). Esses métodos são cruciais na indústria de bebidas para garantir a precisão na determinação do teor alcoólico e a conformidade com os padrões regulatórios, pois a densidade está diretamente relacionada à concentração de álcool na solução.

2.3.2. Acidez

A avaliação da acidez é essencial na produção de cachaça, pois os ácidos orgânicos presentes influenciam diretamente suas características sensoriais, podendo comprometer sua qualidade ao conferir um sabor agressivo (Borges et al., 2016). O ácido acético é o componente mais relevante na fração ácida das cachaças, sendo quantificado em termos de acidez volátil (Miranda, 2005). Durante a fermentação, o controle da acidez é fundamental, já que uma alta acidez pode ser resultado de contaminações no caldo de cana ou da própria fermentação, impactando na qualidade final do produto (Cardoso, 2001). Por outro lado, um nível adequado de acidez é essencial para o sabor e aroma da cachaça, destacando a importância de sua produção e preparo com rigor (Cherubin, 1998). Entretanto, o excesso de acidez pode resultar em um sabor indesejado e prejudicial à qualidade da bebida (Lima, 1983; Nobrega, 2003). A importância do controle da acidez na produção de cachaça é evidente, pois influencia diretamente suas características sensoriais, sendo essencial garantir um equilíbrio para uma bebida de qualidade superior.

2.3.3. pH

O pH é um indicador crucial que afeta diversas características da cachaça, desde suas propriedades sensoriais até sua estabilidade e segurança alimentar. O pH alcalino ou ácido pode influenciar absorção nutricional da levedura (incluindo consumo de carboidratos, aminoácidos e elementos inorgânicos) e conseqüentemente, o crescimento de leveduras e a formação de compostos desejáveis (Ribeiro-Filho et al., 2021). Durante a fermentação alcoólica, variações como um pH elevado podem desencadear acidentes que prejudicam o processo, resultando na proliferação de outros microrganismos ou evaporação do álcool

devido à temperatura alta, o que inibe a atividade das leveduras (Basso et al., 1995; Novaes et al., 1974). Esses eventos, conhecidos como acidentes de fermentação alcoólica, podem causar transtornos significativos na indústria de produção de bebidas.

2.3.4. Extrato Seco

A lignina é um dos principais componentes da madeira, é a que mais contribui para a geração de congêneres na cachaça, principalmente compostos fenólicos e taninos, que podem compor até 40% do teor do extrato seco do destilado (Puech et al., 1987). Com o tempo de estocagem, ocorre uma maior extração desses componentes da madeira, resultando em um aumento do teor de extrato seco na cachaça envelhecida (Dias et al., 1998). Conseqüentemente, a cachaça recém-destilada geralmente apresenta teores de extrato mais baixos do que aquela envelhecida, devido à soma dos extratos originais aos valores adquiridos ao longo do envelhecimento (Pinheiro, 2010).

2.3.5. Fenólicos Totais

Durante o processo de maturação da cachaça, ocorrem mudanças significativas, incluindo o aumento da complexidade do aroma devido à extração de certos compostos da madeira. Além disso, os compostos fenólicos são solubilizados, melhorando o sabor da bebida, enquanto oxidações sutis desses compostos ocorrem, reduzindo a adstringência e provocando alterações na cor (Pinheiro, 2010). Os compostos fenólicos, presentes em diversas fontes naturais, são essenciais para propriedades organolépticas e cores, sendo responsáveis por características como cor, adstringência, aroma e estabilidade oxidativa em alimentos (Naczk, Shahidi, 2004; Peleg et al., 1998). Frutas cítricas, como limão e laranja, juntamente com outras frutas como cereja e uva, são as principais fontes desses compostos, presentes em maior quantidade na polpa do que no suco (Miranda, 2005). Em destilados, os compostos fenólicos são identificados e quantificados para caracterizar as bebidas, diferenciando tipos, marcas e tempo de envelhecimento, destacando o valor agregado ao processo de envelhecimento das bebidas (Santana, 2014).

2.3.6. Cor

Durante o período de envelhecimento, uma das principais vias que ocorre na transformação da concentração e composição dos compostos químicos da cachaça é a via aditiva. Isso envolve a decomposição de macromoléculas da madeira e a extração de constituintes minoritários que são adicionados à bebida, sendo responsáveis principalmente pela coloração (CASTRO, 2020). De acordo com Miranda (2005), durante o envelhecimento em madeira, a coloração da cachaça tende a se tornar amarelada devido à extração de compostos, principalmente taninos, e suas reações de oxidação. Singleton (1995) atribui aos taninos a responsabilidade pelo progressivo escurecimento ou intensificação da cor amarelo-alaranjado.

A busca por correlacionar a idade do destilado com sua cor é um desafio na indústria da cachaça. A autorização do uso de corante caramelo pela Instrução Normativa nº 13 do Ministério da Agricultura (BRASIL, 2005) dificulta essa correlação, ressaltando a importância das análises dos compostos fenólicos totais e derivados da lignina para determinar o envelhecimento da cachaça (CASTRO, 2020). Paralelamente, a cachaça se destaca pela diversidade proporcionada pela mistura de variedades envelhecidas em diferentes tipos de madeira. Essa variedade, que inclui amburana, amendoim, bálsamo, jequitibá-branco, jequitibá-rosa, castanheira, freijó e ipê, confere ao destilado brasileiro uma ampla gama de cores, aromas e sabores (DA CACHAÇA, 2019; IBRAC, 2019).

2.3.7. Ésteres

Durante a fermentação alcoólica, os ésteres são produzidos pelas leveduras e também durante o envelhecimento pela esterificação de ácidos graxos com etanol (Faria et al., 2003). O desenvolvimento desses compostos está associado a reações nas células de levedura, incluindo a ativação de ácidos monocarboxílicos e a descarboxilação oxidativa dos ácidos 2-oxo (Nascimento, 1997). Embora a formação de ésteres após a fermentação ocorra principalmente por reações químicas diretas entre álcoois e ácidos, durante o envelhecimento da cachaça, esse processo é mais gradual e em menor escala (Nykänen et al., 1991). O acetato de etila é o éster predominante na cachaça, contribuindo com um aroma frutado em concentrações baixas, porém, em níveis elevados, pode conferir um sabor indesejável (Pinheiro, 2010). Apesar disso, a presença de ésteres dentro de limites específicos é desejável,

pois contribuem para o aroma da bebida, juntamente com os álcoois superiores, que também influenciam significativamente o sabor das bebidas destiladas (Nobrega et al., 2003).

2.3.8. Aldeídos

Segundo Pinheiro (2010), os aldeídos são componentes do aroma da cachaça, embora sejam geralmente considerados uma contribuição negativa devido ao seu odor desagradável na maioria dos casos. No entanto, eles têm a capacidade de reagir facilmente com álcoois, formando acetais, o que reduz o odor pungente (Souza, 2006). O acetaldeído (etanal, aldeído acético) é um exemplo de aldeído presente naturalmente em várias fontes, como folhas de tabaco e aromas de frutas como pera, maçã, morango e abacaxi, além de ser formado durante a fermentação e envelhecimento da cachaça (Burdock, 2003).

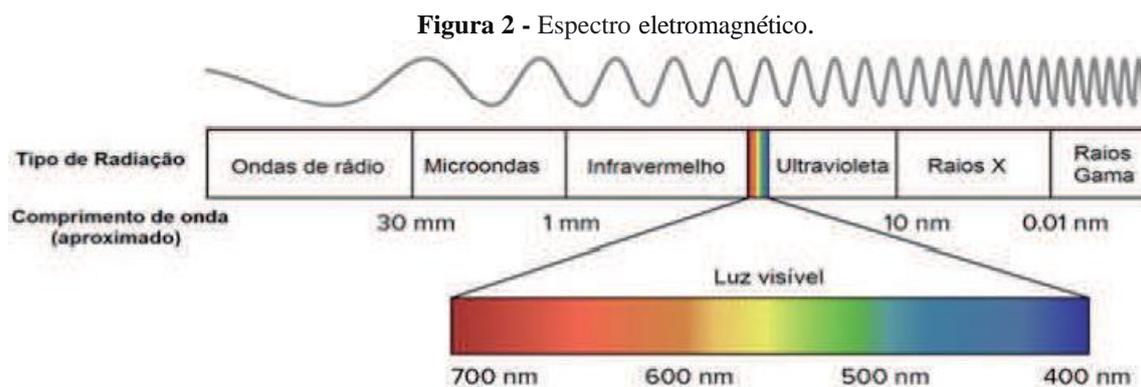
2.3.9. Cobre

A presença de cobre na produção de cachaça, é proveniente dos materiais dos alambiques, é considerada indesejável devido aos efeitos na qualidade da bebida (Sargetelli et al., 1996). Altos teores desse metal geralmente indicam falta de limpeza do equipamento, o que pode ser evitado enchendo o alambique com água entre os processos para prevenir a oxidação do cobre (Cardoso, 2001). Durante a destilação, ocorre a formação de azinhavre, que pode contaminar a cachaça, mas a primeira destilação com água é recomendada para eliminar resíduos de cobre (Cardoso, 2001). Embora o cobre contribua para a eliminação de odores desagradáveis, seu excesso pode ser prejudicial à saúde e afetar negativamente o paladar da bebida (Sargetelli et al., 1996).

2.4. ESPECTROSCOPIA NO INFRAVERMELHO

A espectroscopia, abrangendo diversas técnicas específicas para diferentes regiões espectrais, analisa a interação entre a radiação e a amostra para fornecer informações sobre sua composição e características (Petrozzi, 2012). Essas técnicas, embora variadas, compartilham a essência de medir a quantidade de radiação eletromagnética absorvida ou emitida, permitindo uma análise qualitativa e quantitativa das espécies de interesse (Petrozzi, 2012). Com base nessa viabilidade, a espectroscopia destaca-se como uma abordagem rápida,

versátil e acessível para a análise de materiais (Skoog, 2007). Assim, a espectroscopia desempenha um papel fundamental na investigação científica e na análise de materiais, promovendo avanços significativos no entendimento da estrutura e propriedades das substâncias.



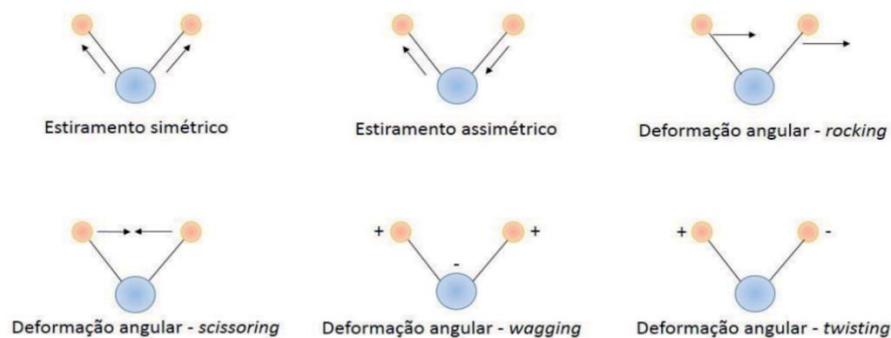
Fonte: Adaptado de NASA - Imagine the Universe.

A espectroscopia é notável por sua capacidade de análise rápida, amplamente aplicável e economicamente viável, iniciando após a validação da obtenção de informações sobre substâncias por meio de sua interação com a radiação eletromagnética (SKOOG, 2007). Essa abordagem instrumental, que abrange diversas técnicas específicas para diferentes regiões espectrais, é essencialmente baseada na quantidade de radiação absorvida ou emitida pela amostra, fornecendo dados sobre sua composição e características (Petrozzi, 2012). Diversas regiões espectrais, como o infravermelho, oferecem informações valiosas sobre as estruturas de moléculas orgânicas (Ji et al., 2018; Xie et al., 2018). Compostos com ligações covalentes absorvem radiação nessa região, destacando a ampla aplicabilidade dessa técnica (Ji et al., 2018; Xie et al., 2018; Nazeer et al., 2017; Sugawara, 2017; Huck, 2015; Xin et al., 2014).

A espectroscopia na região do infravermelho tem como propósito analisar as alterações que ocorrem no movimento das ligações presentes em uma molécula quando esta interage com a radiação (Figueira, 2012). A absorção da radiação no infravermelho ocorre somente em deformações que causam variações no momento de dipolo durante o movimento de rotação ou vibração (Sugawara, 2017; Huck, 2015; Xin et al., 2014). Portanto, moléculas com ligações simétricas, como H_2 e Cl_2 não conseguem absorver esse tipo de radiação, impedindo sua identificação por espectroscopia na região de infravermelho (Pavia et al., 2009; Skoog, 2007).

As vibrações moleculares são geralmente classificadas em dois tipos: deformações axiais (stretching) e deformações angulares (bending) (Figura3). As deformações axiais podem ser simétricas ou assimétricas, correspondendo a um movimento rítmico ao longo do eixo da ligação, aumentando e diminuindo alternadamente a distância entre os átomos (Paiva et al, 2009). No caso das vibrações de deformação angular, não ocorrem alterações nas posições relativas dos átomos do grupo, sem a modificação dos ângulos de ligação, podendo ocorrer no plano ou fora do plano de referência (Silverstein, 2006).

Figura - 3 Tipos de vibração molecular observados em moléculas diatômicas.



Fonte: PAVIA *et al.*, 2009.

2.4.1. Espectroscopia no Infravermelho Médio (MIR)

Entre as técnicas de espectroscopia na região do infravermelho podemos citar a espectroscopia no Infravermelho próximo (NIR) e a espectroscopia no Infravermelho Médio (MIR). Ambas, são aplicadas para analisar as alterações que ocorrem no movimento das ligações encontradas nas moléculas quando elas interagem com a radiação (Figueira, 2012). A espectroscopia de infravermelho médio tem se destacado como uma ferramenta analítica importante na análise da composição química da cachaça. Essa técnica permite a identificação e quantificação de diferentes compostos presentes na bebida, auxiliando no controle de qualidade e autenticidade (Santos et al., 2017). Um dos principais benefícios da espectroscopia MIR é sua rapidez e simplicidade, pois permite a análise de múltiplos componentes em uma única medição, economizando tempo e recursos (Santos et al., 2017, Figueira, 2012). Além disso, essa técnica é não destrutiva, o que significa que as amostras podem ser analisadas sem serem alteradas ou danificadas, tornando esta técnica analítica interessante para o setor produtivo da cachaça.

Em relação à análise de cachaça, a espectroscopia MIR tem sido utilizada para identificar e quantificar uma variedade de compostos, incluindo álcoois, ácidos, ésteres, aldeídos e outros componentes que contribuem para as características sensoriais da bebida (Santos et al., 2017). Essa técnica também tem sido empregada na detecção de adulterações e na verificação da autenticidade da cachaça, auxiliando no combate à falsificação (Gonçalves et al., 2019). Além disso, estudos têm explorado a correlação entre os espectros de infravermelho médio e os compostos que fornecem as características sensoriais da cachaça, como aroma e sabor (Franco et al., 2019). Por ser uma ferramenta poderosa, tem permitindo a identificação precisa de compostos químicos e contribuindo para o controle de qualidade, autenticidade e desenvolvimento de métodos analíticos mais eficazes na indústria de produção de cachaça.

