

PAMELA DEL CARMEN MANCHA AGRESTI

**DIFERENCIAÇÃO DE CAFÉS SADIO E
DEFEITUOSO PELO PERFIL CROMATOGRÁFICO
DE COMPOSTOS VOLÁTEIS**

**Faculdade de Farmácia da UFMG
Belo Horizonte
2006**

Livros Grátis

<http://www.livrosgratis.com.br>

Milhares de livros grátis para download.

PAMELA DEL CARMEN MANCHA AGRESTI

**DIFERENCIAÇÃO DE CAFÉS SADIO E
DEFEITUOSO PELO PERFIL CROMATOGRÁFICO
DE COMPOSTOS VOLÁTEIS**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Ciência de Alimentos da Faculdade de Farmácia da Universidade Federal de Minas Gerais, como requisito parcial à obtenção do título de Mestre em Ciência de Alimentos.

Orientadora: Profa. Adriana Silva França

**Faculdade de Farmácia da UFMG
Belo Horizonte
2006**

FOLHA DE APROVAÇÃO DADA PELA SECRETARIA

AGRADECIMENTOS

A Deus, por me ajudar a superar esta etapa na minha vida com muita integridade.

À minha família, Adrian e Victoria por me entender e ajudar a cada momento desta etapa cumprida.

À professora Adriana S. França pela sua orientação.

Aos meus amigos Edith e Cristian por me escutar, apoiar e me dar forças para o cumprimento desta etapa.

À minha amiga e vizinha Fabiana, que me recebeu no Brasil desde o primeiro dia com os braços abertos, com muito amor e carinho, e a toda sua família.

À Fernanda e Fabrício, meus amigos e vizinhos por gostar muito da Vi e de mim.

À minha amiga Claudia “carioca”, pela amizade e o companheirismo.

À Juliana, Marcelo e Gabriel, pela amizade e pelos bons momentos compartilhados.

Ao Dinardi, pela amizade e pela ajuda com o computador.

À minha amiga e professora de português, Juliana, quem me ensinou a falar e escrever o português, o que não é tarefa fácil.

Às professoras do Jardim Azul do Imaculada que me apoiaram e contribuíram na educação de minha florzinha, Victoria.

Ao professor Rodinei Augusti pelo profissionalismo, empréstimo do CG/MS, e por disponibilizar sua atenção sempre que precisei.

À Patrícia e Ilza, alunas do professor Rodinei Augusti, que tiveram a paciência e boa vontade de me socorrer com o massas quando foi necessário.

Ao Rafael, colega de mestrado, pela troca de idéias do trabalho, e sua ajuda com excel, mini tab, JMP, etc.

Ao professor David Lee Nelson que foi o primeiro em me abrir as portas de seu laboratório, quando eu ainda não era aluna da UFMG.

À todos os professores do curso de Mestrado em Ciências de Alimentos por contribuir na minha formação, dando o melhor deles: o seu conhecimento.

Aos participantes da banca examinadora pelas contribuições e idéias finais.

Obrigada a todos vocês que fizeram que minha passagem pelo Brasil tenha sido ótima, e que fique sempre, sempre no meu coração.

SUMÁRIO

LISTA DE TABELAS	6
LISTA DE FIGURAS	7
LISTA DE APÊNDICES	9
LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS	10
RESUMO	11
ABSTRACT	12
1 INTRODUÇÃO	13
2 REVISÃO DE LITERATURA	15
2.1 O CAFÉ	15
2.1.1 Biologia da planta de café	15
2.1.2 Importância Econômica	17
2.1.3 Colheita, beneficiamento e armazenamento	20
2.1.4 Classificação	23
2.1.4.1 Caracterização dos defeitos	25
2.1.5 Composição química dos grãos	27
2.1.6 Maturação e características físicas, físico-químicas e químicas do café	30
2.1.7 Polifenoloxidase e qualidade da bebida	31
2.1.8 O Processo de torração	33
2.1.8.1 Conseqüências da torrefação no grão de café	36
2.1.8.2 AVALIAÇÃO DO PERFIL DE COMPOSTOS VOLÁTEIS AO LONGO DA TORRAÇÃO	39
2.2 GRÃOS DEFEITUOSOS (PVA)	40
2.3 COMPOSTOS VOLÁTEIS DO CAFÉ	44
2.5 MICROEXTRAÇÃO EM FASE SÓLIDA (MEFS) (SPME)	56
2.6 CROMATOGRAFIA GASOSA ACOPLADA A ESPECTROMETRIA DE MASSAS	58
3 MATERIAL E MÉTODOS	61
3.1 MATERIAL	61
3.1.1 Amostras	61
3.1.2 Fibras de Micro extração em fase sólida (SPME)	61
3.1.3 Cromatografia Gasosa acoplada a Espectrometria de Massas	62
3.2 MÉTODOS	62

3.2.1	Caracterização da massa da mistura de PVA.....	62
3.2.2	Torração e acondicionamento de amostras	62
3.2.3	Perda de massa.....	63
3.2.3	Obtenção do Headspace	63
3.2.5	Análises cromatográficas.....	64
3.2.6	Análise estatística.....	65
4.1	AVALIAÇÃO COMPARATIVA DAS FIBRAS DE SPME	66
4.2	AVALIAÇÃO DOS COMPOSTOS VOLÁTEIS DURANTE A TORRAÇÃO	70
4.3	ESTUDO COMPARATIVO DO PERFIL DE COMPOSTOS VOLÁTEIS PARA GRÃOS SADIOS E DEFEITUOSOS	84
4.3.1	Grãos defeituosos e sadios submetidos às mesmas condições de	84
4.3.2	Grãos defeituosos e sadios submetidos a diferentes condições de torrefação.....	104
4.4	DIFERENCIAÇÃO DE GRAUS DE TORRAÇÃO E DE GRÃOS SADIOS E DEFEITUOSOS	115
5	CONCLUSÕES E SUGESTÕES	124

LISTA DE TABELAS

1 – Classificação das principais bebidas de café.....	24
2– Classificação do café por tipo.....	25
3 – Classificação do Café beneficiado, quanto à equivalência de defeitos (intrínsecos) e impurezas (extrínsecos).	27
4 – Composição do café cru das espécies arábica e robusta.	30
5 – Perda de massa (%) para diferentes graus de torrefação.....	36
6 – Composição química (% base seca) de grãos de café Arábica e Robusta após a torração.....	37
7 – Tipos mais comuns de imperfeições em grãos de café.....	42
8 – Resumo das interações presentes nas fibras de SPME	57
9 – Tendência dos compostos voláteis identificados em três ou mais tempos de torrefação	74
10 – Compostos que se apresentam em um ou dois tempos de torrefação avaliados.	79
11 – Grãos defeituosos e sadios submetidos às mesmas condições de torrefação (60 minutos).....	85
12 – Grãos defeituosos e sadios submetidos às mesmas condições de torrefação (120 minutos).....	92
13 – Compostos voláteis característicos de grãos pretos.....	100
14 – Compostos voláteis característicos de grãos verdes.....	101
15 – Compostos voláteis característicos de grãos ardidos.....	102
16 – Compostos voláteis identificados somente em grãos defeituosos em torrefação de 60 minutos.....	106
17 – Compostos voláteis identificados somente em grãos defeituosos em torrefação de 120 minutos.....	110
18 – Autovalores e proporção das cinco primeiras componentes principais.....	115
19 – Autovalores e Proporção das cinco primeiras componentes principais para amostras de cafés sadios e defeituosos.	119

LISTA DE FIGURAS

1 – Seção longitudinal de um café cereja (fruto).	16
2 – Grão de café arábica, vista interna.	16
3 – Produção de café safra 2006/2007.	18
4 – Evolução da produção brasileira.	19
5 – Comparação de grão cru e grão torrado.	34
6 – Evolução do perfil cromatográfico de gases de exaustão no processo de torração.....	40
7 – Estrutura de alguns compostos heterocíclicos encontrados no café torrado. ...	47
8 – Representação esquemática de uma seringa de SPME para análises de headspace.	56
9 – Caracterização em massa por defeito da mistura PVA.....	66
10 – Cromatograma obtido para análises de café comercial utilizando fibra PDMS.	67
11 – Cromatograma obtido para análises de café comercial utilizando fibra CAR/PDMS.	68
12 – Cromatograma obtido para análises de café comercial utilizando fibra PDMS/DVB.....	68
13 – Cromatograma obtido para análises de café comercial utilizando fibra DVB/CAR/PDMS.	69
14 – Comparação das fibras de SPME com base no número de compostos extraídos (RSI>700 com probabilidade >30 e RSI>800 com probabilidade>20).....	69
15 – Cromatograma obtido para o branco da fibra DVB/CAR/PDMS.	71
16 – Cromatograma obtido para análises do perfil de voláteis de café cru, fibra DVB/CAR/PDMS.	71
17 – Cromatograma obtido para análises do perfil de voláteis de café torrado a 200°C por 30 minutos, fibra DVB/CAR/PDMS.....	72
18 – Cromatograma obtido para análises do perfil de voláteis de café torrado a 200°C por 60 minutos, fibra DVB/CAR/PDMS.....	72
19 – Cromatograma obtido para análises do perfil de voláteis de café torrado a 200°C por 90 minutos, fibra DVB/CAR/PDMS.....	73
20 – Cromatograma obtido para análises do perfil de voláteis de café torrado a 200°C por 120 minutos, fibra DVB/CAR/PDMS.....	73
21 – Exemplos de espectros de compostos no café ardido e verde.	103

22 – Gráfico de perda de massa de café sadio e defeituoso. As linhas pontilhadas caracterizam o início da fase de pirólise, segundo CLARKE (1987).....	105
23 – Gráfico de Autovalores e número de componentes principais.....	115
24 – Gráfico de Score de Pontos do PCA para café sadio (1 e 2 se referem as réplicas de um dado ensaio).	116
25 – Loadings de cafés sadios em diferentes tempos de torrefação.	117
26 – Espectro de massas do composto que sai no tempo de retenção de 23,24 min.....	118
27 – Dendrograma de cafés sadios em diferentes tempos de torrefação.	119
28 – Gráfico de Autovalores e número de componentes principais.....	120
29 – Gráfico de Score de Pontos do PCA para café sadio e defeituoso.....	121
30 – Loadings de cafés sadios e defeituosos.....	122
31 – Espectro de massas do composto que sai no tempo de retenção de 4,20 min.....	122
32 – Dendrograma de cafés sadios e defeituosos.....	123

LISTA DE APÊNDICES

A – Análises de repetibilidade dos cromatogramas.....	132
B – Identificação dos compostos voláteis, fibra PDMS	134
C – Identificação dos compostos voláteis, fibra CAR/PDMS.....	139
D – Identificação dos compostos voláteis, fibra PDMS/DVB.....	145
E – Identificação dos compostos voláteis, fibra DVB/CAR/PDMS	153
F – Duplicata dos Cromatogramas	162
G – Identificação dos compostos voláteis, fibra DVB /CAR/PDMS (Café cru)	167
H – Identificação dos compostos voláteis, fibra DVB /CAR/PDMS (Café sadio 30min) ..	172
I – Identificação dos compostos voláteis, fibra DVB /CAR/PDMS (Café sadio 60min)	181
J – Identificação dos compostos voláteis, fibra DVB /CAR/PDMS (Café sadio 90min) ...	190
K – Identificação dos compostos voláteis, fibra DVB /CAR/PDMS (Café sadio 120min) .	199
L – Cromatogramas dos cafés defeituosos	207

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

5-ACQ : Ácido 5-Cafeiolquínico

CAR/PDMS : Carboxen/Polidimetilsiloxano

CG-MS : Cromatografia gasosa acoplada a espectrometria de massas

CONAB : Companhia Nacional de Abastecimento

DVB/CAR/PDMS : Divinilbenzeno/Carboxen/Polidimetilsiloxano

m/z: relação massa/carga dos íons

PDMS : Fibra de Polidimetilsiloxano

PDMS/DVB : Polidimetilsiloxano/Divinilbenzeno

SINDICAFÉ : Sindicato da Indústria de Café

SPME : micro-extracção em fase sólida

UFMG: Universidade Federal de Minas Gerais

RESUMO

O café torrado brasileiro é considerado de baixa qualidade, em função da presença de grãos defeituosos, que depreciam significativamente a qualidade sensorial da bebida. Tendo em vista o fato de que o sabor e aroma do café estão diretamente associados aos compostos voláteis produzidos durante a torrefação, o presente trabalho teve como objetivo a avaliação comparativa do perfil de voláteis de grãos defeituosos (pretos, verdes, ardidos) e sadios, de forma a identificar possíveis compostos e/ou grupos de compostos voláteis que possam ser utilizados como marcadores químicos para detecção de grãos defeituosos em café torrado. A extração e concentração dos voláteis foi realizada através da técnica de micro-extração em fase sólida e headspace (HS-SPME). Os resultados obtidos demonstram que a metodologia proposta foi adequada para a extração, concentração e análises do perfil de compostos voláteis do café. Foram avaliadas quatro fibras de SPME, sendo escolhida a fibra DVB/CAR/PDMS, por ter extraído um maior número de compostos voláteis. Foram identificados diversos compostos como possíveis diferenciadores de grãos de café pretos, ardidos e verdes em relação aos grãos de café sadios. A análise estatística dos resultados por componentes principais (PCA) demonstrou ser possível a separação dos cafés sadios segundo o grau de torração pelo perfil de compostos voláteis. Os cafés foram separados em dois grupos, o primeiro incluindo grãos crus e torrados por 30 minutos e o segundo incluindo os demais, demonstrando que o tempo de torração de 30 minutos acoplado a uma temperatura de 200°C não foram suficientes para caracterizar o café como torrado adequadamente para consumo. Com relação a comparação de cafés sadios e defeituosos observou-se uma separação em dois grupos, um contendo os defeitos verde e preto e o outro contendo os grãos sadios e ardidos. Estes resultados indicam que os grãos pretos e ardidos podem ser originários da fermentação dos grãos verdes e sadios, respectivamente.

Palavras chaves: café, grãos defeituosos, compostos voláteis, torrefação, aroma.

ABSTRACT

IDENTIFICATION AND DIFFERENTIATION OF VOLATILE COMPONENTS BY SPME COUPLED TO GC-MS IN HEALTHY AND DEFECTIVE COFFE BEANS SUBMITTED TO DIFFERENT ROASTING DEGREES. The coffee roasted in Brazil is considered to be of low quality, due to the presence of defective coffee beans that depreciate beverage quality. In view of the fact that coffee flavor is directly related to the volatile compounds produced during roasting, the objective of the present study was to perform a comparative evaluation of the volatiles profile of defective (black, immature, sour) and healthy coffee beans, in order to find possible chemical markers for identification of defective coffee beans in roasted coffee. Volatiles extraction and concentration was performed by SPME analysis of the roasted coffee headspace. The obtained results showed that the proposed methodology was adequate for extraction, concentration and analysis of coffee volatiles profile. Four SPME fibers were evaluated, with the one that extracted the highest amount of substances (DVB/CAR/PDMS) being selected. Several substances were identified as possible markers for separating black, sour and immature beans from healthy coffee beans. Statistical analysis of the data by principal components (PCA) showed that the volatile components profile provided separation of coffees according to roasting degree. Coffees were separated into two groups the first one including crude and coffee roasted for 30 minutes and the second including the remaining roasted coffees. Such results demonstrated that roasting for 30 min at 200° C was not enough to characterize roasted coffee flavor. Regarding the comparison between healthy and defective beans, the data were separated into two groups, one containing immature and black beans and the other containing healthy and sour coffee beans. Such results indicated that black and sour beans can be associated to fermentation of immature and healthy beans, respectively.

Key words: coffee, defective beans, volatiles profile, roasting, flavor.

1 INTRODUÇÃO

O café é tão complexo que apresenta classificação própria de sabor. O aroma do café é formado por uma mistura complexa de inúmeros compostos voláteis que apresentam qualidades de aroma, intensidades e concentrações diferentes. Cada um desses compostos contribui de maneira muito variada e podem ocorrer também interações sinérgicas e antagônicas entre eles (DE MARIA et al., 2000).

Minas Gerais destaca-se como o estado responsável por aproximadamente 50% da produção nacional, devido à amplitude de suas regiões produtoras e condições climáticas favoráveis ao cultivo do cafeeiro, com a conseqüente produção de cafés de boa qualidade (PEREIRA, 1997).

Os grãos de café crus não apresentam nem a cor nem o aroma do café torrado, ambos são formados durante o processo de torrefação. O aroma do café é gerado por uma complexa mistura de compostos voláteis, ao passo que os compostos não voláteis determinam a acidez, amargor e adstringência do café (BUFFO & CARDELLI-FREIRE, 2004).

A qualidade de um bom café é definida na lavoura. Não se acrescenta qualidade ao grão ruim, mas a falta de cuidado na colheita, processamento inadequado do fruto e falta de condições de armazenamento podem prejudicar as características de um grão que seria excelente. Essa perda de qualidade relaciona-se a modificações bioquímicas indesejáveis, que dão origem aos grãos defeituosos. Os principais tipos de grãos defeituosos são denominados “pretos”, “verdes” e “ardidos”, e prejudicam a aparência, cor e qualidade sensorial da bebida, ocasionando, assim, redução na cotação comercial do café (VASCONCELOS, 2005).

O defeito preto pode ser proveniente de grãos secos dentro da cereja (CLARKE, 1987) ou de grãos que caem no chão por ação da chuva ou porque estão muito maduros. Os grãos verdes são provenientes de frutos imaturos. Grãos ardidos podem ser decorrentes de fermentação que ocorre durante o processamento úmido (CLARKE, 1987), de secagem inadequada ou também de aproveitamento de cerejas muito maduras (SIVETZ & DESROSIER, 1979; FRANÇA et al., 2005 a).

Mesmo que os procedimentos de cultivo de pré e pós-colheita sejam adequados, não existe café sem a ocorrência de grãos defeituosos. A porcentagem de grãos defeituosos nos cafés produzidos em Minas Gerais é cerca de 20% do total produzido

(VASCONCELOS et al., 2007). É imprescindível ter conhecimentos da época adequada para se efetuar a colheita, além de uma secagem perfeita evitando processos fermentativos, dentre outros fatores, para a obtenção de um café com composição química adequada, menores modificações bioquímicas indesejáveis e detrimental à qualidade da bebida.

A matriz do café é extremamente complexa e a torração dá origem a uma grande quantidade de compostos voláteis responsáveis pelo sabor e aroma da bebida. Embora existam diversos estudos na literatura relativos à identificação e quantificação desses compostos voláteis (DE MARIA et al., 1999; DE MARIA et al., 2000), nenhum dos estudos verificou a existência de correlação entre o perfil de voláteis e a qualidade do café.

Tendo em vista a relação entre o teor e, perfil de compostos voláteis com o sabor e aroma da bebida, este trabalho teve como objetivo geral efetuar uma avaliação comparativa do perfil de compostos voláteis de cafés sadios e defeituosos, visando identificar possíveis compostos e/ou grupos de compostos voláteis que possam ser utilizados como marcadores químicos para detecção e quantificação de grãos defeituosos em café torrado e moído.

Os objetivos específicos do presente trabalho, que caracterizam as principais etapas de seu desenvolvimento foram:

- desenvolvimento e otimização de metodologia para obtenção de “headspace” de café torrado e moído;
- desenvolvimento e otimização de metodologia de concentração de “headspace” por micro-extração em fase sólida (SPME);
- desenvolvimento e otimização de metodologia de cromatografia gasosa acoplada a espectrometria de massas (GC-MS) para avaliação do perfil de compostos voláteis de café torrado e moído;
- avaliação do perfil de compostos voláteis de café torrado e moído comercial, utilizando diversas fibras de SPME, (PDMS, PDMS/DVB, CAR/PDMS e DVB/Carboxen/PDMS), visando determinar a fibra mais adequada para as análises; e
- avaliação do perfil de compostos voláteis de cafés sadios e defeituosos (preto, verde, ardido) em diversos graus de torração, visando a identificação de potenciais maçadores químicos para permitir a diferenciação de cafés torrados e moídos pelo teor de grãos defeituosos nos mesmos.

2 REVISÃO DE LITERATURA

2.1 O CAFÉ

2.1.1 Biologia da planta de café

Existem aproximadamente umas 60 espécies de café silvestre, sem interesse comercial. Pelo menos dez espécies são cultivadas para obtenção de seus grãos. As variedades cultivadas alcançam dentre três e cinco metros facilitando, assim, seu cuidado e manutenção. As variedades mais comercializadas são Robusta e Arábica. *Coffea robusta* é a variedade forte, amarga e perfumada. Possui maior conteúdo de cafeína. É mais resistente às pragas e, portanto, precisa de menores cuidados. Já a espécie *Coffea arábica* possui um aroma suave, e dela obtém-se uma bebida de maior qualidade, fina e requintada, entretanto, é facilmente afetada por pragas (SINDICAFÉ, 2005).

O cafeeiro é um arbusto da família das Rubiaceae e do gênero *Coffea*. A planta *coffea* é originária da Etiópia. O café é amplamente cultivado em países tropicais, tanto para consumo próprio como para exportações (SILVA, 1999). O cafeeiro possui seu melhor crescimento nos trópicos, em função das temperaturas entre 19 e 25°C, as quais geram um vigoroso arbusto ou árvore pequena que chega facilmente a uma altura de 3 - 3,5 m. O caule principal é ereto, e os ramos secundários partem do principal num ângulo aproximado de 90 graus. As folhas, opostas, onduladas nos bordos e de coloração verde-acinzentada quando jovens, encontram-se nestes ramos. As flores são brancas e perfumadas (SINDICAFÉ, 2005). Os frutos são ovóides, nascendo verdes e passando a vermelho, de acordo com as fases de maturação. A casca é lisa e brilhante, contendo geralmente duas sementes de coloração acinzentada, branco-amarelada ou amarelo-esverdeada, envoltas por polpa branca, adocicada, como pode ser observado na Figura 1.

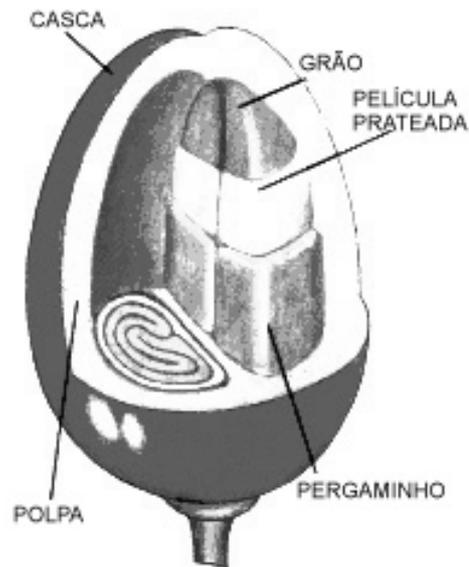


Figura 1 – Seção longitudinal de um café cereja (fruto).

Fonte: (www.nodo50.org/espanica)

O pericarpo ou casca é a membrana externa que cobre e protege a polpa. Em direção à semente, após a polpa, encontra-se o pergaminho (mesocarpo e endocarpo), e por último se encontra a película prateada, que antecede ao grão. A semente representa o grão de café cru (VIANI, 1986). Na Figura 2 observa-se a anatomia da parte interna do grão de café cru, espécie arábica.



Figura 2 – Grão de café arábica, vista interna.

Fonte: (http://.illy_Pt/Science)

2.1.2 Importância Econômica

O Brasil, além de ser o maior produtor, é um grande consumidor de café. O consumo interno brasileiro equipara-se à soma das exportações para os Estados Unidos, Alemanha, Itália, Japão e França. Entretanto, a qualidade do produto comercializado internamente não é padronizada. O selo de pureza instituído pela ABIC (Associação Brasileira da Indústria de Café) garante o café com até 1% de impurezas, previstas de acordo com a legislação, porém não há um controle efetivo sobre a qualidade do produto final (SINDICAFÉ, 2005).

O café é considerado uma das bebidas mais populares do mundo e proporciona renda média de oito bilhões de dólares ao ano aos países produtores (SILVA, 1999).

Do ponto de vista comercial, aproximadamente 70% do café tratado são do tipo arábica, e os 30% restante da produção comercial consiste em café tipo robusta (FERIA-MORALES, 2002). Isso é decorrente do fato de o café arábica possuir qualidades gustativas refinadas, dando origem a uma bebida de mais fina qualidade, e o robusta se caracterizar por uma bebida neutra, de qualidade inferior, que serve como um importante suporte para as ligas de café mais encorpados. Por se tratar de um produto mais barato, vem tendo aceitação no mercado mundial do café (SINDICAFÉ, 2005).

O Brasil e Colômbia são os principais países produtores de café de América do Sul, embora a cultura cafeeira seja distribuída em todos os continentes. A América do Sul é responsável por 80% da produção mundial (CONAB, 2006).

O maior produtor e exportador de café no mercado internacional tem sido o Brasil. Com uma exportação de 25,87 milhões de sacas (sacas de 60 kg de café cru) em 2005 o Brasil faturou 2,5 bilhões de dólares, o que representa 30,1% de todo o café cru exportado no mundo (ABIC, 2006). O segundo país em termos de exportação de café é o Vietnã, que responde por 15,53 % das exportações mundiais, seguido da Colômbia com 10,69% do mercado exportador (ABIC, 2006).

A estimativa da safra 2005/2006 proposta pela CONAB (2006) é de 32,9 milhões de sacas de café beneficiado no País, observando-se uma redução de 16,1% ou 6,21 milhões de sacas em relação à safra anterior. Esse decréscimo é devido, principalmente, ao ciclo de baixa bianualidade na maioria das regiões produtoras e de outros fatores como clima adverso e a menor utilização de adubos e defensivos, reflexo dos baixos preços no café em 2004. Já café robusta (conilon) com produção de 9,20 milhões de sacas, apresentou acréscimo sobre a safra anterior, de 21,7% ou de 1,64 milhões de

sacas. Acredita-se que se deve às condições climáticas favoráveis e às melhorias dos tratos culturais envolvendo as adubações, podas, desbrotos e controle fitossanitário no Espírito Santo, seu maior produtor (CONAB, 2006).

A previsão para a safra 2006/2007, feita pela CONAB (2006), é de 40,4 milhões de sacas, com uma porcentagem alta de 75%, para a produção de café arábica. Nos tempos atuais, o país que compra maior quantidade de café cru brasileiro é Alemanha, seguida dos Estados Unidos e Itália (CONAB, 2006).

Como pode ser observado na Figura 3, o estado de Minas Gerais é o maior produtor de café no país, com uma produção estimada entre 19.478 mil e 22.125 mil sacas de café beneficiado, representando uma porcentagem de aproximadamente 50,9 % da produção nacional (CONAB, 2006). Na mesma figura fica claro que o segundo estado em produção de café é o Estado de Espírito Santos com 21,7% , seguido pelos estados de São Paulo (10,8%), Bahia (5,4%), Paraná (5,3%), Rondônia (3,2%), e os demais estados (2,7%) (CONAB, 2006).

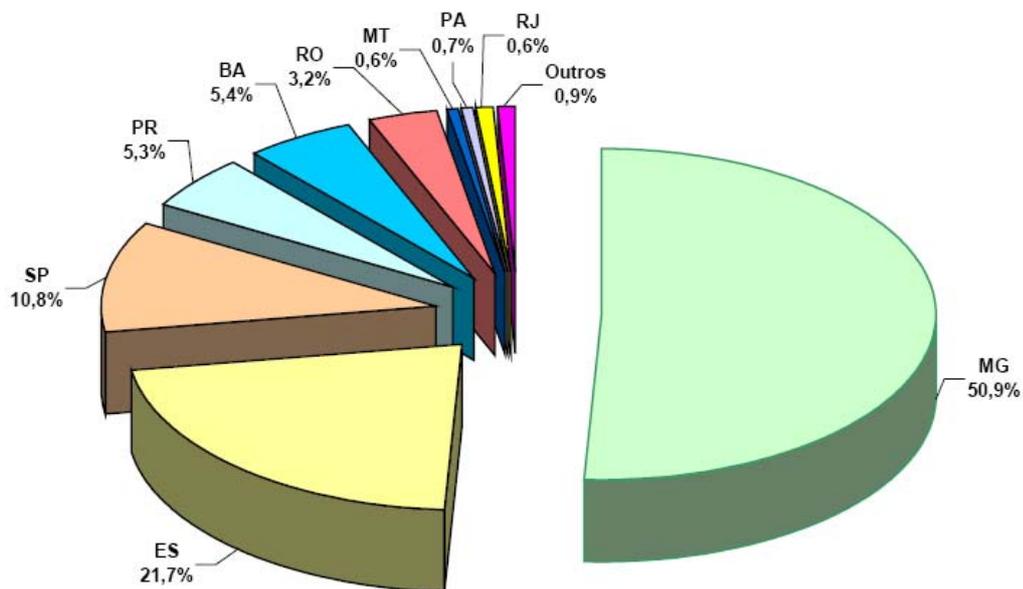


Figura 3 – Produção de café safra 2006/2007.

Fonte (CONAB, 2006)

Embora o Brasil ainda ocupe a posição de maior exportador de café mundial, as exportações têm diminuído ao longo dos anos. Em 1961 foi responsável por 37% das exportações mundiais, enquanto em 1995 só apresentou 20% dessas exportações. SILVA (1999) mostrou que a qualidade do café é um fator determinante do preço e fator imprescindível para a aceitação do café no comércio internacional. A falta de padrão de qualidade do produto nacional tem sido um dos fatores responsáveis pelo declínio da participação brasileira no mercado internacional.

O acréscimo na produção se respalda na bianualidade da cultura, na melhoria dos tratos culturais, podas, desbrotos, no controle fitossanitário, e nas condições climáticas favoráveis (CONAB 2006). Observa-se na Figura 4 a evolução da produção brasileira no transcorrer dos anos. Embora a safra 2006/2007 não seja tão promissora como a safra 2002/2003, supera as 40 milhões de sacas de 60 kg, sendo assim, a segunda melhor posicionada desde os anos 2000.

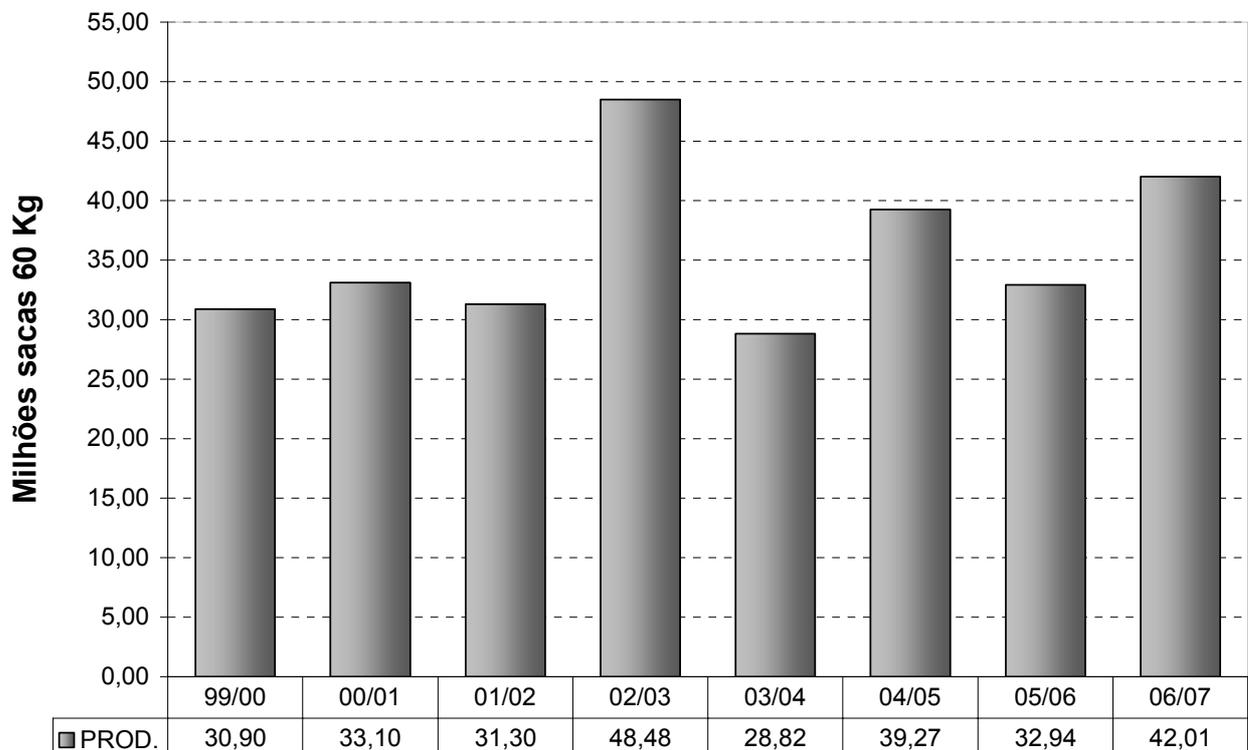


Figura 4 – Evolução da produção brasileira.

Fonte (CONAB, 2006)

O consumo interno tem apresentado taxas contínuas de crescimento. O consumidor esta cada vez mais exigente quanto à qualidade, existindo uma tendência cada vez maior de redução do mercado para cafés de baixa qualidade. Obriga-se, dessa forma, o produtor brasileiro a se especializar e adotar tecnologia moderna para produção de cafés de qualidade. Existem muitos fatores que determinam à qualidade final do produto, eles são: colheita e secagem dos frutos, processos de beneficiamento e rebeneficiamento (PIMENTA, 2001).

2.1.3 Colheita, beneficiamento e armazenamento

O café é um produto agrícola e, para que sejam preservadas suas qualidades, inclusive as organolépticas, precisa de um cuidado especial no seu preparo. Esse cuidado começa na escolha genética dos cultivares, junto a um sistema de manejo corretamente avaliado, e segue com uma colheita e preparo dos frutos bem conduzidos, secagem ideal e armazenamento racional. São esses fatores que propiciarão a tão desejada qualidade que traduzirá maior agregação de valor ao produto final (SINDICAFÉ, 2005).

O café é cultivado em mais de 50 países entre os dois paralelos tropicais. Dessa forma, as condições climáticas e geográficas variam muito de uma região para outra, exigindo a consideração de vários estilos diferentes de manejo (PETRACCO, 1999). A decisão de se plantar arábica ou robusta depende de condições climáticas, já que a primeira espécie possui faixa ideal de crescimento entre 19°C e 22°C enquanto a segunda cresce melhor em temperaturas entre 22°C e 26°C (SINDICAFÉ, 2005).

A colheita do café deve ser realizada sete meses após a floração, com as primeiras chuvas (setembro a novembro) que é quando aproximadamente 90% dos frutos estão maduros (SILVA, 1999). CARVALHO & CHALFOUN (1985) observaram que, o processo de maturação do café se inicia com o aumento da atividade respiratória da planta e com a síntese de etileno, acompanhado do metabolismo de açúcares e ácidos, degradação de clorofila e síntese de pigmentos responsáveis pela mudança de coloração da casca, partindo de verde para chegar a vermelho-cereja, além do decréscimo de adstringência e sínteses de compostos voláteis, como aldeídos, ésteres, cetonas e álcoois, que são os responsáveis do aroma do fruto maduro. Os frutos maduros, por possuírem teores ideais de constituintes químicos, responsáveis pelas características sensoriais desejáveis da bebida, determinam conseqüentemente a época adequada da colheita. No Brasil, o

processo de maturação se dá nas regiões mais quentes normalmente nos meses de março a abril, enquanto nas regiões mais frias ocorre nos meses de julho e agosto, sendo a colheita efetuada entre abril e setembro, podendo em algumas regiões estender-se até meados de dezembro (PEREIRA, 1997). É muito difícil obter uma colheita com maturação homogênea, já que em uma única lavoura de café podem ocorrer várias florações, às vezes numa mesma planta têm-se frutos em diferentes estádios de maturação, cor, estado de seca na árvore, densidade e teor de umidade, identificados como verdes, verde-cana, cereja, passa, bóia e coquinho. Segundo PIMENTA (2001), a proporção desses frutos varia durante toda a colheita, proporcionando no início maior quantidade de cerejas e verdes; no final da colheita, são maioria os frutos passa e bóia.

A colheita pode ser finalizada em poucas semanas ou em até três meses, dependendo das condições de floração, crescimento e maturação dos frutos, as quais dependem das condições climáticas da região. Estudos realizados por BÁRTHOLO et al., (1989) demonstram que uma colheita realizada antes da época é rica em grãos verdes, obtendo-se menor rendimento. Isso repercute em maiores gastos, além de alterar a qualidade da bebida. Também se sabe que haverá maior incidência de grãos defeituosos quanto maior o tempo de permanência do café na lavoura (árvore ou chão) após a maturação. É por isso que se recomenda que a colheita seja iniciada quando a maior porcentagem de frutos estiver madura (90%), e antes que se inicie a queda desses frutos (SILVA, 1999).

As melhores qualidades de bebida segundo o relatado por CLARKE (1987), são obtidas quando se processa o café cereja. Esse é o ponto ideal de maturação dos frutos, em que a casca, polpa e semente se encontram com composição química adequada, para proporcionar ao fruto seu máximo de qualidade. No estágio de maturação cereja, o café apresenta uma completa maturidade fisiológica que facilita a prática do despulpamento, eliminação da casca e mucilagem, reduzindo assim, as possibilidades de ocorrer fermentações e ofertando um produto de maior qualidade e, conseqüentemente maior rentabilidade (PIMENTA, 2001).

A derriça manual é a metodologia mais empregada na colheita de café no Brasil. Também existem a derriça a dedo e a colheita mecanizada. A derriça manual consiste no deslizamento da mão fechada ao longo do ramo, recolhendo todo tipo de fruto e evitando que as folhas sejam retiradas. Os frutos derriçados podem cair diretamente no chão ou também em panos colocados embaixo do cafeeiro, sendo o café derriçado no chão muito mais susceptível a riscos maiores por estarem em contato com o solo (BÁRTHOLO et al.,

1989; SILVA, 1999). A derriça a dedo é a colheita feita a mão, e vão-se retirando do cafeeiro só os frutos maduros. É uma metodologia lenta e muito trabalhosa, que exige muita mão de obra. A derriça mecanizada é a colheita dos frutos através de uma “colhedeira” que entra na plantação e, com movimentos rotativos de suas asas colhe todos os frutos do cafeeiro. Essa derriça é a mais rápida de todas, porém não são todas as plantações que estão preparadas para o uso da colhedeira.

Após a colheita vem o processo de separação das impurezas, que se faz por peneiramento manual, ventilação forçada ou também por separadores de ar e peneira (SILVA, 1999). Em seguida efetua-se o processamento pós-colheita.

São duas as maneiras de processamento do café: via seca e via úmida. No processamento por via seca o fruto é seco na sua forma integral (com casca) e depois é descascado. O processamento por via úmida pode ser efetuado de duas maneiras: (i) o café é descascado e submetido a secagem, ou (ii) o café é descascado, despulpado (fermentação) e submetido a secagem. A via úmida é o processamento utilizado para obtenção de um café de melhor qualidade destinado ao mercado externo (CLARKE, 1987; BÁRTHOLO et al., 1989; SILVA, 1999). A maioria dos cafeicultores no Brasil prepara seu café pelo processo denominado via seca.

A secagem do café pode ser feita de duas maneiras: natural e artificial. Na forma natural os frutos são dispostos em finas camadas em um terreiro cimentado bem ventilado e ao sol, sendo o tempo de exposição dependente das condições climáticas, do tamanho do café, do grau de maturidade e do conteúdo de umidade (CLARKE, 1987). Esse processo é bem mais barato por não requerer equipamento. O café exposto ao sol seca rapidamente, evitando assim, fermentações causadas por microorganismos. Porém se houver falta de insolação ou alto teor de umidade, pode ocorrer fermentação ou crescimento de mofo (PIMENTA, 2001). A secagem do café em terreiros ou secadores deve ser iniciada imediatamente após colheita, a fim de que sejam eliminadas rapidamente a alta umidade da casca, polpa e mucilagem, para também, dessa forma, evitar fermentações que possam prejudicar a qualidade do café. A forma artificial é um pouco mais vantajosa, pois o tempo e temperatura são controláveis. A temperatura geralmente utilizada é em média de 55° C e podem ser usados vários equipamentos com sistemas distintos de operação para esse procedimento (CLARKE, 1987).

E muito importante o teor de umidade dos grãos no final da secagem, devendo estar entre 11 e 13 %. Abaixo de 11%, o café permanece mais tempo ocupando mão-de-obra, espaço no terreiro, além da perda de peso e quebra dos grãos no beneficiamento.

Já acima de 13 %, os grãos correm riscos de deteriorações, principalmente por microrganismos (PIMENTA, 2001). A secagem em terreiros tem o inconveniente de ter maior contaminação e proliferação de fungos, já que a secagem se processa mais lentamente em virtude das camadas do pericarpo do fruto (ele fica úmido por mais tempo, aumentando assim, o período durante o qual os microrganismos podem se desenvolver) (PIMENTA, 2001). Outro fator avaliado pelo mesmo autor, que agrava esta situação é que como estes frutos possuem o pericarpo ofertam um meio mais favorável para desenvolvimento dos microrganismos, em virtude do alto conteúdo de açúcares.

Os processos fermentativos a que os grãos estão sujeitos durante a secagem influenciam diretamente na qualidade da bebida. Um estudo feito por ANDROCIOLI FILHO et al. (1999), trabalhando com duas espessuras de leito de grãos 2 e 6 cm, com e sem movimentação, constataram que na camada mais grossa de secagem, sem movimentação, houve um aumento nos defeitos pretos e ardidados com elevação no tempo da secagem.

O conjunto de operações subseqüentes ao processamento pós-colheita (pré-limpeza, catação de pedras, descascamento e classificação de grãos por tamanho) é o que se conhece como beneficiamento, que tem por finalidade separar do grão de café a polpa seca (O CAFEZAL, 2005).

2.1.4 Classificação

A classificação do café é uma fase importante no processo de sua comercialização, visto que a aceitação e preço do produto no mercado estão diretamente ligados a sua classificação. TEIXEIRA (1999); MEGAAGRO (2006) e O CAFEZAL (2005) estabelecem que, para se determinar a qualidade final do café, deve-se examinar, separadamente, cada um dos componentes que afetam a classificação, por processos físicos ou pelos órgãos dos sentidos. A avaliação da qualidade do café compreende duas etapas principais: classificação por defeitos ou tipos e classificação por bebida. Além desses dois aspectos principais, o café pode também ser classificado por peneira.

A análise sensorial que classifica o café quanto à qualidade da bebida é a tradicional “prova de xícara”, sendo realizada por degustadores treinados (TEIXEIRA, 1999; MEGAAGRO, 2006; O CAFEZAL, 2006). Essa análise é o principal critério de definição da qualidade do café (FRANÇA et al., 2005a, b). Este método baseia-se na

utilização de 10 gramas de café torrado e moído com 100 mL de água fervente. A mistura é deixada em repouso por cinco minutos antes da degustação. Usa-se para esta prova torração média dos grãos de café. Provadores treinados realizam a diferenciação qualitativa da bebida (Tabela 1), usando a seguinte classificação em ordem decrescente de qualidade da bebida: “estritamente mole” (café sem defeitos), “mole”, “apenas mole”, “duro”, “riado”, “rio”. A percepção das características sensoriais de um alimento consta de um fenômeno complexo que depende da acuracidade do paladar, treinamento dos analistas e conhecimento das particularidades do produto em questão (O CAFEZAL, 2006).

Tabela 1 – Classificação das principais bebidas de café.

Bebidas Finas do Grupo 1 – Arábica	
Estritamente mole	Café que apresenta em conjunto, todos os requisitos de aroma e sabor “mole”, porem mais acentuado.
Mole	Café que apresenta aroma e sabor agradável, brando e adocicado.
Apenas Mole	Café que apresenta sabor acre, adstringente e áspero, porem não apresenta paladares estranhos.
Duro	Café que apresenta sabor acre, adstringente e áspero.
Bebidas do grupo 1 – Arábica	
Riado	Café que apresenta leve sabor típico de iodofórmio.
Rio	Café que apresenta sabor típico e acentuado de iodofórmio
Rio zona	Café que apresenta aroma e sabor muito acentuado assemelhado ao iodofórmio ou ácido fênico, sendo repugnante ao paladar.
Bebidas do grupo 11 – Robusta	
Excelente	Café que apresenta sabor neutro e acidez mediana
Boa	Café que apresenta sabor típico de robusta sem acidez
Regular	Café que apresenta sabor não característico do produto

(Fonte: Vasconcelos, 2005)

Na TABELA DE CLASSIFICAÇÃO DO CAFÉ POR TIPO (Tabela 2) mostra-se a classificação por tipo ou defeito. Ela é baseada na identificação do número de defeitos, matérias estranhas e impurezas que o café apresenta em uma amostra de 300 gramas de

grãos (SINDICAFÉ, 2005; MEGAAGRO, 2006). Em uma mesa provida de boa iluminação, a amostra é espalhada sobre uma cartolina preta. Os defeitos são separados e contados. A escala de avaliação compreende sete tipos de valores, que podem variar de 2 a 8, segundo normas estabelecidas pela Classificação Oficial Brasileira (O CAFEZAL, 2005; MEGAAGRO, 2006).

Tabela 2– Classificação do café por tipo.

Tipo	Número de defeitos por 300 g de amostra
2	6
3	13
4	30
5	60
6	120
7	240
8	450

Fonte: FRANÇA et al. (2005a).

Por último está a classificação por peneira, que é realizada por um jogo de peneiras, que separa os grãos pela forma e pelo tamanho. As peneiras têm crivos com diversas medidas e dois formatos diferentes: podem ser oblongos, para separar os cafés mocas, ou circulares, para separar os cafés chatos.

2.1.4.1 Caracterização dos defeitos

Existem defeitos de natureza intrínseca, próprios de grãos alterados por condução inadequada de processos agrícola e beneficiamento ou por modificações de origem fisiológicas ou genéticas, abrangendo os grãos “pretos”, “ardidos”, “verdes” (como os principais defeitos), chochos, mal granados, quebrados e brocados. Já os defeitos de natureza extrínseca, são representados por elementos estranhos ao café beneficiado como marinheiro, coco, casca, paus e pedras (PEREIRA, 1997). Diversos fatores são

atribuídos à ocorrência de defeitos como: deficiência nutricional, ataque de microorganismos e elevada umidade relativa do ar aliada a procedimentos inadequados na colheita e pós-colheita.

O defeito “verde” se caracteriza pela cor verde-cana da película prateada da semente, que predominam nos frutos colhidos no estágio verde de maturação. O defeito “ardido” pode ser originado devido a deficiências hídricas no decorrer das diferentes etapas do desenvolvimento dos frutos e fermentações anormais dos grãos colhidos. Esse defeito se caracteriza pela cor marrom ou parda do grão. PEREIRA (1997) observou que os grãos “ardidos” apresentam-se com maior frequência nos frutos secos do chão e decrescentemente, nas frações seco normal, secos anormais, verdes, meio maduros e passa, sugerindo que este defeito não é originário apenas de fermentações anormais.

O pior defeito encontrado e considerado pelos classificadores como defeito capital é o grão “preto”, considerando-o padrão dos defeitos (TEIXEIRA, 1999) que se origina devido à permanência prolongada de frutos secos no solo ou nos cafeeiros, possibilitando a ocorrência de fermentações e infecções microbianas (MEGAAGRO, 2006). A influência destes grãos na qualidade de café é considerada como a mais intensa, quando comparada ao efeito dos grãos verde e ardidos.

Como se pode ver na Tabela 3, em geral são necessários vários grãos imperfeitos para se obter 1 defeito; o grão preto, por si só, corresponde a 1 defeito (MEGAAGRO, 2006), enquanto um pau ou uma pedra de tamanho grande equivalem a cinco defeitos (O CAFEZAL, 2005).

A qualidade pode ser definida como um conjunto de características físicas, sensoriais e químicas que induzem a aceitação do produto pelo consumidor. Aparência, sabor, odor, textura, valor nutritivo, são atributos de qualidade de um alimento. A aparência é considerada pelos comerciantes e distribuidores como o atributo de maior relevância, além de estes mesmos se preocuparem com as características sensoriais do produto (PEREIRA, 1997).

Devem-se considerar tanto os atributos de qualidade acima citados como a ausência de defeitos para assim poder efetuar uma comercialização tanto interna como externa do café brasileiro. Com base na literatura consultada podemos dizer que a qualidade do café bebida depende de vários fatores: a) composição química dos grãos, que é determinada por fatores genéticos, ambientais e culturais; b) os métodos de colheita, processamento e armazenamento; c) torração e preparo da bebida; os itens b e c modificam a constituição química dos grãos.

Tabela 3 – Classificação do Café beneficiado, quanto à equivalência de defeitos (intrínsecos) e impurezas (extrínsecos).

Defeitos	Quantidade	Equivalência
Grão preto	1	1
Grãos ardidos	2	1
Conchas	3	1
Grãos verdes	5	1
Grãos quebrados	5	1
Grãos brocados	2 a 5	1
Grãos Mal granados ou chochos	5	1
Coco	1	1
Marinheiros	2	1
Pau, pedra e torrão grande	1	5
Pau, pedra e torrão regular	1	2
Pau, pedra e torrão pequeno	1	1
Casca grande	1	1
Cascas pequenas	2 a 3	1

Fonte: SINDICAFÉ (2005)

2.1.5 Composição química dos grãos

A composição química dos grãos de café depende de vários fatores como: espécie, variedade do grão, origem geográfica, condições de solo, armazenamento, tempo e temperatura de torrefação.

O café é uma mistura complexa de diferentes compostos. O café cru possui uma grande variedade de compostos, desde substâncias de baixo peso molecular, como alcalóides (cafeína), minerais, monossacarídeos, lipídeos, ácido orgânicos, água até polímeros bem definidos, como proteínas e polissacarídeos.

No período que antecede a maturação os teores de açúcares totais, redutores e sacarose, permanecem praticamente constantes, elevando-se acentuadamente a seguir, com maior acúmulo de açúcares redutores em relação à sacarose (PEREIRA, 1997).

A sacarose é o principal sacarídeo de baixo peso molecular encontrado no café cru, cujo teor pode variar de 1,9 a 10% na matéria seca. É o açúcar precursor de maior

relevância para o aroma e sabor de café torrado (MENDONÇA et al., 2005). A espécie arábica possui maior quantidade de sacarose que a espécie robusta (CLARKE, 1987). Os polissacarídeos presentes no café cru pertencem aos grupos dos arabinogalactanos e galactomananos, presentes em 45% base seca. Sua importância é devido ao fato de que participam na retenção de substâncias voláteis, como também contribuem para a viscosidade e corpo da bebida (NAVARINI et al., 1999).

Com base na literatura consultada observou-se que os frutos verdes não possuem mucilagem, a qual só é formada quando os mesmos se encontram quase maduros. A mucilagem possui cerca de 80% de água e 15% de sólidos dos quais 20% são açúcares, que sob condições inadequadas de manejo ou mesmo no processo de senescência sofrem fermentações detrimenais à qualidade (CARVALHO & CHALFOUN, 1985). Durante o amadurecimento esta mucilagem é digerida e liquidificada, nutrindo, assim, a semente para a continuidade de seus processos metabólicos e conferindo às mesmas seu sabor característico (PEREIRA, 1997).

Considerando o fato de se tratar de um grão cru, o café possui um alto conteúdo de água, aproximadamente 50%. O conteúdo de água é de grande importância na estocagem contra a deterioração dos grãos (CLARKE, 1987). O teor de minerais do café é da ordem de 4%, sendo o potássio seu maior constituinte (40%). Cálcio e magnésio também estão presentes, porém em menor quantidade, como também os elementos não metálicos (fósforo e enxofre) (CLARKE, 1987). MARTÍN et al. (1999) avaliaram o conteúdo de metais para discriminar entre as duas espécies, arábica de robusta. Esses autores observaram que a espécie robusta possui maior conteúdo de fósforo e cobre, enquanto a espécie arábica apresenta maiores quantidades de manganês. O conteúdo de cafeína dos grãos de café crus varia amplamente segundo a espécie. Robusta claramente contém maiores quantidades deste alcalóide (2,2%) do que a espécie arábica, que possui 1,2% (CLARKE, 1987). Ao contrário do observado para cafeína encontrou-se que arábica possui maiores níveis, 1,0%, enquanto robusta possui níveis de 0,7% de trigonelina. Esse composto é degradado durante o processo de torrefação originando ácido nicotínico.

As proteínas do café encontram-se predominantemente livres no citoplasma ou ligadas a polissacarídeos da parede celular, as quais são completamente desnaturadas durante a torrefação. Nos grãos crus a quantidade total de proteína vai entre 9 a 16% (CLARKE, 1987). A determinação do conteúdo protéico com base no nitrogênio total limita as interpretações por possibilitar a interferência de outros compostos nitrogenados como cafeína, trigonelina, pigmentos, entre outros. O grão verde é um dos possuidores de maior

quantidade de proteína, visto que nestes grãos existe a presença de alguns aminoácidos em maiores concentrações (PIMENTA, 1995) como serina, alanina, valina, isoleucina, tirosina, fenilalanina, ácido aminobutírico, lisina, etanolamina, entre outros. Além disso, não foram observadas diferenças entre as espécies para os teores de proteínas, tendo ambas as espécies um teor de 11% (CLARKE, 1987).

O teor de lípidos dos grãos crus de café se encontra no intervalo de 10 a 18%, considerando a determinação com base no extrato etéreo. Este teor é de importância quando se avalia a qualidade da bebida, já que podem sofrer hidrólises e oxidações que geram uma diminuição na qualidade da bebida (PEREIRA, 1997). Os triglicerídeos são os lipídeos que estão em maior proporção em café verde. Existe também diferença das quantidades de lipídeos entre as espécies (CLARKE, 1987).

Os compostos fenólicos no café são responsáveis pela adstringência que o fruto possui. Esses compostos estão presentes em todos os vegetais e compreendem um grupo heterogêneo de substâncias, como taninos e ligninas, contribuindo de maneira altamente significativa para o sabor e aroma do produto final (PIMENTA, 2001). Dentre os compostos fenólicos encontrados no café, há uma predominância de ácido clorogênico. Esse ácido, conjuntamente com o caféico, exerce uma ação protetora, antioxidante dos aldeídos.

Igual a outros frutos, o processo de desenvolvimento e maturação do café é caracterizado pela síntese e degradação de diferentes compostos químicos, como afirmam CARVALHO & CHALFOUN (1985). O equilíbrio natural entre estas reações, propicia o ponto ideal de maturação, grãos com teores adequados das substâncias responsáveis pelas características sensoriais da bebida.

Apresenta-se na Tabela 4 um resumo da composição química de café cru das espécies arábica e robusta.

Tabela 4 – Composição do café cru das espécies arábica e robusta.

Constituinte	Arábica (%)	Robusta (%)
Carboidratos	55-65,5	40-55,5
Ácidos e fenóis	8-11	9-17
Ácidos voláteis	0,1	0,1
Ácidos clorogênicos	6,7-9,2	7,1-12,1
Lipídios	15-18	8-12
Compostos nitrogenados	11-15	11-15
Aminoácidos livres	0,2-0,8	0,2-0,8
Proteínas	8,5-12	8,5-12
Cafeína	0,8-1,4	1,7-4,0
Trigonelina	0,6-1,2	0,3-0,9
Minerais	3-5,4	3-5,4

Fonte: (VIANI, 1986)

2.1.6 Maturação e características físicas, físico-químicas e químicas do café

Com a maturação dos frutos, as características físico-químicas e a composição química dos grãos são alteradas, seja decrescendo ou aumentando até atingirem níveis ideais característicos dos grãos de café maduro. Devido a isso, o cafeeiro apresenta mais de uma floração e conseqüentemente frutos de diferentes fases de maturação. Torna-se, portanto, muito importante realizar sua derrça na hora onde a maioria desses frutos se encontra no ponto ideal de maturação “estádio cereja”. O café colhido no estágio de maturação verde apresenta aspecto e torrefação de pior qualidade, gerando uma bebida de sabor inferior à bebida obtida a partir dos frutos maduros, além de apresentar grãos de menor peso e tamanho (PIMENTA, 2001).

Vários fatores caracterizam o amadurecimento dos frutos de café, destacando-se dentre eles o aumento no teor de açúcares solúveis em decorrência da degradação de amido (AMORIM, 1978). Segundo o autor, os carboidratos não parecem afetar a qualidade do café de modo geral, porém existe a hipótese que esses polissacarídeos

sejam metabolizados, gerando CO₂, o que contribuiria para perda de peso em armazenamento e também para produção de outros compostos, especificamente de alguns ácidos de efeitos muitas vezes determinantes à qualidade. A sacarose é um dos açúcares não redutores predominantes do café. Os açúcares redutores apresentam-se em pequenas quantidades.

Nos grãos de café o teor de acidez titulável é variável, dependendo dos níveis de fermentações que tenham ocorrido nos grãos e também dos diferentes estádios de maturação dos mesmos. Existem vários trabalhos que verificam que frutos de café no estágio de maturação verde possuem menores teores de acidez titulável, e que esses valores aumentam com o amadurecimento dos frutos (PIMENTA, 2001). O mesmo autor estabelece que o odor característico do café seja devido à presença de compostos voláteis, que se encontram no café baixo a forma de aldeídos, cetonas e ésteres metílicos. KALLIO et al. (1990) avaliaram as centenas de compostos voláteis aromáticos apresentados nos frutos verdes, propiciando valores sensoriais bem baixos, que com o decorrer da maturação aumentam gradativamente contribuindo, assim, para o aroma de café e tornando-se responsável pelo sabor final do produto.

2.1.7 Polifenoloxidase e qualidade da bebida

A qualidade da bebida é afetada pelas transformações químicas, de natureza enzimática, que ocorrem no grão de café. Essas enzimas são constituintes do próprio grão ou de microorganismos que contaminam os frutos quando os mesmos apresentam umidade elevada, facilitando assim, a multiplicação desse organismo e o conseqüente aumento dessas enzimas (AMORIM, 1978). O fruto do café tem uma flora microbiana bastante vasta, relacionando-se alguns sabores e aromas que alteram as características peculiares do produto.

É conhecido que a qualidade e aroma do café são determinantes no estabelecimento de seu preço. Quando se trabalha exclusivamente com grãos maduros ou com baixa porcentagem de defeitos e bem processados, o clima oferece determinados atributos especiais da bebida, como o corpo, acidez e aroma (PIMENTA, 2001).

As polifenoloxidases encontram-se ligadas às membranas celulares, agem sobre os polifenóis diminuindo sua ação antioxidante sobre os aldeídos, facilitando a oxidação desses com interferência no sabor e aroma do café após a torrefação (AMORIM & SILVA,

1968). Essa enzima encontra-se na polpa dos frutos, nas camadas externas e nas partes centrais do grão. Dessa forma, danos ocorridos nas membranas liberam e ativam a enzima, que por sua vez, oxida ácidos clorogênicos a quinonas, as quais atuam inibindo a polifenoloxidase, diminuindo sua atividade. É por isso que qualquer fator ambiental que afete a estrutura da membrana, como por exemplo, infecção por microorganismos, ataque de insetos, alterações fisiológicas, e danos mecânicos, gera um maior contato entre as enzimas e os compostos químicos presentes intra e extracelular no grão dando lugar às reações químicas que modificam a composição original do grão de café e conseqüentemente do produto final (PIMENTA, 2001).

As respostas em nível celular a danos físicos ou estresse fisiológico nos grãos de café estão intrinsecamente relacionadas à polifenoloxidase. Essa é uma enzima cúprica de importância na determinação dos atributos de qualidade de vários frutos e vegetais, principalmente com relação ao escurecimento dos tecidos, uma vez que catalisa a oxidação aeróbica dos compostos fenólicos (PEREIRA, 1997). O mesmo autor relata que vários pesquisadores têm constatado maiores valores de atividades nos melhores cafés. O mecanismo de ação dessa enzima é: hidroxilação de monofenóis dando origem aos o-difenóis e remoção de hidrogênio, gerando o-quinonas. As o-quinonas geradas exerceriam sobre a polifenoloxidase uma inibição competitiva através de ligação covalente no sítio ativo da enzima ou nas proximidades do mesmo, ocasionando a redução da atividade enzimática (PEREIRA, 1997).

AMORIM & SILVA (1968) denotam um aspecto relevante à relação da polifenoloxidase com a qualidade do café. É fato conhecido que a oxidação de aldeídos confere sabores e odores desagradáveis aos alimentos, porém os compostos fenólicos têm a capacidade de exercer sobre os aldeídos uma ação protetora antioxidante. Portanto, a ativação das polifenoloxidase como consequência da exposição dos grãos a condições adversas durante e após a colheita, diminuirá a ação protetora dos compostos fenólicos, contribuindo indiretamente para a redução na qualidade da bebida.

No cafeeiro os compostos fenólicos são considerados como um complexo conhecido como ácidos clorogênicos, geralmente subdivididos em grupos de isômeros, baseados no número e tipo de seus resíduos acilantes (CLIFFORD, 1985). Aos fenólicos é atribuída a sensação de adstringência da bebida do café. O café arábica tem uma melhor posição comercial em relação ao robusta, com "flavor" mais apreciável. A literatura aponta teores mais elevados de ácidos clorogênicos para o café robusta quando

comparado ao arábica, o mesmo para os grãos verdes. Portanto, esses grãos apresentam maior adstringência (CLARKE, 1987).

2.1.8 O Processo de torração

Para transformar o café verde na bebida pronta para beber são utilizados os seguintes processos: (1) torração, (2) moagem, e (3) extração. No primeiro processo o sabor e aromas característicos do café são desenvolvidos. No segundo ocorre uma redução do tamanho das partículas para aumentar a superfície de contato e, assim, facilitar a extração. No terceiro, são extraídos os sólidos solúveis e as substâncias voláteis. Este processo efetua-se com água quente, obtendo-se a bebida para o consumo (CLARKE, 1987).

Um grande número de autores (DE MARIA et al., 1994; DE MARIA et al., 1996; REDGWELL et al., 2002; OOSTERVELD et al., 2003; HERNANDEZ et al., 2006), tem demonstrado que no processamento do café, a torrefação é a etapa mais importante. Define-se como a pirólise moderada dos grãos devido a um aquecimento prolongado e controlado, resultando em uma série de alterações químicas e físicas, gerando vários compostos aromáticos responsáveis pelo sabor e aroma da bebida e do produto seco (CLARKE, 1987; BARROS MELO, 2004).

A torrefação divide-se em três etapas: (1) secagem, (2) pirólise ou torrefação e (3) resfriamento. A secagem caracteriza-se pela liberação de água e compostos voláteis presentes nos grãos crus, processo endotérmico. Nessa etapa atinge-se temperaturas internas dos grãos de 160°C (HERNANDEZ et al., 2006). Observa-se uma mudança de cor dos grãos de verde para amarelo, aqui o café apresenta cheiro de pão torrado. Essa é a fase mais lenta do processo, pois pode ser de 5 minutos até uma hora (SIVETZ & DESROSIER, 1979; FRANÇA et al., 2005a). Na fase de pirólise ou torrefação, ocorrem numerosas reações que resultam em modificação drástica da composição química dos grãos com liberação de gás carbônico e compostos voláteis característicos do café (BORGES et al., 2004ab; HERNANDEZ et al., 2006). Os grãos de café atingem uma cor marrom, devido à caramelização dos açúcares. As etapas iniciais da torrefação envolvem processo exotérmico, mas no momento que ocorrem as reações de pirólise, o processo passa a ser endotérmico, com o grão alcançando temperaturas de 190-210°C, com a conseqüente liberação de compostos voláteis (BUFFO & CARDELLI-FREIRE, 2004),

como também estouro e duplicação de seu volume, o que pode ser corroborado observando a Figura 5. O volume dos grãos de café torrados aumenta no decorrer do processo de torrefação, sendo este aumento mais acentuado no início das reações de pirólise (BORGES et al., 2004; FRANÇA et al., 2005b).



Grão cru



Grão torrado

Figura 5 – Comparação de grão cru e grão torrado.

Após os grãos alcançarem a cor desejada, devem ser retirados do contato com os gases quentes e imediatamente resfriados com spray de ar ou de água (SIVETZ & DESROSIER, 1979; FRANÇA et al., 2005a). Esse resfriamento imediato é importante para paralisar as reações de pirólise e evitar a carbonização dos grãos. O café torrado é poroso e quebradiço, os gases desenvolvidos durante o processo de torração provocam a expansão dos grãos (aumento da porosidade e volume). A quantidade de calor transferida aos grãos é um parâmetro muito influente no processo de torrefação. Esse pode ser controlado pelo binômio tempo-temperatura.

A torrefação pode ser denominada clara, média ou escura, em função do tempo e temperatura utilizados no processo. A cor externa do grão, o aroma, o sabor desenvolvido, a perda de massa durante a torra e as alterações químicas que ocorrem em componentes selecionados são característicos do grau de torração efetuado (CLARKE, 1987).

Os parâmetros que se correlacionam com o grau de torrefação são: a cor, a perda de massa e os parâmetros sensoriais. A cor dos grãos varia à medida que aumenta o grau de torrefação, partindo de um grão esverdeado (grão cru), passando por diferentes tonalidades de marrom, obtendo por último um grão marrom escuro.

A perda de massa no começo da torrefação é lenta, ocorrendo liberação de água e de componentes voláteis. Logo ocorre uma intensa liberação de compostos orgânicos e CO₂, próprio da pirólise (OLIVEIRA et al., 2005). BARROS MELO (2004) afirma que existem três características sensoriais importantes que indicam a qualidade da bebida em função do grau de torra: acidez, aroma e corpo. A acidez é a característica predominante para torra clara com baixo corpo e desenvolvimento de aroma e sabor insuficientes, porque o tempo não é o adequado para completar todas as reações de pirólise necessárias, obtendo-se, assim, um café de baixas características organolépticas (BUFFO & CARDELLI-FREIRE, 2004). Com o aumento da torra essa característica diminui deixando ressaltar as demais. Nos graus de torra intermediários a bebida torna-se mais encorpada e tanto o aroma quanto o sabor tornam-se mais evidentes (BARROS MELO, 2004). À medida que o grão se torna mais escuro, ou seja, com o aumento no nível de torração, a acidez diminui, até certo ponto que acontece a carbonização de alguns componentes, portanto, acentuando o sabor de queimado e gosto amargo da bebida (BARROS MELO, 2004).