2.5 QUIMIOMETRIA

A quimiometria é a disciplina da química que usa métodos matemáticos e estatísticos para: planejar ou selecionar condições ótimas de medidas ou experimentos e extrair o máximo de informação de dados químicos (Ferreira, 2015). As atividades de pesquisa em quimiometria podem ser agrupadas em oito áreas principais, a saber: calibração multivariada, análise exploratória e de classificação, planejamento e otimização de experimentos, resolução de curvas multivariada, processamento de sinal, controle estatístico multivariado de processos, figuras de mérito, métodos “multi-way” e de inteligência artificial. (Geladi, 2003)

2.5.1. Análise de Componente Principal (CPA)

Segundo Bernardes (2015) a análise de componente principal (CPA), uma técnica de classificação não monitorada, desempenha um papel crucial na redução da dimensionalidade dos dados, tendo foco principal em identificar padrões entre as amostras e agrupá-las com base em suas similaridades, viabilizando a detecção de amostras anômalas. Em conjuntos de dados com variáveis altamente correlacionadas (alta colinearidade), é viável obter novas bases que capturam de forma mais eficiente as informações contidas nos dados. Essas novas bases, conhecidas como componentes principais, permitem uma representação mais clara dos dados com um número reduzido de variáveis, minimizando a perda de informação (Santa, 2014).

3. METODOLOGIA

3.1. AMOSTRAGEM

As amostras utilizadas na pesquisa foram doadas pelos produtores de cachaça do estado associados à Associação de Produtores de Cachaça de Areia (APCA). Foram analisadas 13 cachaças incluindo cristais, descansadas, envelhecidas e blends. Visando à integridade das empresas, as amostras foram identificadas como C1, C2*, C3, C4*, C5*, C6, C7, C8, C9, C10, C11*, C12 e C13 (*cachaça cristal). Todas as amostras foram acondicionadas fora do alcance da luz, dentro de uma sala em ambiente adequado, com a finalidade de manter e preservar os seus componentes.

3.2. ANÁLISES FÍSICO-QUÍMICAS

As análises foram realizadas no Laboratório de Tecnologia de Produtos Agropecuários/Departamento de Solos e Engenharia Rural e no Laboratório de Química Geral e Analítica/Departamento de Química e Física, ambos localizados no Centro de Ciências Agrárias - campus II da Universidade Federal da Paraíba. Análises físico-químicas realizadas foram pH, acidez total, acidez fixa, acidez volátil, extrato seco, teor alcoólico, densidade, ésteres totais, aldeídos totais, fenólicos totais, cobre e cor. Todos os ensaios foram realizados em triplicata usando as recomendações do Instituto Adolf Lutz (2008).

3.2.1. Acidez Total (AT)

Para a determinação da acidez total utilizou-se o método 221/IV, descrito por Lutz (2008). Esse procedimento fundamenta-se na titulação de neutralização de ácidos utilizando uma solução de hidróxido de sódio 0,1 M padronizada, utilizando indicador fenolftaleína até atingir o ponto de equivalência. O valor de acidez total foi calculado a partir da equação 1, sendo expressa em gramas de ácido acético por 100 mL de amostra.

$$AT = \frac{n \times M \times f \times MM}{10 \times V} \quad (\text{Equação 1})$$

Onde, n = volume gasto na titulação da solução de hidróxido de sódio, em mL, M = molaridade da solução de hidróxido de sódio, f = fator de correção da solução de hidróxido de

sódio, MM = Massa Molar do ácido acético (60 g/mol), V = volume tomado da amostra, em mL

3.2.2. Acidez fixa (AF)

Para indicar a acidez volátil, aplicou-se o método 222/IV, conforme descrito por Lutz (2008). Neste método, a acidez fixa é determinada evaporando a amostra e titulando os ácidos residuais com álcali. Primeiro, 50 mL da amostra são evaporados em banho-maria. Em seguida, água é adicionada cuidadosamente à cápsula para lavar o resíduo e a evaporação continua até quase secar. O resíduo é transferido para um frasco e titulado com solução de hidróxido 0,1 M de sódio padronizada, utilizando indicador fenolftaleína até atingir o ponto de equivalência. Abaixo segue a equação 2 para calcular a acidez fixa, sendo expressa em gramas de ácido acético por 100 mL de amostra.

$$AF = \frac{n \times M \times f \times MM}{10 \times V} \quad (\text{Equação 2})$$

Onde, n = volume gasto na titulação da solução de hidróxido de sódio, em mL, M = molaridade da solução de hidróxido de sódio, f = fator de correção da solução de hidróxido de sódio, PM = Massa Molar do ácido acético (60g/mol), V = volume tomado da amostra, em mL

3.2.3 Acidez Volátil (AV)

Para a determinar da acidez volátil utilizou-se o método 223/IV, retratado por Lutz (2008). Sendo que a quantificação é realizada pela diferença entre a acidez total e a acidez fixa da cachaça, podendo assim o resultado obtido ser expresso em mg de ácido acético por 100 mL de álcool anidro. Logo abaixo segue a fórmula utilizada para calcular acidez volátil.

$$AV=AT-AF \quad (\text{Equação 3})$$

Onde, AV= acidez volátil, AT = acidez total, AF = acidez fixa

3.2.4 Extrato Seco (ES)

Para a determinação de extrato seco utilizou-se o método 218/IV, descrito por Lutz (2008). Este método visa determinar o extrato seco em bebidas alcoólicas, envolvendo a pesagem do resíduo após a evaporação da água e álcool. O procedimento consiste em pipetar 20 ou 25 mL da amostra para uma cápsula, previamente seca em estufa, resfriada em dessecador até a temperatura ambiente e pesada. A evaporação é realizada lentamente em banho-maria até a completa secura. Após isso, a amostra é seca em estufa a $100 \pm 5^\circ\text{C}$ por 30 minutos, resfriada em dessecador por 30 minutos e, por fim, pesada. O valor de extrato seco foi calculado a partir da fórmula abaixo.

$$ES = \frac{100 \times N}{V} \quad (\text{Equação 4})$$

Onde, N = massa de resíduo seco em g (massa da cápsula com o extrato menos a tara da cápsula), V = volume da amostra em mL

3.2.5 Teor Alcoólico (TA)

O grau alcoólico real foi determinado pelo método 217/ IV, descrito por Lutz (2008), que se baseia na avaliação de densidade relativa, através da leitura direta da densidade ou em °G, utilizando um alcoômetro centesimal (Alcoômetro de Gay Lussac), que se destina à determinação do grau alcoólico ou da força real das misturas de água e álcool, indicando somente a concentração do álcool em volume. As determinações do alcoômetro são exatas somente para esta mistura, à temperatura de 20 °C, na qual o instrumento foi calibrado.

3.2.6 Densidade

Para a determinação de densidade utilizou-se o método 216/IV, descrito por Lutz (2008). A densidade relativa a 20°C é determinada utilizando um densímetro, a amostra é inserida no densímetro e a densidade é medida diretamente.

3.2.7. pH

A determinação do pH envolve a preparação cuidadosa da amostra, seguida pela calibração do pHmetro usando soluções tampão de pH específicas para garantir a precisão das medições. Uma vez calibrado, o eletrodo do pHmetro é inserido na amostra e o valor do pH é registrado quando a leitura se estabiliza, fornecendo uma medida da acidez ou basicidade da solução. A interpretação dos resultados é fundamental, com valores de pH abaixo de 7 indicando acidez, valores acima de 7 indicando basicidade e um pH de 7 sendo neutro. No presente trabalho, foi utilizado o pHmetro OneSense pH 2500.

3.2.8. Ésteres Totais (ET)

Para a determinação de ésteres totais utilizou-se o método 224/IV, descrito por Lutz (2008). Esse método é usado para determinar ésteres totais em bebidas alcoólicas destiladas, através da saponificação com hidróxido de sódio. O procedimento consiste em neutralizar 50 mL da amostra com solução de hidróxido de sódio 0,1 N, usando fenolftaleína como indicador. Após isso, um excesso de hidróxido de sódio é adicionado, seguido pelo refluxo da mistura por 1 hora em banho-maria. Se a cor rosa desaparecer, mais hidróxido de sódio é adicionado e o refluxo continua. Após resfriamento, ácido sulfúrico é adicionado e o excesso é titulado com hidróxido de sódio até a cor rosa. Os ésteres são expressos em mg de acetato de etila por 100 mL da amostra ou de álcool anidro. O valor de ésteres foi calculado a partir da fórmula abaixo.

$$ET = \frac{(B-C) \times N \times MM \times 100}{V} \quad (\text{Equação 5})$$

Onde, B = volume de solução de hidróxido de sódio adicionado (10 ou 20 mL) mais volume de hidróxido de sódio gasto na titulação, multiplicado pelo fator da solução, C = volume em mL de ácido sulfúrico adicionado, multiplicado pelo respectivo fator da solução, N = normalidade das soluções (0,1 N), V = volume da amostra usado na titulação, em mL, MM = Massa Molar do acetato de etila (88 g/mol).

3.2.9. Fenólicos Totais (FT)

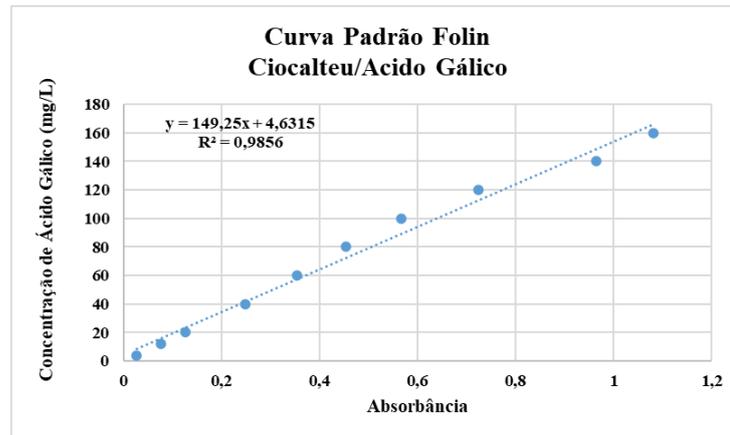
A quantificação dos compostos fenólicos totais das amostras foi realizada segundo o método de Folin – Ciocalteu. Primeiramente, foi preparado a curva de calibração, soluções padrão foram feitas em dez balões volumétricos, em seguida, em tubos de ensaio, foram adicionados ácido gálico, Folin-Ciocalteu e carbonato de sódio. Após repouso, a leitura foi feita no espectrofotômetro a 765 nm. Os dados da curva de calibração de fenólicos totais (Tabela 3) foram plotados para obtenção da equação linear da reta ($y = 149,25x - 4,6315$) e coeficiente de regressão linear ($R^2 = 0,9856$) (Figura 4). Um coeficiente de correlação $> 0,99$ indica uma correlação linear muito forte entre a resposta do instrumento e a concentração do analito, conseqüentemente, indica precisão da calibração, confiabilidade e redução de erros. Portanto, os dados gerados são precisos, confiáveis e baixos erros.

Para a análise das amostras, a extração foi realizada conforme um procedimento padrão. Em seguida, em tubos de ensaio, o extrato da amostra foi adicionado, seguido pela solução de Folin-Ciocalteu. Dois tubos em branco foram preparados com o solvente usado na extração e a solução de Folin-Ciocalteu. Após agitar e repousar os tubos, a solução de carbonato de sódio foi adicionada e agitada novamente. Após 60 minutos de repouso, o espectrofotômetro foi ligado e calibrado. A leitura foi realizada a 765 nm, utilizando os tubos brancos como referência. Os valores de absorbância para cada amostra foram anotados e os cálculos foram realizados para determinar a concentração de ácido gálico equivalente (AGE) no extrato e o teor de AGE no alimento.

Tabela 3: Valores obtidos da absorbância e o resultado da concentração.

Solução Padrão	Abs	Conc (mg/L)
1	0,027	4
2	0,077	12
3	0,127	20
4	0,248	40
5	0,354	60
6	0,453	80
7	0,567	100
8	0,724	120
9	0,964	140
10	1,080	160

Fonte: Elaboração própria, 2024

Figura 4: Curva padrão de ácido gálico.

Fonte: Elaboração própria, 2024

3.2.10 Cor

A metodologia envolve a inserção da amostra em uma célula de 10 mm e a medição da absorbância em comprimentos de onda de 430 nm e 700 nm usando um espectrofotômetro. Os resultados são registrados e verificados, com cálculos para determinar a cor em unidades SRM (Standard Reference Method) e sua conversão para unidades EBC (European Brewery Convention). No desenvolvimento da metodologia, foram seguidos os princípios descritos em Application News No. A622 Spectrophotometric Analysis Measurement of Color, Bitterness, and Diacetyl Content of Beer Using UV-Vis Spectrophotometer. Os valores de CC (cor da cachaça) foram determinados usando a equação 6. A indicação de maturação, cor, tonalidade e classificação foi determinada usando os valores de cor expressos em CC classificados por tonalidade (Tabela 4).

$$CC = 10 \times A (430 \text{ nm}) \times 1.97 \quad (\text{Equação 6})$$

Onde, CC – cor da cachaça, A (430 nano) – absorbância.

Tabela 4: Classificação, indicação de maturação, cor e tonalidade indicada análise de cor expressa em CC (Cor da cachaça).

Tonalidade	CC	Cor	Classificação
	< 1	Cristal (incolor)	Cachaça clara
	1-1,9	Amarelo-palido	
	2-2,9	Amarelo-palha	
	3-3,9	Dourado	
	4-4,9	Ambar avermelhado	Cachaça escura
	5-5,9	Caramelo	
	6-6,9	Ambar profundo	
	7-7,9	Castanho claro	
	8-8,9	Castanho escuro	
	9-9,9	Ambar-escuro	

Fonte: Elaboração própria, 2024

3.2.11. Aldeídos (AL)

Os aldeídos nas amostras foram quantificados utilizando-se o método 12, descrito pelo Manual de Métodos de Análises de Bebidas e Vinagres. Esse método determina aldeídos totais em bebidas destiladas, utilizando a reação de bissulfito com os aldeídos da amostra, formando compostos bissulfíticos. O excesso de bissulfito é titulado com solução de iodo na presença de amido. O procedimento envolve adicionar soluções específicas à amostra, aguardar períodos de repouso, ajustar o pH se necessário e realizar titulações com solução de iodo até a mudança de cor. O pH final deve estar entre 8,8 e 9,5. Os resultados foram expressos em mg de aldeído acético por 100 mL de álcool anidro. Segue a fórmula utilizada para calcular a concentração de aldeídos.

$$AL = \frac{4,4 \times n \times M \times 100}{GR} \times 1000 \quad (\text{Equação 7})$$

Onde, AL= Concentração de aldeídos totais em mg por 100 mL de álcool anidrido, n = volume gasto da solução de iodo, em mL, M = molaridade da solução de iodo, MM = peso molecular do aldeído acético (4,4 g/mol), GR = Grau alcoólico real.