O café torrado comercializado pode ser arábica, robusta, ou bem uma mistura de ambos, que é denominada “blend”. Em vista da diferença de preço entre arábica e robusta as possibilidades de adulterações são altas. Cafés arábica e robusta crus são facilmente identificáveis, já que seus tamanhos são bem diferentes. A diferenciação por tamanho não é possível depois da torrefação, já que este processo origina aproximadamente 33% de aumento de volume dos grãos e 18 a 22% de perda de massa (MONDELLO et al., 2004).

Muitos dos compostos voláteis presentes no café são derivados de componentes não voláteis do grão cru que são gerados durante o processo de torrefação. MONDELLO et al. (2004) observaram no perfil de voláteis de arábica e robusta quase idêntica, porém abundante fração de pirazinas, as que têm um papel principal no perfil de aromas do café e são geradas durante o processo de torrefação. Embora a fração de pirazinas seja quase idêntica para as diferentes espécies, esses autores mostraram no seu trabalho que a fração de compostos voláteis difere entre as duas espécies de café mais comercializadas no mundo (MONDELLO, et al., 2004).

2.1.8.1 Conseqüências da torrefação no grão de café

O processo de torrefação origina alterações físicas e químicas no grão de café. A principal alteração física provocada pelo processo de torrefação é o aumento progressivo do volume dos grãos, incluindo a fase do “estouro”. Foi demonstrado por BORGES et al. (2004) e FRANÇA et al. (2005a) que o volume dos grãos de café sadios aumenta no decorrer do processo de torrefação, sendo este aumento mais pronunciado no início das reações de pirólise. Outra das alterações físicas envolvidas no processo de torrefação é a modificação da cor dos grãos que altera de marrom claro para torração suave até quase preto para a torração forte devido à caramelização dos açúcares e reações de Maillard (BORGES et al., 2004).

CLARKE (1987) estabeleceu que a perda de massa dos grãos de café no processo de torrefação é conseqüência da perda de umidade e de uma fração de material orgânico volátil. Na Tabela 5 observam-se os valores de perda de massa relacionados ao grau de torrefação segundo CLARKE, (1987).

São poucos os trabalhos que correlacionam variações da perda de massa ao longo da torração com a qualidade do café (Borges et al., 2004a; Vasconcelos et al., 2007). No trabalho realizado por BORGES et al. (2004a) observou-se que cafés de baixa qualidade apresentaram perda de massa inferior a cafés de boa qualidade, indicando que o grau de torração atingido era inferior para as mesmas condições de processamento. Estes resultados foram comprovados por Vasconcelos et al, (2007), que demonstraram que os grãos defeituosos de café apresentam menores valores de perda de massa em comparação a grãos sadios submetidos às mesmas condições de torrefação.

Tabela 5 – Perda de massa (%) para diferentes graus de torrefação.

Grau de torração	Perda de Massa (%)
Claro	1 – 5
Médio	5 – 8
Escuro	8 – 12
Muito Escuro	> 12

Fonte: CLARKE (1987)

A torrefação também provoca mudanças químicas nos grãos de café, decorrentes das reações químicas que ocorrem no processo de torração. Durante esse processo encontram-se envolvidos mecanismos bioquímicos complexos capazes de produzir cor, sabor e aroma característicos do café, envolvendo diferentes tipos de reações como: Maillard e Strecker, caramelização de açúcares, degradação de ácidos clorogênicos, proteínas e polissacarídeos (CLARKE, 1987; DE MARIA et al., 1994).

A composição química (%base seca) dos cafés torrados para as duas espécies mais comuns é apresentada na Tabela 6.

Tabela 6 – Composição química (% base seca) de grãos de café Arábica e Robusta após a torração.

Componentes	Arábica (torrado)	Robusta (torrado)
Minerais	3,5-4,5	4,6-5,0
Cafeína	~1,0	~2,0
Trigonelina	0,5-1,0	0,3-0,6
Lipídios	14,5-20,0	11,0-16,0
Ácido clorogênico total	1,2-2,3	3,9-4,6
Ácidos alifáticos	1,0-1,5	1,0-1,5
Oligossacarídeos	0-3,5	0-3,5
Polissacarídeos totais	24,0-39,0	-
Aminoácidos	0	0
Proteínas	13,0-15,0	13,0-15,0
Ácidos úmicos	16,0-17,0	16,0-17,0

Fonte: SMITH (1989)

No que se refere a minerais, no café cru não se tem diferença entre as espécies para conteúdo total de minerais (Tabela 4). No entanto, para café torrado, MARTIN et al. (1999) concluíram que o conteúdo de fósforo (P), manganês (Mn), e Cobre (Cu) podem ser usados para discriminar entre as espécies arábica e robusta. Um dos componentes do café que quase não se vê alterado pela torração é a cafeína, havendo dois motivos para tal caso. Primeiro, o vapor formado dentro do grão aumenta a pressão interna (membranas são impermeáveis) aumentando, assim, a temperatura de sublimação da cafeína; segundo, a cafeína forma sais com ácidos presentes dentro do grão, o que

impede sua sublimação (CLARKE, 1987). Porém, FRANÇA et al. (2005a) mostram que os níveis de cafeína podem diminuir ao final da torração, em função de sua alta solubilidade em água e conseqüente arraste pelos gases ao final da torração. A trigonelina é degradada de 50 a 80% durante a torração. O remanescente desse composto no grão será completamente extraído no preparo da infusão e, dependendo do nível, pode ter uma pequena influência no sabor amargo da bebida (CLARKE, 1987).

Durante a torrefação, há pouca alteração na concentração total de lipídeos. Uma pequena quantidade do óleo é utilizada na produção de compostos voláteis e outra parte pode ser quebrada (DART & NURSTEN, 1985). Apesar de serem pouco alterados na torração, os lipídeos protegem os compostos de aroma da degradação na torração contínua. O óleo do café se encontra concentrado em forma de gotículas no citossol e distribuído em células da semente, porém nos melhores cafés existe uma distribuição mais intensa de lipídeos nos bordos externos das sementes (AMORIM, 1978). Segundo o autor, os lipídeos do café atuam durante a torrefação como uma peneira seletiva, retendo parte dos componentes aromáticos formados, assim a concentração do óleo nos bordos propiciaria uma melhor retenção do aroma.

Observando a composição de ácidos clorogênicos de café cru (Tabela 4) e correlacionando-os com os dados da Tabela 6, pode-se avaliar que durante a torrefação os ácidos são perdidos. Essa perda é originada por vários caminhos: migração do grupo acil; hidrólise; oxidação, fragmentação (talvez haja perda real de fragmentos pelos gases liberados); polimerização e associação com proteínas degradadas e desnaturadas (CLIFFORD, 1985).

O açúcar que é perdido rapidamente durante a torrefação, é a sacarose, sendo sua porcentagem de perda diretamente proporcional ao grau de torrefação. TRUGO (1989) mostrou que, em amostras de café torrado tanto arábica quanto robusta, a perda de sacarose é de 97% para torração leve e de 99 % para torrefação média. Considerando as torrefações severa e muito severa, a sacarose é completamente degradada.

Os principais polissacarídeos presentes em infusões de café torrado são os galactomananos e arabinogalactanos tipo II (NAVARINI et al., 1999; NUNES & COIMBRA, 2001). Esses polissacarídeos têm uma importante função na formação de flavor durante a torrefação, tendo também importância na estabilidade da espuma do café expresso (NUNES & COIMBRA, 1998). O processo de torrefação leva a mudança em quantidade e estruturas dos polissacarídeos solúveis em água quente em relação aos extraídos de café cru (NUNES & COIMBRA, 2001). Em estudos feitos por TRUGO (1989) observa-se que

durante o processo de torração há perda de peso dos polissacarídeos, o que indica alterações na solubilidade e estrutura dos mesmos. O grão torrado possui maior quantidade de ácido nicotínico que o grão cru. Isso se deve ao fato de que essa vitamina é proveniente, em sua maioria, da degradação de trigonelina durante a torrefação do café.

CLARKE e MACRAE (1987) observaram que a perda de nitrogênio de aminoácidos é dependente da severidade da torração podendo ser da ordem 20-40%. Haverá desnaturação de todas as proteínas, liberando, assim, aminoácidos. Haverá aminoácidos livres, porém insolúveis, e por isso eles não estão presentes na bebida. Os que se encontram em baixas concentrações, porém, não menos importantes, são os compostos com enxofre. Eles são de grande importância para o aroma do café (DART & NURSTEN, 1985).

WOODMAN (1986) concluiu que quanto maiores os graus de torração menos ácidas eram as bebidas. Isso se deve ao fato de que os ácidos cítrico e málico, por exemplo, são degradados durante a torração. Nesse processo, alguns ácidos se volatilizam e outros que são originalmente presentes no grão cru são decompostos.

2.1.8.2 Avaliação do perfil de compostos voláteis ao longo da torração

À medida que acontece o processo de torração, ocorrem inúmeras mudanças na composição dos voláteis responsáveis pelo aroma do café. Como já mencionamos anteriormente, muitos compostos são degradados durante a torrefação e muitos outros são formados. Segundo VITZTHUM (2001), no café cru foram identificados cerca de 25 compostos, sendo que, para torrados, foram identificados mais de 800. Além disso, o número e concentração dos compostos voláteis varia consideravelmente durante a torração, conforme já demonstrado por DUTRA et al. (2001) (Figura 6).

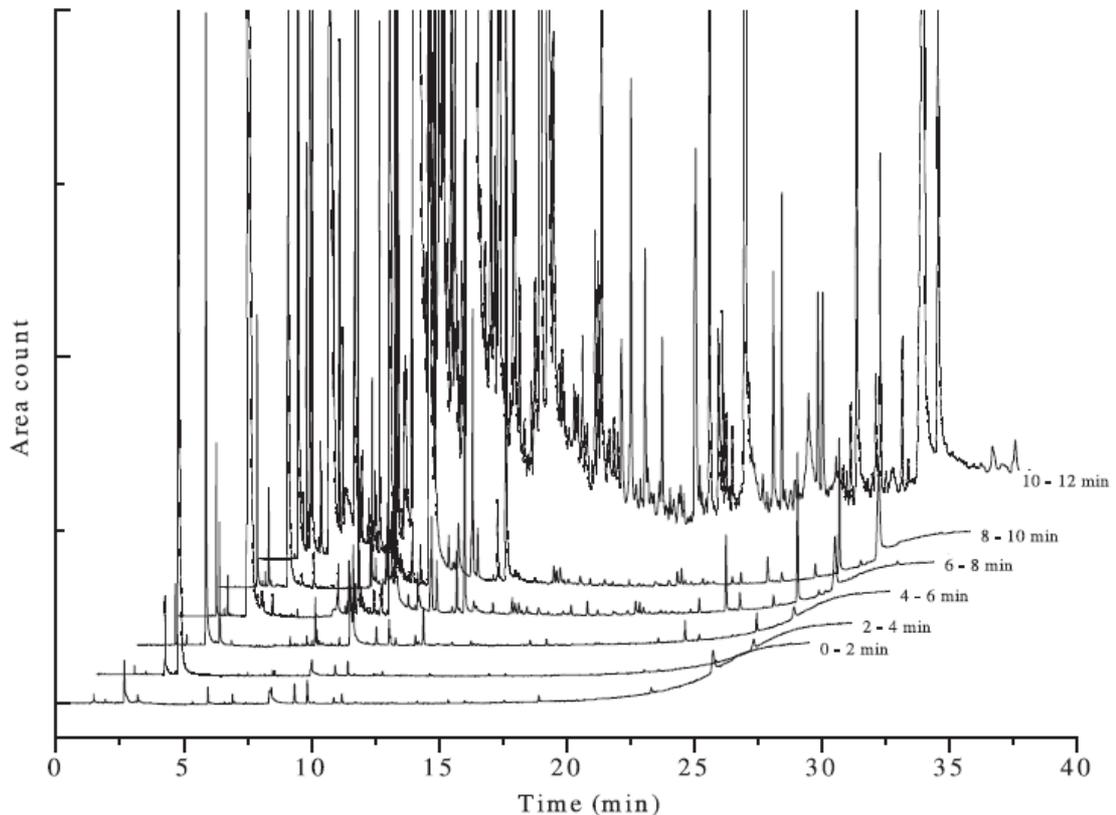


Figura 6 – Evolução do perfil cromatográfico de gases de exaustão no processo de torração. (Fonte: DUTRA et al., 2001).

2.2 Grãos Defeituosos (PVA)

A maioria dos dados de propriedades do café é restrita aos cafés de boa qualidade (FRANÇA et al., 2005b), em que há predominância de grãos sadios. Existem escassas pesquisas que avaliem as propriedades físicas e químicas dos grãos defeituosos do café.

É amplamente conhecido que os defeitos: “verdes”, “ardidos” e pretos” prejudicam sensivelmente a qualidade do café “estritamente mole”. Portanto sugere-se que maiores cuidados sejam tomados antes, durante e após a colheita do café, a fim de evitar o aparecimento desses defeitos, pois se sabe que os mesmos podem ser eliminados parcialmente através de catação manual ou eletrônica (PEREIRA, 1997).

Segundo MAZZAFERA (1999), a presença de grãos “pretos”, “verdes” e “ardidos” (PVA) no café são considerados defeitos sérios, já que promovem mudanças na composição química do café cru, que podem mudar a aceitabilidade do produto final.

Os grãos de café preto, verde e ardido são considerados defeitos intrínsecos do café, resultantes de modificações fisiológicas e genéticas que afetam negativamente a

qualidade da bebida (MAZZAFERA, 1999; TEIXEIRA, 1999; O CAFEZAL, 2005). Embora ainda não se tenha confirmações científicas precisas sobre a origem dos defeitos, “ardidos” e pretos”, se aceitam hipóteses de que sejam provenientes, provavelmente, de fermentações anormais que ocorrem nos grãos, principalmente como reflexo do ataque microbiano aos frutos. A invasão de fungos pode desencadear a transcrição do mRNA para fenilalanina-amônialiasa resultando no estímulo à sínteses de compostos fenólicos (PEREIRA, 1997). Há evidências da ocorrência de maior concentração de compostos fenólicos totais em cafés de pior qualidade o que tem sido atribuído geralmente ao ataque de fungos como *Fusarium spp.* (AMORIM & SILVA, 1968). BORGES et al. (2004b) observaram que bebidas de pior qualidade apresentaram um teor de trigonelina maior, o que pode estar associado a um grau de torração menos intenso dos grãos defeituosos presentes na amostra.

O estágio de maturação do fruto na época de colheita é um dos fatores que mais influencia a qualidade do grão, sendo o fruto cereja o ideal para ser colhido. No entanto, sabe-se que quanto maior o tempo de permanência do café na lavoura (árvore ou chão) após a maturação, maior será a incidência de grãos pretos e ardidos. O grão defeituoso “preto” é consequência de uma colheita de frutos com permanência prolongada em contato com o chão. O fruto sofre ação microbiana prematura, ainda na galha de café, desprendendo-se da galha e caindo no solo. Esse defeito é considerado geralmente como oriundos de fermentações mais intensas do que os “ardidos”. Com base nesses dados PEREIRA, (1997) constatou que os grãos “pretos” exibiram teores mais elevados de acidez titulável, considerando a possibilidade de uma maior volatilização e ou lixiviação de ácidos, em virtude de degradações mais intensas que tenham ocorrido nas membranas. Os grãos defeituosos “ardidos” caem do pé de café pela ação das chuvas e ou ventos e entram em contato com o solo, favorecendo a fermentação microbiana. Os grãos “pretos” podem ser diferenciados dos grãos “ardidos” pela presença de uma fina película brilhante aderente à superfície do grão preto (MAZZAFERA, 1999). Os grãos classificados como verdes ou imaturos são grãos colhidos prematuramente. Dessa forma, possuem uma fina película recobrimo a superfície externa do grão de coloração esverdeada. Essa coloração é consequência da forte adesão da película prateada ao endosperma (MAZZAFERA, 1999). De acordo com ILLY & VIANI (1995), os grãos verdes possuem sabor adstringente, reduzido conteúdo de lipídios e de ácido oléico e contribuem para a adstringência da bebida (VASCONCELOS et al., 2007). Como em toda planta, no cafeeiro os açúcares aumentam em concentração apenas a partir do início da maturação dos frutos, tendo sido

observado por PIMENTA (1995) teores mais baixos de açúcares totais nos grãos de frutos colhidos verdes. No estudo feito por PEREIRA (1997) nota-se uma redução nos teores de açúcares não redutores, acompanhada por um aumento nos açúcares redutores, indicando uma interconversão da sacarose em açúcares mais simples; o autor observou também que a elevação dos teores de açúcares redutores e redução dos não redutores intensificaram-se com a gravidade da injúria destes grãos. Apresentam-se na Tabela 7 os tipos mais comuns de imperfeições e suas causas mais prováveis.

Tabela 7 – Tipos mais comuns de imperfeições em grãos de café.

Tipo de Imperfeição	Causa Provável
Verdes/ verdoengos	Frutos com maturação inadequada
Verdes/ pretos	Grãos secos de maneira inadequada
Ardidos de roça	Frutos com umidade excessiva amontoados no terreiro e revirados incorretamente
Cochos	Frutos estragados por falta de adubação e água
Mal granado	Frutos com fecundação irregular
Conchas	Fruto com deficiência genética
Brocados	Grãos atacados por brocas
Quebrados	Grãos quebrados pelo mal ajustamento dos descascados
Coco	Cereja seca juntamente com o grão

(Fonte: Vasconcelos, 2005)

Foi avaliada por MAZZAFERA, (1999) a composição química de grãos verdes e grãos preto-verdes (aqueles que caem no chão quando ainda estão verdes), comparando-os com os grãos sadios. Como resultado dessa comparação, verificou-se que esses defeitos possuem umidade, níveis de sacarose, proteína e óleo totais menores que os grãos sadios. Esses resultados indicam que a presença de grãos defeituosos altera, de forma significativa, a composição química do produto final.

O volume, massa específica aparente e granular, parâmetros de cor e concentrações de cafeína, trigonelina e ácido 5-cafeoilquínico (5-ACQ) foram os parâmetros avaliados por MENDONÇA et al. (2003) em grãos defeituosos (PVA) e comparados com grãos sadios. Os autores concluíram que é possível diferenciar os grãos

pretos dos demais defeitos (VA) por meio de atributos físicos e químicos, uma vez que volume, massa específica, luminosidade e concentração de 5-ACQ foram inferiores para o defeito em questão. Em relação à concentração de cafeína, não houve diferença entre os três defeitos e para a concentração de trigonelina os grãos verdes merecem destaque por apresentarem menores concentrações que os demais após a torração. Com respeito à trigonelina, os grãos pretos apresentaram o menor valor antes da torrefação, apresentando também a menor degradação após a torrefação (FRANÇA et al. 2005a; MENDONÇA et al. 2003). Outra conclusão importante desse estudo é que os grãos pretos torram menos quando comparado com os grãos sadios para as mesmas condições de torração, e isso contribui para a depreciação da qualidade da bebida quando esse defeito é misturado com grãos sadios.

Em contrapartida aos dados avaliados por MENDONÇA et al. (2003), FRANÇA et al. (2005a) demonstram que grãos pretos têm aproximadamente 30% a mais de cafeína em relação aos outros defeitos. Os resultados obtidos por OLIVEIRA et al. (2006) estão de acordo com os obtidos por VASCONCELOS et al. (2007) que constatam que não se observaram diferenças nos níveis de proteínas de grãos sadios e defeituosos. Esses autores também constataram que o teor de umidade dos grãos defeituosos foi menor quando comparado com grãos sadios. No referente ao conteúdo de cinzas, foram identificadas diferenças quando esses autores compararam esse parâmetro entre os defeitos, acharam que o grão preto possui o maior teor de cinzas (OLIVEIRA et al., 2006; VASCONCELOS et al., 2007).

Os melhores cafés em termos de qualidade de bebida parecem exibir, geralmente, concentrações menores de ácidos graxos livres (AMORIM, 1978). Por sua parte PEREIRA, (1997) observou um aumento na porcentagem de ácidos graxos livres com a intensificação do tipo de defeito; valores próximos foram obtidos para os grãos “verdes” e “ardidos”, constatando-se teores bem mais elevados para o defeito preto. Em contraposição a esses dados, OLIVEIRA et al. (2006) não encontram diferenças significativas entre a composição dos ácidos graxos presente no óleo extraído dos grãos de café cru sadios e defeituosos, sendo que os ácidos linoleico e palmítico foram os ácidos graxos encontrados em maiores proporções, em média, 44% e 34%, respectivamente. Tanto OLIVEIRA et al. (2006) como VASCONCELOS et al. (2007) afirmam que o teor de lipídeos é significativamente diferente entre os grãos crus defeituosos e sadios. O grão sadio possui o maior teor de lipídeos quando comparado aos grãos defeituosos.

Dentre os grãos defeituosos, o grão preto é o que mais se diferencia dos grãos sadios quanto aos parâmetros físico-químicos. VASCONCELOS et al. (2007) observaram que o teor de umidade, teor de minerais, atividade de água, luminosidade, acidez, pH e presença de histamina são possíveis parâmetros para diferenciação de grãos de café crus sadios e defeituosos. Esse mesmo estudo concluiu que, para grãos de café torrado, somente o teor de minerais (em todos os graus de torração) e pH (nas torrações média e escura) mantiveram a tendência de diferenciação entre grãos de café sadios e defeituosos (VASCONCELOS et al. 2007).

Sob o termo fibra bruta, encontram-se as frações de celulose e lignina insolúveis, representando a grande parte da fração fibrosa dos alimentos (SILVA, 1990). No trabalho realizado por PEREIRA (1997) observou-se que o teor de fibra bruta tem uma tendência ascendente para os grãos “verdes”, “ardidos” e “pretos”.

A sacarose é degradada quase que em sua totalidade durante a torrefação, originando açúcares menores precursores de ácidos e aldeídos, responsáveis pelo “flavor”. Assim, se a mesma encontra-se em concentrações basais reduzidas, devido a uma atuação mais intensa de enzimas sacarolíticas provenientes de microorganismos que atacam os grãos gerando os defeitos, provavelmente ocorrerão modificações nos demais constituintes dos grãos torrados com alterações na qualidade da bebida (PEREIRA, 1997).

No processo de torrefação do café, os açúcares redutores particularmente reagem com aminoácidos (reação de Maillard), originando compostos coloridos desejáveis, que são os responsáveis da cor marrom do café torrado, e também existe a geração de compostos voláteis que apresentam um grande efeito no aroma do produto final.

2.3 Compostos Voláteis do Café

Muitos autores têm trabalhado no estudo dos compostos voláteis do café tendo sido avaliados, tanto cafés arábica como robusta como também as misturas de ambas as espécies. No entanto, não existem dados referentes a compostos voláteis nos grãos defeituosos de café.

Os progressos em análises instrumental, particularmente cromatografia líquida de alta eficiência (HPLC) e espectrometria de massas, tem mostrado que a fração de compostos voláteis de café torrado esta formada por uma grande variedade de compostos

(VITZTHUM, 2001). Esses compostos são responsáveis pelo aroma do café torrado. Atualmente, mais de mil compostos já foram identificados, primordialmente por cromatografia gasosa acoplada a espectrometria de massas (DE MARIA et al., 2000), com uma ampla variedade de grupos funcionais e características odoríferas diferentes, alguns agradáveis outros não tanto, e muitos outros provavelmente estão abaixo seu nível detectável. Sugere-se que somente aqueles compostos, cuja concentração supere seu próprio limite de detecção (threshold), serão odores ativos em alimentos (VITZTHUM, 2001). Muitos desses compostos também foram determinados quantitativamente, correspondendo a 700-800 mg por kg de café torrado. Dentre estes destacam-se as classes de furanos (~20%), cetonas (~18%) e aldeídos (~10%) (SANZ et al., 2001).

Os efeitos que um composto volátil tem sobre outro não estão bem esclarecidos e é quase que impossível de esclarecer numa mistura tão complexa como é a fração de voláteis do café onde vários desses compostos encontra-se em concentrações diferentes (DART & NURSTEN, 1985).

No café cru foram identificados cerca de 230 compostos voláteis. O composto predominante odorante de café cru é a 3-isobutil-2-metoxypirazina, porém, em segunda categoria é o 2-metoxi-3,5-dimetilpirazina (VITZTHUM, 2001). O mesmo autor reporta que em café cru foram encontradas altas concentrações de 4-vinilguayacol, (E)-2-nonenal, e β -damascenona.

Tanto espécie, procedência do café, condições climáticas e solo no qual a planta foi cultivada, como grau de torrefação são fatores que possuem uma influencia direta sobre o aroma final do café (DART & NURSTEN, 1985; VITZTHUM, 2001). Durante o processo de torração, são liberados vários gases, destacando-se compostos inorgânicos e inodoros tais como gás carbônico, monóxido de carbono, nitrogênio e água.

Os mecanismos de formação dos compostos voláteis presentes no café torrado são extremadamente complexos e há clara evidência da existência de uma ampla faixa de interações entre várias vias implicadas na formação desses compostos (ILLY & VIANI, 1995; BUFFO & CARDELLI-FREIRE, 2004). Esses autores citam essas possíveis vias de formação de voláteis:

- a) **Reação de Maillard ou escurecimento não enzimático**, baseada na reação do nitrogênio contido nas proteínas, lipídeos, aminoácidos, serotonina, trigonelina e carboidratos redutores, fenóis e outros para formar aminoaldosas por condensação.

- b) **Degradação de Strecker de aminoácidos (via reação de Maillard)**, reação entre um aminoácido e um α dicarbonil com a formação de uma aminocetona que se condensa para formar compostos heterocíclicos ou reage com formaldeído para formar oxazóis.
- c) **Ruptura de aminoácidos sulfurados**: cisteína, cistina e metionina que são transformados em mercaptans, também como os tiofenos e tiazóis que reagem com açúcares redutores ou produtos intermediários da reação de Maillard.
- d) **Degradação de proteínas e aminoácidos livres**, ou seja, degradação de hidroxiaminoácidos, serina e treonina, capazes de reagir com sacarose para formar principalmente as alquilpirazinas.
- e) **Degradação de prolina e hidroxiprolina** que reagem com produtos intermediários da reação de Maillard dando piridinas, pirróis e pirolizinas, que depois vão formar alquil-, acil-, e furfúrilpirróis.
- f) **Degradação da trigonelina** durante o processo de torrefação do café a trigonelina se desmetila a ácido nicotínico. Sabe-se que a termólise da trigonelina gera piridinas, pirróis e compostos bicíclicos, sendo também a decarboxilação da trigonelina uma fonte de CO_2 gerada durante a torrefação.
- g) **Degradação de açúcares**, os açúcares não voláteis como hexoses, pentoses, dissacarídeos, são degradados pelo calor produzindo compostos com aroma a caramelo e de cor escura, como por exemplo, maltol, furanol.
- h) **Degradação de lipídeos**, a auto-oxidação de ácidos graxos insaturados, principalmente os de cadeia longa que produz aldeídos insaturados como: 2,4-alcadienal, 2-enals, e hexanal.
- i) **Degradação de ácido quinico** formando fenóis.
- j) **Degradação de pigmentos** principalmente carotenóides gerando β -damascenone.

Esses autores também consideram, por último, porém não menos importante a interação entre produtos intermediários de decomposição, muitos deles desconhecidos.

Os compostos orgânicos voláteis que têm tido a maior atenção dos pesquisadores são os **heterocíclicos**. São compostos que possuem no anel um elemento diferente do carbono, seja um oxigênio, um enxofre ou um nitrogênio. Apresentam-se na Figura 7 alguns dos compostos heterocíclicos encontrados no café torrado.

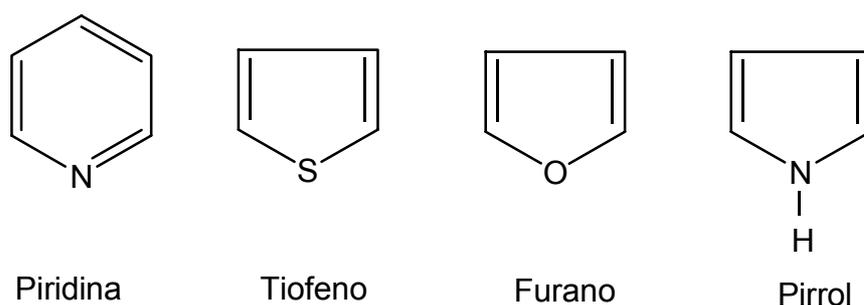


Figura 7 – Estrutura de alguns compostos heterocíclicos encontrados no café torrado.

DART & NURSTEN (1985) revelam por que alguns compostos diminuem e outros aumentam no decorrer do processo de torrefação, explicando que se pode dever a que os compostos voláteis são derivados de dois ou mais precursores, os que se degradam em proporções diferentes durante o processo de torrefação. VITZTHUM (2001) acrescenta ao exposto por DART & NURSTEN, (1985) que a diminuição de determinados compostos durante a torrefação também se pode dever à labilidade desses compostos como também à participação na formação de outros.

Os furanos são os compostos heterocíclicos que estão em maior quantidade no café torrado e são formados pela degradação pirolítica de açúcares (hexosas e hexosas fosfatos como também pentosas em presença de glicina) (VITZTHUM, 2001), incluindo funções como aldeído, cetonas, ésteres, álcoois, éteres, ácidos e tióis (DART & NURSTEN, 1985; VITZTHUM, 2001; ILLY e VIANI, 1995; DE MARIA et al. 1999). Cerca de cem furanos já foram identificados no café torrado, dentre eles, alquil-furanos, alquenil-furanos, furanos contendo oxigênio como substituinte, furil-alcanonas, furanos com função éter e éster. Também foi descrita na literatura a presença de furanos condensados com pirazinas e pirróis. Alguns furanos foram encontrados em grandes quantidades no café torrado, sendo os mais abundantes o furil-2-metanol (90-135mg/kg de café torrado), 2 furfural (55-70 mg/kg), 2-metil-tetraidro-3-furanona (10-16 mg/kg), 2-acetil-furano (6-12 mg/Kg) (DE MARIA et al., 1999), 4-hidroxy-2,5-dimetil-3(2H) furanona (VITZTHUM, 2001), entre outros. Os furanos são oriundos principalmente da degradação de glicosídeos presentes no café, embora existam evidências que estes seriam formados também da degradação de terpenos (DE MARIA et al., 1999). Também tem-se evidência da

participação dos polissacarídeos (arabinogalactanos) como precursores de furanos no café torrado. Os furanos contribuem consideravelmente para as características sensoriais do café torrado. Sabe-se que 0,01-0,5 ug/l de 2-tio-hidroxi-metil-furano em água fornece aroma de café torrado fresco, enquanto 1-10 ug/l produz aroma de café torrado velho. Logo, dependendo da concentração, esse composto pode ter qualidade sensorial boa ou ruim para o café torrado, aumentando de 5 a 10 vezes durante a estocagem.

O etil-furano é o responsável pelo aroma de matéria queimada e pelo odor doce parecido com o aroma de café torrado. Furano e 2-metil furano fornecem aromas similares ao do éter, o furfural, aroma de grama (DART & NURSTEN, 1985) e assim por diante; cada composto tem um odor característico dependendo da concentração em que se encontra (DE MARIA et al., 1999).

DE MARIA et al. (1999) define os pirróis como compostos característicos de alimentos processados termicamente. Esses compostos aumentam gradativamente à medida que aumenta o grau de torra. Encontram-se em maior abundância na espécie arábica. Cerca de 70 já foram identificados no café torrado, dos quais aproximadamente 45% são alquil-pirróis. Os pirróis podem ser formados a partir da reação de Maillard, da degradação de Strecker, da pirólises de aminoácidos ou ainda da degradação de trigonelina (DART & NURSTEN, 1985; DE MARIA et al., 1999). Também poderiam ocorrer reações secundárias entre a trigonelina e outros constituintes, como os glicídeos que estão em grandes quantidades no café (DE MARIA et al., 1999). Os pirróis apresentam propriedades sensoriais bem características. Os alquil- e acil- pirróis apresentam um odor desagradável, porém os alquil-pirróis, em baixas concentrações, fornecem um aroma doce e levemente queimado, enquanto os acil-pirróis fornecem um aroma semelhante ao do pão, sendo os furil-pirróis os responsáveis por um aroma de cogumelo. Os três pirróis de maior impacto no aroma de café torrado foram o 2-acetil-pirrol, o N-furil-2-metil-pirrol e o N-etil-2-formil-pirrol (DE MARIA et al., 1999).