3.2.12. Cobre

Foram preparadas soluções incluindo padrões de cobre (0,5, 1, 1,5, 2, 3, 4, 4,5, 5 e 6 mg/L), EDTA (0,025 mol/L), acetato de sódio (1 mol/L) e ácido acético (0,1 mol/L). A solução-padrão estoque de cobre foi preparada dissolvendo 3,928 g de sulfato de cobre pentahidratado ($\text{CuSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$) em 500 mL de água com adição de 1 ml de H_2SO_4 concentrado. Após a total dissolução, esta solução foi transferida para um balão volumétrico de 1 L e aferido com água destilada. A partir desta solução padrão de cobre foram preparadas as soluções padrão de cobre (0,5, 1, 1,5, 2, 3, 4, 4,5, 5 e 6 mg/L) para curva de calibração. A solução de EDTA 0,025 mol/L, foi preparada dissolvendo 7,31g de EDTA em 400 mL de água destilada; após a dissolução esta solução foi transferida para um balão volumétrico de 1 L e aferido com água destilada. Em seguida, foram preparadas as soluções de acetato de sódio (1 mol/L) e ácido acético (0,1 mol/L). A solução tampão (acetato de sódio + ácido acético) foi preparada misturando as soluções de acetato de sódio (1 mol/L) e ácido acético (0,1 mol/L) a uma proporção de 1:10 (ácido acético: acetato de sódio), posteriormente foi acidificada até atingir o pH de 2,2.

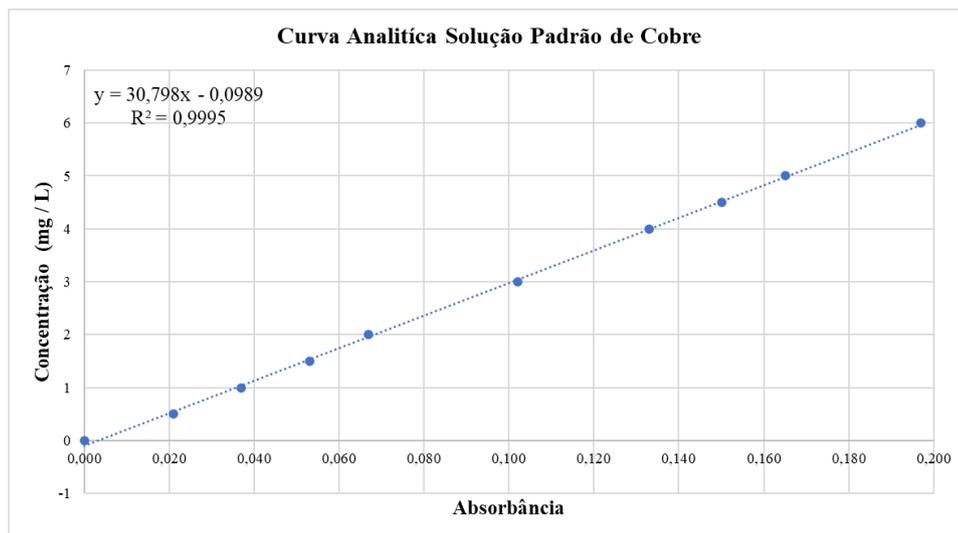
Foram tomados 5 mL de cada solução de cobre (0,5, 1, 1,5, 2, 3, 4, 4,5, 5 e 6 mg/L), separadamente, e em cada uma delas foi adicionado 5 mL da solução tampão (acetato de sódio + ácido acético com pH=2,2) e 5 mL do EDTA. As leituras da absorbância das soluções padrão de calibração foram realizadas em espectrofotômetro (KASUAKI, Modelo: IL-593) no comprimento de onda de 745 nm. Os dados da curva de calibração de cobre (Tabela 5) foram plotados para obtenção da equação linear da reta ($y = 30,798x - 0,0989$) e coeficiente de regressão linear ($R^2 = 0,9995$) (Figura 5). Um coeficiente de correlação $> 0,99$ indica uma correlação linear muito forte entre a resposta do instrumento e a concentração do analito, conseqüentemente, indica precisão da calibração, confiabilidade e redução de erros. Portanto, os dados gerados são precisos, confiáveis e baixos erros.

Após a obtenção da curva de calibração, foram tomados 5 mL da amostra de cachaça e foram adicionados 5 mL da solução tampão (acetato de sódio + ácido acético), a seguir a solução foi acidificada para o pH = 2,2 e 5 mL do EDTA. O método envolveu a formação do complexo Cu^{2+} com EDTA. Utilizou-se uma solução tampão para a formação de quelatos bivalentes mais estáveis, assim os íons de Cu^{2+} foram quantitativamente complexados pelo EDTA. As leituras da absorbância das soluções padrão de calibração foram realizadas em espectrofotômetro (KASUAKI, Modelo: IL-593) a comprimento de onda de 745 nm.

Tabela 5: Valores obtidos da absorbância e o resultado da concentração.

Solução de calibração	Abs	Concentração (mg /L)
T1	0,000	0,0
T2	0,021	0,5
T3	0,037	1,0
T4	0,053	1,5
T5	0,067	2,0
T6	0,102	3,0
T7	0,133	4,0
T8	0,150	4,5
T9	0,165	5,0
T10	0,197	6,0

Fonte: Elaboração própria, 2024

Figura 5: Curva analítica para determinação de cobre, expressa em mg/L.

Fonte: Elaboração própria, 2024

3.3 ANÁLISE ESPECTRAL

As medidas de absorção no infravermelho médio (MIR) foram conduzidas utilizando um espectrofotômetro Agilent Cary 630 FTIR. Os espectros MIR foram adquiridos por meio do software Resolutions Pro FTIR e mensuradas por refletância difusa. A aquisição dos espectros MIR abrangeu a faixa de 650 a 4000 cm^{-1} , com uma resolução de 4 cm^{-1} . Para extrair informações estruturais dos espectros de infravermelho, foram levantadas as frequências nas quais diferentes grupos funcionais apresentam absorção. Esses dados podem ser obtidos através de tabelas de correlação no infravermelho, que fornecem dados

abrangentes sobre as posições de absorção de vários grupos funcionais. A figura 6 apresenta essas informações de referência.

Figura 6: Tipo de vibração, frequência e intensidade dos grupos funcionais já identificados usando MIR simplificada.

	Tipo de Vibração	Frequência (cm ⁻¹)	Intensidade	
C—H	Alcanos (estiramento)	3000–2850	s	
	—CH ₃ (dobramento)	1450 e 1375	m	
	—CH ₂ — (dobramento)	1465	m	
	Alcenos (estiramento)	3100–3000	m	
	(dobramento fora do plano)	1000–650	s	
	Aromáticos (estiramento)	3150–3050	s	
	(dobramento fora do plano)	900–690	s	
	Alcino (estiramento)	ca. 3300	s	
	Aldeído	2900–2800	w	
			2800–2700	w
C—C	Alcano	Inútil para interpretação		
C=C	Alceno	1680–1600	m–w	
	Aromático	1600 e 1475	m–w	
C≡C	Alcino	2250–2100	m–w	
C=O	Aldeído	1740–1720	s	
	Cetona	1725–1705	s	
	Ácido carboxílico	1725–1700	s	
	Éster	1750–1730	s	
	Amida	1700–1640	s	
	Anidrido	1810 e 1760	s	
	Cloreto ácido	1800	s	
	C—O	Alcoóis, éteres, ésteres, ácidos carboxílicos, anidridos	1300–1000	s
	O—H	Alcoóis, fenóis Livres	3650–3600	m
		Ligação de H	3400–3200	m
Ácidos carboxílicos		3400–2400	m	
N—H	Aminas e amidas primárias e secundárias (estiramento)	3500–3100	m	
	(dobramento)	1640–1550	m–s	
C—N	Aminas	1350–1000	m–s	
C=N	Iminas e oximas	1690–1640	w–s	
C≡N	Nitrilas	2260–2240	m	
X=C=Y	Alenos, cetenas, isocianatos, isotiocianatos	2270–1940	m–s	
	Nitro (R—NO ₂)	1550 e 1350	s	
S—H	Mercaptanas	2550	w	
S=O	Sulfóxidos	1050	s	
	Sulfonas, cloretos de sulfonila, sulfatos, sulfonamidas	1375–1300 e 1350–1140	s	
C—X	Fluoreto	1400–1000	s	
	Cloreto	785–540	s	
	Brometo, iodeto	< 667	s	

Fonte: Adaptado (Pavia et al., 2015).

3.4. Análise estatística

Para identificar diferenças significativas, todos os dados obtidos foram submetidos à ANOVA unidirecional e o agrupamento foi feito de acordo com o teste de Tukey. Os dados foram organizados utilizando Microsoft Excel® e as análises foram feitas utilizando o

software Statistica® 5.0. Valor de ($p < 0,05$) considerado estatisticamente significativo. Os dados espectroscópicos foram selecionados na faixa de 4000 a 650 cm^{-1} . Os resultados também serão submetidos a Análise de Componentes Principais para visualizar a similaridade e diferenças das amostras com respeito as suas várias marcas.

4 RESULTADOS E DISCUSSÃO

Foram avaliadas 13 amostras de cachaça (incluindo cristais, descansadas, envelhecidas e *blends*). Estas foram submetidas a análises de cor, pH, acidez volátil (AV), acidez total (AT), acidez fixa (AF), densidade (D), teor alcoólico (TA), extrato seco (ES), fenólicos totais (FT), ésteres totais (ET) e cobre (Cu). Após as análises físico-químicas, as amostras foram submetidas as medidas espectrofotométricas de refletância difusa usando o MIR (espectrofotômetro Agilent Cary 630 FTIR) com faixa de 650 a 4000 cm^{-1} , com uma resolução de 4 cm^{-1} . Todas as informações foram adquiridas por meio do software (Resolutions Pro FTIR). Todos os dados foram tratados usando software Microsoft Excel® e software Statistica® 5.0.

4.1 ANÁLISE DE COR DAS CACHAÇAS

A cachaça tem uma ampla gama de cores, que varia com o período de armazenamento, descanso e envelhecimento e com o tipo de madeira do barril (DA CACHAÇA, 2019). Dentre as amostras analisadas, continha desde cachaças cristais, armazenadas/descansadas em barris de Umburana, Bálamo e Jaqueira, *blend 1* (Jequitibá, Jaqueira, Castanheira e Carvalho) e *blend 2* (Umburana, Bálamo, Jaqueira e Ipê). A análise de cor na cachaça é essencial para identificar características de envelhecimento e qualidade, indicando tipos de barris e tempo de maturação (Miranda, 2005). As cachaças cristais, tais como a C2*(0,2), C4*(0,1), C5*(0,3) e C11*(0,2) são incolores, pois, apresentaram concentrações de $CC < 1$ (Tabela 6). Portanto, apresentaram características de maturação como cachaça cristal (Incolor) e classifica-se como cachaça clara (Tabela 6). As amostras C1 ($CC=1,1$; amarelo-pálido), C6 ($CC=2,3$; Amarelo-ouro) e C9 ($CC=3,6$; Dourado) apresentaram valores de $CC < 4$, são classificadas como cachaças (Tabela 6). Estas três cachaças foram maturadas em barris de umburana, mas eles divergem quanto aos seus valores de CC e tonalidade de cor devido à idade do barril, tipo de tosta e tempo de maturação. As demais cachaças obtiveram $CC > 5$ o que as classifica como cachaça escura, porém, estas divergem quanto as suas tonalidades de cor. As amostras C3 (CC

= 5,3), C10 (CC = 5,7) e C12 (CC=5,4) apresentam cor caramelo, embora sejam armazenadas em barris diferentes que são umburana, balsamo e um *blend* de madeiras, respectivamente. As amostras C7 (CC=8,4) e C13 (CC=8,7) apresentam cor castanho escuro, embora sejam armazenadas em barris diferentes que são jaqueira e um blend de cinco madeiras, respectivamente. As amostras C8 (CC=4,1, Ambar avermelhado) e C10 (CC=5,7, Caramelo) foram ambas envelhecidas em barris de balsamo, mas apresentam diferenças de cor. Este fato ocorreu devido à idade do barril, tipo de tosta e tempo de maturação.

Tabela 6: Classificação, indicação de maturação, cor e tonalidade das cachaças indicada análise de cor expressa em CC

Amostras	CC	Cor	Classificação
C1	1,1	Amarelo-pálido	Cachaça clara
C2*	0,2	crystal	Cachaça clara
C3	5,3	Caramelo	Cachaça escura
C4*	0,1	crystal	Cachaça clara
C5*	0,3	crystal	Cachaça clara
C6	2,3	Amarelo-palha	Cachaça clara
C7	8,4	Castanho escuro	Cachaça escura
C8	4,1	Ambar avermelhado	Cachaça escura
C9	3,6	Dourado	Cachaça clara
C10	5,7	Caramelo	Cachaça escura
C11*	0,2	crystal	Cachaça clara
C12	5,4	Caramelo	Cachaça escura
C13	8,7	Castanho escuro	Cachaça escura