DE MARIA et al. (1999) e ROJAS MONROY (2005) constataam que vinte e nove oxazóis foram identificados no café torrado. Os alquil-oxazóis foram detectados em maior número. Apesar dos oxazóis serem formados exclusivamente por tratamento térmico, o mecanismo exato de formação desses compostos ainda não é conhecido. Esses compostos apresentam aroma doce e semelhante ao de nozes, sendo nenhum deles associado à percepção de queimado. Tanto DART e NURSTEN (1985) como ILLY e VIANI, (1995), e DE MARIA et al. (1999) afirmam que nenhum oxazol foi identificado

como componente de impacto para o aroma de café, embora estes compostos sejam característicos de alimentos processados termicamente.

Vinte e sete tiazóis foram identificados no café torrado, sendo a maioria de alquil-tiazóis. Os tiazóis seriam formados pela decarboxilação de aminoácidos com fechamento do anel para formação de tiazolidinas, seguido pela sua oxidação a acil-tiazóis. Esses possuem aroma semelhante ao de vegetais, de carne, de matéria-torrada, e de nozes (DART & NURSTEN, 1985). Sabe-se que a presença de substituintes de cadeias laterais curtas na molécula do tiazol intensifica esses aromas. DE MARIA et al. (1999) constata que nenhum tiazol, ao igual que os oxazois, foi identificado como componente de impacto para o aroma do café.

Os compostos sulfurados são muito importantes no aroma do café torrado, apesar de estar em baixas concentrações. O café robusta possui maior quantidade de compostos com enxofre que o café arábica (ILLY & VIANI, 1995). Essa afirmação foi corroborada por TRESSL (1989), que demonstra que a iguais condições de torra a variedade robusta possui altas concentrações de furfurilmercapto, furfurilsulfuro, furfurilmetidissulfuro, formados na degradação da cisteína e metionina em presença de açúcares redutores. Já para café arábica somente correspondem os derivados 5-metil (TRESSL, 1989). Tiofenos identificados até o momento como componentes da fração volátil do café torrado foram trinta e um (DE MARIA et al., 1999). Desses, somente onze são exclusivos do café. A formação dos tiofenos está relacionada à presença de aminoácidos sulfurados. Esses aminoácidos sofrem degradação individual durante a torrefação e interação com açúcares redutores e intermediários da reação de Maillard, resultando de uma ampla variedade de compostos voláteis sulfurados. Esses autores (TRESSL, 1989; DE MARIA et al., 1999), assim como DART & NURSTEN (1985), atribuíram aos tiofenos aromas de cebola, de mostarda e também aroma sulfuroso, porém a seus ésteres, aldeídos e cetonas atribuiu aromas doce, de mel e de caramelo. De modo geral o tiofeno apresenta um odor um tanto quanto semelhante ao do benzeno. O 3-metil-2-acetil-tiofeno é considerado um dos possíveis compostos voláteis de impacto para o aroma de café torrado. Foi demonstrado que os tiofenos surgem como produtos da pirólise individual da cisteína.

As pirazinas contribuem apreciavelmente para as características sensoriais dos alimentos, sendo consideradas flavorizantes importantes para a indústria de produtos alimentícios. Esses compostos são característicos de alimentos submetidos a tratamento térmico, com exceção das metoxi-pirazinas, que são degradadas durante a torrefação de

café cru. O conteúdo das pirazinas é proporcional ao grau de torrefação. Esse conteúdo aumenta até certo limite, à medida que a temperatura de torrefação aumenta. Porém quando essa torrefação é muito prolongada começa a ocorrer degradação dessas pirazinas. Portanto, maiores quantidades de pirazinas serão encontrados em cafés submetidos à torrefação leve e moderada. Do grupo das alquil-pirazinas, destacam-se as metil- e dimetil-pirazinas que, segundo DE MARIA et al. (1999) e VITZTHUM, (2001) são as pirazinas majoritárias no café torrado. Já foram identificadas mais de oitenta pirazinas como componentes da fração volátil do café torrado.

Foi descoberto que as pirazinas podem ser geradas diretamente por reações de Maillard, por degradação de Strecker ou ainda por pirólises de aminoácidos (DART & NURSTEN, 1985; DE MARIA et al., 1999; VITZTHUM, 2001). Na reação de Maillard as maiores fontes de carbono para formação de pirazinas são os produtos da degradação de carboidratos, enquanto que os aminoácidos funcionam basicamente como fontes de nitrogênio. SEMMELROCH & GROSCH (1995) demonstraram que a isobutil-metoxipirazina está presente no café arábica torrado em uma concentração superior à do café robusta. CZERNY & GROSCH (2000) encontraram depois de avaliar o café arábico verde procedente da Colômbia que o composto 3-isobutil-2-metoxypirazina foi o odorante responsável pela característica “peasy” (odor desagradável) dos cafés crus. Os autores observaram que esse composto não apresentou mudanças na sua concentração depois da torrefação, quando comparado com outros compostos que apresentaram grande aumento depois de dito processo, como é o caso da β -damascenona, 2-furfuriltiol, entre outros, que conseguem mascarar o odor típico e desagradável da 3-isobutil-2-metoxypirazina.

As pirazinas possuem aroma de trigo doce, enquanto que as alquilpirazinas oferecem aroma de terra, noz torrada e queimada (ILLY & VIANI, 1995). A presença do grupo tiol nas pirazinas dá ao café torrado aroma de noz e biscoito. Quando grupo furfúril e tiol se encontram juntos, oferecem aroma de carne cozida (DARK & NURSTEN, 1985).

As piridinas são substâncias encontradas em alimentos submetidos à atividade microbiana ou a tratamento térmico, como seria o caso de café, bebidas alcoólicas, leite e carne. Segundo dados da literatura as quantidades de piridina no café torrado dependem do grau de torrefação, sendo as quantidades de piridinas maiores no café submetido à torrefação forte. Segundo o avaliado por TRESSEL (1989) o café arábica possui maior quantidade de piridinas quando comparado com café robusta nas mesmas condições de torrefação. Além da piridina, a presença de seis alquil-piridinas foi descrita na literatura

referente à fração volátil do café torrado, sendo um total de doze piridinas identificadas, até o momento. As piridinas podem ser geradas por degradação térmica da trigonelína (base nitrogenada), por pirólises de aminoácidos, por degradação de Strecker ou ainda via reação de Maillard (DE MARIA et al., 1999). As piridinas apresentam propriedades sensoriais peculiares, sendo associadas a um odor desagradável característico presente nos alimentos. A piridina foi uma das responsáveis pelo odor desagradável de café torrado velho (ILLY & VIANI, 1985; DE MARIA et al., 1999). Porém, há pouca informação disponível referente à contribuição das piridinas para o aroma final do café torrado (DE MARIA et al., 1999).

Além dos heterocíclicos, existem vários outros compostos na fração volátil do café como os compostos alifáticos, alicíclicos, e aromáticos. Os compostos alifáticos são os de cadeia aberta (alcanos, alquenos e alquinos). Os alicíclicos são aqueles originados pelo fechamento em si mesmo de uma cadeia de carbonos saturados. Os compostos aromáticos são o benzeno e os compostos de comportamento químico similar, caracterizados pela sua tendência à substituição heterolítica. Geralmente esses compostos são encontrados em baixas concentrações, dificultando seu estudo quantitativo e a avaliação de suas propriedades sensoriais. Esses compostos são: fenóis, aldeídos, cetonas, álcoois, éteres, hidrocarbonetos, ácidos orgânicos, anidridos, ésteres, lactonas, aminas e os compostos contendo átomo de enxofre (sulfetos e disulfetos) (DE MARIA et al., 2000).

Os fenóis pertencem ao grupo dos compostos aromáticos. Sua variedade e concentração sofrem influência do grau de torrefação, e maiores quantidades são detectadas em cafés submetidos à torrefação forte. Vale notar que o café da espécie robusta normalmente apresenta um perfil de compostos fenólicos mais ricos do que a espécie arábica (DART & NURSTEN, 1985; DE MARIA et al., 2000; VITZTHUM, 2001). BLATES & BOCHMAN (1987) demonstraram a possibilidade de os fenóis serem formados através da degradação térmica da sacarose. Porém, a principal via de formação desses compostos parece ser a degradação dos ácidos fenólicos livres (ácido p-cumárico, ferúlico, caféico, quínico) durante a torração do café, o que se encontra relacionado à degradação a ácidos clorogênicos (ACGS). Esses ácidos são principais compostos fenólicos não voláteis encontrados no café. Os ácidos clorogênicos são precursores importantes dos ácidos fenólicos livres e, portanto, dos compostos fenólicos voláteis que participam da formação do aroma do café processado (DE MARIA et al., 2000). Como uma afirmativa e esses estudos, modelos experimentais feitos por VITZHUM, (2001)

afirmam que o ácido 4-feruloilquinico é o precursor de o guaiacol, 4 etilguaiacol e 4 vinilguaiacol.

De acordo com DART & NURSTEN (1985) os compostos fenólicos voláteis apresentam características sensoriais bem dispersas, sendo eles os responsáveis por odores de matéria queimada, de especiarias, de cravo, de fumo e também pela sensação de amargor e adstringência encontradas no café.

Em estudos realizados por CLIFFORD (1985), foram determinadas as concentrações de alguns fenóis presentes no aroma do café e seus limites de detecção em água (“threshold”). O limite de detecção é a concentração mínima de uma determinada substância, que ainda é capaz de permitir a percepção de algum aroma. Com base nos resultados avaliados nesse trabalho, concluiu-se que guaiacol e 4-vinil-guaiacol podem ser considerados odorantes potentes para o café torrado. Determinou-se que os níveis de concentração de guaiacol, 4-vinil-guaiacol, 4 etil guaiacol e vanilina foram mais elevados na bebida de café robusta do que na bebida de café arábica, isto se deve a que a espécie robusta possui maior concentração de ácido clorogênicos (DE MARIA et al., 2000; VITZHUM, 2001). Segundo VITZHUM (2001), pode-se dizer que somente uma pequena fração de voláteis que é produzida no processo de torração do café possui aroma ativo.

Entre os compostos carbonílicos encontrados no café, podem-se destacar as cetonas e os aldeídos. Estes últimos encontram-se entre os compostos de maior volatilidade (ROJAS MONROY, 2005) é por essa razão que os aldeídos são encontrados nos cafés recentemente torrados em altas concentrações, porem são perdidos rapidamente por volatilização e oxidação (DART & NURSTEN, 1985; ILLY & VIANI, 1995).

Têm sido identificados aldeídos do grupo alifáticos e aromáticos. Os aldeídos voláteis provêm da auto-oxidação de lipídeos. SHIBAMOTO & YEO (1992) demonstraram que os lipídeos expostos ao aquecimento em atmosfera de oxigênio se decompõem em produtos secundários, dentre os quais se destacam os aldeídos. Muitos desses aldeídos produzem compostos voláteis heterocíclicos ao reagirem com compostos amínicos, em alimentos tratados termicamente. Outros aldeídos têm sua origem relacionada à degradação de Strecker e outros também se relacionam às reações de Maillard. Os aldeídos possuem características sensoriais bem diversificadas (DE MARIA et al., 2000).

As cetonas de baixa massa molecular são abundantes e diminuem durante a estocagem do café torrado, devido à volatilização. Foram identificadas por vários autores as cetonas alifáticas e as cetonas cíclicas. Estes compostos apresentam várias possíveis

vias de formação, por exemplo, as cíclicas como maltol e 3-metilciclopent-2-en-2-olona, são derivadas da pirólise da sacarose (DART & NURSTEN, 1985; ILLY & VIANI, 1995, DE MARIA et al., 2000); compostos carboxílicos são provenientes da pirólise de carboidratos, ou também da autooxidação de lipídeos, particularmente dos ácidos graxos insaturados (DART & NURSTEN, 1985). As cetonas são consideradas como produtos secundários da reação de Maillard. A β -damascenona, por exemplo, é um produto característico de quebra de carotenóides. As cetonas apresentam propriedades sensoriais bem variadas, sendo a β -damascenona uma das substâncias de impacto para o aroma final do café torrado (DART & NURSTEN, 1985). SEMMELROCH & GROSCH (1995) demonstraram que 2,3 Butanodiona e 2,3 Pentanodiona foram os principais odorantes de café arábica e robusta tanto para café torrado e moído quanto para café bebida.

Foram detectados na fração volátil do café torrado, 35 hidrocarbonetos alifáticos e 32 aromáticos, sendo os mais abundantes os alcanos e alquenos de cadeia curta (DE MARIA et al., 2000). Existe evidência que certos hidrocarbonetos sejam derivados da oxidação de lipídeos do grão verde, desenvolvida durante a estocagem e o transporte anteriores a torração (CLIFFORD, 1985). Nenhuma informação sobre as propriedades sensoriais dos hidrocarbonetos foi encontrada na literatura relacionada ao aroma do café (DE MARIA et al., 1999). Nenhum dos compostos desse grupo, apesar de estarem em grandes concentrações no café torrado, é considerado de impacto para o aroma final do café.

Na fração volátil do café torrado foram identificados 16 álcoois alifáticos e dois aromáticos. Os álcoois citados com maior frequência são o metanol e o etanol (DE MARIA et al., 2000). As razões entre as concentrações de determinados compostos e de alguns álcoois podem ser usadas como indicadores do tempo de estocagem do café torrado e de seus produtos. Os álcoois presentes no café torrado são uns dos produtos secundários da degradação oxidativa de lipídeos e da quebra de carotenóides durante a torrefação do café (DART & NURSTEN, 1985; DE MARIA et al., 2000).

Os éteres voláteis não estão presentes no café torrado em quantidades muito elevadas, predominando os tioéteres. Esses compostos não se apresentam como compostos de impacto para o aroma final do café torrado. (DE MARIA et al., 2000). Os mesmos autores afirmam que os ácidos carboxílicos estão presentes em grandes quantidades na fração volátil, tendo sido identificados cerca de vinte ácidos alifáticos e dois alicíclicos. Segundo DE MARIA et al. (2000), os principais ácidos carboxílicos voláteis encontrados no café torrado são o ácido acético, o ácido fórmico e o ácido propanóico.

No caso dos ácidos voláteis, a redução em seu conteúdo à medida que o tempo de torrefação aumenta é devida a sua volatilização, enquanto que para ácidos não-voláteis, sua perda durante a torrefação está relacionada à decomposição térmica (DE MARIA et al., 2000). Apesar da volatilização desses ácidos, estes autores observaram um aumento de acidez desse produto durante a estocagem, caracterizado por valores de pH menores e por um aumento de acidez titulável da bebida. Acredita-se que esse aumento de acidez estaria relacionado à oxidação dos aldeídos voláteis a ácidos carboxílicos. Existem várias vias possíveis de formação para os ácidos carboxílicos voláteis, sendo uma delas a degradação de glicídios; outra das vias de formação dos ácidos carboxílicos pareceria ser a degradação térmica de ésteres e a auto-oxidação de aldeídos e cetonas. Esses ácidos voláteis presentes no café torrado apresentam odores bem característicos, porém não são considerados substâncias de impacto para o aroma final do café torrado (DE MARIA et al., 2000).

Os ésteres encontram-se em grandes quantidades na fração volátil do café torrado. Foram identificados 29 ésteres na fração volátil do café torrado, dentre eles: formato de metila, acetato de metila, acetato de etila, e salicilato de metila. A maioria dos ésteres voláteis é produzida no fruto do café antes da torrefação, sofrendo pirólise durante o aquecimento (DE MARIA et al., 2000). O mesmo trabalho concluiu também que os ésteres furfurílicos são formados somente durante o processo de torrefação e reportaram que os ésteres produzidos durante a torrefação poderiam ser gerados a partir da reação de ésterificação entre um ácido e um álcool presentes no café. Porém, no café cru, condições favoráveis para a ésterificação poderiam ser obtidas através de um processo de secagem artificial, onde são usadas temperaturas mais elevadas. Nesse mesmo trabalho se sugere que os ésteres presentes no café defeituoso teriam em parte sua origem relacionada a atividade microbiana, reações enzimáticas ou químicas, que poderiam ocorrer ao longo de um processamento inadequado (estocagem prolongada do fruto, fermentação de duração excessiva, e secagem a temperaturas muito elevadas) para a preparação do café. Os ésteres voláteis apresentam odores bem variados (DE MARIA et al., 2000).

Todos os constituintes das plantas têm ácidos clorogênicos (ACG) em elevadas concentrações. O café cru apresenta concentrações desse ácido no intervalo de 6 a 12% (CLARK, 1987). Estes são: cafeoilquinico (CQA), dicafeoilquinico (diCQA), feruloiquinico (FQA) e p-coumaroilquinico (pCoQA). Nove lactonas já foram identificadas na fração volátil do café torrado. A tiobutirilactona (composto heterocíclico) figura entre os

componentes considerados de impacto para o aroma de café torrado (CLIFFORD, 1985). Estudos realizados por FARAH et al. (2005) descrevem que a formação das lactonas ocorre durante o processo de torrefação, tendo como precursores aos ácidos clorogênicos. Geram-se por perda de água e formação de uma união éster intramolecular da molécula de ácido quínico. Esses autores avaliaram que as lactonas alcançam seu máximo nível aos sete minutos após o iniciado processo de torrefação (suave ou média). No entanto, para torração escura, após dez minutos de processo, os valores de lactonas diminuem 20% de seu valor máximo, e detectaram-se somente traço das mesmas após 15 minutos de torração.

Foram identificadas 17 aminas voláteis (12 alifáticas e 5 aromáticas) no café torrado, sendo aminas primárias e secundárias (CLARKE, 1987). Tem-se pouca informação com relação à origem e as propriedades sensoriais das aminas voláteis presentes no café torrado.

De acordo com DART & NURSTEN (1985), os compostos que contém enxofre são de grande importância para o aroma do café torrado. Esses compostos apresentam limites de detecção muito baixos a aromas bem potentes e característicos, tendendo a dominar o aroma total do produto no qual estão presentes. O café robusta possui maior quantidade de compostos com enxofre em comparação ao café arábica (ILLY & VIANI, 1995).

Além dos compostos heterocíclicos foram detectados mais 65 compostos voláteis contendo enxofre. A origem desses compostos relaciona-se à degradação direta de aminoácidos sulfurados (cistina, cisteína e metionina), como também à interação desses compostos com açúcares redutores e intermediários das reações de Maillard (DART & NURSTEN, 1985). Os compostos voláteis sulfurados contribuem de forma decisiva para o aroma final do café torrado (DE MARIA et al., 1999).

Tendo-se realizado uma exaustiva revisão bibliográfica dos compostos voláteis no café, não foram encontrados dados na literatura referentes ao perfil de voláteis em grãos de café defeituosos. Os únicos trabalhos que tratam da diferenciação de cafés pelo perfil de compostos voláteis, são referentes a comparação entre as espécies arábica e robusta (SANZ et al. 2001; SANZ et al. 2002; MOMDELLO et al. 2005) Portanto, este trabalho caracteriza-se como uma contribuição original aos estudos de caracterização química de grãos defeituosos no café.

2.5 Microextração em fase sólida (MEFS) (SPME)

A microextração em fase sólida ("SPME-solid phase microextraction") desenvolvida por Arthur e Pawliszyn em 1990 (PAWLISZYN, 1999), é uma técnica analítica baseada na adsorção dos analitos presentes numa matriz, que pode ser sólida, líquida ou gasosa, para uma fina fibra de sílica fundida revestida por uma camada polimérica. De 1990 até os dias atuais, o sistema de SPME foi aperfeiçoado e, atualmente, consiste em uma haste de sílica fundida, recoberta por uma de fase sólida ou recoberta com um filme fino de um líquido polimérico, que apresenta diferentes espessuras, como se pode observar na Figura 8.

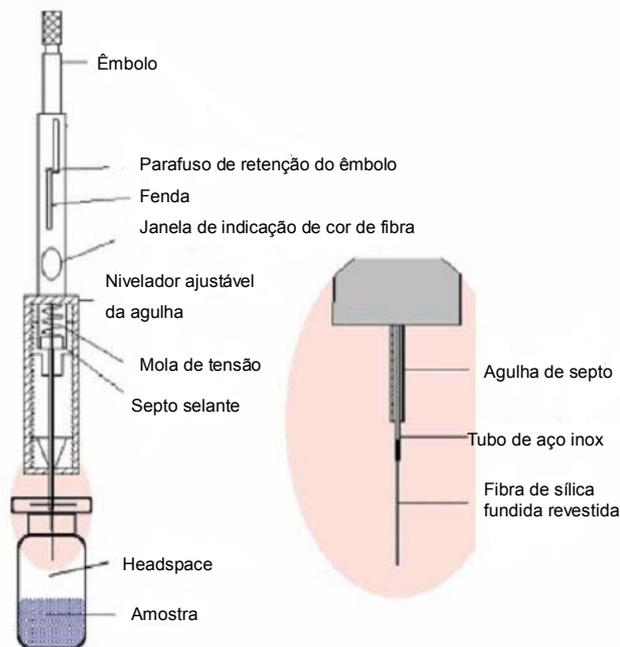


Figura 8 – Representação esquemática de uma seringa de SPME para análises de headspace.

Fonte: ALMEIDA et al., 2004.

As fibras polares são efetivas para analitos polares, enquanto as fibras apolares extraem analitos apolares. Na atualidade, os tipos de revestimento disponíveis nas fibras podem ser classificados como apolares, bipolares e polares, que vão extrair analitos voláteis, semivoláteis e não voláteis a partir de diferentes matrizes (PAWLISZYN, 1999).

Na Tabela 8 podem-se observar as diferentes fibras de SPME com suas respectivas polaridades.

No processo de extração por SPME podem-se diferenciar duas etapas: a) na primeira etapa acontece a partição dos analitos entre o revestimento da fibra e a amostra; ocorre uma migração dos analitos desde a amostra à fibra até alcançar o equilíbrio. Acontece essa etapa quando a fibra é exposta à amostra, por tempo e temperatura suficientes para que o equilíbrio seja alcançado; b) na segunda etapa acontece a dessorção dos analitos retidos na fibra. No caso de SPME-associada as análises por cromatografia gasosa (SPME-CG) a última etapa ocorre num processo térmico, enquanto para SPME associada a análises por cromatografia líquida de alta eficiência (SPME-HPLC), pela adição de um solvente orgânico (PAWLISZYN, 1999).

Tabela 8 – Resumo das interações presentes nas fibras de SPME

Fibra de SPME	Interação	Polaridade
Sílica fundida pura	Adsorção	Desconhecida
PDMS	Adsorção	Apolar
PA	Adsorção	Polar
PDMS/DVB	Adsorção	Mista
CAR/PDMS	Adsorção	Mista
CW/DVB	Adsorção	Polar
DVB/CAR/PDMS	Adsorção	Mista
CW/TPR	Adsorção	Mista

FONTE: VILELA PARREIRA, 2005.

Há três maneiras distintas de se fazer a extração dos compostos de interesse através de SPME:

a) imersão direta: a fibra é introduzida na amostra;

b) extração por headspace: os analitos são extraídos da fase de vapor que está em equilíbrio com a amostra. Este método de extração permite proteger a fibra de compostos de elevada massa molecular e modificar a matriz da amostra sem danificar a fibra, como, por exemplo, variando o pH, análises de amostras sólidas, como sedimentos ou alimentos onde a interferência da matriz é importante. A pesar de todas essas vantagens, esse

método de extração está restrito a compostos voláteis e semivoláteis (PAWLISZYN, 1999; SANZ et al., 2001);

c) SPME com proteção de membrana: usa-se uma membrana ao redor da fibra evitando, assim, que substâncias de alta massa molecular, como as proteínas, penetrem na fibra e a danifiquem.

Os analitos voláteis são extraídos mais rapidamente que os semivoláteis, porque os primeiros encontram-se em maiores concentrações no headspace. Neste caso os tempos de equilíbrio são menores quando comparados com imersão direta. Isto se deve a várias razões: uma grande fração dos analitos está presente antes do começo da extração, existe uma grande interfase entre a matriz da amostra e o headspace, e os coeficientes de difusão na fase gasosa são geralmente mais altos que na fase líquida (PAWLISZYN, 1999; SANZ et al., 2001).

As vantagens que a técnica de extração de SPME apresenta são muitas: baixo custo, automatizável, requer pequeno volume de amostra, não precisa do uso de solventes orgânicos, é aplicável à determinação de compostos de diferente volatilidade, e, devido a seu desenho, é de fácil transporte, o que facilita a realização de amostragem no campo. O limite de detecção da SPME é na ordem de partes por trilhão (ppt). Uma das principais desvantagens é devido ao revestimento das fibras ser muito pequeno. Portanto, podem-se obter limites de detecção baixos, o que se vê potencializado quando se utiliza SPME com HPLC (PAWLISZYN, 1999).

Têm sido realizadas muitas pesquisas que combinam esta técnica de SPME com café torrado e moído, porém não há evidências relacionadas aos defeitos do café (MONDELLO et al., 2005; ZAMBONIN et al., 2005; RYAN et al., 2004; MAYER & GROSCH, 2001; CZERNY & GROSCH, 2000; ROBERTS et al., 2000)

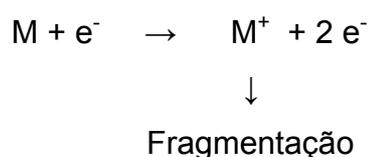
2.6 Cromatografia gasosa acoplada a espectrometria de massas

A cromatografia é um método físico de separação descoberta em 1906 por Mikahail Tswett. Baseia-se nas diferenças de comportamento de partição que ocorre entre uma fase móvel (fase que carrega a mostra) e uma fase estacionária (coluna cromatográfica) dos componentes de uma mistura. À medida que os componentes da mistura são eluídos da coluna, podem ser quantificados por um detector ou coletados para outras análises como espectrometria de massas (MS).

Átomos gasosos e moléculas são de difícil controle no laboratório; somente suas pressões podem ser variadas facilmente. No entanto, uma vez que átomos e moléculas são ionizados, os íons produzidos podem ser controlados rapidamente por campos magnéticos e/ou elétricos onde ambos os campos são mantidos constantes ou são variados rapidamente. A partícula carregada responde rápida e precisamente a campos magnéticos e/ou elétricos (SIVERSTEIN & WEBSTER, 2000). Espectrometria de massas é o nome dado à manipulação de trajetórias iônicas tanto para regiões com campos como para regiões livres de campos. Os primeiros espectrômetros de massas foram desenvolvidos com base nas pesquisas pioneiras de J.J. Thomson em 1912 e F. W. Aston em 1919 (SIVERSTEIN & WEBSTER, 2000).

Os espectrômetros de massas podem ser divididos em quatro componentes principais: a) Injetor. Através dele, pequenas quantidades de amostras volatilizadas são introduzidas na fonte de íons; b) Fonte de íons. Ocorre aqui a geração de íons; c) Analisador. O analisador de massas separa os íons de acordo com suas razões massa-carga (m/z); d) Detector. Este converte o feixe de íons em sinal elétrico.

Um das técnicas de ionização mais utilizadas, e de fato, a utilizada neste trabalho, foi a de impacto por elétrons: elétrons liberados de alta energia (70 eV) de um filamento aquecido colidem com moléculas gasosas que entram na fonte de íons. O produto de uma colisão elétron/molécula é um íon positivo, possivelmente num estado eletrônico e/ou vibracional excitado (SILVERSTEIN & WEBSTER, 2000). No processo de ionização, um elétron secundário é ejetado da molécula gasosa.



A ruptura da ligação resulta na fragmentação do íon-precursor. Na investigação de moléculas gasosas por espectrometria de massas, observa-se freqüentemente que a magnitude dos fragmentos detectados é muito maior que a do íon-precursor. O padrão de fragmentação depende da composição desse íon, e o exame do padrão de fragmentação leva a uma compreensão da estrutura e composição do íon-precursor (SILVERSTEIN & WEBSTER, 2000).

Quando a ionização por impacto de elétrons está completa, os íons são direcionados para o analisador de massas. Para que este procedimento seja bem sucedido, placas carregadas positivamente na fonte de íons agem como um refletor, empurrando os íons em direção à abertura do espectrômetro de massa. Os refletores e placas estão comumente na região sob a influência do campo magnético. O campo magnético faz com que os íons assumam trajetórias helicoidais. A trajetória helicoidal aumenta o tamanho do caminho do íon dentro da fonte de íons do filtro de massa quadrupolar e, portanto, aumenta a ionização total na fonte de íons. Estes, por sua vez, são separados no analisador de massas de acordo a suas razões massa-carga. Finalizada a etapa do analisador, os íons são direcionados ao detector, que transforma o feixe de íons em sinal elétrico, gerando, assim, o espectro de massas para as razões massa-carga do intervalo de varredura. Cada pico obtido pode ser relacionado a uma correspondente razão massa/carga (SILVERSTEIN & WEBSTER, 2000).

3 MATERIAL E MÉTODOS

3.1 MATERIAL

3.1.1 Amostras

Neste trabalho, utilizou-se como matéria prima café arábica rejeitado pela máquina de separação por cor, de uma saca de 60 kg, proveniente da Fazenda Samambaia (Santo Antonio do Amparo, MG) safra 2004/2005, aqui denominado mistura de PVA. Cada tipo de defeito (preto, verde, ardido) foi separado manualmente dos grãos sadios da mistura PVA. Como a massa de grãos defeituosos disponível após o processo de separação manual era reduzida, os ensaios de padronização de rampas de temperatura para utilização das fibras, bem como os ensaios referentes ao estudo comparativo de utilização das mesmas, foram efetuados com café torrado e moído comercial (Melitta, tradicional).

3.1.2 Fibras de Micro extração em fase sólida (SPME)

Foram avaliados quatro tipos de fibras de SPME, conforme discriminados a seguir:

- a) Fibra de Polidimetilsiloxano (PDMS), 100 um (Supelco, 57324-U).
- b) Fibra de Carboxen/Polidimetilsiloxano (CAR/PDMS), 75 um (Supelco, 57324-U).
- c) Fibra de Polidimetilsiloxano/Divinilbenzeno (PDMS/DVB) de 65um (Supelco, 57324-U).
- d) Divinilbenzeno/Carboxen/Polidimetilsiloxano (DVB/Carboxen/PDMS), 50/30 um (Supleco, 57348-U).

3.1.3 Cromatografia Gasosa acoplada a Espectrometria de Massas

A identificação dos voláteis foi baseada nos espectros obtidos na espectrometria de massas com ionização por elétrons a 70 eV de m/z 50 a 650, realizado em cromatógrafo Trace CG ultra da Finnigan, com analisador do tipo íon trap. Os espectros de massas foram comparados com dados da biblioteca de espectros NISTMS do equipamento. As análises foram efetuadas no Laboratório de Espectrometria de Massas do Departamento de Química da UFMG.

3.2 MÉTODOS

3.2.1 Caracterização da massa da mistura de PVA

Para a caracterização da mistura PVA foram pesados 100 gramas de amostra da safra em estudo (2004/2005) de café arábica. Os grãos defeituosos (preto, verde, ardido) e os grãos sadios foram separados manualmente e pesados para determinar a composição em massa de grãos defeituosos e sadios. A análise foi efetuada em duplicata.

3.2.2 Torração e acondicionamento de amostras

Amostras de 40 grãos foram separadas aleatoriamente de cada grupo de grãos catados (sadio, verde, ardido e preto) e submetidos à torração em estufa convectiva (Nova Ética, N480) a 200°C, em diferentes tempos de torrefação. Em virtude da grande variabilidade de compostos observados por DUTRA et al. (2001) na evolução do perfil cromatográfico de gases de exaustão no processo de torração (Figura 6), efetuou-se um estudo do perfil de compostos voláteis de grãos de café sadio, submetidos a diferentes graus de torração. Os graus foram estabelecidos com base nos seguintes tempos de processamento: 30, 60, 90 e 120 minutos para grãos sadios, 60 e 120 minutos para grãos defeituosos. A escolha dos tempos de torração foi baseada nos resultados de VASCONCELOS et al. (2007). As amostras de café recém torradas (amostra/placa de

Petri) foram resfriadas em dessecador por 10 minutos e armazenadas nas mesmas placas de Petri em que foram torradas e envolvidas com filme de PVC. As amostras de grãos de café foram armazenadas por um período máximo de 24 h a temperatura ambiente, sendo submetidas a moagem durante 30 segundos antes de se iniciar o processo de extração do “headspace”. A moagem dos grãos foi efetuada em moinho elétrico específico para café torrado (C-Mill Coffee Grinder, mod 5679), por 30 segundos.

3.2.3 Perda de massa

A perda de massa dos grãos secos foi avaliada como a diferença percentual de cada amostra, antes e após a torração, de acordo com a equação:

$$P_m = \frac{m_i - m_f}{m_i} \times 100$$

Em que:

P_m = perda de massa expressa em percentual;

m_i = massa inicial do café;

m_f = massa do café após a torração.

3.2.3 Obtenção do Headspace

As fibras de SPME foram acondicionadas no cromatógrafo usando tempo e temperatura estabelecidos pelo fabricante para cada uma delas. Esse acondicionamento foi efetuado cada dia que a fibra foi utilizada.