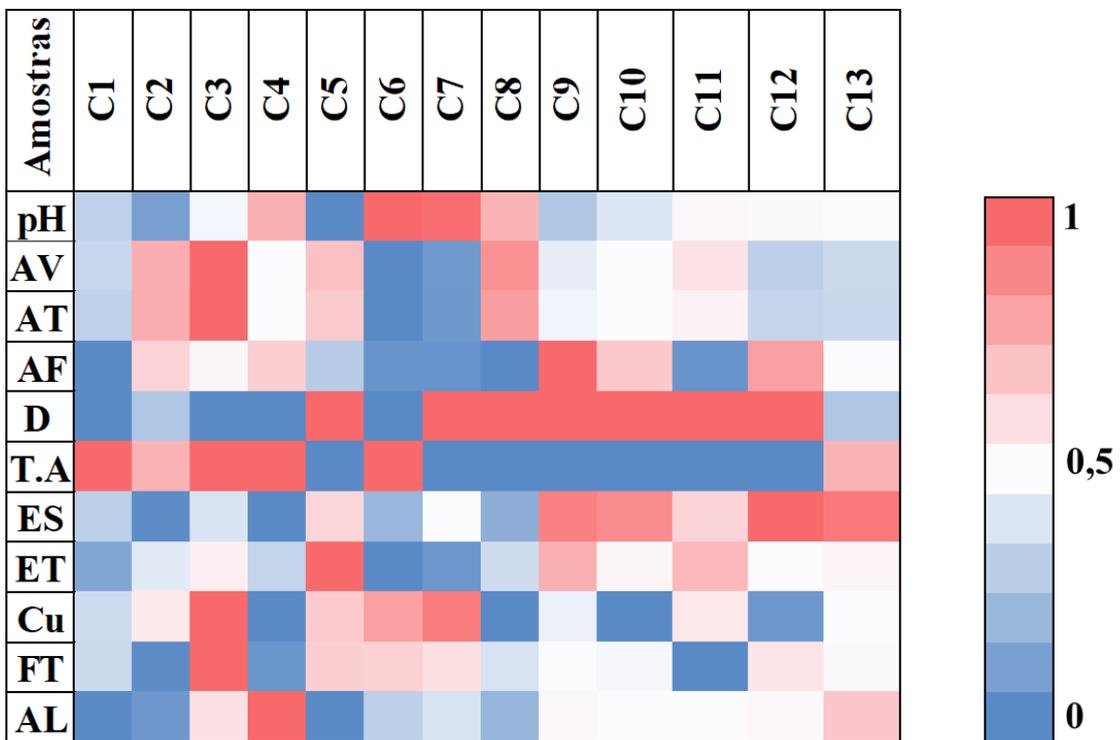
Fonte: Elaboração própria, 2024

Cachaças armazenadas ou descansadas em barris de umburana de pequeno volume, como até 250-300 litros, podem assumir uma cor intensa variando de dourado a âmbar-escuro. Por outro lado, em barris antigos de grande volume, a coloração tende a ser amarelo-pálido (DA CACHAÇA, 2019). A diferença de coloração entre cachaças pode ser atribuída aos diferentes tipos, tamanhos e tosta dos barris utilizados durante o armazenamento. A amostra C8 (CC=4,1, Ambar avermelhado) e C10 (CC=5,7, Caramelo) foram envelhecidas em barris de bálsamo, mas apresentam valores de CC e tonalidade diferentes devido ao envelhecimento em barris de Bálsamo de baixa capacidade (250-300 L) ou devido ao envelhecimento em barris de bálsamo antigos de grande volume (DA CACHAÇA, 2019). A cor da cachaça, armazenada, descansada ou envelhecida, é influenciada por diversos fatores, como o tipo de barril utilizado, o tempo de envelhecimento e as condições de armazenamento, resultando em uma ampla variedade de tonalidades na bebida final (IBRAC, 2019; Miranda et al., 2005).

4.2. PARÂMETROS FÍSICO-QUÍMICOS

A graduação alcoólica da cachaça é definida pela percentagem volumétrica de álcool presente na bebida, o teor alcoólico está vinculado à quantidade de água transportada pelo processo de destilação (Marinho et al., 2009). Os resultados revelam que as amostras C1, C3, C4* e C6 (44,8 %, v:v) obtiveram maior TA ($p<0,05$) (Tabela 7) (Figura-7). Em comparação as cachaças C5*, C7, C8, C9, C10, C11* e C12 (42,8 %, v:v) apresentaram menor TA ($p<0,05$) (Tabela 7) (Figura-7). De acordo com Portaria n°539 de 22/12/2022 os níveis aceitáveis pela legislação atual para a nomeação de cachaça, deve conter entre 38 °GL e 48 °GL Todas as amostras analisadas exibiram valores dentro dos limites estabelecidos.

Figura 7: Mapa de calor das análises físico-químicas.



pH, Acidez Volátil (AV), Acidez Total (AT), Acidez Fixa (AF); Densidade (D), Teor Alcoólico (TA), Extrato Seco (ES), Cobre (Cu), Ésteres Totais (ET), Fenólicos Totais (FT) e Aldeídos Totais (AL) mensurados das 13 amostras de cachaça estudadas

Fonte: Elaboração própria, 2024

Tabela 7 – Características físico-químicas da cachaça

Amostra	pH	A.V.	A.T.	A.F.	D	T. A	E.S.	E.T.	Cu	FT	AL
C1	4,10 ±0,01 ^j	123,08± 0,01 ^j	129,23± 0,01 ^k	6,15± 0,01 ^j	0,941± 0,01 ^c	44,8± 0,1 ^a	83,0± 0,1 ⁱ	122,21 ±0,01 ^k	0,76± 0,01 ⁱ	49,29± 0,01 ^j	15,30± 0,01 ^l
C2*	3,90± 0,01 ^l	195,79± 0,01 ^c	208,42± 0,01 ^c	12,63±0 ,01 ^e	0,943± 0,01 ^b	43,8± 0,1 ^b	14,0± 0,1 ^l	145,50 ±0,01 ^h	1,27± 0,01 ^f	9,12± 0,01 ^l	16,60± 0,01 ^j
C3	4,28 ±0,01 ^h	223,59± 0,01 ^a	233,85± 0,01 ^a	10,26±0 ,01 ^f	0,941± 0,01 ^c	44,8± 0,1 ^a	103,6± 0,1 ^h	162,62 ±0,01 ^d	2,71± 0,00 ^a	232,97± 0,01 ^a	28,60± 0,01 ^c
C4*	4,84± 0,01 ^c	164,33± 0,01 ^g	177,30± 0,01 ^g	12,97±0 ,01 ^d	0,941± 0,01 ^c	44,8± 0,1 ^a	11,8± 0,1 ^m	138,00 ±0,01 ^j	0± 0 ^l 0,01 ^k	13,75± 0,01 ^k	42,60± 0,01 ^a
C5*	3,79± 0,01 ^m	188,71± 0,01 ^d	196,92± 0,01 ^d	8,21± 0,01 ^h	0,945± 0,01 ^a	42,8± 0,1 ^c	304,6± 0,1 ^f	266,47 ±0,01 ^a	1,6± 0,01 ^d	119,33± 0,01 ^b	15,43± 0,01 ^k
C6	5,33± 0,01 ^a	38,93± 0,01 ^m	45,41±0 ,01 ^m	6,49± 0,01 ⁱ	0,941± 0,01 ^c	44,8± 0,1 ^a	57,40± 0,1 ^j	112,35 ±0,01 ^m	2,09± 0,01 ^c	117,09± 0,01 ^c	21,52± 0,01 ^h
C7	5,30± 0,01 ^b	56,23± 0,01 ^l	62,70± 0,01 ^l	6,49± 0,01 ⁱ	0,945± 0,01 ^a	42,8± 0,1 ^c	128,8± 0,1 ^g	116,75 ±0,01 ^l	2,5± 0,00 ^b	98,12± 0,01 ^d	23,15± 0,01 ^g
C8	4,82± 0,01 ^d	207,19± 0,01 ^b	213,33± 0,01 ^b	6,15± 0,01 ^j	0,945± 0,01 ^a	42,8± 0,1 ^c	49,4± 0,1 ^k	140,70 ±0,01 ⁱ	0±0 ^l 0,01 ⁱ	53,62± 0,01 ⁱ	19,14± 0,0 ⁱ
C9	4,07± 0,01 ^k	148,89± 0,01 ^h	168,89± 0,01 ^h	20,01±0 ,01 ^a	0,945± 0,01 ^a	42,8± 0,1 ^c	696,8± 0,1 ^c	211,86 ±0,01 ^b	0,96± 0,01 ^h	66,61± 0,01 ^g	25,93± 0,01 ^d
C10	4,20± 0,01 ⁱ	164,44 ± 0,01 ^f	177,78± 0,01 ^f	13,33±0 ,01 ^c	0,945± 0,01 ^a	42,8± 0,1 ^c	644,8± 0,1 ^d	156,31 ±0,01 ^f	0± 0 ^l 0,01 ^h	64,22± 0,01 ^h	25,62± 0,01 ^e
C11*	4,35± 0,01 ^e	175,14± 0,01 ^e	181,62± 0,01 ^e	6,49± 0,01 ⁱ	0,945± 0,01 ^a	42,8± 0,1 ^c	314,0± 0,1 ^e	204,32 ±0,01 ^c	1,3± 0,01 ^e	7,78± 0,01 ^m	25,31± 0,01 ^f
C12	4,33± 0,01 ^f	115,68± 0,01 ^k	131,89± 0,01 ^j	16,22±0 ,01 ^b	0,945± 0,01 ^a	42,8± 0,1 ^c	804,8± 0,1 ^a	151,60 ±0,01 ^g	0,14± 0,01 ^j	93,34± 0,01 ^e	25,93± 0,01 ^d
C13	4,31± 0,01 ^g	126,49± 0,01 ⁱ	136,22± 0,01 ⁱ	9,73±0, 01 ^g	0,943± 0,01 ^b	43,8± 0,1 ^b	735,4± 0,1 ^b	158,03 ±0,01 ^e	1,06± 0,01 ^g	70,64± 0,01 ^f	31,67± 0,01 ^b

pH – Potencial Hidrogeniônico, AV – Acidez Volátil (mg/100mL Á. Anidro), AT – Acidez Total (mg/100mL Ac. Cético), AF - Acidez Fixa (mg/100mL Ac. Cético); D – Densidade (g/cm³), TA – Teor Alcoólico (°GL - 20°C), ES - Extrato Seco (%), Cobre - Cu (mgCu/L A. Anidro), ET - Ésteres Totais (mg Ac. Etila/100mL A. Anidro), Fenólicos Totais (mg Ac. Gálico/L), Aldeídos -AL (mg Aldeído acético/100mL Á. Anidro), * (cachaça cristal)

Fonte: Elaboração própria, 2024

A densidade é definida como a razão entre a massa e o volume. Logo, a presença e a concentração de álcool na cachaça afetam diretamente a densidade, ou seja, quanto mais álcool, menor a densidade da cachaça (Braga, 2007). Os resultados obtidos de Densidade (D) exibem, que a cachaças C5*, C7, C8, C9, C10, C11* e C12 ($0,945 \text{ g/cm}^3$) obtiveram maior D ($p < 0,05$) (Tabela 7) (Figura-7). Em contraste, as amostras de menores concentrações são elas C1, C3, C4* e C6 com ($0,941 \text{ g/cm}^3$) de D ($p < 0,05$) (Tabela 7) (Figura-7). Com os resultados adquiridos observou-se que o teor alcoólico e a densidade são inversamente proporcionais.

O pH do destilado é um parâmetro significativo que pode impactar tanto as propriedades químicas quanto as sensoriais do produto final. Os resultados de pH revelam que a amostra C6 (5,33) apresentou maior valor de pH ($p < 0,05$) (Tabela 7) (Figura-7). Em compensação a amostra C5* (3,79) obteve menor pH ($p < 0,05$) (Tabela 7) (Figura-7). As demais amostras alcançaram resultados diferentes entre si (Tabela 7) (Figura-7). Durante o período de maturação, o pH do destilado é influenciado, geralmente diminuindo juntamente com as concentrações de álcoois, enquanto a acidez aumenta (Pinheiro, 2010). Essa relação é provocada pela interação do destilado com os constituintes da madeira, resultando em alterações na composição química ao longo do tempo de envelhecimento (Miranda, 2005).

A avaliação do nível de acidez da cachaça está relacionada à sensação de ardência na garganta ou ao desconforto causado pelo cheiro do destilado, indicando que altos teores de ácido acético podem ser responsáveis por tais características (Miranda, 2005). Os dados de Acidez Total (AT) indicam, que a amostra C3* ($233,85 \text{ mg/100mL}$) contém a maior concentração de AT ($p < 0,05$) (Tabela 7) (Figura-7). Enquanto isso, a cachaça C6 ($45,41 \text{ mg/100mL}$) apresentou menor concentração de AT ($p < 0,05$) (Tabela 7) (Figura-7). Altas concentrações de acidez é reflexo de um processo fermentativo malconduzido, por conta da presença de bactérias acéticas na cana ou no mosto (Cardoso, 2001). Adicionalmente, a condução da destilação pode resultar em cachaças com alta acidez, o que geralmente indica uma qualidade inferior do produto (Miranda, 2005). Como mencionado anteriormente, o pH e acidez são parâmetros inversamente proporcionais, o que justifica a amostra C6 conter a menor concentração de AT entre as amostras analisadas e conseqüentemente maior pH (Tabela 7) (Figura-7). Dessa forma, uma cachaça de baixa acidez pode indicar seu nível de maturação através do aumento da acidez volátil (Miranda, 2005). Destacou-se entre todas as cachaças analisadas a amostra C3, devido aos níveis elevados de AT (Acidez Total) e AV (Ácidos Voláteis), resultantes do seu descanso em barril de umburana. Isso justifica sua concentração maior de CC e uma coloração mais intensa em comparação às outras amostras

submetidas ao mesmo tipo de barril. A acidez volátil desempenha um papel importante na definição do aroma e do sabor das bebidas alcoólicas destiladas (Janzanti, 2004).

Na cachaça, os ácidos voláteis mais comuns incluem o ácido acético (presente em vinagres), o ácido láctico e o ácido fórmico (Janzanti, 2004). Os resultados revelam que amostra C3 (233,59 mg/100mL) contém a maior concentração de AV ($p < 0,05$) (Tabela 7) (Figura-7). Em contraste, a cachaça C6 (38,93 mg/100mL) obteve a menor concentração AV ($p < 0,05$) (Tabela 7) (Figura-7). Sete das amostras variaram de 233,15 a 164,33 mg/100mL, excederam o valor máximo de AV de 150 mg de ácido acético por 100 mL de álcool anidro (BRASIL, 2022). No entanto, de acordo com a legislação, esses níveis são mantidos elevados não com o objetivo de proteger a cachaça recém produzida de baixa qualidade, mas sim a cachaça envelhecida, cujo teor aumenta à medida que envelhece devido à oxidação do etanol, resultando em ácido acético e acetaldeído (Reazin, 1981; Litchev, 1989).

A análise da Acidez Fixa (AF) está relacionada à detecção de ácidos orgânicos não voláteis, como ácido cítrico, ácido succínico e ácido málico (Campos et al., 2004). Os valores de AF indicam que a cachaça C9 (20,01 mg/100mL) contém a maior concentração de AF ($p < 0,05$) (Tabela 7) (Figura-7). Em comparação com as amostras C1 e C8 (6,15 mg/100mL) apresentou menores concentrações de AF ($p < 0,05$) (Tabela 7) (Figura-7). A acidez fixa é um parâmetro intrinsecamente relacionado ao extrato seco (ES), ambos os quais são medidas que refletem a presença de compostos não voláteis. Portanto, variações no extrato seco e na acidez fixa podem estar correlacionadas com fatores como a influência do processo de fermentação, o tempo de destilação e os tipos de madeira utilizados no envelhecimento (Campos et al., 2004). Durante o processo de fermentação, a geração de ácidos não voláteis está associada ao ciclo de Krebs. Paralelamente, o tempo de destilação exerce influência na formação de compostos, uma vez que a catalisação desses processos é afetada pela presença de cobre, este último relacionado à estrutura do alambique (Parazzi et al., 2008).