Amostras de café torrado e moído foram acondicionadas em frascos de micro-reação de 5mL (Supelco, cód: 33299) em quantidade suficiente para alcançar a marca de 3mL. Os frascos foram cobertos com filme plástico e, em seguida, tampados com o septo e tampa dos frascos de micro-reação.

Cada micro-reator foi colocado em banho Maria a 70°C por dez minutos, visando a liberação dos compostos voláteis. A fibra de SPME foi então exposta ao “headspace” durante um período de 40 minutos (SANZ et al., 2001).

As fibras foram deixadas no injetor por dez minutos para garantir a dessorção dos compostos voláteis. Após esse tempo foi retirada do injetor e resfriada a temperatura ambiente para ser reutilizada.

3.2.5 Análises cromatográficas

Usaram-se as seguintes condições experimentais: coluna capilar RTX- 5Ms (crossbond 5 % difenil, 95 % dimetilpolisiloxano; 30 m x 0,25 mm IDx 0,25 μ m). As temperaturas do injetor e detetor utilizadas foram 250 e 300 °C, respectivamente. A injeção foi em modo “splitless” e o gás de arraste utilizado foi o hélio.

Foram utilizadas rampas de temperatura específicas para cada fibra, conforme detalhado a seguir:

a) PDMS: 40°C por 5 min, aumento de 3°C/min até 100°C, aumento de 5°C/min até 250°C e manutenção a 250°C por 5 min;

b) PDMS/DVB: começa a 40°C, aumento de 3°C/min até 150°C, aumento de 8°C/min até 250°C e manutenção a 250°C durante 5 min;

c) CAR/PDMS: 40°C por 5 min, aumento de 2,5°C/min até 125°C, aumento de 10°C/min até 245°C e manutenção a 245°C durante 3 min;

d) DVB/Carboxen/PDMS: 40°C por 5 min, aumento de 3°C/min até 180°C, aumento de 10°C/min até 250°C e manutenção a 250°C durante 5 min.

As rampas de temperatura foram determinadas com base em ensaios preliminares, utilizando-se como ponto de partida dados de literatura (MONDELLO et al., 2005; ZAMBONIN et al., 2005; RYAN et al., 2004; MAYER & GROSCH, 2001; CZERNY & GROSCH, 2000) e ajustando-se as condições de forma a se obter o maior número de picos.

3.2.6 Análise estatística

Da análise dos cromatogramas obtidos efetuaram-se as tabelas de identificação dos compostos. Usou-se como critério de seleção de picos a relação sinal ruído (que representa o sinal de intensidade (S) dividido pelo ruído (N) da linha de base (S/N)), sendo considerados todos os compostos que possuíam $SN > 50$. A partir dessas tabelas foram feitos tanto a comparação de compostos como as análises de PCA.

Na análise de comparação de compostos utilizou-se ainda mais um critério de seleção, baseado nos valores de RSI e probabilidade. RSI é um parâmetro de compatibilidade inverso que ignora alguns picos do espectro desconhecido que não estão no espectro da biblioteca do software. Probabilidade é um parâmetro baseado na compatibilidade direta do espectro desconhecido e o espectro da biblioteca. Foram selecionando os compostos que possuíam $RSI > 700$ com probabilidade maior de 30 e $RSI > 800$ com probabilidade maior de 20.

Para as análises de PCA utilizaram-se todos os compostos que apresentaram $SN > 50$. As matrizes foram montadas usando como variáveis os tempos de retenção e as intensidades dos picos cromatográficos, as dimensões da matriz que envolve tanto sadio em diferentes tempos de torração como defeito foi de 22 linhas e 316 colunas. No entanto as dimensões da matriz realizada para café sadio cru e em diferentes tempos de torração avaliados foram de 10 linhas e 251 colunas. Foi utilizado o programa Minitab, para as análises de estatística multivariada.

4 RESULTADOS E DISCUSSÃO

Apresentam-se na, Figura 9, os percentuais de defeitos e de grãos sadios para a safra em estudo. Observa-se que, mesmo a quantidade de defeitos sendo muito alta, 33,8%, não supera o percentual de grãos sadios. Embora essa mistura de PVA tenha sido rejeitada pela máquina de separação por cor, ainda continha cerca de 70% de grãos sadios. Esses resultados são similares aos de OLIVEIRA et al. (2005), os quais encontraram uma porcentagem de grãos defeituosos em bebidas de baixa qualidade, classificadas pela prova da xícara como Riada e Rio, entre 30 e 40%.

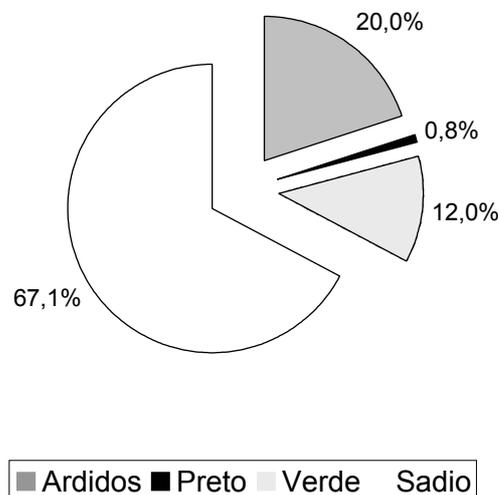


Figura 9 – Caracterização em massa por defeito da mistura PVA.

4.1 AVALIAÇÃO COMPARATIVA DAS FIBRAS DE SPME

Os cromatogramas obtidos para as análises do “headspace” de café torrado e moído comercial são apresentados nas Figuras 10 a 13. Cromatogramas típicos, demonstrando a repetibilidade das análises, são apresentados no Apêndice A. Uma análise detalhada destes cromatogramas (Apêndice B a E) demonstra que o número de compostos extraídos foi de 80, 107, 128 e 139 para as fibras PDMS, CAR/PDMS, PDMS/DVB, e DVB/CAR/PDMS, respectivamente. Embora a fibra PDMS/DVB tenha extraído um maior número de compostos do que a fibra CAR/PDMS, observou-se uma

abundância relativa maior dos compostos da fibra CAR/PDMS em relação à PDMS/DVB. Com base nestes resultados, concluiu-se que a fibra DVB/CAR/PDMS seria a mais apropriada para a avaliação comparativa dos compostos voláteis de café torrado e moído uma vez que combina as duas fases das anteriores, portanto, utilizada nas etapas subseqüentes do presente estudo. Estes resultados estão em concordância com o trabalho de ROJAS MONROY (2005), que realizou uma caracterização do aroma de café torrado e moído de Porto Rico utilizando a técnica de SPME-GC/MS. Este autor utilizou como critério para a escolha da fibra o número de compostos voláteis adsorvidos. O autor concluiu que a fibra DVB/CAR/PDMS foi a que adsorveu maior quantidade de compostos. As duplicatas dos cromatogramas encontram-se disponíveis no Apêndice F.

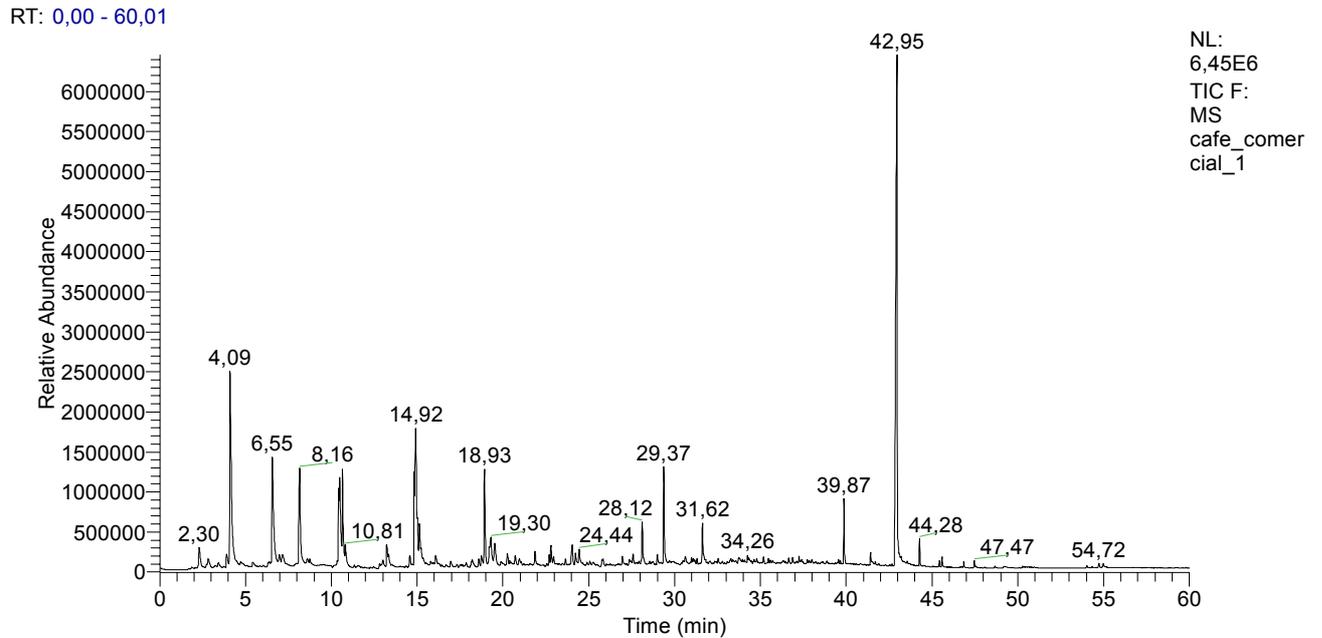
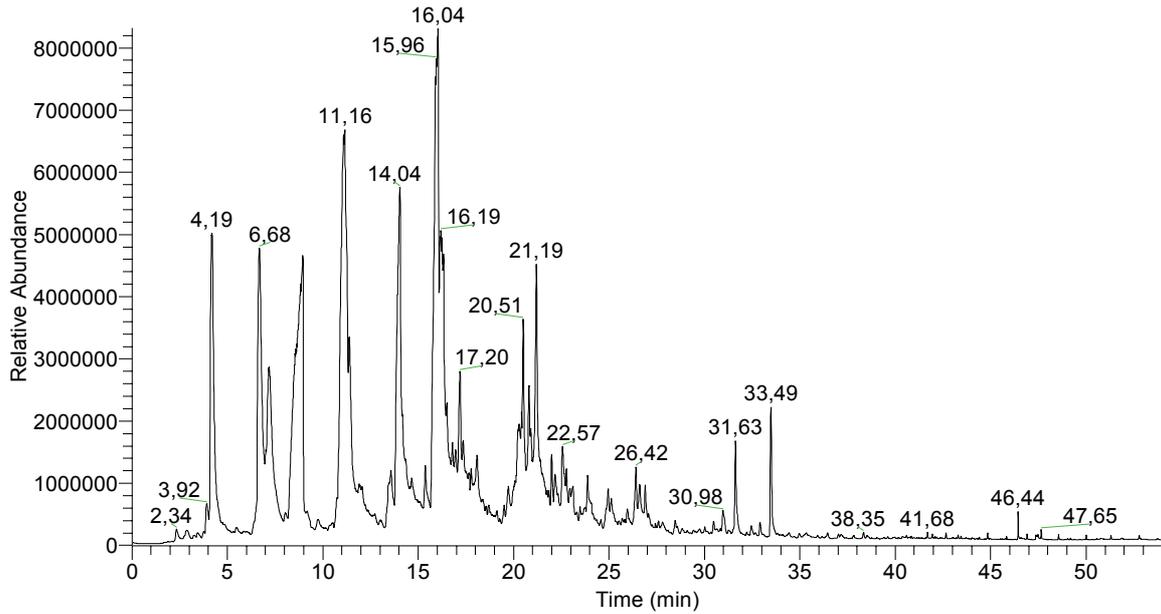


Figura 10 – Cromatograma obtido para análises de café comercial utilizando fibra PDMS.

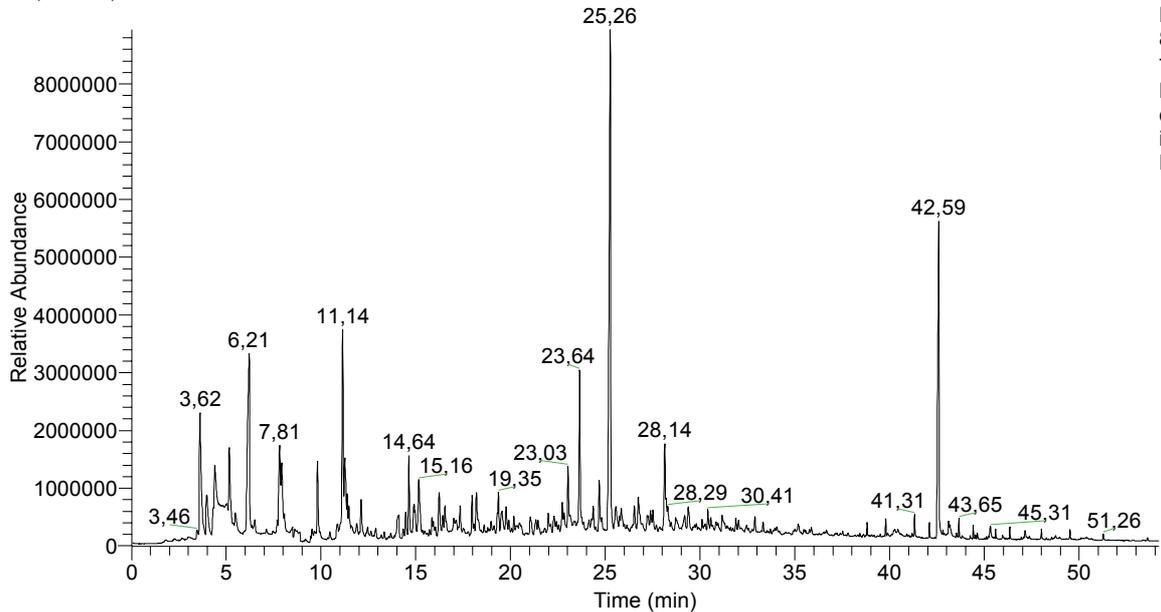
RT: 0,00 - 54,02



NL:
8,32E6
TIC F:
MS
cafecomerc
ial_CAR_P
DMS_1

Figura 11 – Cromatograma obtido para análises de café comercial utilizando fibra CAR/PDMS.

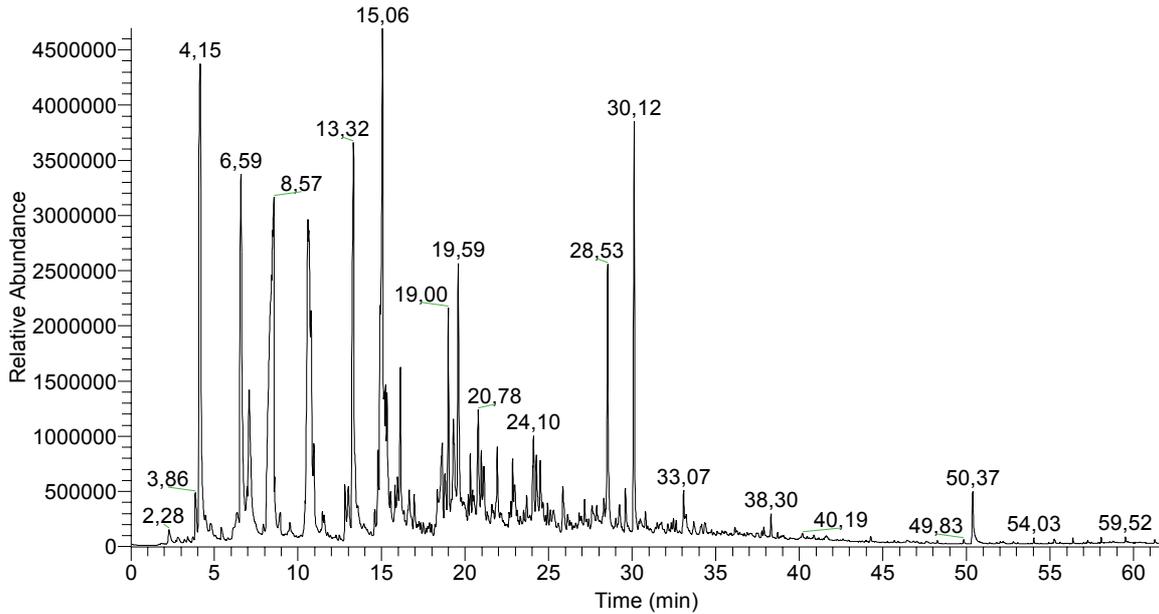
RT: 0,00 - 54,20



NL:
8,94E6
TIC F:
MS
cafécomerc
ial_PDMS_
DVB

Figura 12 – Cromatograma obtido para análises de café comercial utilizando fibra PDMS/DVB.

RT: 0,00 - 61,69



NL:
4,70E6
TIC F:
MS
cafe_comer
cial_DVB_
CAR_PDM
S_1

Figura 13 – Cromatograma obtido para análises de café comercial utilizando fibra DVB/CAR/PDMS.

Vale ressaltar que, no entanto, quando são considerados somente os compostos que apresentam RSI superior a 700, o número de compostos adsorvidos pelas fibras CAR/PDMS e PDMS/DVB é similar ao número de compostos adsorvidos pela fibra DVB/CAR/PDMS (Figura 14). Estes resultados indicam que as fibras CAR/PDMS e PDMS/DVB também poderiam ser utilizadas em estudos futuros.

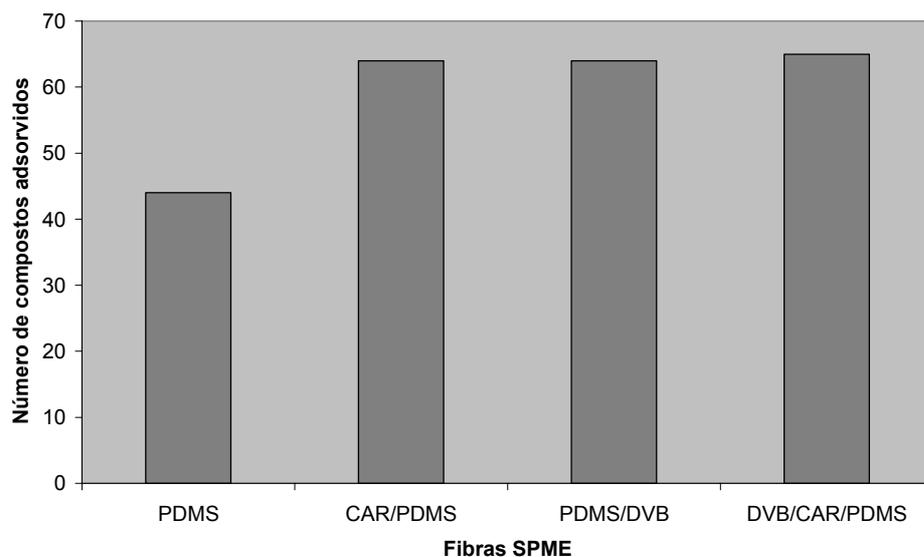


Figura 14 – Comparação das fibras de SPME com base no número de compostos extraídos (RSI>700 com probabilidade >30 e RSI>800 com probabilidade>20).

Há numerosas pesquisas sobre compostos voláteis de café sadio (MONDELLO et al., 2005; RYAN et al., 2004; ZAMBONIN et al., 2005; MAYER e GROSCH, 2001; CZERNY et al., 2000) e os resultados obtidos no presente estudo para o perfil de compostos voláteis de café torrado e moído comercial estão em concordância com as mesmas. Para café sadio, identifica-se um grande número de compostos responsáveis pelo aroma do café torrado. A fração volátil estudada neste trabalho está constituída por compostos que pertencem à família dos ácidos carboxílicos, álcoois, aldeídos, amidas, aminas, cetonas, compostos sulfurados, compostos benzênicos, compostos fenólicos, ésteres, furanos, hidrocarbonetos, lactonas, mercaptanos, oxazóis, pirazinas, piridinas, pirróis, terpenos, tiofenos, entre outros. Cada composto apresenta um comportamento particular e oferece ao aroma final determinadas características próprias nessa mistura tão complexa.

4.2 AVALIAÇÃO DOS COMPOSTOS VOLÁTEIS DURANTE A TORRAÇÃO

Os cromatogramas referentes aos perfis de compostos voláteis das amostras de café foram obtidos subtraindo-se o perfil obtido para análise da fibra sem adsorção de voláteis (Figura 15). Os cromatogramas obtidos para o headspace de café cru e torrado são apresentados nas Figuras 16 a 20.

Observa-se que o perfil do cromatograma do café cru é muito diferente dos cafés torrados, sendo estes últimos semelhantes entre si, com um aumento na intensidade relativa dos picos à medida que aumenta o grau de torração. Sabe-se que o comportamento dos compostos voláteis é muito variado, uma vez que existe tanto a formação de compostos através da reação de Maillard, por exemplo, como a degradação de outros no decorrer do processo de torração.

RT: 0,00 - 61,67

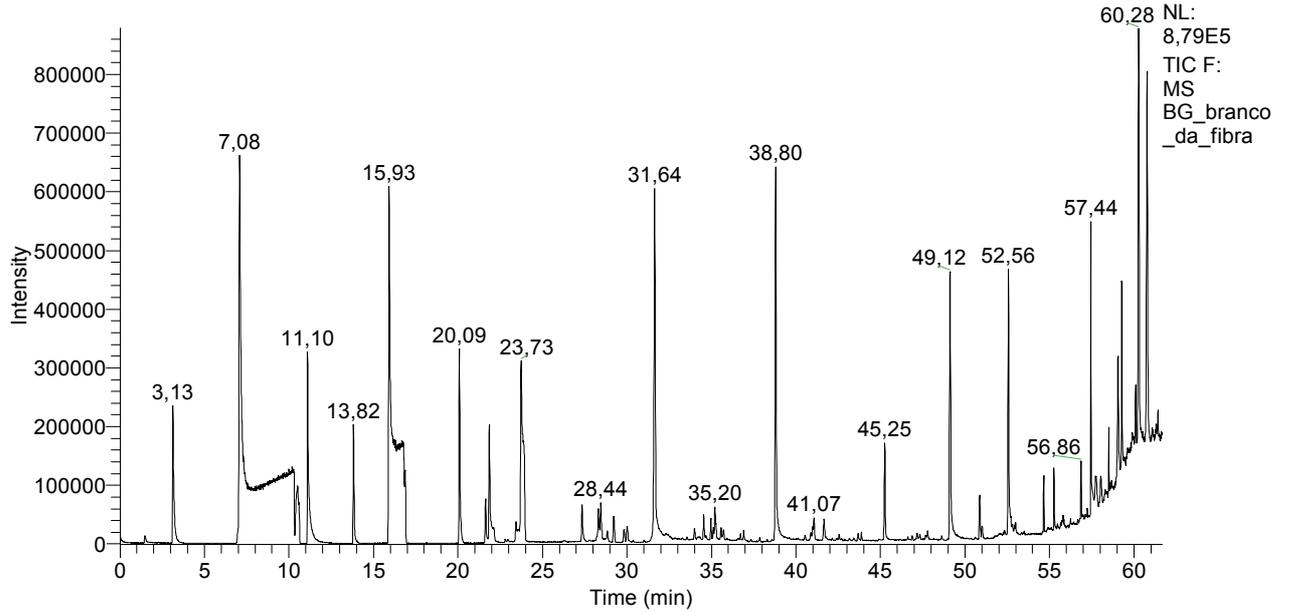


Figura 15 – Cromatograma obtido para o branco da fibra DVB/CAR/PDMS.

RT: 0,00 - 61,70

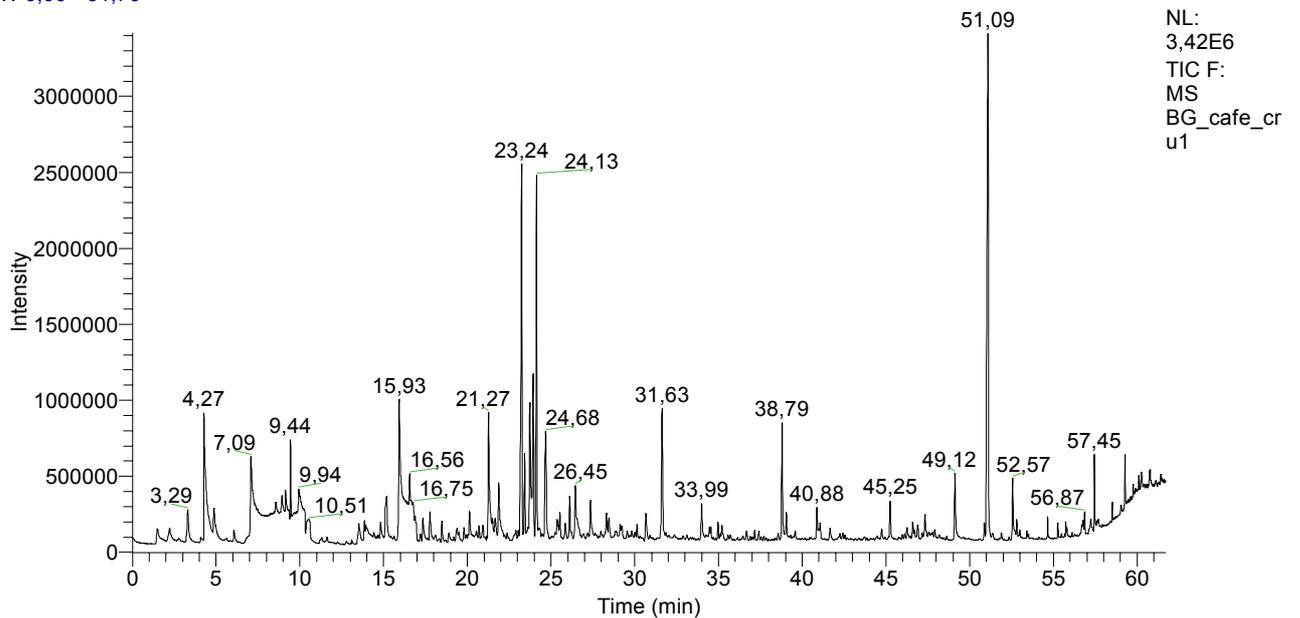
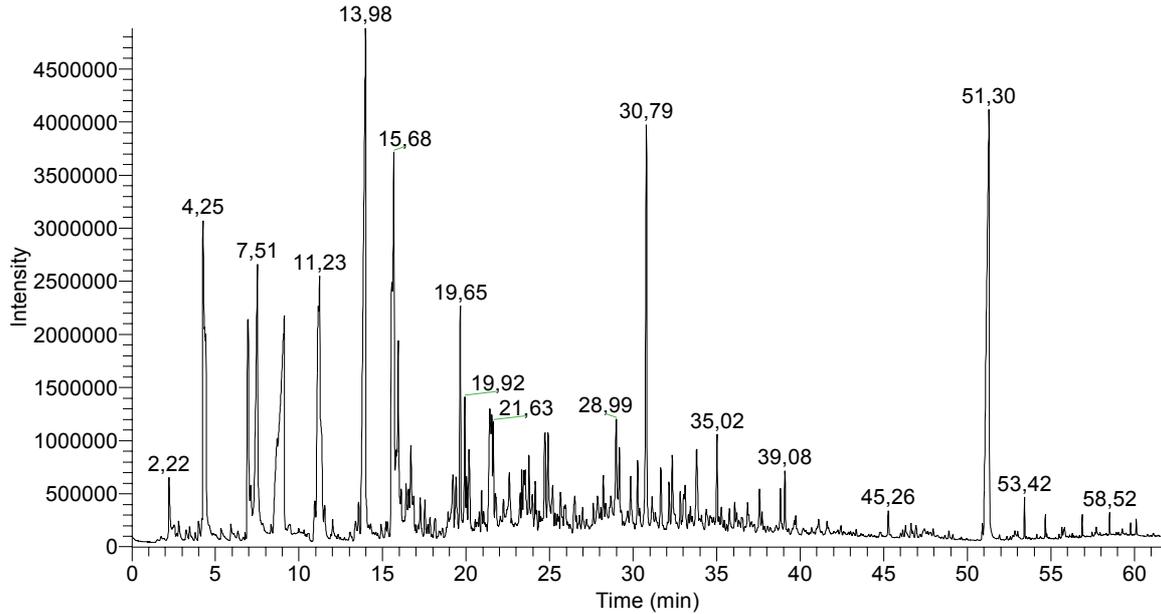


Figura 16 – Cromatograma obtido para análises do perfil de voláteis de café cru, fibra DVB/CAR/PDMS.

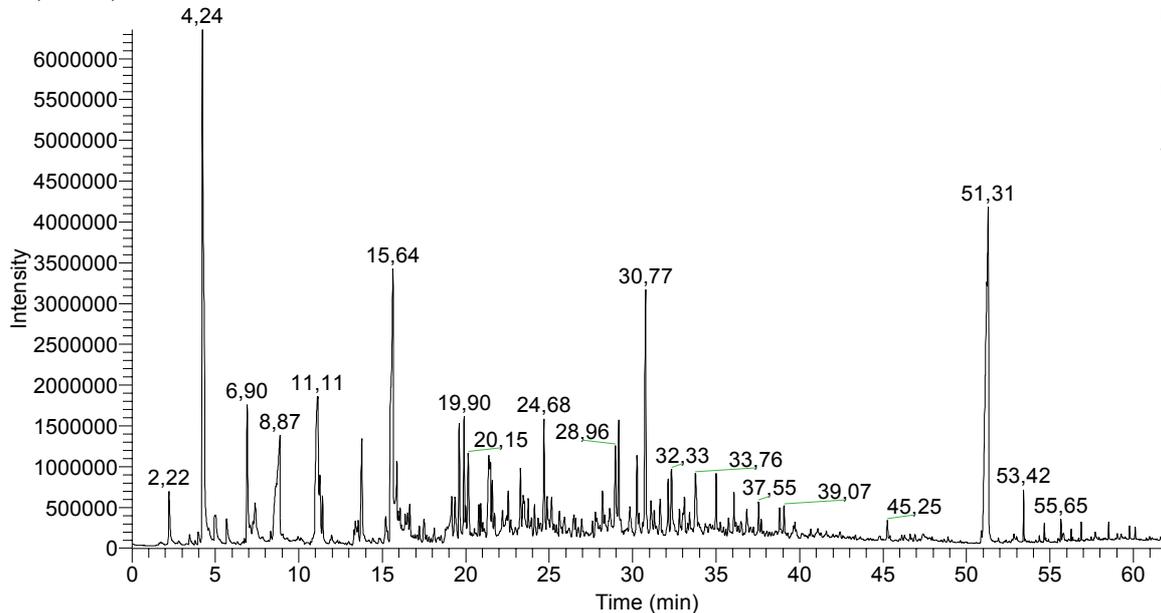
RT: 0,00 - 61,70



NL:
4,88E6
TIC F:
MS
BG_cafe_s
adio_30min
_1

Figura 17 – Cromatograma obtido para análises do perfil de voláteis de café torrado a 200°C por 30 minutos, fibra DVB/CAR/PDMS.

RT: 0,00 - 61,66



NL:
6,36E6
TIC F: MS
BG_cafe_s
adio_60min
_1_061020
224959

Figura 18 – Cromatograma obtido para análises do perfil de voláteis de café torrado a 200°C por 60 minutos, fibra DVB/CAR/PDMS.

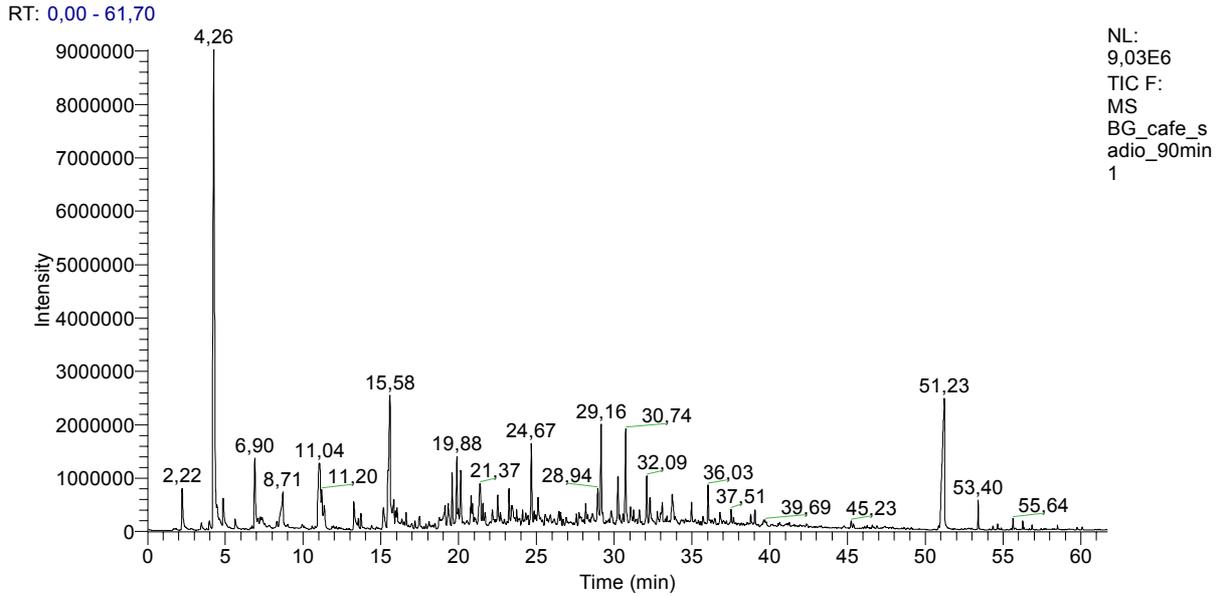


Figura 19 – Cromatograma obtido para análises do perfil de voláteis de café torrado a 200°C por 90 minutos, fibra DVB/CAR/PDMS.

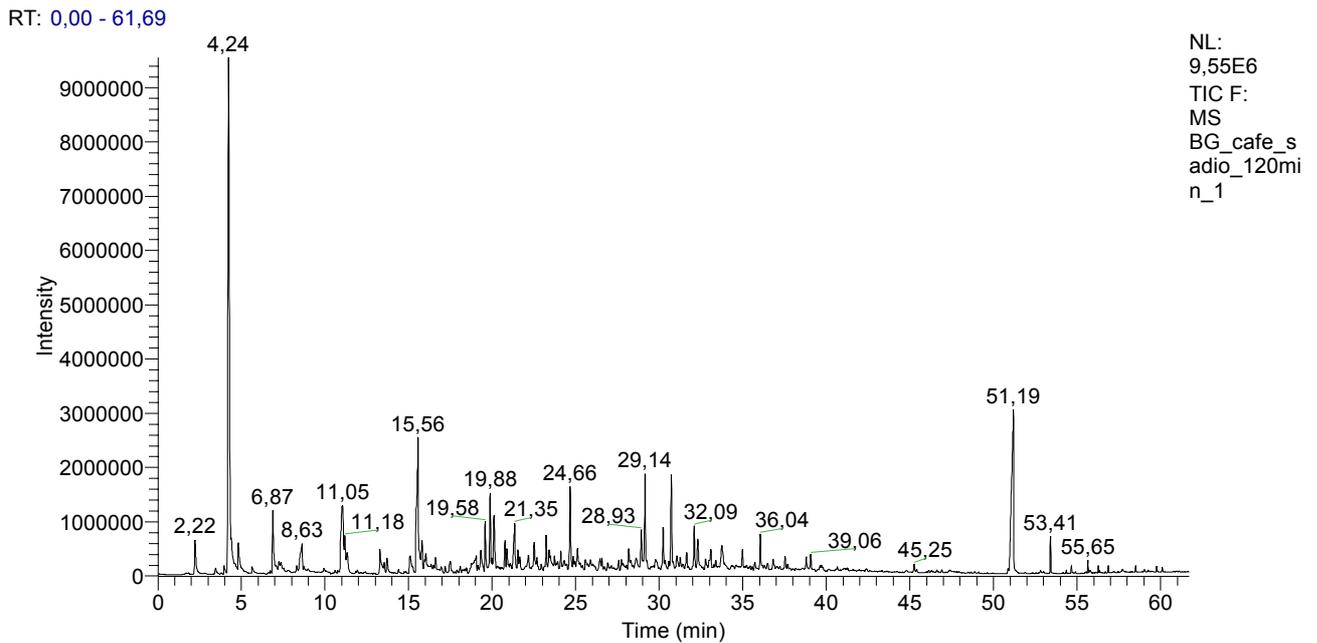


Figura 20 – Cromatograma obtido para análises do perfil de voláteis de café torrado a 200°C por 120 minutos, fibra DVB/CAR/PDMS.

A análise detalhada dos cromatogramas é apresentada nos Apêndices G a K. Tendo em vista o grande número e variedade de compostos voláteis identificados, foram compilados, na Tabela 9, os compostos que foram identificados em todos os graus de torração, e avaliou-se a tendência dos mesmos.

Tabela 9 – Tendência dos compostos voláteis identificados em três ou mais tempos de torrefação

Tempo de retenção *	RSI*	Probabilidade* (%)	Sinal Ruído				Compostos	Tendência	
			Café cru	Café torrado					
				30 min	60 min	90 min			120 min
2,22	821,88	55,38		368,0	419,0	758,5	494,0	Furano, 2-metil-	↑
3,45	855,25	74,07		82,5	74,0	125,5	83,0	Furano, 2,5-dimetil	**
3,97	826,00	59,37		79,5	106,0	153,5	124,5	Pirazina	↑
4,33	830,60	57,26	344,0	1066,0	9229,0	13015,0	13583,5	Piridina	↑↑
4,99	814,25	25,02		62,0	230,0	495,0	380,5	1-Metil-2piperidinametanol	↑↑
6,88	833,75	28,19			1095	1294,0	897	4-Piridinamina	**
7,25	784,33	77,35			255,0	194,0	149,5	Furano,2-(metoxymetil)	↓
7,40	824,00	39,81		1667,0	312,0	177,0	142,0	Furfural ou 3-Furaldeido	↓
8,31	805,88	40,83		60,0	73,5	107,5	95,0	Furano,2-(2-propenil)-	↑
8,81	833,00	48,24		1388,0	899,0	600,0	432,0	3-Furanmetanol	↓
9,95	885,25	44,35	171,5	52,0		79,5	64,0	1,3,5,7, Ciclooctatetraeno	**
11,04	810,63	40,86		6277,5	5023,0	1165,5	4049,5	Pirazina,2,6-dimetil	↓
13,31	862,33	66,41		115,0	294,0		300,5	Furano-2-metil-	↑
13,32	815,00	36,86			320,0	532,0	306,5	Piridina,4-etil	**
13,79	826,25	80,73		3179,5	886,0	276,0	212,0	2-Furancarboxaldeido,5-metil-	↓
15,10	840,90	31,05	66,5	208,0	190,0	405,5	240,5	Ácido benzenosulfônico,4-hydroxy ou Fenol	↑
15,48	803,50	46,49		6006,5	4490,0	4960,0	4000,5	Pirazina,2 etil,5-metil	↓
15,61	847,75	66,05		2417,0	2257,5	2334,0	1794,0	2-Furanmetanol,acetato	↓
15,67	798,17	55,51			1795,5	1977,0	1503,0	Pirazina,trimetil	**
15,85	824,50	66,66		1162,5	533,5	449,0	408,0	1H-Pirrol-2-carboxaldeido,1-metil	↓

Tabela 9 – Tendência dos compostos voláteis identificados em três ou mais tempos de torrefação (Continuação)

Tempo de retenção *	RSI*	Probabilidade* (%)	Sinal Ruído				Compostos	Tendência
			Café cru	Café torrado				
				30 min	60 min	90 min		
16,06	855,63	78,88	507,5	174,5	292,0	211,0	1-Propanona,1-(2-furanil)	**
16,44	793,25	50,25	253,5	176,0	231,5	316,5	Pirazina,(1-metiletetil)/ isopropenilpirazina	**
17,19	783,67	64,59		124,5	146,0	96,0	Etanona,1-(2-piridinil)	**
16,97	934,17	76,56		175,5	232,0	632,0	2-Acetil,5-metilfurano	↑
17,63	836,13	37,27	586,0	303,0	216,5	145,5	2,5-Furandiona	↓
19,08	846,50	73,79		307,0	358,0	235,0	Etanona,1-(1-H-Pirrol-2-yl-)	**
19,35	827,13	76,12	343,5	322,5	390,5	290,0	Etanona,1-(1-metil, 1H-Pirrol,2yl)	**
19,60	818,25	41,73	1504,5	881,0	1006,5	653,0	Pirazina,2,6-dietil	↓
19,89	886,63	59,01	881,5	894,5	1246,5	986,5	Furano,2,2'-metilenebis-	↑
19,99	815,50	39,45	1380,0		1233,5	743,5	Pirazina,3-etil-2,5-dimetil	↓
20,13	838,88	31,91	537,0	629,0	975,0	750,0	Fenol, 4-metoxo	↑
21,01	755,83	58,71	417,0	344,5		203,0	1-Ciclopenten,1 ácido carboxílico	↓
21,40	837,63	69,86	693,5	743,0	730,0	647,5	Maltol	**
21,57	738,83	34,32	2432,5		386,0	278,5	2-Acetil-3-metilpirazina	↓
22,19	836,75	52,86	158,0	190,5	256,5	219,0	1-Propanona,1-(5-metil, 2-furanil)	↑
22,64	797,17	45,36	254,5	305,5	99,5		1H-pirrol-2-carboxaldeido-1-metil	**
24,68	870,88	56,81	589,0	911,5	1446,5	1118,0	Furano,2-(2-furanilmetil)-5-metil	↑
25,60	746,33	33,58	240,5	193,5	185,0		2-Metilindoline/1H-Indol,2,3-dihydro,2-metil	↓
26,42	895,17	40,52	647,5	492,5	531,5		Furano,3-fenil	**
26,57	791,17	55,67		264,0	220,0	181,0	Ácido pentanóico,2-furanilmetiléster	↓
28,18	851,25	30,49	323,5			329,0	2-Hydroxy-1,7-Naftiridina	≈

Tabela 9 – Tendência dos compostos voláteis identificados em três ou mais tempos de torrefação (Continuação)

Tempo de retenção *	RSI*	Probabilidade* (%)	Sinal Ruído				Compostos	Tendência	
			Café cru	Café torrado					
				30 min	60 min	90 min			120 min
28,62	840,13	31,66		155,5	186,5	142,5	157,5	4-Metilpirrolo[1.2 ^a]pirazina	**
28,95	799,50	36,63		682,5		544,0	619,0	3,4-Dihydroxyacetofenona	**
29,16	827,20	71,54	65,0	473,5	957,0	1598,5	1550,0	Fenol,4-etil,2-metoxyp-Etilguayacol	↑
30,25	873,88	73,14		450,0	650,0	773,0	679,5	Furano,2,2'-[oxibis(metilene)]bis-	↑
30,36	864,00	38,62		690,5	774,0	623,0	646,5	4-Hydroxy,3-metilacetofenona	**
30,74	844,00	36,15	141,0	2626,5	2023,5	1439,0	1613,5	2-Metoxyp,4-vinilfenol	**
31,27	845,00	37,67		102,5	188,0	207,0	192,0	4-Metilpirrolo[1.2 ^a]pirazina	↑
32,11	860,50	38,48		312,5		716,0	754,0	2(1H)-Quinolinona,4-metil	↑
33,09	830,50	74,87		283,0	275,5	297,5	342,5	Benzeno,4-etenil,1,2-dimetoxyp	**
33,39	837,25	39,21		151,0	147,5	91,0	126,5	2,5-Dihydroxypropiofenona	↓
34,80	877,67	36,44		85,5	66,0		51,0	Bezeno,2-[1,3-butadienil]1,3,5-trimetil	↓
34,99	787,25	82,12		624,0	480,0	320,0	358,5	à Furfuriliden-à-furilmetilamina	↓
39,07	810,00	52,26	103,5	379,5	177,5	263,0	164,5	Butilato hydroxytolueno	**
46,67	761,40	51,77	71,0	79,5	52,0	65,0	51,0	n-Nonylfenol	≈
51,22	865,70	93,54	2799,5	2705,0	2607,5	1912,0	2836,5	Cafeína	↓
53,41	741,88	57,25		281,5	373,0	417,0	730,5	Ácido hexadecanóico, metil éster/ácido palmítico,metil éster	↑
59,77	807,00	44,72	70,0	84,5	112,0	61,0	114,0	Ácido hexadecanóico,mono,(2-etilhexyl)éster	↑

* Valor médio referente a análises em duplicata, ↑: tendência ao aumento na concentração; ↓: tendência à diminuição na concentração; ** não se observa uma tendência definida; ≈: **não se observa variação no transcórre da torrefação**. Sinal Ruído: Sinal de intensidade (S) dividido pelo ruído(N) da linha; RSI: parâmetro de compatibilidade entre o espectro desconhecido e o espectro da biblioteca.

Em concordância com a literatura, nosso trabalho identificou a 2-isobutil-3-metoxypirazina, somente no café cru. Estudos anteriores mencionam 3-isobutil-2-metoxypirazina como o predominante odorante de café cru, sendo este o composto responsável do odor desagradável (peasy) que o caracteriza. Além disso, CZERNY et al. (2000) confirmam que as metoxypirazinas são estáveis durante a torrefação, e sugerem que a geração dos compostos característicos do café torrado mascara o odor desagradável causado pelas metoxypirazinas.

Muitos dos compostos identificados no presente trabalho já foram identificados por outros autores. Dentre eles, destacam-se: furano, 2-metil; furano,2-(metoxymetil) (SANZ et al., 2001; ZAMBONIN et al., 2005); furano, 2,5-dimetil (SANZ et al., 2001; MONDELLO et al., 2005); pirazina; piridina; pirazina,2,6-dimetil; pirazina,2,3-dimetil (DE MARIA et al.,1996; SANZ et al., 2001; MONDELLO et al., 2005 e ZAMBONIN et al., 2005); furfural (DE MARIA et al., 1996; MONDELLO et al., 2005); furano,2-(2-propenil); 2-furancarboxaldeido,5-metil-; 2-acetil,5-metilfurano; furano,2,2'-metilenebis-; pirazina,3-etil-2,5-dimetil; 2-acetil-3-metilpirazina (SANZ et al., 2001); pirazina, trimetil (SANZ et al., 2001; YERETZIAN et al., 2003) 3-furanmetanol, 2-furanmetanol,acetato; etanona,1-(1-H-Pirrol-2-yl-) (ZAMBONIN et al., 2005); piridina,4-etil; 1-Propanona; 1-(5-metil, 2-furanil); 1H-pirrol-2-carboxaldeido-1-metil (MONDELLO et al., 2005); Na literatura (SANZ et al., 2001; ZAMBONIN et al., 2005), o ácido benzenosulfônico,4-hidroxy e o fenol foram identificados, cada um deles saindo num tempo de retenção característico, porém, no nosso trabalho, estes dois compostos apresentaram um tempo de retenção coincidente. Pirazina, 2etil, 5-metil (SANZ et al., 2001; ZAMBONIN et al., 2005); pirazina, 2,6-dimetil (DE MARIA et al., 1996; SANZ et al., 2001; MONDELLO et al., 2005); fenol, 2-metoxo (guaiacol) (MAYER & GROSCH, 2001; VITZTHUM, 2001; MONDELLO et al., 2005); Fenol, 4-etil, 2-metoxo (4-etilguaiacol) (MAYER & GROSCH, 2001; VITZTHUM, 2001), Isopropenilpirazina (DE MARIA et al., 1999); maltol (DE MARIA et al., 2000; YERETZIAN et al., 2003); 4-hydroxy,3-metilacetofenona (LEE & SHIBAMOTO, 2002); 2-metoxo,4-vinilfenol (ROCHA et al., 2003). No entanto, muitos dos compostos identificados neste trabalho não foram encontrados na literatura consultada, tais como: 1,3,5,7-ciclooxatetraeno; 1H-pirrol-2-carboxaldeido-1-metil; 1-propanona,1-(2-furanil); etanona,1-(2-piridinil); 2,5-furanodiona; 1,2,4-triazolo[4,3 a] piridina; etanona-1-(1-metil-1H-pirrol-2yl-); 2-ciclopenteno-1- ácido carboxílico; furano,2-(2-furanilmetil)-5-metil; furano,3-fenil; ácido pentanóico, 2-furanilmetiléster; 2-hydroxy-1,7-Naftiridina; 4-metilpirrol[1.2a]pirazina; furano,2,2'-[oxibis(metilene)]bis-; 4metilpirrol [1.2a]pirazina; 2(1H)quinolinona,4-metil;

benzeno,4-etenil,1,2-dimetoxi; 2,5-dihydroxypropiofenona; bezeno,2-[1,3-butadienil]1,3,5-trimetil; à Furfuriliden-à-furilmetilamina; butilato hidroxytolueno; n-Nonylfenol; ácido hexadecanóico, metil éster; ácido hexadecanóico, mono (2-etilhexil) éster; 1- Metil-piperidinametanol.

Apresentam-se, na Tabela 10, compostos que somente foram encontrados em um ou dois dos tempos de torração avaliados. Neste caso, não foi possível observar uma tendência de comportamento, à exceção do 1,4-Diisopropilciclohexano, que parece estar se decompondo.

Tabela 10 – Compostos que se apresentam em um ou dois tempos de torrefação avaliados.

Tempo de retenção *	RSI*	Probabilidade* (%)	Sinal Ruído				Compostos	
			Café cru	Café torrado				
				30 min	60 min	90 min		120 min
3,25	899,50	20,27		63,5			Ácido propanóico anidrido	
3,79	820,50	35,44		47,5			Ácido benzenosulfônico,4-hydroxy	
4,17	961,50	37,34			110,0		1H-1,2,3-Triazol	
4,18	859,00	78,86		448,0			Ácido,2,4-pentadienóico,1-ciclopenten-3-on-1yl-éster	
4,88	858,50	28,76	147,5				Spiro[2.4]hepta4,6-dieno	
6,35	756,00	47,02		63,0			3[2H]-furanona,dihidro-2-metil-	
6,73	848,25	59,21			43,5	61,5	Piridina,3-metil	
7,52	760,50	35,36				116,5	Piridinium,1-(carboxymetil)-,hidroxydo,innert salt	
8,57	846,50	26,10	57,0				Etilbenzeno	
8,95	861,50	23,73	141,0				Benzeno,1,2-dimetil	
8,73	814,50	47,17				162,5	Piridina,4-metil	
9,00	822,00	35,99			46,0		1H-Pirrol,2,5-dimetil	
10,94	742,50	55,46		172,0			Ácido 2,3-pentadienóico, etil éster	
11,09	726,00	47,37			1148,0		3-(5-metilfúril)-N-furamidopropionamida	
11,34	743,50	42,70		2949,0			Etilpirazina	
11,09	885,25	65,18			3495,5	1889,5	Etanona,1-(2-furanil)-	
11,47	812,00	40,46		146,5	245,0		Pirazina,2,3-dimetil	
11,95	786,50	30,74			72,0		Benzenamina,4-(2H-tetrazol-2-yl)	
11,94	827,25	26,63			63,0	49,5	1H-Pirrol,2,4-dimetil	

Tabela 10 – Compostos que se apresentam em um ou dois tempos de torrefação avaliados (Continuação)

Tempo de retenção *	RSI*	Probabilidade* (%)	Sinal Ruído				Compostos		
			Café cru	Café torrado					
				30 min	60 min	90 min		120 min	
12,01	807,00	52,31		129,0			Pirazina,etenil/pirazina vinil-		
13,56	864,50	24,44	99,0				Benzeno,1-etil,2-metil/ Tolueno,o-etil		
14,40	973,50	68,18				65,5	62,0	Metil,2-furoato	
14,75	744,00	55,37			115,0	47,5		2-n-Butilfurano/2-butilfurano	
14,84	759,50	43,95					102,0	3(2H)-Tiofenona,dihydro,2-metil	
15,29	812,00	22,47				551,5		Pirrolidina,2-butl,1-metil	
15,65	835,50	20,52	676,5					Benzeno,1-etil,3-metil/Tolueno,m-etil	
16,21	778,50	31,72					186,5	Pirimidina,5-metil	
16,22	760,00	56,13					188,0	Pirrol,4-etil,2-metil	
16,34	762,00	54,36				311,0	125,0	1H-Pirrol-2-acetinitrilo,1-metil	
16,64	755,00	54,20					260,0	4(H)-Piridina,N-acetil	
16,88	845,50	58,74		236,5				1H-pirrol-2-carboxaldeido-1-metil	
16,96	826,00	22,85					79,0	1,3, Ciclohexanediona	
17,11	813,50	50,20		228,0				1,4-Ciclohex-2-enedione	
17,51	875,00	39,11					555,5	2,2' Bifurano	
17,82	877,50	26,48	141,0					1,3,5-Cicloheptatrieno	
18,10	749,50	39,61					139,5	1-(1,2-dimetil ciclopenten-2-enyl)-etanona	
18,17	785,75	65,89					282,0	168,5	Piridina,3-propil
18,11	813,00	44,10					113,5		Ciclohexen,1-metil-3-(1-metiletil)
18,75	850,50	30,71		50,0				85,5	1,2,4-Triazolo[4,3 a] piridina
18,61	729,50	34,51		64,5					Ciclohexanona,2-etil-2-propil

Tabela 10 – Compostos que se apresentam em um ou dois tempos de torrefação avaliados (Continuação)

Tempo de retenção *	RSI*	Probabilidade* (%)	Sinal Ruído				Compostos
			Café cru	Café torrado			
				30 min	60 min	90 min	
18,93	755,00	36,10		141,0			1-Butanona, 1-(2-furanil)
19,20	725,50	42,08		352,5			1H-pirrol-2-carboxaldeido-1-metil
20,89	746,50	38,63				1432,0	1,5-Dimetil-2-pirrolecarbonitrilo
21,32	895,00	67,77	670,5				Feniletil álcool
22,51	715,00	25,54				395,0	Etanona, 1-(2-piridinil),- oxime
23,26	785,25	46,78	1920,5	466,0			1,4-Diisopropilciclohexano
23,32	723,00	49,95		351,0			6-Metoxi-2'-nitroaurone
23,23	829,00	33,69			664,5	479,5	1-Piperidino-1-etenil-ciclopropano
23,41	789,50	31,79			346,0		3,4-dimetil-1H-Pirrol-2-carboxaldeido
23,60	874,50	82,57		669,5			3-Ciclohexen, 1-amina, 6(4-metilfenil)2,5-difenil-, (1à, 2à 5á, 6à)
23,49	759,00	33,71				882,5	Pirazina, 3,5-dietil, 2-metil
24,19	747,00	44,96			256,0		Fenol, 4-etil
24,16	798,50	34,89	1824,5	303,0			1,4-Diisopropilciclohexano
24,22	752,00	48,46		482,5			1-Propanona, 1-(2-furanil)
24,47	746,50	46,30				177,0	Ácido benzoacético, metiléster
24,68	805,00	79,68	1849,0				Pirazina, 2-metoxi-3-(2-metilpropil)/2-isobutil, 3-metoxypirazina
24,74	810,50	28,56	536,5				1-Isopropil-1,4,5-trimetilciclohexano
24,90	745,50	57,65		572,0			Ácido, 2-furancarboxílico-3-metil, metil éster
25,11	811,50	33,89			488,5		Pirazina, 2-metil-5-(2-propenil)
25,39	803,50	24,39			189,5		Indol, 5-ol

Tabela 10 – Compostos que se apresentam em um ou dois tempos de torrefação avaliados (Continuação)

Tempo de retenção *	RSI*	Probabilidade* (%)	Sinal Ruído				Compostos	
			Café cru	Café torrado				
				30 min	60 min	90 min		120 min
25,55	876,00	38,45		434,0			1H-Pirrol,[2.3-b]piridina,2-metil	
25,58	758,50	30,39	131,5				Ciclohexanol,2,3-dimetil	
25,71	779,00	40,88				231,5	5,6,7,8-Tetrahydroquinoxaline	
25,74	834,00	30,36			196,0		Quinoxaline	
26,02	771,50	34,25				124,0	2-propanal,2-metil,3-fenil	
26,17	813,50	40,04			82,0	116,5	1,2-Benzenodiol	
26,40	874,00	35,93				498,5	2-Naftalenol	
26,51	907,50	51,31	233,5				Benzotiazol	
26,60	722,50	45,62		120,0			Ácido butanóico,3-metil-,2-furanilmetil-éster	
26,77	730,50	42,69		99,5			Piridina,3-metil,1oxide	
28,95	799,50	36,63		682,5		544,0	3,4-Dihydroxyacatofenona	
29,29	769,00	39,47		357,5		619,0	2-Isopropenil-3,6-dimetilpirazina	
29,49	731,50	34,00				194,0	2H-Imidazol,[4,5-b]piridin-2-ona-1,3-dihydro	
29,67	803,50	35,54		104,5			1H-Pirrole,2-carboxaldeido,1-metil	
30,57	838,25	29,74				357,0	2-Butil,3,4,5,6-tetrahydropiridina	
31,41	816,00	27,26			178,5		2,7-Naftalenodiol	
32,30	737,50	31,23				424,0	4-Hydroxy,7-metil,1,8 naftilidina	
32,48	829,00	32,36		374,0	270,5		3-Piridinacarbonitrilo,6-etil,5-metil	
32,61	832,50	22,76		159,0			2-Piridinamina,5-metil	
32,81	754,00	42,88		248,5			1,8(2H,5H)Isoquinolinediona,6,7-dihydro-3-hydroxy	

Tabela 10 – Compostos que se apresentam em um ou dois tempos de torrefação avaliados (Continuação)

Tempo de retenção *	RSI*	Probabilidade* (%)	Sinal Ruído				Compostos	
			Café cru	Café torrado				
				30 min	60 min	90 min		120 min
33,00	725,50	30,70		1116,5			4H-pirido[1,2-a]pirimidin-4-ona,3,6-dimetil	
33,91	808,50	29,66				322,0	2,4-Ácido pentadienóico,1-ciclopenten,3-on-1yl-éster	
34,00	843,00	63,04				225,5	5-Metoxo-2,3-dimetilindole	
34,31	748,00	33,13				70,5	2-Naftalenol,3-metoxo	
34,61	780,00	30,18				69,0	1H-Benzaimidazol,2,5-dimetil	
34,77	855,50	37,59				59,0	Naftaleno,1,2-dihydro1,1,6-trimetil	
35,22	771,50	23,28				80,0	70,0	1-Benzaimidazole,1-etil
35,71	706,00	30,25				130,5		Benzeno,2,4-diisocianato-1-metil
36,04	800,25	38,18				579,0	647,0	2(1H) Quinolinona,3,4-dimetil
37,22	796,00	49,46	42,0					2,5-Ciclohexadiene-1,4-diona,2,6-bis(1,1-dimetiletil)
40,55	719,50	31,21				470,0		[1,1'Bifenil]-4-ol-acetato
40,56	829,00	25,96					599,5	3-Piridinol,2-fenil
40,65	817,00	31,32		63,0	57,0			1-Naftalenamina,N,N-dimetil
40,66	818,00	29,16					76,0	1H-Pirrole,3,5-dimetil-2-fenil
46,27	824,50	21,85				53,0		Hexestrol
46,32	793,50	21,84	36,0					Fenol,4-(1,1-dimetilpropil)-

* Valor médio referente a análises em duplicata; Sinal Ruído: Sinal de intensidade (S) dividido pelo ruído(N) da linha; RSI: parâmetro de compatibilidade entre o espectro desconhecido e o espectro da biblioteca.

4.3 ESTUDO COMPARATIVO DO PERFIL DE COMPOSTOS VOLÁTEIS PARA GRÃOS SADIOS E DEFEITUOSOS

4.3.1 Grãos defeituosos e sadios submetidos às mesmas condições de torração

Efetua-se uma comparação do perfil de compostos voláteis para grãos sadios e defeituosos, após 60 e 120 minutos de torrefação. Os resultados obtidos são apresentados nas Tabelas 11 e 12 respectivamente. Com base nestes resultados, foram compilados nas Tabelas 13 a 15 os compostos que podem ser caracterizados como possíveis identificadores da presença de grãos defeituosos em café torrado e moído.

Tabela 11 – Grãos defeituosos e sadios submetidos às mesmas condições de torrefação (60 minutos)

Tempo de retenção*	RSI	Probabilidade* (%)	Sinal Ruído				Compostos Voláteis			
			Sadio	Preto	Verde	Ardido	Café Sadio	Café Preto	Café Verde	Café Ardido
2,22	834,00	60,43	419,0	164,5	354,0	223,5	Furano,2-metil-	Furano,2-metil	Furano,2-metil-	Furano,2-metil-
3,45	849,25	76,71	74,0		46,5		Furano, 2,5-dimetil		Furano, 2,5-dimetil	
3,95	889,75	73,80	106,0	322,5	151,0	228,5	Pirazina	Pirazina	Pirazina	Pirazina
4,16	970,75	34,27	110,0			56,0	1H-1,2,3-Triazol			1H-1,2,3-Triazol
4,29	831,88	54,85	9229,0	18150,0	11256,5	15336,5	Piridina	Piridina	Piridina	Piridina
4,61	877,00	38,57		149,5		114,5		1H-Pirrol		1H-Pirrol
4,87	808,67	24,27	230,0		290,5	239,0	1-Metil-2piperidina Metanol		1-Metil-2piperidinametanol	1-Metil-2piperidinametanol
6,64	929,50	84,90		47,0		141,0		4-Metiltiazol		4-Metiltiazol
6,76	893,00	66,78	43,5				Piridina,3-metil			
6,88	819,83	28,94	1095,0	2330,0	1367,5		4-piridinamina	3-Piridinamina	4-Piridinamina	
6,72	790,50	42,69				49,5				1H-Pirrol,3-carbonitrilo
7,25	784,00	74,99	255,0		221,0	195,5	Furano,2-(metoxymetil)		Furano,(2-metoxymetil)	Furano,2-(metoxymetil)
7,37	835,63	39,41	312,0	78,0	188,0	144,5	Furfural	Furfural	Furfural	Furfural
7,52	768,00	40,51			138,0	84,0			Piridinium,1-(carboxymetil)-,hydroxido inert salt	Piridinium,2-(carboxy-1-metil),hydroxido,inert salt
8,32	808,50	37,70	73,5				Furano,2-(2-propenil)-			
8,63	844,63	54,39	899,0	1197,0	770,0	494,5	3-Furanmetanol	2-Furanmetanol	3-Furanmetanol	3-Furanmetanol
9,02	839,50	38,29				58,0				1H-Pirrol,3,4-dimetil
9,94	888,83	54,80		115,5	51,0	78,5		1,3,5,7-Ciclooctatetraeno	1,3,5,7-Ciclooctatetraeno	1,3,5,7-Ciclooctatetraeno
11,13	811,25	40,81	4762,5	1295,0	1055,5	1114,0	Pirazina,2,6-dimetil	Pirazina,2,6-dimetil	pirazina,2,6-dimetil	Pirazina,2,6-dimetil
11,09	726,00	47,37	1148,0				3-(5-metilfural)-N-furamidopropionamida			

Tabela 11-Grãos defeituosos e sadios submetidos às mesmas condições de torrefação (60 minutos) (Continuação)

Tempo de retenção*	RSI	Probabilidade* (%)	Sinal Ruído				Compostos Voláteis				
			Sadio	Preto	Verde	Ardido	Café Sadio	Café Preto	Café Verde	Café Ardido	
11,21	711,50	37,23		925,5				Ciclopentacarbonitrilo,2-imino			
11,21	739,00	31,31		925,5				Etilpirazina			
11,38	837,50	62,63	245,0	265,0	163,5	410,0	Pirazina,2,3-dimetil	Pirazina,2,3-dimetil	Pirazina,2,3-dimetil	Pirazina,2,3-dimetil	
11,94	772,75	32,07			80,5	88,5			Pirazina,etenil	Pirazina,etenil	
11,95	786,50	30,74	72,0				Benzenamina,4-(2H-tetrazol-2-yl)				
12,06	717,50	64,18				87,5					1H-Pirrol,2-etil,4-metil
13,29	864,33	64,75	294,0		290,5	153,0	Furano,2-metil-		Furano,2-metil-	Furano,2-metil-	
13,40	812,38	40,55	320,0	146,5	163,5	251,5	Piridina,4-etil	Piridina,4-etil	Piridina,4-etil	Piridina,3-etil	
13,44	815,00	42,91				263,0					Benzaldeido
13,54	861,50	22,83			127,0				Benzeno,1-metoxo-2-metil		
13,74	856,50	81,99	886,0	173,0	382,5	229,5	2-Furancarboxaldeido,5-metil-	2-Furancarboxaldeido-5-metil	2-Furancarboxaldeido,5-metil	2-Furancarboxaldeido,5-metil	
14,03	874,00	53,93			77,5				Ácido propanóico etenil éster		
14,78	735,50	57,63	115,0				2-n-Butilfurano/2-butilfurano				
15,10	833,33	32,18	190,0	212,0	192,0		Ácido benzeno sulfônico,4-hydroxy	Ácido Benzeno Sulfônico,4-hydroxy	Ácido benzenosulfônico,4-hydroxy		
15,19	780,50	67,14				424,0					2,7-Dioxatriciclo dec-4-ene [4.4.0.0(3,8)]
15,29	812,00	22,47	551,5				Pirrolidina,2-butil,1-metil				
15,49	807,00	42,58	4490,0	4519,0	5479,0	7406,5	Pirazina,2-etil,6-metil	Pirazina,2-etil-3-metil	Pirazina,2-etil,5-metil	Pirazina,2-etil,5-metil	
15,59	846,63	61,41	2257,5	2353,5	2178,0	2319,5	2-Furanmetanol,acetato	2-Furanmetanol, acetato	2-Furanmetanol,acetato	2-Furanmetanol,acetato	
15,65	799,00	45,50		4811,5				Pirazina,2-etil-5-metil			
15,69	800,13	50,57	1795,5	4488,0	2203,0	3757,0	Pirazina,trimetil	Pirazina,trimetil	Pirazina,trimetil	Pirazina,trimetil	