Os compostos contidos Extrato Seco (ES) (incluindo ácidos orgânicos/graxos, e fenólicos) são gerados durante o processo da cachaça (Pinheiro, 2010). Resultados revelam que a amostra C12 (804,8 mg/100mL) contém a maior concentração de ES ($p < 0,05$) (Tabela 7) (Figura-7). Em contraste, a amostra C2* (11,8 mg/100mL) exibiu menor concentração de ES ($p < 0,05$) (Tabela 7) (Figura-7). As cachaças cristais tais como C5* (304,6 mg/100mL) e C11* (314,6 mg/100mL) apresentaram concentrações de ES > 300 mg/100mL, acima dos valores esperados para cachaças cristais (Tabela 7) (Figura-7). Considerando o extrato seco, a expectativa é que ele seja diretamente proporcional com concentração de fenólicos totais (FT)

e com a intensidade da cor (Castro, 2020). Logo as cachaças brancas que obtiveram altas concentrações de ES, podem ter sido armazenadas em barris de madeira neutras, como o freijó. Durante o processo de envelhecimento das cachaças, ocorre um aumento progressivo no teor de extrato seco, atribuído à extração dos compostos não voláteis da madeira (Pinheiro, 2010). Essa diferença de teor de extrato seco está associada ao período de envelhecimento, uma vez que as cachaças recém-destiladas exibem teores inferiores em comparação com as envelhecidas (Pinheiro, 2010).

Os compostos fenólicos são uma ampla classe de compostos químicos que contêm um ou mais anéis fenólicos (Correia et al., 2007). Estes compostos estão presentes na natureza (especialmente em plantas) e têm diversas funções, desde o sabor e aroma de alimentos e bebidas até a saúde. Os compostos fenólicos são derivados das ligninas podem ser divididos em sete grupos incluindo fenóis simples, ácidos fenólicos, aldeídos fenólicos, flavonoides, taninos, etilenos e ligninas (Silva et al., 2023). Os compostos fenólicos em bebidas espirituosas contribuem significativamente para aroma, sabor e, podem vir a contribuir com a cor. Resultados revelam que a amostra C3 (232,97 mg/100mL) contém a maior concentração de FT ($p < 0,05$) (Tabela 4/Figura-5). Por outro lado, as amostras C2* (9,12 mg/100mL), C4* (13,75 mg/100mL) e C11* (7,78 mg/100mL) contém as menores concentração de FT (< 15 mg/100mL) ($p < 0,05$) (Tabela 4/Figura-5). A amostra C5* destacou-se por apresentar concentração de ES e FT similares às cachaças envelhecidas, mas mantendo as características incolores, sendo classificada como cachaça cristal, não apenas nos valores de ES e FT, mas também por apresentar altas concentrações para uma cachaça cristal, indicando que foi armazenada em barril de madeira neutra, o que confirma a influência do alto teor de fenólicos totais. Vale salientar que as cachaças cristais (7,8-119,3 mg/100mL), descansadas (49,3-117,1 mg/100mL) e envelhecidas (53,62-232,97 mg/100mL) apresentam sobreposição diante as concentrações dos FT, isso comprova que a coloração tem influência dos tipos de compostos fenólicos gerados por cada tipo de madeira.

Compostos fenólicos são derivados das ligninas da madeira e, durante o descanso ou envelhecimento são gradualmente absorvidos pela bebida, conferindo-lhe indicação de maturação, cor e tonalidade que pode reduzir ou aumentar a sensação de desidratação causada pelo teor alcoólico presente (Mendes et al., 2009). Compostos fenólicos tais como ácidos fenólicos (ácido ferúlico, ácido caféico e ácido serínico), aldeídos fenólicos (vanilina e siringaldeído) e fenóis Simples (guaiacol, eugenol e outros fenóis voláteis) contribuem para o perfil de aroma e sabor do destilado, mas não afetam significativamente a cor por serem

pouco pigmentados (Castro, 2020). Portanto, madeiras neutras como o Feijó têm sido muito usadas para descansar cachaças cristais, pois esta madeira equilibra a cachaça sem apresentar grande mudanças de cor na mesma, isto está relacionado aos grupos de fenólicos que são gerados durante a interação madeira-destilado. Portanto, a amostra C5* (119,33 mg de FT/100mL), classificada como cristal/incolor (CC=0,3, Tabela 6), cachaça clara, contém concentração de FT similar a amostra C6 (117,09 mg de FT/100mL, cor: amarelo-palha, cachaça clara) (Tabela 6, Tabela 7/Figura-7), mas apresentam colorações distintas. Estes dados indicam que a amostra C5* foi descansada em um barril de freijó ou jequitibá (ambas madeiras neutras) que promoveu uma alta concentração de compostos fenólicos proveniente dos grupos ácidos fenólicos, aldeídos fenólicos e fenóis simples que influenciam o aroma e sabor do destilado sem influenciar sua cor. Enquanto, a amostra C6 apresentou coloração distinta a amostra C5*, embora contenha, similar quantidade de FT (Tabela 6, Tabela 7/Figura-7), pois a amostra C6 foi envelhecida em barril de umburana (madeira não neutra) que apresenta grupos de fenólicos (incluindo taninos, flavonoides e antocianinas) que contribuem com o aroma, sabor e cor da cachaça.

Os ésteres são compostos aromáticos significativos, originados durante os processos de fermentação, destilação e envelhecimento (Bortoletto et al., 2016). Os resultados de Ésteres Totais (ET) revelam, que a cachaça C5* (266,47 mg/100mL) contém a maior concentração de ET ($p < 0,05$) (Tabela 7) (Figura-7). Em contraste, a amostra C6 (112,35 mg/100mL) exibiu menor concentração de ET ($p < 0,05$) (Tabela 7) (Figura-7). Três das amostras variaram de 266,47 a 204,32 mg/100mL, excederam o valor máximo de ET de 200 mg de ácido acético por 100 mL de álcool anidro (BRASIL, 2022). Níveis elevados de ésteres totais podem estar associados a separação incorreta de fração da cabeça do destilado (Maia et al., 1994). Apesar de a formação de ésteres após o processo de fermentação ocorrer principalmente através de reações químicas entre álcoois e ácidos, durante o processo de envelhecimento da cachaça, esse fenômeno é mais lento e em menor proporção (Nykänen et al., 1991). A esterificação dos álcoois e ácidos gera ésteres, como o acetato de etila, que contribuem para o aroma agradável das bebidas envelhecidas (Miranda, 2005). Portanto, é comum que bebidas maturadas apresentem maiores concentrações de ésteres e aldeídos.

Aldeídos são gerados durante a fermentação e maturação da cachaça. Resultados revelam que a cachaça C4* (42,46 mg/100mL) contém a maior concentração de Al ($p < 0,05$) (Tabela 7) (Figura-7). Em contraste, a amostra C1 (15,33 mg/100mL) exibiu menor concentração de Al ($p < 0,05$) (Tabela 7) (Figura-7). Durante o processo de fermentação

alcoólica, o principal aldeído formado é o acetaldeído (Maia, 1994). Durante a maturação (incluindo descanso e/ou envelhecimento), a oxidação é uma reação química crucial na formação de aldeídos a partir dos etanóis e dos álcoois superiores (Parazzi et al., 2008).

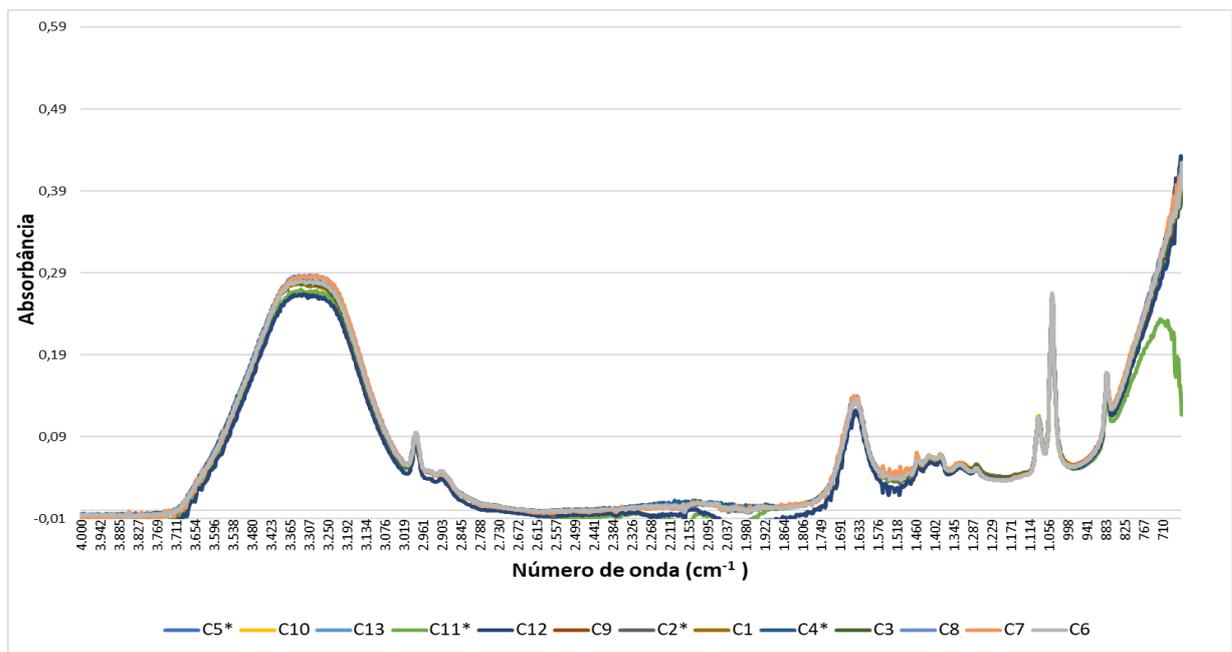
Concentrações de cobre identificadas em cachaça são gerados durante a destilação, mas altas concentrações de cobre indicam que os alambiques não foram bem higienizados (Marinho et al., 2009). Os resultados revelam que a cachaça C3 (2,71 mg/100mL) contém maior concentração de Cu ($p < 0,05$) (Tabela 7) (Figura-7). Em contraste, as amostras C4*, C8 e C10 não apresentaram presença de cobre ($p < 0,05$) (Tabela 7) (Figura-7). Todas as cachaças analisadas contêm concentrações de cobre < 5 mg/L, estado de acordo com a legislação vigente (BRASIL, 2022). Os alambique de cobre retém substâncias indesejáveis como dimetilsulfeto (Sargentelli et al., 1996). Porém, o uso de alambiques cobre requer cuidados adequados de limpeza, pois o cobre do equipamento oxida-se lentamente, formando uma camada esverdeada chamado “azinhavre” (óxido de cobre) (Marinho et al., 2009). Ao ser gerado, óxido de cobre é dissolvido pelos vapores alcoólicos/ácidos, contaminando o produto (Boza; Horii, 2000). Altas concentrações de cobre podem ser tóxicas ao organismo humano, levando a doenças como epilepsia e artrite reumatoide (Garbin et al., 2005). Apesar de ser um catalisador durante a destilação, contribuindo para a eliminação de odores desagradáveis, sua presença excessiva pode contaminar a cachaça (Nascimento et al., 1998).

4.3 ANÁLISE ESPECTRAL

A técnica de espectroscopia de infravermelho médio (MIR) foi utilizada para a caracterização das 13 amostras, a (figura 8) (Tabela 8) mostra os espectros MIR das amostras, na região de 4000 a 650 cm^{-1} e os grupos funcionais identificados. Os espectros MIR representativos das treze cachaças, todas elas tinham espectros semelhantes. As bandas de absorção que são específicas dos álcoois surgem do movimento de estiramento da ligação O-H em ligação hidrogênio intermolecular na região 3400 e 3300 cm^{-1} (Pavia et al., 2015). Uma característica importante dessa função orgânica é que o aumento da concentração do álcool faz com que o sinal na região de 3200-3700 cm^{-1} apresente-se como uma banda larga e intensa (Silverstein et al., 2007). A absorção do estiramento de C-H em alcanos ocorreu na região de 3000 - 2840 cm^{-1} . A absorção de C-H sp^3 sempre ocorre em frequências mais baixas que 3000 cm^{-1} (3000 - 2840 cm^{-1}) (Pavia et al., 2015). Adicionalmente, os respectivos picos de absorção detectados foram, um pico de banda larga na região de 3200 cm^{-1} (O-H), o pico

na região de 2979,703 cm^{-1} corresponde ao grupo alcanos (C-H), o pico 1637 cm^{-1} indica a presença do grupo carbonila (ésteres) (C=O), a sequência 1084,98 cm^{-1} e 1043,65 cm^{-1} indicam a presença de ésteres (C-O) e o último pico detectado na faixa de 877 cm^{-1} é característico do grupo aromáticos (=CH), portanto, indica a presença de compostos fenólicos.

Figura 8: Espectrogramas MIR obtidos das cachaças para identificação dos grupos funcionais.



Fonte: Elaboração própria, 2024

Tabela 8: Identificação dos grupos funcionais.

Tipo de vibração	Grupo funcional	Frequência (cm^{-1})	Pico
O-H	Álcoois	3771-3076	3291,812
C-H	Alcanos	3019-2961	2979,703
C=O	Grupo carbonila (ésteres)	1749-1576	1637,168
C-O	Ésteres	1114-1056	1084,894
C-O	Ésteres	1056-1000	1043,651

=C-H	Aromáticos	883-825	877,16
------	------------	---------	--------

Fonte: Adaptado (Pavia et al., 2015)

O grupo carbonila (C=O) é encontrado em aldeídos, cetonas, ácidos, ésteres, amidas, cloretos de ácidos e anidridos, ele apresenta uma absorção significativa entre 1820 e 1600cm⁻¹ devido à sua considerável alteração no momento de dipolo (Pavia et al., 2009)

Uma das propriedades mais definidas do espectro dos ésteres é estiramento C-O aparece como duas ou mais bandas, uma mais forte e mais larga do que a outra, ocorre na faixa de 1300 a 1000 cm⁻¹ (Silverstein et al., 2007). Em 600-900 cm⁻¹ houve uma banda larga de média intensidade característica de compostos aromáticos e resultante do movimento de deformação angular C-H sp³ fora do plano do anel aromático (Pavia et al., 2015).

4.4 Análise de Componente Principal (ACP)

Aplicou-se a ACP como uma técnica multivariada para resumir todas as correlações lineares em um CA loading plot (Figura 9A) (Tabela-9) e PCA score plot (Figura 9B). A PC1, PC2 e PC3 representaram 25,1%, 19,4% e 15,6% da variância, respectivamente o que totaliza 60,1 % da variabilidade total, a PCA discriminou as amostras revelando suas similaridades e diferenças. Ao analisar a PC1 separou as amostras C1, C2*, C3, C5*, C6, C7 e C8, que apresentaram maiores valores de Alcanos (CH), cobre (Cu), fenólicos totais (FT), Ésteres II (C-O), Ésteres III (C-O) e teor alcoólico (TA). Em contrapartida as amostras C9, C10, C11*, C12 e C13 que apresentaram maiores concentrações de ésteres totais (ET), acidez totais (AT), aldeídos totais (AL), e suas correlações positivas com os picos das bandas identificadas no espectrograma MIR incluindo Ésteres I (C=O), aromáticos (=CH) e Álcoois (OH). Por outro lado, a PC2 separou as amostras C1, C3, C4*, C6, C12 e C13 (que apresentaram maiores valores Álcoois (OH), AL, TA, FT, e suas correlações positivas com os picos das bandas identificadas no espectrograma MIR incluindo Ésteres II (C-O) e Ésteres III (C-O) das amostras C2*, C5*, C7, C8, C9, C10 e C11* (que apresentaram maiores valores Cu, ET, AT, e suas correlações positivas com os picos das bandas identificadas no espectrograma MIR incluindo Alcanos (CH), Ésteres I (C=O) e aromáticos (=CH)).

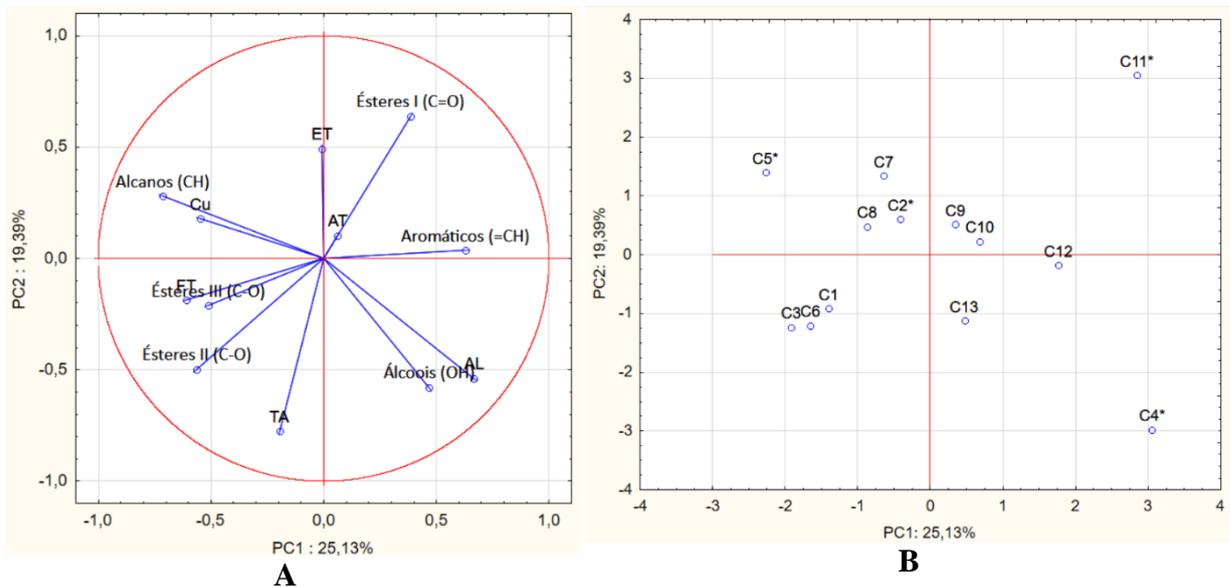


Figura 9: (A) ACP loading plot demonstrando as variações dos parâmetros físico-químicas da cachaça (incluindo AT – Acidez Total (mg/100mL), Ac. acético, TA – Teor Alcoólico (°GL - 20°C), Cobre - Cu (mgCu/L), ET - Ésteres Totais (mg Ac. Etila/100mL), Fenólicos Totais (mg Ac. Gálico/L), Aldeídos -AL (mg Aldeído acético/100mL)) e picos das banda identificados através do espectrograma do MIR (incluindo Álcoois (O-H), alcanos (C-H), ésteres I (C=O), ésteres II (C-O), ésteres III (C-O) e aromáticos (=CH)); e (B) APC score plot demonstrando as variações dos parâmetros físico-químicas da cachaça e picos das banda identificados através do espectrograma do MIR.

Fonte: Elaboração própria, 2024

Resultados revelam que os AL têm correção positiva com o grupo funcional expresso no espectrograma do MIR, portanto, em amostras de cachaça, aldeídos totais (AL) podem ser identificados pelo MIR usando a frequência do grupo funcional O-H (Figura 9A/Tabela 9). Fenólicos totais (FT) apresentaram correlação positiva com a frequência do grupo funcional ésteres III (C-O) e correção negativa com a frequência do grupo funcional aromáticos (=CH). Portanto, os fenólicos totais, em amostras de cachaça, podem ser identificados pela diminuição da frequência do grupo funcional aromáticos (=CH) ou pelo aumento da frequência do grupo funcional ésteres III (C-O) (Figura 9A/Tabela 9). Acidez total da cachaça tem correlação positiva com a frequência do grupo funcional ésteres I (C=O), logo, acidez total, em amostras de cachaça, pode ser identificada pelo aumento da frequência do grupo funcional ésteres I (C=O) (Figura 9A/Tabela 9). Os teores de cobre têm correlação positiva com a frequência do grupo funcional alcanos (CH); portanto, cobre pode ser identificado utilizando MIR pelo aumento da frequência do grupo funcional CH (Figura 9A/Tabela 9).

Tabela 9: Matriz de correlação (Pearson (n)) entre 12 parâmetros obtidos de 13 cachaças.

Variáveis	AT	TA	ET	FT	AL	Cu	OH	CH	C=O	C-O	C-O	=CH
AT	1,00											
TA	-0,11	1,00										
ET	0,49	-0,48	1,00									
FT	-0,01	0,21	0,07	1,00								
AL	0,04	0,25	-0,13	-0,04	1,00							
Cu	-0,25	0,23	0,04	0,62	-0,21	1,00						
OH	0,06	0,22	-0,06	-0,02	0,55	-0,45	1,00					
CH	0,09	-0,20	0,02	0,36	-0,77	0,26	-0,22	1,00				
C=C	-0,29	-0,45	-0,01	-0,15	0,01	0,27	-0,20	-0,08	1,00			
C-O	-0,20	0,19	-0,39	0,33	-0,11	0,03	0,06	0,43	-0,55	1,00		
C-O	0,19	0,36	0,27	0,48	-0,15	0,31	-0,01	0,24	-0,35	0,10	1,00	
=CH	0,10	-0,13	-0,04	-0,11	0,48	-0,08	0,47	-0,18	0,49	-0,42	-0,06	1,00

Acidez Total/AT (mg/100mL); Teor Alcoólico/TA (v/v %); Ésteres Totais/ ET (mg/100mL); Fenólicos Totais/ FT (mg/100mL); Aldeídos Totais (AL) (mg/100mL); Cobre/Cu (mg/100mL); Álcoois (OH); Alcanos (C-H); Ésteres I (C=O); Ésteres II (C-O); Ésteres III (C-O) e aromáticos (=CH).

Fonte: Elaboração própria, 2024

A cor da cachaça é um indicador crítico para a indústria, refletindo a qualidade, o processo de envelhecimento e as escolhas feitas durante a produção. A variação da cor resulta de uma combinação de fatores, como o tipo de madeira dos barris, tipo de tosta da madeira, o tempo de maturação e as condições de armazenamento (Castro, 2020). Na produção da cachaça, a relação entre a cor e os compostos fenólicos é essencial para garantir um produto de alta qualidade que atenda às expectativas dos consumidores. Os compostos fenólicos desempenham um papel fundamental na determinação da cor da cachaça, durante o processo de envelhecimento, a madeira dos barris libera uma variedade de compostos fenólicos derivados da lignina que são dissolvidos na cachaça, contribuindo para sua cor, sabor e aroma (Santana, 2014). Na indústria, o tipo de madeira utilizado para os barris, bem como sua capacidade e tempo de uso, tem impacto direto sobre a cor do produto final (Miranda, 2005). Os fenólicos são uma classe ampla de compostos químicos que podem ser divididos em várias categorias; porém, podemos destacar ácidos fenólicos, flavonoides, taninos e aldeídos fenólicos (Santana, 2014). Os ácidos fenólicos e aldeídos fenólicos não influenciam na cor, exceto quando interagem com outros compostos formando complexos. Por outro lado, flavonoides, taninos têm uma influência mais significativa na cor, frequentemente associados a tons mais escuros, como âmbar ou caramelo (Santana, 2014). Além da cor e composição de

fenólicos, cachaça tem alguns outros parâmetros que determinam sua qualidade e sua conformidade incluindo graduação alcoólica, densidade, pH, acidez, ésteres totais, aldeídos totais e concentração de cobre (Pinheiro, 2010). Estes parâmetros influenciam em atributos sensoriais incluem aroma, sabor, cor, corpo e sensação ao paladar. A graduação alcoólica da cachaça é um parâmetro essencial para classificar o produto, a legislação brasileira (Portaria nº 539 de 22/12/2022) exige que a graduação alcoólica da cachaça esteja de 38 a 48 °GL. Resultados mostram que as amostras C1, C3, C4* e C6 contém graduação alcoólica em média 44,8 °GL (% v/v), podendo ser, sensorialmente, percebida como mais "forte" ou "intensa". Por outro lado, amostras C5*, C7, C8, C9, C10, C11* e C12 contém teor alcoólico em média de 42,8 °GL (% v/v), que podem ser consideradas mais "suave".

O pH da cachaça é um fator que influencia tanto as propriedades químicas quanto as sensoriais. O pH mais baixo pode indicar maior acidez, o que pode resultar em um sabor mais azedo ou uma sensação de ardência na garganta (Cherubin, 1998). As amostras analisadas variaram em pH, com C6 apresentando o valor mais alto (5,33), sugerindo uma sensação mais suave, enquanto C5* apresentou o pH mais baixo (3,79), indicando maior acidez. O controle do pH é crucial, pois influencia na qualidade do produto e evitar problemas de acidez excessiva, que podem indicar processos de fermentação ou destilação inadequados (Silva-Filho et al., 2005; Basso e Amorim, 1995; Novaes et al., 1974). A acidez total também é um parâmetro de qualidade importante. Valores mais altos podem sugerir fermentação mal conduzida ou presença de bactérias acéticas, enquanto níveis mais baixos podem indicar uma cachaça bem envelhecida (Miranda, 2005). A amostra C3, com 233,85 mg/100mL de acidez total, destaca-se por seu alto nível de acidez, resultante do uso de barris de umburana durante o descanso ou envelhecimento. Altos níveis de acidez podem resultar em um sabor mais picante, enquanto baixos níveis indicam uma cachaça mais suave, equilibrada e agradável (Pinheiro, 2010). A acidez total elevada pode ser percebida como um defeito pelo consumidor, sugerindo processos fermentativos mal conduzidos.

Os ésteres são compostos aromáticos que contribuem para o aroma da cachaça. Níveis elevados de ésteres podem conferir um aroma frutado ou floral (Maia, 1994). Porém, o excesso de ésteres pode levar a aromas e sabores indesejados, afetando negativamente a experiência sensorial do consumidor (Miranda, 2005). A amostra C5* apresentou concentrações muito altas de ésteres totais (266,47 mg/100mL), que podem acarretar em aromas desagradáveis e sugere possível necessidade de separação da fração cabeça durante a destilação. Os níveis de aldeídos devem ser monitorados para evitar concentrações excessivas,

que podem indicar problemas de fermentação ou envelhecimento (Pinheiro, 2010). Considerando que os aldeídos são formados durante a fermentação e podem aumentar durante o descanso ou envelhecimento devido à oxidação do etanol (Santana, 2014). As amostras de cachaça cristal apresentaram concentração de aldeído de 15,4 a 42,6 mg/100 mL de álcool anidro, as amostras de cachaça descansada apresentaram concentração de aldeído de 15,3 a 25,9 mg/100 mL de álcool anidro, e as amostras de cachaça envelhecidas apresentaram concentração de aldeído de 19,14 a 31,7 mg/100 mL de álcool anidro. Estes resultados revelam que as amostras C4* (42,6 mg/100mL) e C13 (31,31,7 mg/100mL) apresentaram concentração de aldeídos acima dos valores recomendados pela legislação vigente (30 mg/100 mL de álcool anidro) (Brasil, 2022). Adicionalmente, indicam que estas cachaças precisam de um melhor controle de fermentação e envelhecimento. A presença de cobre na cachaça é uma preocupação industrial importante, pois altas concentrações indicam problemas de higiene nos equipamentos de destilação (Sanatana, 2014). Todas as amostras analisadas estavam dentro do limite de cobre (< 5 mg/L), isso indica que as produções das cachaças avaliadas tomam as devidas ações de higiene e manutenção do alambique. Para o consumidor, a percepção de sabores metálico ou amargo que pode ser um grande fator de rejeição do produto, além de serem prejudiciais à saúde.

A espectroscopia de infravermelho médio (MIR) oferece uma ferramenta valiosa para controle de qualidade e padronização de produtos. A detecção de bandas específicas nos espectros MIR permite a confirmação da presença de compostos esperados e a identificação de potenciais contaminantes ou adulterações. No nosso estudo, 13 amostras de cachaça analisadas e os espectros foram identificados na região de 4000 a 650 cm^{-1} (Figura 8). A similaridade entre os espectros sugere que as cachaças têm uma composição química consistente em termos de grupos funcionais principais. Os espectros MIR revelaram bandas de absorção que correspondem a álcoois, alcanos, ésteres e compostos aromáticos. A banda larga na região de 3400 a 3300 cm^{-1} está associada ao estiramento O-H, indicando a presença de álcoois e de água, característica crucial para a cachaça (Pavia et al., 2015). O aumento da concentração de álcool é representado por uma banda larga e intensa entre 3200 e 3700 cm^{-1} (Pavia et al., 2015). A absorção de C-H em alcanos ocorre na região de 3000 a 2840 cm^{-1} , sendo a absorção C-H sp^3 sempre em frequências mais baixas que 3000 cm^{-1} (Pavia et al., 2015). Essa distinção é útil para diferenciar entre diferentes tipos de ligações e suas respectivas composições. Os picos em 1637 cm^{-1} , $1084,98$ cm^{-1} e $1043,65$ cm^{-1} indicam a presença de ésteres, um importante componente para o aroma da cachaça. Finalmente, o pico

em 877 cm^{-1} , característico de compostos aromáticos, sugere a presença de grupos fenólicos, que são cruciais para a coloração e características sensoriais da cachaça. Em uma perspectiva industrial, a identificação de álcoois e ésteres é especialmente importante para a produção de cachaça, pois esses compostos são fundamentais para o sabor e o aroma da bebida (Miranda, 2005). A presença de compostos fenólicos pode indicar alterações na qualidade devido ao envelhecimento ou armazenamento inadequado (Castro, 2020). Adicionalmente, os picos de absorção nos espectros podem ser usados para estabelecer padrões de qualidade, garantindo consistência entre lotes de produção. Além disso, a capacidade de identificar grupos funcionais específicos ajuda a indústria a monitorar e corrigir desvios durante a destilação, armazenamento ou envelhecimento. A tecnologia MIR pode vir a auxiliar no controle de qualidade, padronização, conformidade com regulamentações e identificação de adulterações. A utilização de análise multivariada, análise de componente principal (ACP), para identificar similaridades e diferenças entre as cachaças mostraram-se efetiva. Portanto, faz-se possível utilizar dados do MIR, com análise multivariada, para identificar conformidade com regulamentações e adulterações da cachaça, assim como, qualidade e padronização do produto cachaça. A produção de cachaça é um campo complexo que requer uma abordagem multidisciplinar para garantir a qualidade e a segurança do produto final. Podemos destacar a importância dos parâmetros físico-químicos que influenciam na qualidade sensorial. Para a indústria, a aplicação de ACP e MIR é fundamental para garantir a consistência e a conformidade com padrões regulamentares devido a facilitação do controle de qualidade, padronização e análises de riscos do produto. Embora este estudo apresente dados úteis e promissores, futuros estudos são necessários para aumentar o banco de dados e tornar as avaliações multivariadas mais robustas. Adicionalmente, outros estudos também se fazem necessários incluindo 1) Desenvolvimento de Protocolos de Envelhecimento, 2) Aplicação de técnicas como MIR para otimizar processos de produção, como destilação e envelhecimento, e 3) correlacionar dados do MIR com dados sensoriais.