Tabela 11-Grãos defeituosos e sadios submetidos às mesmas condições de torrefação (60 minutos) (Continuação)

Tempo de retenção*	RSI	Probabilidade* (%)	Sinal Ruído				Compostos Voláteis			
			Sadio	Preto	Verde	Ardido	Café Sadio	Café Preto	Café Verde	Café Ardido
15,84	801,38	56,73	533,5	589,5	497,5	738,5	1H-Pirrol-2-carboxaldeido,1-metil	1H- Pirrol-2-carboxaldeido,1-metil	1H-pirrol-2-carboxaldeido-1-metil	1H-Pirrol-2-carboxaldeido-1-metil
16,05	860,25	65,21	174,5		211,0		1-Propanona,1-(2-furanil)		1-Propanona,1-(2-furanil)	
16,28	880,00	48,42		64,5				1H-Pirrol,2-carboxaldeido		
16,40	775,50	70,91	311,0		181,5	200,5	1H-Pirrol-2-acetonitrilo,1-metil		1H-Pirrol-2-acetonitrilo,1-metil-	1H-Pirrol-2-acetonitrilo-1-metil
16,45	791,67	47,45	176,0		472,0	442,5	isopropenilpirazina		Isopropenilpirazina	Isopropenilpirazina
16,62	756,25	38,33	260,0		278,0		4(H)-Piridina,N-acetil		4(H)Piridina,N-acetil	
16,69	705,00	35,80		349,0				2(1H)Piridinone,3,6-dimetil		
16,96	714,00	42,93			63,5				2-Ciclohexen,1-ol,-3-metil-6-(1-metiletil)cis	
17,20	782,50	53,18	124,5		118,5		Etanona,1-(2-piridinil)		Etanona,1-(2-piridinil)	
17,47	927,00	65,65	175,5		314,5		2-Acetil,5-metilfurano		2-Acetil,5-metilfurano	
17,51	875,00	39,11	555,5				2,2' Bifurano			
17,62	856,25	44,44	303,0		132,0		2,5-Furandiona		2,5-Furandiona	
18,05	837,00	24,28				71,5				2-Piridinamina,N,N-dimetil
18,10	795,25	38,72	113,5		85,5		Ciclohexen,1-metil-3-(1-metiletil)		Ciclohexen,1-metil-3-(1-metiletil)	
18,15	759,00	35,91		66,0				Triciclo[2.2.1.0.2,6] heptan-3-one, oxime		
18,36	827,50	27,33				86,5				Biciclo[3.1.0]hex-2-ene, 4-metileno-1-(1-metiletil)
18,49	776,00	50,26				73,0				1H-Pirrol,3-metil
19,06	868,63	94,23	307,0	275,5	233,0	1127,5	Etanona,1-(1-H-Pirrol-2-yl-)	Etanona,1-(1H-Pirrol,2-yl)	Etanona,1-(H-pirrol-2-yl)	Etanona-1-(1H-pirrol-2yl-)
19,18	846,50	42,12		317,0	133,5	362,0		[1.2.4]Triazolo[1.5a] piridina	1,2,4-Triazolo[4,3 a] piridina	1,2,4-Triazolo[4,3 a] piridina
19,15	838,00	28,48	90,0				Isopropenilpirazina			

Tabela 11-Grãos defeituosos e sadios submetidos às mesmas condições de torrefação (60 minutos) (Continuação)

Tempo de retenção*	RSI	Probabilidade* (%)	Sinal Ruído				Compostos Voláteis			
			Sadio	Preto	Verde	Ardido	Café Sadio	Café Preto	Café Verde	Café Ardido
19,35	834,63	71,79	322,5	336,0	308,5	447,0	Etanona,1-(1-metil,1H-Pirrol,2yl)	Etanona,1-(1-metil-1H-Pirrol,2-yl)	Etanona-1-(1-metil-1H-pirrol-2yl-)	Etanona-1-(1-metil-1H-pirrol-2yl-)
19,62	820,38	47,83	881,0	1177,5	1134,5	1812,5	Pirazina,2,6-dietil	Pirazina,2,6-dietil	Pirazina,2,6-dietil	Pirazina,3-etil-2,5-dimetil
19,88	860,33	49,49	894,5		724,5	612,0	Furano,2,2'-metilenebis-		Furano,2,2' metilene-bis	Furano,2,2'-metilenebis-
20,00	861,50	47,58		1126,5	1199,5	2936,5		2,3-Dimetil-5-etilpirazina	2,3-Dimetil,5-etilpirazina	2,3-Dimetil,-5-etilpirazina
20,12	837,33	32,95	629,0		673,0	1152,0	Fenol, 4-metoxo		Fenol,2-metoxo	Fenol,2-metoxo
20,27	820,00	56,57				198,5				Pirazina,2-metil,5-propil
20,35	760,25	40,78		432,5		321,0		3-Piperidinone,1-metil		Benzaldeido
20,87	756,50	44,11			274,0				,Isopropenilpirazina	
20,92	778,50	49,94		499,0		581,0		1,5-Dimetil,2-pirrol carbonitrilo		1,5-Dimetil,2-pirrolecarbonitrilo
20,99	740,25	60,87	344,5		201,0		1-Ciclopenten,1 ácido carboxílico		1-Ciclopenteno-1-ácido carboxílico	
21,29	862,50	62,17		789,5				1H-Indol,2,3-dihidro		
21,36	840,50	62,63	743,0	1945,5	722,5	694,5	Maltol	Maltol	Maltol	Maltol
21,56	740,50	42,02				609,0				2-Acetil-3-metilpirazina
21,63	760,50	39,06		387,0				Pirazina,2-metil,5-propil		
22,19	857,50	71,08	190,5				1-Propanona,1-(5-metil, 2-furanil)			
22,34	709,00	49,31				128,5				2-Isobutil,3-metilpirazina
22,32	789,25	34,18	305,5	151,0			1H-pirrol-2-carboxaldeido-1-metil	1H-Pirrol,2-carboxaldeido,-1-metil		
22,59	760,75	44,16		339,0		574,5		5H-5-Metil-6,7-dihydrociclopentapirazina		5H-5-Metil,6,7-dihydrociclopentapirazina
23,53	769,83	41,48		1504,5	1666,0	2516,5		Pirazina,3,5-dietil-2-metil	Pirazina,3,5-dietil,2-metil	Pirazina,3,5-dietil,2-metil
23,64	759,00	42,30				253,5				2,3,5-Trimetil-6-etilpirazina

Tabela 11-Grãos defeituosos e sadios submetidos às mesmas condições de torrefação (60 minutos) (Continuação)

Tempo de retenção*	RSI	Probabilidade* (%)	Sinal Ruído				Compostos Voláteis			
			Sadio	Preto	Verde	Ardido	Café Sadio	Café Preto	Café Verde	Café Ardido
24,19	728,00	39,02				355,0				Fenol 4-(2-metilpropil)
24,26	795,50	42,36				160,5				Quinoline,1,2,3,4-tetrahydro
24,51	795,17	62,85		104,0	115,5	213,0		Ácido benzeno acetico,metil éster	Ácido benzenoacetico, metil éster	Ácido benzenoacetico, metil éster
24,67	879,00	57,24	911,5		757,0		Furano,2-(2-furanilmetil)-5-metil		Furano,2-(2-furanilmetil)-5-metil	
24,74	812,75	71,69		352,5		517,5		1H-Pirrol,1-(2-furanil metil)		1H-Pirrol,1-(2-furanilmetil)
25,29	705,50	35,49				284,0				2,3,5-Trimetil-6-etilpirazina
25,41	859,50	25,79			151,5				1H-Indol,5-ol	
25,49	831,00	48,46		114,0				Piridina,2-pentyl		
25,59	886,00	28,51				328,0				2H-Ciclopenta[d]piridazina
25,58	756,00	34,72	193,5		222,0		2-Metilindoline		2-Metilindoline	
25,72	806,00	30,03				323,5				5,6,7,8-tetrahydroquinoxaline
25,74	834,00	30,36	196,0				Quinoxaline			
25,86	702,25	51,08			184,5	283,0			2-Ciclohexen,1-ona,3-metil-6-(1-metiletilidene)	2-Ciclohexen-1-ona, 3-metil,6-(1-metiletilideno)
26,19	848,00	41,18	82,0				1,2-Benzenodiol			
26,42	884,00	33,73	492,5				Furano,3-fenil			
26,58	798,33	57,08	264,0		345,5	430,0	Ácido pentanóico,2-furanilmetiléster		Ácido pentanóico,2-furani lmetiléster	Ácido pentanóico, 2-furanilmetiléster
27,19	719,00	41,59				48,0				5-Amino,2-metoxifenol
27,31	728,50	30,26				286,0				Pirazina,2,3-dimetil-5-(1-propenil),-(Z)
27,87	750,67	44,22		315,0	310,0	521,0		2-isoamil,6-metilpirazina	2-Isoamil,6-metilpirazina	2-Isoamil,6-metilpirazina
28,21	854,00	27,15	322,5	785,5	436,0	1035,0	2-Hydroxy,1,7-naftiridina	2-Hydroxy-1,7-Naftiridina	2-Hydroxy-1,7-Naftiridina	2-Hydroxy-1,7-Naftiridina

Tabela 11-Grãos defeituosos e sadios submetidos às mesmas condições de torrefação (60 minutos) (Continuação)

Tempo de retenção*	RSI	Probabilidade* (%)	Sinal Ruído				Compostos Voláteis			
			Sadio	Preto	Verde	Ardido	Café Sadio	Café Preto	Café Verde	Café Ardido
28,30	714,00	31,93				199,5				Pirazina,2-metil,5-propil
28,64	867,50	32,65	186,5	138,0	213,0	231,0	4-Metilpirrolo pirazina	[1.2a] 4-Metilpirrol[1.2 ^a]pirazina	4-Metilpirrolo[1,2-a]pirazina	4-Metilpirrolo[1.2 ^a]pirazina
28,93	806,50	32,03			543,5				3,4-Dihydroxyacetofenona	
29,18	851,63	76,99	957,0	1686,0	1465,0	1819,0	Fenol,4-etil,2-metoxyp/p-Etilguayacol	Fenol,4-etil,2-metoxyp	Fenol,4-etil,2-metoxyp	Fenol,4-etil,2-metoxyp
29,67	742,00	32,85				395,0				2-Isopropenil-3,6-dimetilpirazina
29,81	864,00	35,13		475,0		357,5		1H-Indole		1H-Indole
30,26	870,38	64,10	650,0	138,0	632,0	339,0	Furano,2,2'-[oxibis(metilene)]bis-	Furano,2,2'[oxybis(metilene)]bis-	Furano,2,2'-[oxibis(metilene)]bis-	Furano,2,2'-[oxibis(metilene)]bis-
30,37	885,50	36,34	774,0				4-Hydroxy,2-metil acetofenona			
30,77	849,50	38,92	2023,5	2665,5	2086,5	2649,5	2-Metoxyp,4-vinilfenol	2-Metoxyp-4-vinilfenol	2-Metoxyp-4-vinilfenol	2-Metoxyp,4-vinilfenol
31,30	852,63	43,29	188,0	508,0	260,5	303,5	4-Metilpirrolo pirazina	[1.2a] 4-Metilpirrol[1.2 ^a]pirazina	4-Metilpirrolo[1.2a]pirazina	4-Metilpirrolo[1.2 ^a]pirazina
31,41	816,00	27,26	178,5				2,7-Naftalenodiol			
32,10	864,50	44,46			507,0				2(1H)-Quinolinona,4-metil	
32,19	749,25	36,21		683,5		239,0		Indol-3-acataldeido		Indole,3-acetaldeido
32,47	851,50	40,65	270,5				3-Piridinacarbonitrilo,6-etil,5-metil			
32,87	760,00	47,01				302,5				3-(2-Metoxypiridin-6-yl-)1-propanol
32,99	719,00	40,54	1116,5		1277,0		4H-pirido[1,2-a] pirimidin - 4-ona,3,6-dimetil		4H-pirido[1,2-a]pirimidin-4-ona,3,6-dimetil	
33,12	829,88	71,49	275,5	320,5	336,5	414,5	Benzeno,4-etenil,1,2-dimetoxyp	Benzeno,4-etenil-1,2-dimetoxyp	Benzeno,4-etenil-1,2-dimetoxyp	Benzeno,4-etenil-1,2-dimetoxyp
33,39	847,25	37,54	147,5		94,0		2,5-Dihydroxypropiofenona		2,5-Dihydroxypropiofenona	
33,97	791,00	43,33			79,5				Benzonitrilo,4-hydroxy,3-metoxyp	
34,06	726,00	35,28				165,0				Benzenamina,N,N-dietil

Tabela 11-Grãos defeituosos e sadios submetidos às mesmas condições de torrefação (60 minutos) (Continuação)

Tempo de retenção*	RSI	Probabilidade* (%)	Sinal Ruído				Compostos Voláteis			
			Sadio	Preto	Verde	Ardido	Café Sadio	Café Preto	Café Verde	Café Ardido
34,79	877,75	43,40	66,0		57,0		Benzeno,2-(1,3-Butadienil)-1,3,5-trimetil		Benzeno,2-(1,3-butadienil)-1,3,5-trimetil	
34,99	781,67	75,65	480,0		317,5	177,5	à Furfuriliden-à-furilmetilamina		à furfuriliden-à-furilmetilamina	à Furfuriliden-à-furilmetilamina
35,22	825,00	40,51			86,5				1-H-Benzaimidazol,1-etil	
35,79	771,00	35,27		132,0		242,0		Benzaldeido,2,5-difluoro-3,4-dihidroxy		Benzaldeido,2,5-difluoro,3-5-dihydroxy
36,32	759,00	46,57				73,5				Benzaldeido,2,5-difluoro,3-5-dihydroxy
37,22	843,00	23,39			59,5				Furfuril, isotiocianato	
38,05	799,00	30,60		77,0				Etanona,1-(4-hydroxy-3-metoxifenil)		
39,09	784,75	49,29	177,5	79,5	55,0	323,0	Butilato hydroxytolueno	Butilato hydroxytolueno	Butilato hydroxytolueno	Butilato hydroxytolueno
39,15	820,00	28,10			89,5				1H-Pirrol,1-(4-metilfenil)	
39,62	739,00	34,24				92,5				1,3,5-Trimetil-2-ciclohexylbenzeno
40,25	797,75	38,79		219,5		75,0		Naftaleno,1,2,3,4-tetrahydro-1-metil-8-(-1-metiletil)		Naftaleno,1,2,3,4-tetrahydro-1-metil-8-(-1-metiletil)
40,65	820,00	43,85			73,5	95,0			1H-Pirrol,3,5-dimetil,2-fenil	1H-Pirrole,3,5-dimetil-2-fenil
40,67	817,00	31,03	63,0				1-Naftalenamina,N,N-dimetil			
46,28	869,00	44,60				50,0				Hexestrol
46,62	746,25	43,29	52,0			57,5	n-Nonylfenol			n-Nonylfenol
51,21	872,00	94,17	2607,5	2788,0	2304,0	2745,5	Cafeína	Cafeína	Cafeína	Cafeína
53,44	744,88	58,24	373,0	990,0	571,5	2089,0	Ácido hexadecanóico, metil éster	Ácido hexadecanóico, Metiléster	Ácido hexadecanóico, metil éster	Hexadecanóico ácido, metil éster
55,66	764,50	26,12				134,5				1,5,6,7-tetrametil-3-fenilbicyclo [3.2.0] hepta,2,6-diene
56,71	736,50	47,88				96,0				Ácido octadecanóico, metil éster
59,77	816,83	51,24	112,0		156,5	350,0	Ácido hexadecanóico, mono,(2-etilhexyl)éster		Ácido hexadecanóico, mono,(2-etilhexyl)éster	Ácido hexadecanóico, mono,(2-etilhexyl)éster

* Valor médio referente a análises em duplicata, Sinal Ruído: Sinal de intensidade (S) dividido pelo ruído(N) da linha; RSI: parâmetro de compatibilidade entre o espectro desconhecido e o espectro da biblioteca.

Tabela 12 – Grãos defeituosos e sadios submetidos às mesmas condições de torrefação (120 minutos)

Tempo de retenção*	RSI	Probabilidade* (%)	Sinal Ruído				Compostos Voláteis			
			Sadio	Preto	Verde	Ardido	Café Sadio	Café Preto	Café Verde	Café Ardido
1,84	890,50	50,15				50,5				Aminoacetaldeído, dimetil acetal
2,21	832,88	58,13	494,0	408,0	436,5	493,5	Furano,2-metil-	Furano,2-metil	Furano,2-metil-	Furano,2-metil-
3,45	850,25	72,94	83,0		65,5		Furano, 2,5-dimetil		Furano, 2,5-dimetil	
3,94	888,38	74,25	124,5	528,0	184,5	285,0	Pirazina	Pirazina	Pirazina	Pirazina
4,28	875,50	80,32			11190,5	12613,5			Indol,3-[(dietilamino)metil]	Indol,3-[(dietilamino)metil]
4,30	855,50	60,96	13583,5	25298,5	15633,5	16663,5	Piridina	Piridina	Piridina	Piridina
4,64	857,17	54,51		226,0	79,5	122,0		1H-Pirrol	1H-Pirrol	1H-Pirrol
4,81	818,50	25,97	380,5	291,0	458,5	444,5	1-Metil-2piperidinametanol	1-Metil Piperidinametanol	-2- 1-Metil-2 piperidinametanol	1-Metil-2piperidinametanol
6,63	912,50	81,53		89,5	194,5	246,0		4-Metiltiazol	4-Metiltiazol	4-Metiltiazol
6,69	769,00	23,55			70,0				1H-Pirrol,3-carbonitrilo	
6,71	869,50	55,83				61,0				Piridina,3-metil
6,88	834,00	25,79	897,0		1748,5		4-Piridinamina		4-Piridinamina	
7,24	778,38	71,58	149,5	66,0	156,5	147,0	Furano,2-(metoxymetil)	Furano,2-(metoxymetil)	Furano,2-(metoxymetil)	Furano,2-(metoxymetil)
7,37	849,25	43,38	142,0	65,0	126,5	374,5	Furfural	Furfural	Furfural	Furfural
7,52	782,50	35,21	116,5		78,5		Piridinium,1-(carboxymetil),hidroxydo,innert salt	-	Piridinium,1-(carboxymetil)-hydroxido,innert salt	
7,65	797,25	46,13		77,5		85,0		1H-Pirrol,3-metil		1H-Pirrol,2,4-dimetil
8,15	845,00	51,51		54,5				4-Metiltiazol		
8,31	808,50	45,04	95,0		67,5		Furano,2-(2-propenil)-		Furano,2-(2-propenil)-	
8,65	835,38	52,44	432,0	762,5	473,5	387,5	3-Furanmetanol	2-Furanmetanol	3-Furanmetanol	3-Furanmetanol
8,73	812,33	45,24	162,5	271,5		399,5	Piridina,4-metil	Piridina,3-metil		Piridina,3-metil
8,99	835,50	46,02		260,5	55,0	71,0		1H-Pirrol,2,4-dimetil	1H-Pirrol,2,5-dimetil	1H-Pirrol,3,4-dimetil

Tabela 12 – Grãos defeituosos e sadios submetidos às mesmas condições de torrefação (120 minutos) (Continuação)

Tempo de retenção*	RSI	Probabilidade* (%)	Sinal Ruído				Compostos Voláteis			
			Sadio	Preto	Verde	Ardido	Café Sadio	Café Preto	Café Verde	Café Ardido
9,93	890,63	52,70	64,0	158,0	100,5	114,5	1,3,5,7-Ciclooctatetraeno	1,3,5,7-Ciclooctatetraeno	1,3,5,7-Ciclooctatetraeno	1,3,5,7-Ciclooctatetraeno
10,97	828,25	45,61	4049,5	1596,5			Pirazina,2,5-dimetil	Pirazina,2,3-dimetil		
11,02	811,25	45,43			3778,5	1031,0			Pirazina,2-etil,6-metil	Pirazina,2,6-dimetil
11,07	885,67	48,52	1889,5		1972,5	2060,5	Etanona,1-(2-furanil)		Etanona,1-(2-furanil)	Etanona,1-(2-furanil)
11,20	723,50	31,07				831,0				Etilpirazina
11,28	790,50	35,76				968,5				Acetilcolina, clorideo
11,36	844,75	63,02		402,5		371,0		Pirazina,2,3-dimetil		Pirazina, 2,3-dimetil
11,94	842,50	32,77	49,5		73,5	103,5	1H-Pirrol,2,4-dimetil		1H-Pirrol,2,4-dimetil	1H-Pirrol,2,4-dimetil
12,01	783,25	54,89		133,0		29,5		1H-Pirrol,2,etil, 4-metil		1H-Pirrol,2-etil,4-metil
12,57	890,50	29,42		59,0				Ácido benzóico,2-(metil amino)		
13,24	878,00	66,96	300,5				Furano,2-metil-			
13,27	838,00	35,98	306,5	549,0	581,0	556,0	Piridina,4-etil	Piridina,3-etil	Piridina,3-etil	Piridina,3-etil
13,72	855,75	80,49	212,0	104,0	139,0	58,0	2-Furancarboxaldeido,5-metil-	2-Furancarboxaldeido,5-metil	2-Furancarboxaldeido,5-metil-	2-Furancarboxaldeido,5-metil-
14,40	964,75	63,59	62,0		52,0		Metil,2-furoato		Metil-2-furoato	
15,11	833,88	39,85	240,5	1427,0	435,5	336,5	Ácido benzenosulfonico, 4-hydroxy ou fenol	Ácido benzenosulfonico,4-hydroxy	Ácido benzenosulfonico,4-hydroxy/ fenol	Ácido benzenosulfonico,4-Hydroxy///fenol
15,46	810,63	48,27	4000,5	2165,5	6992,0	6319,5	Pirazina,2-etil,6-metil	Pirazina,2-etil,5-metil	Pirazina,2-etil,6-metil	Pirazina,2-etil,6-metil
15,57	847,38	65,83	1794,0	2161,0	2299,5	1735,0	2-Furanmetanol,acetato	2-Furanmetanol, acetato	2-Furanmetanol,acetato	2-Furanmetanol,acetato
15,67	794,63	43,47	1503,0	4977,0	3441,0	3190,0	Pirazina trimetil	Pirzina,trimetil	Pirazina,trimetil	Pirazina,trimetil
15,82	796,50	53,62	408,0	578,0	1036,0	896,0	1H-Pirrol-2-carboxaldeido, 1-metil	1H-Pirrol,2-carboxaldeido, 1-metil	1H-Pirrol-2-carboxaldeido, 1-metil	1H-pirrol-2-carboxaldeido-1-metil
16,03	794,50	56,26	211,0		283,5		1-Propanona,1-(2-furanil)		1-Propanona,1-(2-furanil)	

Tabela 12 – Grãos defeituosos e sadios submetidos às mesmas condições de torrefação (120 minutos) (Continuação)

Tempo de retenção*	RSI	Probabilidade* (%)	Sinal Ruído				Compostos Voláteis			
			Sadio	Preto	Verde	Ardido	Café Sadio	Café Preto	Café Verde	Café Ardido
16,21	778,50	31,72	186,5				Pirimidina,5-metil			
16,23	783,25	53,75		167,0	180,0			1H-Pirrol,2etil,4-metil	Pirrol,4-etil,2-metil	
16,20	766,50	33,02				161,5				Etanona,1-(1H-Pirrol,2-yl-)
16,31	762,00	54,50		88,0				Pirrolidina,2-dodecil,1-metil		
16,34	766,50	38,74			144,0				1H-Pirrol-2-acetonitrilo,1-metil	
16,48	793,75	50,76	316,5	97,5	478,0	250,0	Isopropenilpirazina	Isopropenilpirazina	Isopropenilpirazina	Isopropenilpirazina
16,62	701,25	37,44			297,0	248,5			2-(1H)-Piridinona,3,6-dimetil	2(1H)-Piridinone,3,6-dimetil
16,95	819,50	21,30			79,0				1,3-Ciclohexanediona	
17,21	765,88	64,12	96,0	152,5	134,0	86,5	Etanona,1-(2-piridinil)	Etanona,1-(2-piridinil)	Etanona,1-(2-piridinil)	Etanona,1-(2-piridinil)
17,48	939,67	82,67	632,0	269,0	562,5		2-Acetil,5-metilfurano	2-Acetil,5-metilfurano	2-Acetil,5-metilfurano	
17,63	805,50	48,58				51,0				1H-Tatrazaborole,4,5-dihydro-1,4-dimetil
17,60	853,00	28,17	145,5				2,5-Furandiona			
17,62	776,00	43,32		109,0				2-Ciclopeten-1-ona,3,4-dimetil		
18,10	780,00	46,97			82,5	90,0			Ciclohexen,1-metil-3-(1-metiletil)	Ciclohexeno,1-metil-3-(1-metiletil)
18,18	800,67	85,65	168,5		335,0	336,0	Piridina,3-propil		Piridina,3-propil	Piridina,3-propil
18,35	833,75	34,41			87,5	121,0			Biciclo[3.1.0]hex-2-ene-4-metilen-1-(1-metiletil)-	Biciclo[3.1.0]hex-2-ene,4-metilene-1-(1-metiletil)
18,40	841,50	26,70		380,5				n-Butilbenzeno		
18,49	828,00	45,52				102,0				1H-Pirrol,3-metil
19,06	880,00	94,92	235,0	810,5	1252,5	207,5	Etanona,1-(1H-Pirrol,2-yl)	Etanona,1-(1H-Pirrol,2-yl)	Etanona,1-(1H-Pirrol-2-yl-)	Etanona-1-(1H-pirrol-2yl-)
19,14	821,75	33,98	85,5			206,5	[1,2,4][1,5a]piridina	Triazol		1,2,4-Triazol[4,3 a]piridina
19,13	719,00	31,03			408,0				Ácido carbamico, fenil, feniléster	

Tabela 12 – Grãos defeituosos e sadios submetidos às mesmas condições de torrefação (120 minutos) (Continuação)

Tempo de retenção*	RSI	Probabilidade* (%)	Sinal Ruído				Compostos Voláteis				
			Sadio	Preto	Verde	Ardido	Café Sadio	Café Preto	Café Verde	Café Ardido	
19,22	843,00	22,48		407,0				Pirazina, isopropenil			
19,34	835,38	70,27	290,0	442,5	382,5	370,0	Etanona, 1-(1-metil, 1H-Pirrol, 2yl)	Etanona, 1-(1-metil-1H-Pirrol, 2-yl)	Etanona, 1-(1-metil, 1H-Pirrol, 2yl)	Etanona, 1-(1-metil, 1H-Pirrol, 2-yl)	
19,62	811,75	44,41	653,0	1557,0			Pirazina, 2,6-dietil	pirazina, 2,6-dietil			
19,59	816,25	38,76			1770,0	1144,5			Pirazina, 3-etil, 2,5-dimetil	Pirazina, 2-etil, 2,5-dimetil	
19,89	858,63	47,58	986,5	661,0	954,0	578,5	Furano, 2,2'-metilenebis-	Furano, 2,2'-metilenebis		Furano, 2,2' metilenebis-	
19,99	833,00	42,01	743,5	2353,0	2161,5	1984,5	2,3-Dimetil, 5-etilpirazina	Pirazina, 3-etil, 2,5-dimetil	2,3-Dimetil, 5-etilpirazina	2,3-Dimetil, -5-etilpirazina	
20,15	843,00	43,87	750,0	1966,0	1228,0	1375,5	Fenol, 4-metoxo	Furano, 2-metoxo	Fenol, 4-metoxo	Fenol, 2-metoxo	
20,27	862,00	46,12			234,5	238,5			2-Piridinamina, 5-metil	2-Piridinamina, 5-metil	
20,33	762,50	36,26			59,0				Benzaldeido		
20,51	721,00	58,40			54,0				1H-Inden-1-ol-2,3-dihidro		
20,78	818,00	25,90				928,5				2-Ciclohexen, 1-ona, 4,5-dimetil	
20,90	769,17	44,34		836,6	591,5	862,5		1,5-dimetil-2-pirrolecarbonitrilo	1,5-Dimetil-2-pirrole, carbonitrilo	1,5-Dimetil, 2-pirrolecarbonitrilo	
20,98	721,00	59,82	203,0				1-Ciclopenten, 1-ácido carboxílico				
21,35	827,88	52,89	647,5	550,5	677,0	395,5	Maltol	Maltol	Maltol	Maltol	
21,55	745,33	33,37	278,5		518,5	292,5	2-Acetil-3-metilpirazina		2-Acetil, 3-metilpirazina	2-Acetil-3-metilpirazina	
21,61	743,50	32,67		343,0				Pirazina, 2-metil, 6-propil			
21,98	717,00	34,62				50,5				Boron, dietil(2,4-pentanedionato)	
22,16	800,00	54,64	219,0				1-Propanona, 1-(5-metil, 2-furanil)				
22,20	805,50	39,44		72,5				Borano, etilbis[2,3,4,5-tetrametilpirrol, 1yl]			
22,36	795,50	40,13		170,0				3-Fluoro-o- anisidine			
22,41	756,25	39,14		271,5		304,5		2-isobutil, 3-metilpirazina		2-Isobuil, 3-metilpirazina	

Tabela 12 – Grãos defeituosos e sadios submetidos às mesmas condições de torrefação (120 minutos) (Continuação)

Tempo de retenção*	RSI	Probabilidade* (%)	Sinal Ruído				Compostos Voláteis			
			Sadio	Preto	Verde	Ardido	Café Sadio	Café Preto	Café Verde	Café Ardido
22,51	715,00	25,54	395,0				Etanona, 1-(2-piridinil),-oxime			
22,56	746,25	44,94		770,0		558,5		5H-5-Metil-6,7-dihydrociclopentapirazina		5H-5-Metil,6,7-dihydrociclopentapirazina
22,94	793,00	38,12			77,5				1H-Pirrol,2-carboxaldeido	
22,95	784,00	40,83				66,0				1H-Pirrol,2,3-dimetil
23,11	730,00	52,86		72,0				4-Metil,5-etiltiazol		
23,22	828,50	23,70		750,5				2-Pirazolina,1-isopropil-3,4-dimetil		
23,23	828,50	22,86	479,5				1-Piperidino-1-etenil,ciclopropano			
23,25	808,50	46,92				237,0				6-Metoxi,2'-nitroaurone
23,29	752,50	30,48		182,0				1,4-Diisopropilciclohexano		
23,57	780,75	49,38	882,5	419,0	514,0	1674,0	Pirazina,3,5-dietil,2-metil	Pirazina,3,5-dietil,2-metil	Pirazina,3,5-dietil,2-metil	Pirazina,3,5-dietil-2-metil
23,64	720,00	34,13			995,0				2,3,5-Trimetil-6-etilpirazina	
23,94	801,00	31,33			193,5	242,0			2-Acetil-3-metilpirazina	2-Acetil,3-etilpirazina
24,19	748,00	32,14		246,5				5,8-Decadien,2-one-5,9-dimetil		
24,20	781,00	34,30			422,5	493,5			Fenol,4-etil	Fenol,4-etil
24,49	793,13	57,50	177,0	183,0	181,5	187,5	Ácido benzenoacético, metil éster	Ácido benzenoacético, metil éster	Ácido benzenoacético, metil éster	Ácido Benzenoacético, metil éster
24,67	865,50	56,08	1118,0		1016,5	572,5	Furano,2-(2-furanilmetil)-5-metil		Furano,2-(2-furanilmetil)-5-metil	Furano,2-(2-furanilmetil)-5-metil
26,40	874,00	35,93	498,5				2-Naftalenol			
24,75	832,50	37,60		519,5				1H-Pirrol,1-(2-furanilmetil)		
24,86	835,00	23,91			162,0				2,5-Tiofenodicarboxaldeido	
24,87	801,50	30,98				80,0				3,4,5-Trihydroxy fenetil amina

Tabela 12 – Grãos defeituosos e sadios submetidos às mesmas condições de torrefação (120 minutos) (Continuação)