6 CONCLUSÃO

A aplicação da tecnologia MIR e da ACP na análise de cachaça forneceu uma abordagem abrangente para controle de qualidade, identificação de padrões discriminatórios e detecção de adulterações. Foram possíveis identificar a frequências dos grupos funcionais e correlaciona-los com os parâmetros de qualidade. A tecnologia MIR com análise multivariada pode ser aplicada para controle de qualidade e padronização de produtos. A detecção de bandas específicas nos espectros MIR permite a confirmação da presença de compostos esperados e a identificação de potenciais contaminantes ou adulterações. As cachaças que apresentaram maior intensidade de cor C7 (jaqueira) e C13 (blend de cinco madeiras), sendo descritas como cor "castanho escuro". As amostras C3 (umburana), C10 (bálsamo) e C12 (blend de madeiras) foram descritas com cor "caramelo". Por outro lado, as cachaças com menor intensidade de cor ($CC < 1$) são as cachaças cristais C2*, C4*, C5* e C11*. As cachaças C1, C6 e C9 foram descritas como "amarelo-pálido", "amarelo-palha" e "dourado". As cachaças C3, C7, C5* e C4* se destacam por apresentar maiores concentrações em diversos atributos, indicando maior complexidade. A cachaça C3 é a que mais se destaca apresentando acidez total (233,85 mg/100mL), acidez volátil (233,59 mg/100mL), fenólicos totais (232,97 mg/100mL), e cobre (2,71 mg/100mL). A cachaça C7 é descrita com cor "castanho escuro". A cachaça C5* teve a maior concentração de ésteres totais (266,47 mg/100mL). A cachaça C4* apresentou a maior concentração de aldeídos totais (42,60 mg/100mL). As cachaças C11*, C2*, C1, C8 e C6 são aquelas que apresentaram as menores concentrações entre todos os parâmetros avaliados. A cachaça C11* é uma cachaça cristal que apresentou a menor concentração de fenólicos totais (7,78 mg/100mL), indicando um baixo tempo de interação com a madeira durante o armazenamento ou uso de madeiras neutras. A amostra C2* apresentou baixa concentração de diversos parâmetros, mas se destacou devido à menor concentração de extrato seco (11,8 mg/100mL), indicando uma quantidade reduzida de compostos não voláteis. A cachaça C1 foi uma das que apresentou menor concentração de acidez fixa (6,15 mg/100mL) e de aldeídos totais (15,33 mg/100mL), indicando uma boa condução da fermentação e destilação, e menor oxidação armazenamento. A cachaça C8 apresentou baixa concentração de acidez fixa (6,15 mg/100mL) e não apresentou presença detectável de cobre. A cachaça C6 apresentou a menor concentração de acidez total (45,41 mg/100mL), acidez volátil (38,93 mg/100mL) e ésteres totais (112,35 mg/100mL), indicando produto mais neutro. Todos os resultados encontrados são relevantes, e promissores para a indústria de cachaça.

REFERÊNCIAS

- ACHILIAS, D. S.; IOANNIDOUA, M. D.; SAMOURISA, G. Acetaldehyde contamination of water, alcoholic, and non-alcoholic beverages stored in glass or plastic bottles. **Toxicological & Environmental Chemistry**, v.98, n. 10, p. 1183-1190, dez. 2015.
- ATTIA, A.; ESSAM ELDIN, I. Organizational learning, knowledge management capability and supply chain management practices in the Saudi food industry. **Journal of Knowledge Management**, v.22, n. 6, p. 1217, 2018.
- BASSO, L. C; AMORIM, H. V. Estudo comparativo de leveduras isoladas de processo industrial. **Relatório Anual de Pesquisa em Fermentação Alcoólica**, Piracicaba, ESALQ, USP, n. 15, p. 51-106, 1995.
- BERNARDES, C. D. **Métodos Analíticos para Cachaças Utilizando Técnicas Espectrométricas, Cromatográficas e Quimiométricas**. Tese (Doutorado) - Curso de Química, Departamento de Química do Instituto de Ciências Exatas, Universidade Federal de Minas Gerais, Belo Horizonte, 2015.
- BOGUSZ JUNIOR, S.; KETZER, D. C. M.; GUBERT, R.; ANDRADES, L.; GOBO, A. B. Composição química da cachaça produzida na região noroeste do rio grande do sul, Brasil. **Ciênc. Tecnol. Aliment.**, Campinas, 26(4): 793-798, out.-dez. 2006.
- BORGES, G. da S. *et al.* Caracterização química e físico-química de cachaças produzidas em alambique e coluna. **Química Nova**, v. 39, n. 10, p. 1218-1224, 2016.
- BORTOLETTO, A. M. **Influência da Madeira na qualidade química e sensorial da aguardente de cana envelhecida**. Tese (Doutorado) - Curso de Ciências e Tecnologia de Alimentos, Universidade de São Paulo - Escola Superior de Agricultura "Luiz de Queiroz", Piracicaba, 2016.
- BOZA, Y.; HORII, J. Influência do grau alcoólico e da acidez do destilado sobre o teor de cobre na aguardente. **Ciência e Tecnologia de Alimentos**, Campinas, v. 20, n. 3, p.279-284, 2000.
- BRAGA, E. C. **Apostila de Aulas Práticas**. Universidade de São Paulo. Faculdade de Ciências Farmacêuticas de Ribeirão preto. Departamento de Física e Química. São Paulo, 2009.

BRASIL. Decreto nº 6.871, de 4 de junho de 2009. Regulamenta a Lei nº 9.972, de 25 de maio de 2000, que institui a padronização, a classificação, o registro, a inspeção, a produção e a fiscalização de bebidas. **Diário Oficial da União**, Brasília, DF, 5 jun. 2009.

BRASIL. Ministério da Agricultura, Pecuária e Abastecimento. Portaria MAPA nº 539, de 26 de dezembro de 2022. Estabelece os Padrões de identidade e Qualidade da aguardente de cana e da cachaça. **Diário Oficial da União**, Brasília, DF, 27 dez. 2022. Seção 1, p. 13.

BRASIL. Ministério da Agricultura, Pecuária e Abastecimento; Instrução Normativa Nº 13, de 29 de junho de 2005, **Diário Oficial da União**, Brasília, DF, 30, Jun. 2005.

BRASIL. Ministério da Agricultura. Portaria nº 76 de 26 de novembro de 1986. Dispõe sobre os métodos analíticos de bebidas e vinagre. **Diário Oficial da República Federativa do Brasil**, Brasília, 28 nov. 1986. Seção 1, pt. 2.

BURDOCK, G. A. **Fenaroli's Handbook of Flavor Ingredients**. 4ed. CRC Press. 2003.

CAMPOS, J. O. S. **Emprego de extratos aromáticos de madeiras regionais como agentes de envelhecimento acelerado de aguardentes**. Dissertação (Mestrado em Tecnologia de Alimentos) - Universidade Federal do Ceará, Departamento de Tecnologia de Alimentos, Fortaleza, 2000.

CAMPOS, J. O. S.; AQUINO, F. W. B.; NASCIMENTO, R. F.; COSTA, J. G. M.; KEUKELEIRE, D. D.; CASIMIRO, A. R. S. Influence and effect of thermal treatment in elaboration of regional wood extracts for cachaça. **Journal of Food Composition and Analysis**, Grangues, v. 17, p. 179-185, 2004.

CARDOSO, M. das G. Análises físico-químicas de aguardente. **Produção de aguardente de cana-de-açúcar**. Lavras: Editora UFLA. cap. 5. p.152-173, 2001.

CARDOSO, M. G. Análise físico-químicas de aguardente. **Produção de aguardente de cana**, 2. ed. Lavras: UFLA, 2006.

CASTRO, M. C. **Caracterização química e sensorial do grau de maturação de cachaça envelhecida em tonéis novos de carvalho: avaliação dos compostos fenólicos marcadores de envelhecimento**. Dissertação (Mestrado) - Curso de Ciência e Tecnologia de Alimentos, Universidade de São Paulo - Escola Superior de Agricultura "Luiz de Queiroz", Piracicaba, 2020.

CATÃO, C. G.; PAES, J. B.; GOMES, J. P.; ARAÚJO, G. T. Qualidade da madeira de cinco espécies florestais para o envelhecimento da cachaça. **Revista Brasileira de Engenharia Agrícola e Ambiental**, v. 15, n. 7, p. 741–747, 1 jul. 2011.

CECCHI, H. M. **Fundamentos teóricos e práticos em análise de alimentos**. Campinas: Editora da Unicamp, p. 15-17, 2003.

CHERUBIN, R. A. **Efeitos da adição de benzoato de sódio na fermentação alcoólica para produção de aguardente de cana-de-açúcar (*Saccharum spp*)**. Dissertação (Mestrado em Ciência e Tecnologia de Alimentos) - Escola Superior de Agricultura "Luiz de Queiroz", Universidade de São Paulo, Piracicaba, 1998.

CORREIA, P. R. M; FERREIRA, M. M. C. Reconhecimento de padrões por métodos não supervisionados: explorando procedimentos quimiométricos para tratamento de dados analíticos. **Química Nova**, v. 30, n. 2, p. 481, 2007.

CUNHA, S. C. da *et al.* Characterization of aging markers in sugar cane spirits by HS-SPME/GC-MS and spectral data fusion. **Food Chemistry**, v. 310, p. 125924, 2020.

DA CACHAÇA, M. **As cores da cachaça**. **Mapa da Cachaça**, 10 dez. 2019. Disponível em: <<https://mapadacachaca.com.br/artigos/as-cores-da-cachaca-2/>>. Acesso em: 30 abr. 2024.

DEBEBE, A. *et al.* (2016): Alcohol Determination in Distilled Alcoholic Beverages by Liquid Phase Fourier Transform Mid-Infrared and Near-Infrared Spectrophotometries, **Food Analytical Methods**, DOI: 10.1007/s12161-016-0566-7.

DIAS, S.; MAIA, A.; NELSON, D. **Efeito de diferentes madeiras sobre a composição da aguardente de cana envelhecida**. *Food Sci Technol*. [Internet], v. 18, n. 3, p. 331–4, ago. 1998.

FARIA, J. B. **O defeito sensorial das aguardentes de cana destiladas na ausência de cobre**. *Aroma e sabor de alimentos*. São Paulo: Varela, 2003.

FARIA, J. B.; CARDELLO, H. M.A. B.; BOSCOLO, M.; ISIQUE, W. D.; ODELLO, L.; FRANCO, D. W. Evaluation of Brazilian woods as an alternative to oak for cachaças aging. **European Food Research and Technology**, Heidelberg, v. 218, p. 83-87, 2003.

FARIAS, T. F. A. *et al.* **Sustainability in artisanal sugarcane brandy production: A case study in Areia, Paraíba state, Brazil**. **Renewable and Sustainable Energy Reviews**, v. 43, p. 29-39, 2015.

FEIJÓ, A.; MACIEL, E. **Cachaça artesanal: do alambique à mesa**. Rio de Janeiro: Senac, 2002.

FERREIRA, M. M. C.; ANTUNES, A. M.; MELGO, M. S.; Volpe, P. L. O. Quimiometria I: calibração multivariada, uma tutoria. **Quim. Nova**, v. 22, p. 724-731, 1999.

FERREIRA, R. J; **Determinação simultânea de metais em cachaças utilizando a voltametria de redissolução com eletrodos de nanotubo de carbono e calibração multivariada**. 2015. 127 f. Dissertação (Mestrado em Química) – Universidade Federal do Espírito Santo, Centro de Ciências Exatas, Vitória, 2015.

FIGUEIRA, L. C. **Espectroscopia vibracional (no infravermelho e raman) e Espectrofotometria de absorção uv-vis dos óleos de buriti (*mauritia flexuosa*) e de patauá (*oenocarpus bataua*)**. Dissertação (Mestrado em Recursos Naturais da Amazônia) - Universidade Federal do Oeste do Pará, Santarém, 2012.

FRANCO, D. W. et al. Destilados e o processo de destilação. **Química Nova**, v. 42, n. 3, p. 347-356, 2019.

GARBIN, Renata; BOGUSZ JUNIOR, Stanislaw; MONTANO, Marco Aurélio. Níveis de cobre em amostras de cachaça produzidas na região noroeste do Rio Grande do Sul, Brasil. **Ciência Rural**, Ijuí, Rs, v. 35, n. 6, p. 1-5, 15 jun. 2005.

GELADI, P. Chemometrics in spectroscopy. Part 1. Classical chemometrics. **Spectrochimica Acta Part B**, n. 54, p. 767-782, 2003.

GERK, Andréia *et. al.* **200 anos _ 200 cachaças: a evolução da cachaça, da independência até os dias de hoje, contada em 200 rótulos**. Ed: PCN Comunicação, Campinas - SP, 2022.

GONÇALVES, L. M. *et al.* Application of FT-MIR spectroscopy for quality control of Brazilian cachaça: Quantification of ethyl carbamate and other chemical compounds. **Food Chemistry**, v. 277, p. 63-71, 2019.

HUCK, C. W. **Advances of infrared spectroscopy in natural product research**. **Phytochemistry Letters**, v. 11, p. 384-393, 2015.

INSTITUTO BRASILEIRO DA CACHAÇA. **Cachaças e madeiras**. Disponível em: < <https://ibrac.net/cachaca/3/cachaca-e-madeiras> >. Acesso em: 03 mai. 2024.

JANZANTTI, N. **Compostos Voláteis e Qualidade de Sabor da Cachaça**. Tese (Doutorado) - Curso de Engenharia de Alimentos, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, São Paulo, 2004.

Jl, Haining et al. Vanadium dioxide nanopowders with tunable emissivity for adaptive infrared camouflage in both thermal atmospheric windows. **Solar Energy Materials and Solar Cells**. v. 175, p. 96-101, 2018.

LIMA, U. A. Aguardentes. **Alimentos e bebidas produzidas por fermentação** (Série Biotecnologia). Edgard Blucher, v.5, cap. 4, São Paulo, p. 79-102, 1983.

LITCHEV, V. Influence of oxidation process on the development of the taste and flavor of wine distillates. **American Journal of Enology and Viticulture**, v.40, n.1, p.31- 35, 1989.

LUTZ, Instituto Adolfo. **Métodos físico-químicos para análise de alimentos**. São Paulo: ANVISA, 2008.

MAIA, A. B.; FERREIRA, J. M.; CORDEIRO, L. et al. **Tecnologia para produção de aguardente de qualidade**. Segundo curso de tecnologia para produção de aguardente de qualidade da Escola de Engenharia da UFMG e Fundação Cristiano Otoni, p. 65, 1994.

MAIA, A. B.; SILVA, J. M.; CORDEIRO, L. et al. Fermentação alcoólica semi-contínua destinada a produção de aguardente. Bol. Soc. Bras. **Ciênc. Tec. Alim.** Campinas. v. 25. n. 1. p. 33-36, 1991.

MARINHO, A. V.; RODRIGUES, J. P. de M.; SIQUEIRA, M. I. D. de. Avaliação da Acidez Volátil, Teor Alcoólico e de Cobre em Cachaças Artesanais. **Revista Estudos - Vida e Saúde (Ciências Ambientais e Saúde)**, Goiânia, Brasil, v. 36, n. 4, p. 785–793, 2009.

MATOSO, L. C. **Método crioscópico para quantificação de etanol em bebidas**. TCC (Graduação) - Curso de Tecnologia em Alimentos, Universidade Tecnológica Federal do Paraná, Campo Mourão, 2013.

MENDES, L. M.; MORI, F. A.; TRUGILHO, P. F. Potencial da madeira de agregar valor à cachaça de alambique. **Informe Agropecuário**, Belo Horizonte, v. 30, n. 248, p. 41-48, 2009.

MIRANDA, M. B. **Avaliação Físico-Química de Cachaças Comerciais e Estudo da Influência da Irradiação Sobre a Qualidade da Bebida em Tonéis de Carvalho**. Tese (Mestrado em Ciências e Tecnologia de alimentos) - Escola Superior de Agricultura "Luiz de Queiroz". Universidade de São Paulo, Piracicaba, 2005.

MIRANDA, M. R. A. et al. **Influence of the production area on the volatile compounds of cachaça.** *Ciência e Tecnologia de Alimentos*, v. 34, n. 2, p. 294-300, 2014.

NACZK, M.; SHAHIDI, F. Extraction and analysis of phenolics in food. **J Chromatogr A**, 1054 (1/2), p. 95-111, 2004.

NASCIMENTO, R. F.; CARDOSO, D. R.; LIMA NETO, B. S.; FRANCO, D. W.; FARIAS, J. B. Influência do material do alambique na composição química das aguardentes de cana-de-açúcar. **Química Nova**, v. 21, n. 6, p. 735-739, 1998.

NASCIMENTO, R. F.; MARQUES, J. C.; DE KEUKELEIRE, D.; LIMA NETO, B. S.; FRANCO, D. W. **Qualitative and quantitative high-performance liquid chromatographic analysis of aldehydes in Brazilian sugar cane spirits and other distilled alcoholic beverages.** *J. Chromatogr.*, v. 782, p. 13-23, 1997.

NAZEER, S. S. et al., Infrared spectroscopic imaging: Label-free biochemical analysis of stroma and tissue fibrosis. **Int J Biochem Cell Biol**, v. 92, p. 14-17, 2017.

NO, A. **Measurement of color, bitterness, and diacetyl content of beer using UV-Vis spectrophotometer.** Disponível em: <https://www.shimadzu.com/an/sites/shimadzu.com.an/files/pim/pim_document_file/applications/application_note/13131/jpa120020.pdf>. Acesso em: 15 maio. 2024.

NOBREGA, I. C. C. Análise dos compostos voláteis da aguardente de cana por concentração dinâmica do "headspace" e cromatografia gasosa- espectrometria de massas. **Ciência e Tecnologia de Alimentos**, v. 23, p. 210-216, 2003.

NOGUEIRA, A. M. P.; VENTURINI FILHO, Waldemar G. V. **Aguardente de cana. Botucatu: UNESP**, p. 71, 2005.

NOVAES, F. V.; STUPIELLO, J. P.; OLIVEIRA, E. R.; VALSECHI, O. I. **Curso de extensão em tecnologia de aguardente de cana.** ESALQ/USP - Departamento de Tecnologia Rural, Piracicaba. p.104, 1974.

NYKANEN, L. Formation and occurrence of flavour compounds in wine and distilled alcoholic beverages. **American Journal of Enology and Viticulture**, 1986, 37, 84.

NYKANEN, L.; SUOMALAINEN, H. **Aroma of beer, wine and distilled alcoholic beverages.** Berlin: Akaademic-Verlaga, p. 413, 1991.

NYKÄNEN, L; NYKÄNEN, I. Distilled Beverages. In: MAARSE, H. (Ed.). **Volatile Compounds in Foods and Beverages**. New York: Marcel Dekker. Cap. 15, p. 547-580, 1991.

PARAZZI, C.; ARTHUR, C. M.; LOPES, J. J. C.; BORGES, M. T. M. R. Avaliação e caracterização dos principais compostos químicos da aguardente de cana-de-açúcar envelhecida em tonéis de carvalho (*Quercus* sp.). **Food Science and Technology**, [S.l.], v. 28, n. 1, p. 193-199, jan. 2008.

PAVIA, D.; LAMPMAN, G. M.; KRIZ, G. S. **Introduction to Spectroscopy**. 4 ed. Brooks Cole, 2015.

PELEG H, BODINE KK, NOBLE AC. The influence of acid onadstringency of alum and phenolic compounds. **ChemSenses**, v.23, n. 3, p. 371-8, 1998.

PETROZZI, S. **Practical Instrumental Analysis: Methods, Quality Assurance and Laboratory Management**. 1 ed. **Weinheim: Wiley**, p. 492, 2012.

PIGGOTT, J. R.; HUNTER, E. A. Evaluation of assessor performance in sensory analysis. **Italian Journal of Food Science**, 11, p. 289-303, 1999.

PIGGOTT, J. R.; PATERSON, A. The contributions of the process to flavour in Scotch malt whisky. **Distilled beverage flavours: recent developments**. **New York: VCH**, p. 352, 1989.

PINHEIRO, S.H. de M. **Avaliação sensorial das bebidas aguardente de cana industrial e cachaça de alambique**. 2010. Tese. (Doutorado em ciência e tecnologia de Alimentos). Universidade Federal de Viçosa. Viçosa-MG.

PUECH J. L.; GOFFINET, B. Adjustment of nonlinear models for lignin and its degradation products during the aging of Armagnac. **J. Food Sci.**, v.52, p.1280-1282, 1987.

RAMAMURTHY, S. S.; KUMAR, M. A.; PATNAIK, S. G.; LAKSHMINARAYANAN, V. **Electrochemical Determination of Ethanol by a Palladium Modified Graphene Nanocomposite Glassy Carbon Electrode**, **Analytical Letters**, DOI: 10.1080/00032719.2016.1179746.

REAZIN, G. H. Chemical mechanisms In whiskey maturation. **American Journal of Enology and Viticulture**, v.32, n.4. p.283-289, 1981.

RIBEIRO FILHO, M. N. **Capítulo 13: Processamento De Cana-De-Açúcar Para Produção de Cachaça e de Etanol**. João Pessoa - PB, Editora UFPB, p. 168-180, 2020.

RIBEIRO, F. A. L.; BARBOZA, F. D.; BREITKREITZ, M. C.; MARTINS, J. A. Quimiometria: inovação no desenvolvimento e validação de métodos analíticos para controle de qualidade na indústria química. **Jornal do Conselho Regional de Química IV Região** Ano 16, nº 85, mai./jun. 2007.

RIBEIRO-FILHO, N.; LINFORTH, R.; POWELL, C. D.; FISK, I. D. Influence of essential inorganic elements on flavour formation during yeast fermentation. **Food Chem**, 361, 130025, 2021.

RUBIM, J. C. et al. Determination of ethanol in fuel ethanol and beverages by Fourier transform (FT)-near infrared and FT-Raman spectrometries. **Anal. Chim. Acta**, v. 493, p. 219-23, 2003.

SÁDECKÁ, J.; JAKUBÍKOVÁ, M.; MÁJEK, P.; KLEINOVÁ, A. Near-infrared spectroscopy for rapid classification of fruit spirits. **Journal of Food Science and Technology**, v. 53, n. 6, p. 2797-2803, mai. 2016.

SANTOS, L. M. et al. Multivariate determination of furfural and 5-hydroxymethylfurfural in cachaça using mid-infrared spectroscopy and partial least squares regression. **Food Chemistry**, v. 217, p. 432-437, 2017.

SARGETELLI, V.; MAURO, A. E.; MASSABNI, A. C. Aspectos do metabolismo do cobre no homem. **Química Nova**, Araraquara, v. 19, n. 3, p. 290-293, 1996.

SILVA, J. G. F. da. **Estudo comparativo do poder antioxidante em óleos vegetais**. TCC (Graduação) - Curso de Bacharel em Química, Universidade Federal do Rio Grande do Norte, Natal, 2023.

SILVA-FILHO, E. A.; SANTOS, S. K. B.; RESENDE, A. M.; MORAIS, J. O. F.; MORAIS, Jr. M. A.; SIMÕES, D. A. Yeast population dynamics on industrial fuel ethanol fermentation processes assessed by PCR fingerprinting. **Antonie Van Leeuwenhoek**, v.88, p.13-23, 2005.

SILVERSTEIN, R. M.; WEBSTER, F. X.; KIEMLMLE, D. J. **Identificação espectrométrica de compostos orgânicos**. LTC, 2007.

SILVERSTEIN, Robert M.; WEBSTER, Francis X.; KIEMLMLE, David J. **Identificação Espectrométrica de Compostos Orgânicos**. 7 ed. LTC, 2006.

SINGLETON, V. L. Maturation of wines and spirits: comparison, facts and hypotheses.

American Journal of Enology and Viticulture, v. 46, p. 98- 115, 1995.

SKOOG, D. A.; HOLLER, F. J.; CROUCH, S. R. **Principles of Instrumental Analysis**. 6 ed.

Belmont, CA: Thomson Brooks/Cole, p. 1016, 2007.

SKOOG, D. A.; WEST, D. M.; HOLLER, F. J.; CROUCH, S. R. **Fundamentos de Química**

Analítica. 8 ed. Belmont, CA: Thomson Brooks/Cole, p.1124, 2006.

SOUZA, M.D.C.A. **Identificação, quantificação e comparação das substâncias químicas responsáveis pelos aromas da cachaça de alambique e do rum comercial tratados pelo processo de irradiação**. Tese de doutorado (Ciências Tecnologia nuclear) - Instituto de

pesquisas energéticas e nucleares (IPEN). Autarquia associada à universidade de São Paulo. p.

137, 2006.

SUGAWARA, S. Obliterated-writing decipherment using an infrared hyperspectral imaging

system. **Forensic Chemistry**, v. 6, p. 44-51, 2017.

XIE, Xing et al. **Investigation of the relationship between infrared structure and**

pyrolysis reactivity of coals with different ranks. **Fuel**, v. 216, p. 521-530, 2018.

XIN, Hai-hui et al. Structural characteristics of coal functional groups using quantum

chemistry for quantification of infrared spectra. **Fuel Processing Technology**, v. 118, p. 287-

295, 2014.

ZENEON, O.; PASCUET, N. S.; TIGLEA, P. INSTITUTO ADOLFO LUTZ. Normas

Analíticas do Instituto Adolfo Lutz. v. 1: **Métodos químicos e físicos para análise de**

alimentos, 4. ed. 1ª Edição Digital. São Paulo: IMESP, p. 21, 2008.

ANEXOS

Figura S1 – Somatória da PCA

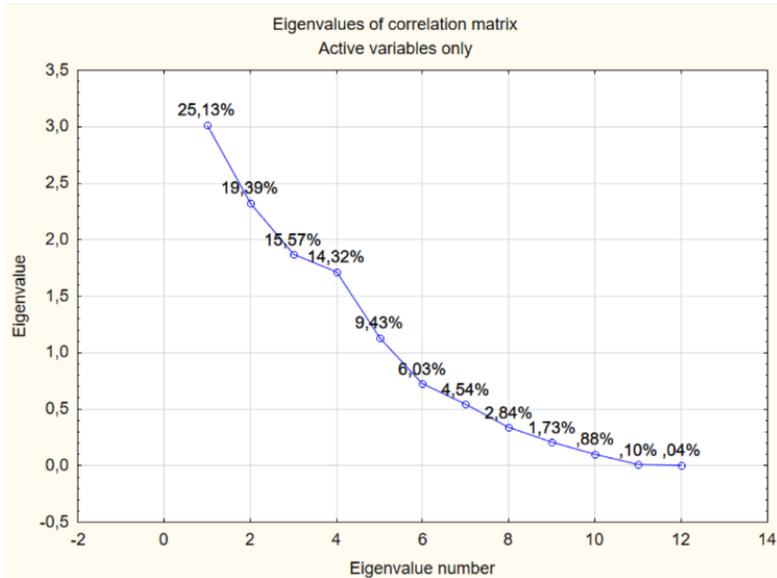


Figura S2– Correlação dos parâmetros na PC1, PC2* e PC3

Variable	Factor coordinates of the variables,		
	Factor 1	Factor 2	Factor 3
AT	0,06	0,10	-0,84
TA	-0,20	-0,78	0,10
ET	-0,01	0,49	-0,74
FT	-0,61	-0,19	-0,10
AL	0,67	-0,54	-0,05
Cu	-0,55	0,18	0,27
Álcoois (OH)	0,47	-0,58	-0,25
Alcanos (CH)	-0,72	0,28	-0,04
Aldeídos (C=C)	0,39	0,64	0,45
Ésteres I (C-O)	-0,56	-0,50	0,18
Ésteres II (C-O)	-0,51	-0,21	-0,48
Aromáticos (=CH)	0,63	0,04	-0,05