Tempo de retenção*	RSI	Probabilidade* (%)	Sinal Ruído				Compostos Voláteis			
			Sadio	Preto	Verde	Ardido	Café Sadio	Café Preto	Café Verde	Café Ardido
25,14	793,00	25,37		1321,5	707,5	897,0		Pirazina,2-metil-6-(2-propenil)	Pirazina,2-metil-5-(1-propenil)-(Z)	Pirazina,2-metil-5-(1-propenil)-(Z)
25,39	806,50	60,38				397,0				Piridina,2-propil
25,44	830,50	38,45		388,5				Piridina,2-pentyl		
25,62	879,50	32,48		482,0		296,0		2H-Ciclopenta[d]piridazina		2H-Ciclopenta[d]piridazina
25,76	795,00	29,23		571,0		255,5		5,6,7,8-Tetrahydro quinoxaline		5,6,7,8-Tetrahydro quinoxaline
26,46	805,50	26,72				478,0				Piridinium,1-(acetilamino)-2-metil,-hidroxido, innert salt
26,57	806,83	53,21	181,0		395,0	422,0	Furfuril pentanoato		Furfuril pentanoato	Furfuril penanoato
26,65	812,00	37,03		540,0				Ácido butanóico,3-metil,2-furanilmetil éster		
27,49	817,00	50,67		125,5				1,5-dimetil-2-pirrole carbonitrilo		
27,83	739,50	51,94			217,5	371,5			2-Isoamil,6-metilpirazina	2-Isoamil,6-metilpirazina
27,92	772,50	56,53		448,5				2-Butil,3-metilpirazina		
28,03	794,00	43,77			98,0				1,6-Dimetil-5-oxo,1,3,5-tetrahydroimidazol[1.2a]Pirimidina	
28,20	855,25	31,26	329,0	1115,5	591,5	823,0	2-Hydroxy,1,7-naftiridina	2-Hydroxy-1,7-Naftiridina	2-Hydroxy,1,7-naftiridina	2-Hydroxy-1,7-naftiridina
28,63	855,38	33,44	157,5	214,0	210,0	201,0	4-Metilpirrolo[1.2a]pirazina	4-Metilpirrol[1.2a]pirazina	4-Metilpirrolo[1.2a]pirazina	4-Metilpirrolo[1.2a]pirazina
28,93	784,00	32,31	619,0				3,4-Dihydroxyacatofenona			
29,19	870,88	78,78	1550,0	3212,0	2231,5	2753,5	Fenol,4-etil,2-metoxyp-Etilguayacol	Fenol,4-etil,2-metoxyp-Etilguayacol	Fenol,4-etil,2-metoxyp-Etilguayacol	Fenol,4-etil,2-metoxyp-Etilguayacol
29,67	781,50	47,32			501,0	573,5			2-Metil,5,6,7,8-tetrahydroquinoxaline	2-Metil,5,6,7,8-tetrahydroquinoxaline
29,80	873,17	29,39		319,0	214,0	348,5		1H-Indole		1H-Indole
30,25	880,13	71,37	679,5	309,5	565,5	427,0	Furano,2,2'-[oxibis(metil ene)]bis-	Furano,2,2'[oxybis(metilene)] bis-	Furano,2,2'-[oxibis(metilene)]bis-	Furano,2,2'-[oxibis(metilene)]bis-

Tabela 12 – Grãos defeituosos e sadios submetidos às mesmas condições de torrefação (120 minutos) (Continuação)

Tempo de retenção*	RSI	Probabilidade* (%)	Sinal Ruído				Compostos Voláteis			
			Sadio	Preto	Verde	Ardido	Café Sadio	Café Preto	Café Verde	Café Ardido
30,35	870,00	39,03	646,5				4-Hydroxy,2-metilacetofenona			
30,57	847,75	26,84	343,0		127,0		2-Butil,3,4,5,6-tetrahydropiridina		2-Butil,3,4,5,6-tetrahydropiridina	
30,75	837,25	34,99	1613,5	1491,5	1569,5	1060,0	2-Metoxo,4-vinilfenol	2-Metoxo-4-vinilfenol	2-Metoxo,4-vinilfenol	2-Metoxo,4-vinilfenol
31,27	863,50	44,93	192,0	276,0	289,0	354,0	4-Metilpirrolo[1.2a]pirazina	4-Metilpirrolo[1.2a]pirazina	4-Metilpirrolo[1.2a]pirazina	4-Metilpirrolo[1.2a]pirazina
31,57	781,00	61,61				220,5				1H-Indol,5-carboxaldeido,2,3-dihydro,1-metil
32,10	859,17	40,00	754,0		623,5	425,0	2(1H)-Quinolinona,4-metil		2(1H)-Quinolinona,4-metil	2(1H) Quinolinone,4-metil
33,11	839,25	75,69	342,5	481,5	377,0	397,5	Benzeno,4-etenil,1,2-dimetoxo	Benzeno,4-etenil-1,2-dimetoxo	Benzeno,4-etenil-1,2-dimetoxo	Benzeno,4-etenil-1,2-dimetoxo
33,39	843,25	47,94	126,5		62,5		2,5-Dihidroxypropiofenona		2,5-Dihidroxypropiofenona	
33,66	802,00	35,77				535,0				Biciclo[2.2.2]oct-2-ene,1,4,5,5,6,6-hexafluoro,7-(fluorometilene)
34,14	804,75	40,63	69,0		800,0		1H-Benzaimidazol,2,5-dimetil		1H-Benzaimidazol,2,5-dimetil	
34,32	762,50	38,57			68,0				2-Naftalenol,3-metoxo	
34,75	701,00	50,76		97,0				Piridina,3-(3,4-dihydro-2H-pirrol-5-yl)		
34,79	849,25	32,42	51,0		93,0		Benzeno,2-(1,3-Butadienil)-1,3,5-trimetil		Benzeno,2-(1,3-Butadienil)-1,3,5-trimetil	
34,98	782,00	72,41	358,5		232,0		à furfuriliden-à-furilmetilamina		à Furfuriliden-à-furilmetilamina	
35,22	824,17	33,05	70,0		85,0	89,5	1H-Benzaimidazol,1-etil		1-H-Benzaimidazol,1-etil,-	1H-Benzaimidazol,1-etil
35,81	765,00	30,11		178,0				Benzaldeido,2,5-difluoro-3,4-dihidroxy		
36,05	801,50	35,92	647,0		631,5		2(1H)-Quinolinona,4-metil		2(1H)-Quinolinona,3,4-Dlmetil	
37,79	717,50	41,66		217,5				3-Amino-4-metil-6-metoxoquinoline		

Tabela 12 – Grãos defeituosos e sadios submetidos às mesmas condições de torrefação (120 minutos) (Continuação)

Tempo de retenção*	RSI	Probabilidade* (%)	Sinal Ruído				Compostos Voláteis			
			Sadio	Preto	Verde	Ardido	Café Sadio	Café Preto	Café Verde	Café Ardido
39,84	745,17	33,65		190,0	127,0	79,5		Naftaleno,1,2,3,4-tetrahy-dro-1-metil-8-(1-metiletil)	Naftaleno,1,2,3,4-tetrahy-dro-1,6-dimetil,-4-(metiletil)	Naftaleno,1,2,3,4-tetrahy-dro-1,6-dimetil-4-(1-metiletil)
40,56	836,00	27,24	599,5			625,0	3-Piridinol,2-fenil			3-Piridinol,2-fenil
40,55	700,00	35,14			670,0				[1,1'Bifenil]-4-ol acetato	
40,68	820,13	37,72	76,0	57,0	77,0	74,0	1H-Pirrole,3,5-dimetil-2-fenil	1H-Pirrol,3,5-dimetil-2-fenil	1H-Pirrol-3,5-dimetil,2-fenil	1H-Pirrol,3,5-dimetil-2-fenil
46,34	847,50	28,39		80,0				Fenol(1,1,3,3-tetrametilbutil)		
46,64	762,25	51,31	51,0	99,5			n-Nonylfenol	n-Nonylfenol		
46,99	783,50	32,30		74,5				4-Nonylfenol		
47,99	861,50	38,53		50,0				Hexestrol		
51,19	870,88	94,10	2836,5	2887,5	2241,0	1938,5	Cafeína	Cafeína	Cafeína	Cafeína
53,44	743,88	54,79	730,5	2837,0	1295,5	2763,5	Ácido hexadecanóico,metil éster	Ácido hexadecanóico,metilés ter	Ácido hexadecanóico,metil éster	Ácido hexadecanóico,metil éster
56,73	734,50	41,80		108,0		123,5		Ácido octadecanóico,metiléster		Ácido octadecanóico,metil éster
59,77	823,33	52,78	114,0		213,5	196,0	Ácido hexadecanóico, mono,(2-etilhexyl)éster		Ácido hexadecanóico, mono,(2-etilhexyl)éster	Ácido hexadecanóico, mono,(2-etilhexyl)éster

* Valor médio referente a análises em duplicata, Sinal Ruído: Sinal de intensidade (S) dividido pelo ruído(N) da linha; RSI: parâmetro de compatibilidade entre o espectro desconhecido e o espectro da biblioteca

Tabela 13 – Compostos voláteis característicos de grãos pretos.

Tempo de retenção*	RSI	Probabilidade* (%)	Sinal/Ruído	Compostos voláteis de café preto 60 min
11,21	711,50	37,23	925,5	Ciclopentacarbonitrilo,2-imino
11,21	739,00	31,31	925,5	Etilpirazina
15,65	799,00	45,50	4811,5	Pirazina,2-etil-5-metil
16,28	880,00	48,42	64,5	1H-Pirrol,2-carboxaldeido
16,69	705,00	35,80	349,0	2(1H)Piridinone,3,6-dimetil
18,15	759,00	35,91	66,0	Triciclo[2.2.1.0.2,6] heptan-3-one, oxime
20,35	760,25	40,78	432,5	3-Piperidinone,1-metil
21,29	862,50	62,17	789,5	1H-Indol,2,3-dihidro
21,63	760,50	39,06	387,0	Pirazina,2-metil,5-propil
25,49	831,00	48,46	114,0	Piridina,2-pentyl
38,05	799,00	30,60	77,0	Etanona,1-(4-hydroxy-3-metoxifenil)
Tempo de retenção*	RSI	Probabilidade* (%)	Sinal/Ruído	Compostos voláteis de café preto 120 min
12,57	890,50	29,42	59,0	Ácido benzóico,2-(metil amino)
16,31	762,00	54,50	88,0	Pirrolidina,2-dodecil,1-metil
17,62	776,00	43,32	109,0	2-Ciclopeten-1-ona,3,4-dimetil
18,40	841,50	26,70	380,5	n-Butilbenzeno
19,22	843,00	22,48	407,0	Pirazina,isopropenil
21,61	743,50	32,67	343,0	Pirazina,2-metil,6-propil
22,20	805,50	39,44	72,5	Borano,etilbis[2,3,4,5-tetrametilpirrol,1yl]
22,36	795,50	40,13	170,0	3-Fluoro-o- anisidine
23,11	730,00	52,86	72,0	4-Metil,5-etiltiazol
23,22	828,50	23,70	750,5	2-Pirazolina,1-isopropil-3,4-dimetil
23,29	752,50	30,48	182,0	1,4-Diisopropil ciclohexano
24,19	748,00	32,14	246,5	5,8-Decadien,2-one-5,9-dimetil
24,75	832,50	37,60	519,5	1H-Pirrol,1-(2-furanilmetil)
25,44	830,50	38,45	388,5	Piridina,2-pentyl
26,65	812,00	37,03	540,0	Ácido butanóico,3-metil,2-furanilmetil éster
27,49	817,00	50,67	125,5	1,5-dimetil-2-pirrole carbonitrilo
27,92	772,50	56,53	448,5	2-Butil,3-metilpirazina
34,75	701,00	50,76	97,0	Piridina,3-(3,4-dihydro-2H-pirrol-5-yl)
35,81	765,00	30,11	178,0	Benzaldeido,2,5-difluoro-3,4-dihidroxy
37,79	717,50	41,66	217,5	3-Amino-4-metil-6-metoxiquinoline
46,34	847,50	28,39	80,0	Fenol(1,1,3,3-tetrametilbutil)
46,99	783,50	32,30	74,5	4-Nonylfenol
47,99	861,50	38,53	50,0	Hexestrol

Tabela 14 – Compostos voláteis característicos de grãos verdes.

Tempo de retenção*	RSI	Probabilidade * (%)	Sinal/Ruído	Compostos voláteis de café verde 60 min
13,54	861,50	22,83	127,0	Benzeno, 1-metoxi-2-metil
16,96	714,00	42,93	63,5	2-Ciclohexen, 1-ol, -3-metil-6-(1-metiletil)cis
25,41	859,50	25,79	151,5	1H-Indol, 5-ol
28,93	806,50	32,03	543,5	3,4-Dihydroxyacetofenona
32,10	864,50	44,46	507,0	2(1H)-Quinolinona, 4-metil
33,97	791,00	43,33	79,5	Benzonitrilo, 4-hydroxy, 3-metoxi
35,22	825,00	40,51	86,5	1-H-Benzimidazol, 1-etil
37,22	843,00	23,39	59,5	Furfuril, isotiocianato
39,15	820,00	28,10	89,5	1H-Pirrol, 1-(4-metilfenil)
Tempo de retenção*	RSI	Probabilidade * (%)	Sinal/Ruído	Compostos voláteis de café verde 120 min
6,69	769,00	23,55	70,0	1H-Pirrol, 3-carbonitrilo
16,34	766,50	38,74	144,0	1H-Pirrol-2-acetonitrilo, 1-metil
16,95	819,50	21,30	79,0	1,3-Ciclohexanediona
19,13	719,00	31,03	408,0	Ácido carbâmico, fenil, feniléster
20,33	762,50	36,26	59,0	Benzaldeido
20,51	721,00	58,40	54,0	1H-Inden-1-ol-2,3-dihydro
22,94	793,00	38,12	77,5	1H-Pirrol, 2-carboxaldeido
23,64	720,00	34,13	995,0	2,3,5-Trimetil-6-etilpirazina
24,86	835,00	23,91	162,0	2,5-Tiofenodicarboxaldeido
28,03	794,00	43,77	98,0	1,6-Dimetil-5-oxo, 1,3,5-tetrahydroimidazol[1.2 ^a]Pirimidina
34,32	762,50	38,57	68,0	2-Naftalenol, 3-metoxi
40,55	700,00	35,14	670,0	[1,1'Bifenil]-4-ol acetato

Tabela 15 – Compostos voláteis característicos de grãos ardidos.

Tempo de retenção*	RSI	Probabilidade* (%)	Sinal/Ruído	Compostos voláteis de café ardido 60 min
6,72	790,50	42,69	49,5	1H-Pirrol,3-carbonitrilo
9,02	839,50	38,29	58,0	1H-Pirrol,3,4-dimetil
12,06	717,50	64,18	87,5	1H-Pirrol,2-etil,4-metil
13,44	815,00	42,91	263,0	Benzaldeido
15,19	780,50	67,14	424,0	2,7-Dioxatriciclo[4.4.0.0(3,8)]dec-4-ene
18,05	837,00	24,28	71,5	2-Piridinamina,N,N-dimetil
18,36	827,50	27,33	86,5	Biciclo[3.1.0]hex-2-ene,4-metileno-1-(1-metiletil)
18,49	776,00	50,26	73,0	1H-Pirrol,3-metil
20,27	820,00	56,57	198,5	Pirazina,2-metil,5-propil
20,35	760,25	40,78	321,0	Benzaldeido
21,56	740,50	42,02	609,0	2-Acetil-3-metilpirazina
22,34	709,00	49,31	128,5	2-Isobutil,3-metilpirazina
23,64	759,00	42,30	253,5	2,3,5-Trimetil-6-etilpirazina
24,19	728,00	39,02	355,0	Fenol 4-(2-metilpropil)
24,26	795,50	42,36	160,5	Quinoline,1,2,3,4-tetrahydro
25,29	705,50	35,49	284,0	2,3,5-Trimetil-6-etilpirazina
25,59	886,00	28,51	328,0	2H-Ciclopenta[d]piridazina
25,72	806,00	30,03	323,5	5,6,7,8-tetrahydroquinoxaline
27,19	719,00	41,59	48,0	5-Amino,2-metoxifenol
27,31	728,50	30,26	286,0	Pirazina,2,3-dimetil-5-(1-propenil),-(Z)
28,30	714,00	31,93	199,5	Pirazina,2-metil,5-propil
29,67	742,00	32,85	395,0	2-Isopropenil-3,6-dimetilpirazina
32,87	760,00	47,01	302,5	3-(2-Metoxypiridin-6-yl)-1-propanol
34,06	726,00	35,28	165,0	Benzenamina,N,N-dietil
36,32	759,00	46,57	73,5	Benzaldeido,2,5-difluoro,3-5-dihydroxy
39,62	739,00	34,24	92,5	1,3,5-Trimetil-2-ciclohexylbenzeno
46,28	869,00	44,60	50,0	Hexestrol
55,66	764,50	26,12	134,5	1,5,6,7-tetrametil-3-fenilbiciclo[3.2.0]hepta,2,6-diene
56,71	736,50	47,88	96,0	Ácido octadecanóico, metil ester
Tempo de retenção*	RSI	Probabilidade* (%)	Sinal/Ruído	Compostos Voláteis de café ardido 120 min
1,84	890,50	50,15	50,5	Aminoacetaldéido, dimetil acetal
6,71	869,50	55,83	61,0	Piridina,3-metil
11,20	723,50	31,07	831,0	Etilpirazina
11,28	790,50	35,76	968,5	Acetilcolina, clorideo
16,20	766,50	33,02	161,5	Etanona,1-(1H-Pirrol,2-yl-)
17,63	805,50	48,58	51,0	1H-Tatrazaborole,4,5-dihydro-1,4-dimetil
18,49	828,00	45,52	102,0	1H-Pirrol,3-metil
20,78	818,00	25,90	928,5	2-Ciclohexen,1-ona,4,5-dimetil
21,98	717,00	34,62	50,5	Boron,dietil(2,4-pentanedionato)
22,95	784,00	40,83	66,0	1H-Pirrol,2,3-dimetil
23,25	808,50	46,92	237,0	6-Metoxi,2'-nitroaurone
24,87	801,50	30,98	80,0	3,4,5-Trihydroxy fenetil amina
25,39	806,50	60,38	397,0	Piridina,2-propil
26,46	805,50	26,72	478,0	Piridinium,1-(acetilamino)-2-metil,-hidroxido, inert salt
31,57	781,00	61,61	220,5	1H-Indol,5-carboxaldéido ,2,3-dihydro,1-metil
33,66	802,00	35,77	535,0	Biciclo[2.2.2]oct-2-ene,1,4,5,5,6,6-hexafluoro,7-(fluorometilene)

Apresentam-se na Figura 21 alguns espectros de compostos identificados no café em comparação aos espectros dos compostos identificados na biblioteca do software. Deve-se observar que a escala do espectro de massas da biblioteca é diferente (de 0 a 600 m/z), da escala do composto desconhecido (de 50 a 650 m/z).

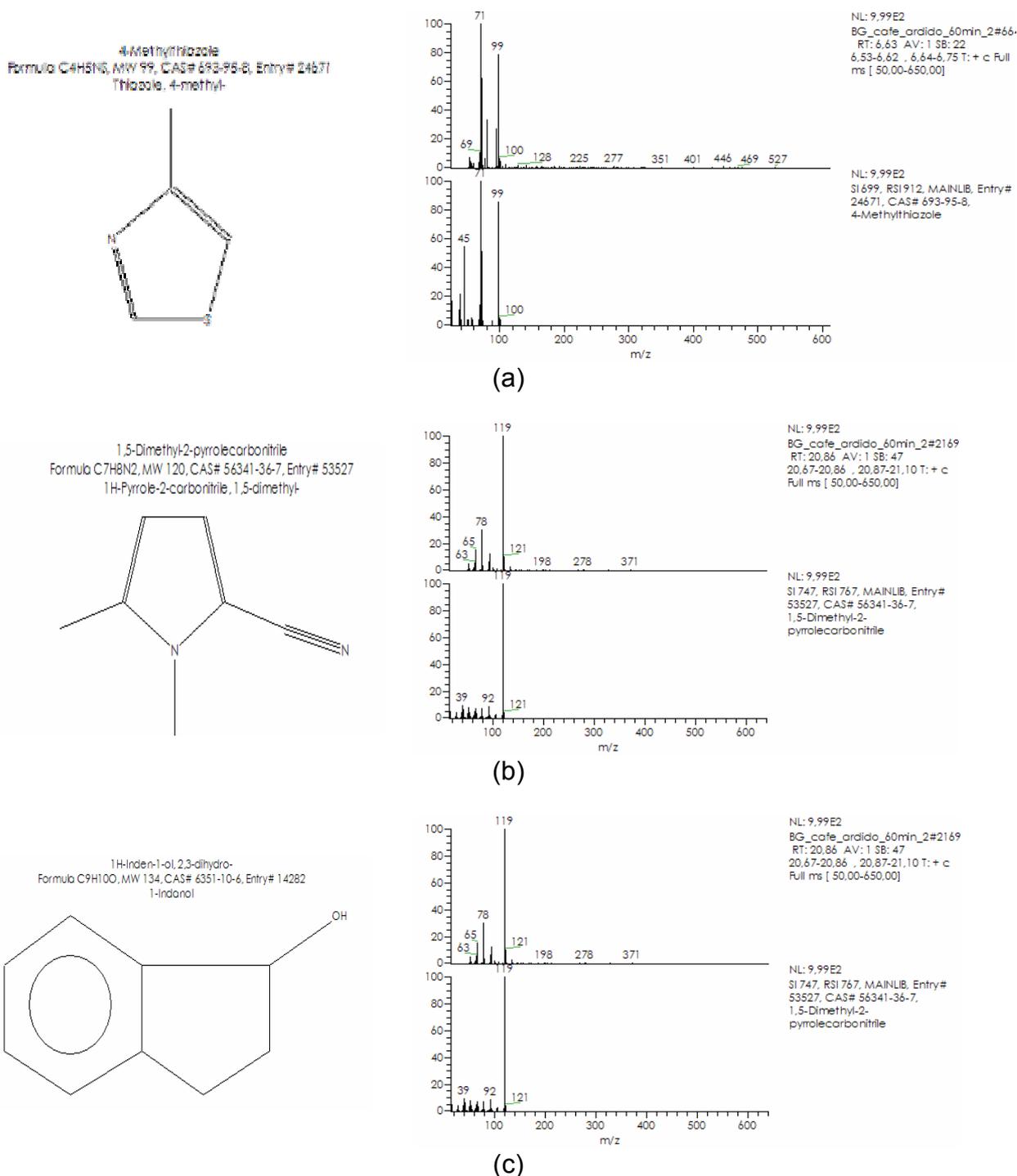


Figura 21 – Exemplos de espectros de compostos no café arido e verde:
 a) 4-Metiltiazole, (RSI=929,50; Prob=84,90); b) 1,5-Dimetil,2-pirrole carbonitrilo, (RSI=778,50; prob=49,94); c) 1H inden-1-ol -2,3 dihydro (RSI=721,50; prob=58,40).

Deve-se ter muita cautela nas análises realizadas, já que estes marcadores deveriam ser conferidos com padrões, para assim, desta maneira, poder ter certeza que tal composto é o composto mencionado. No entanto, isto não inviabiliza a metodologia aqui proposta, contanto que os grãos de café sadio não apresentem outro composto com mesmo tempo de retenção.

Ao avaliar diferentes tempos de torração, ou seja, duas categorias, devemos tomar cuidado, já que determinados compostos que foram identificados como típicos de defeitos para um tempo de torração, não o são em outro tempo avaliado, não podendo, portanto, serem considerados marcadores. Por exemplo, o composto 1,4-Diisopropilciclohexano, que se manifestou presente somente em café preto no processo de torrefação de 120 minutos é um dos compostos que também está presente em café sadio em diferentes tempos de torrefação avaliados (café cru, e 30 min). Pode-se observar que esse composto está-se descompondo no transcorrer da torração de cafés sadios.

4.3.2 Grãos defeituosos e sadios submetidos a diferentes condições de torrefação

Para o estudo da perda de massa, foram avaliados grãos sadios e defeituosos em diferentes tempos de torração (4, 6, 8, 10, 12, 15, 30, 60, 120 min). Os dados da literatura (CLARKE, 1987) estabeleceram que a perda de massa de grãos de café no processo de torração ocorre em consequência da perda de umidade e de uma fração de material orgânico volátil. Os resultados referentes à perda de massa em função do tempo de torração são apresentados na Figura 22. Sabe-se também, por pesquisas anteriores, (HERNANDEZ et al., 2006), que a evolução da perda de massa acontece em duas etapas distintas (secagem e pirólise). A transição entre as duas etapas acontece em uma faixa de 8-12% de perda de massa (CLARKE, 1987; DUTRA et al., 2001). No presente estudo, pode-se ver que essa faixa de perda de massa é alcançada entre os seis e doze minutos de torração para café sadio, sendo atingida para grãos verdes entre os seis e quinze minutos de torração; no entanto, para o defeito ardido, alcança-se a referida perda de massa entre oito e trinta minutos de torração e, finalmente, para os grãos pretos, alcançada entre 10 e 60 minutos. Esses resultados nos permitem afirmar que os grãos defeituosos (verde, ardido e preto), principalmente ardidos e pretos, precisam de maior tempo para atingir o mesmo grau de torração que os grãos sadios, mesmo quando submetidos às mesmas condições de processamento, conforme o descrito em pesquisas

anteriores (BORGES, et al., 2004a; FRANÇA et al., 2005a,b ; VASCONCELOS et al., 2007).

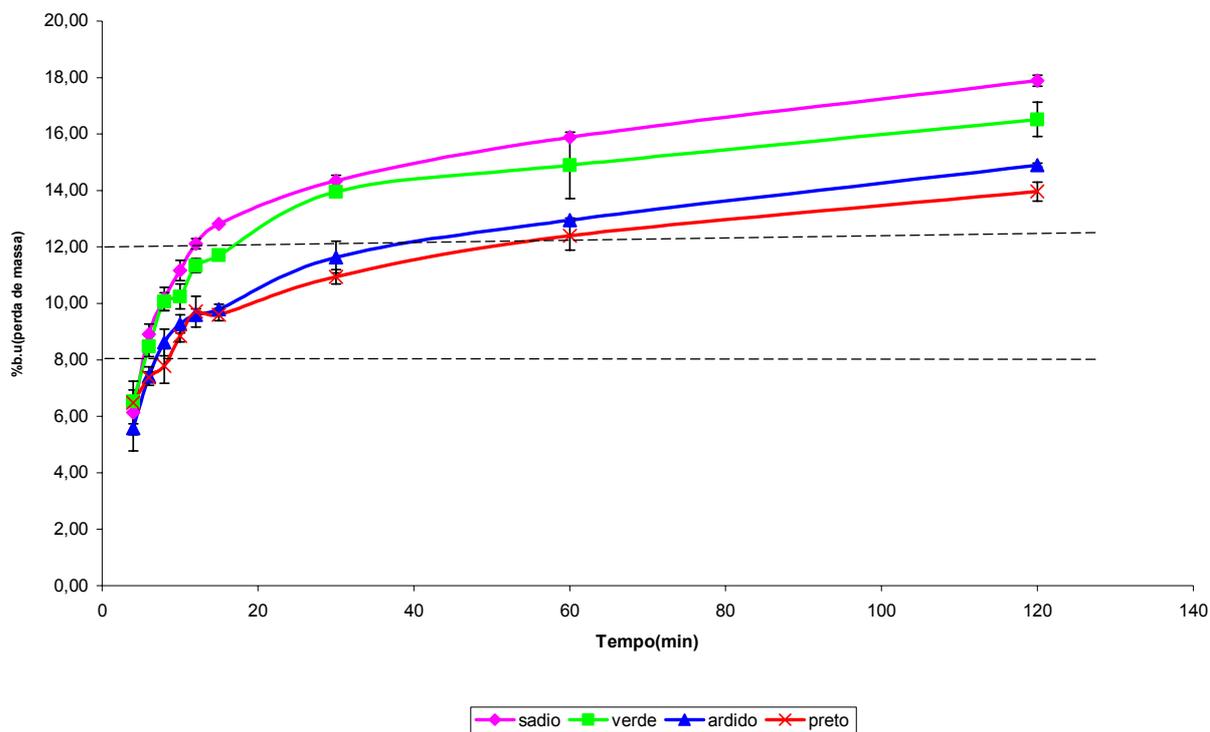


Figura 22 – Gráfico de perda de massa de café sadio e defeituoso. As linhas pontilhadas caracterizam o início da fase de pirólise, segundo CLARKE (1987).

Nesta seção, apresentaram-se os dados de perda de massa, demonstrando que grãos sadios e defeituosos torram em níveis diferentes. Portanto, justifica-se a comparação de grãos sadios 30 com defeito 60 min de torrefação, e sadio 60 com defeito 120 min.

Podem-se observar, nas Tabelas 16 e 17, compostos característicos de cada defeito, bem como outros que aparecem em vários deles. Os cromatogramas dos cafés defeituosos com suas respectivas duplicatas estão disponíveis no Apêndice L.

Tabela 16 – Compostos voláteis identificados somente em grãos defeituosos em torrefação de 60 minutos

Tempo de retenção*	RSI*	Probabilidade* (%)	Sinal Ruído			Compostos voláteis		
			Preto	Verde	Ardido	Café Preto	Café Verde	Café Ardido
4,15	980,00	31,20			56,0			1H-1,2,3-Triazol
4,61	877,00	38,57	149,5		114,5	1H-Pirrol		1H-Pirrol
6,64	929,50	84,90	47,0		141,0	4-Metiltiazol		4-Metiltiazol
6,72	790,50	42,69			49,5			1H-Pirrol,3-carbonitrilo
6,88	821,00	29,55	2330,0	1367,5		3-Piridinamina	4-Piridinamina	
7,25	789,25	72,83		221,0	195,5		Furano,(2-metoxymetil)	Furano,2-(metoxymetil)
7,52	768,00	40,51		138,0	84,0		Piridinium,1-(carboxymetil)-,hydroxido inert salt	Piridinium,2-carboxy-1-metil,hydroxido,inert salt
9,02	839,50	38,29			58,0			1H-Pirrol,3,4-dimetil
12,06	717,50	64,18			87,5			1H-Pirrol,2-etil,4-metil
13,40	825,33	40,16	146,5	163,5	251,5	Piridina,4-etil	Piridina,4-etil	Piridina,3-etil
13,44	815,00	42,91			263,0			Benzaldeido
13,54	861,50	22,83		127,0			Benzeno,1-metoxo-2-metil	
14,03	874,00	53,93		77,5			Ácido propanóico etenil éster	
15,19	780,50	67,14			424,0			2,7-Dioxatriciclo [4.4.0.0(3,8)]dec-4-ene
15,65	799,00	45,50	4811,5			Pirazina,2-etil-5-metil		
16,33	809,67	66,05	64,5	181,5	200,5	1H-Pirrol,2-carboxaldeido	1H-Pirrol-2-acetonitrilo,1-metil-	1H-Pirrol-2-acetonitrilo-1-metil
16,61	757,50	22,46		278,0			4(H)Piridina,N-acetil	
16,69	705,00	35,80	349,0			2(1H)Piridinone,3,6-dimetil		
16,96	714,00	42,93		63,5			2-Ciclohexen,1-ol,-3-metil-6-(1-metiletil)cis	

Tabela 16 – Compostos voláteis identificados somente em grãos defeituosos em torrefação de 60 minutos (Continuação).

Tempo de retenção*	RSI*	Probabilidade* (%)	Sinal Ruído			Compostos voláteis		
			Preto	Verde	Ardido	Café Preto	Café Verde	Café Ardido
17,19	780,00	53,43		118,5			Etanona,1-(2-piridinil)	
18,05	837,00	24,28			71,5			2-Piridinamina,N,N-dimetil
18,10	777,50	33,35		85,5			Ciclohexen,1-metil-3-(1-metiletil)	
18,15	759,00	35,91	66,0			Triciclo[2.2.1.0.2,6]heptan-3-one, oxime		
18,36	827,50	27,33			86,5			Biciclo[3.1.0]hex-2-ene,4-metileno-1-(1-metiletil)
18,49	776,00	50,26			73,0			1H-Pirrol,3-metil
19,05	875,00	93,19	275,5	233,0	1127,5	Etanona,1-(1H-Pirrol,2-yl)	Etanona,1-(H-pirrol-2-yl)	Etanona-1-(1H-pirrol-2yl-)
19,64	814,50	45,22	1177,5	1134,5		Pirazina,2,6-dietil	Pirazina,2,6-dietil	
19,60	828,00	50,73			1812,5			Pirazina,3-etil-2,5-dimetil
20,37	765,00	59,48	432,5			3-Piperidinone,1-metil		
20,27	820,00	56,57			198,5			Pirazina,2-metil,5-propil
20,34	755,50	22,07			321,0			Benzaldeido
20,92	778,50	49,94	499,0		581,0	1,5-Dimetil,2-pirrolcarbonitrilo		1,5-Dimetil,2-pirrolecarbonitrilo
21,29	862,50	62,17	789,5			1H-Indol,2,3-dihidro		
21,63	760,50	39,06	387,0			Pirazina,2-metil,5-propil		
22,34	709,00	49,31			128,5			2-Isobutil,3-metilpirazina
22,59	760,75	44,16	339,0		574,5	5H-5-Metil-6,7-dihydrociclopentapirazina		5H-5-Metil,6,7-dihydrociclopentapirazina
23,53	769,83	41,48	1504,5	1666,0	2516,5	Pirazina,3,5-dietil-2-metil	Pirazina,3,5-dietil,2-metil	Pirazina,3,5-dietil,2-metil
23,64	759,00	42,30			253,5			2,3,5-Trimetil-6-etilpirazina
24,19	728,00	39,02			355,0			Fenol 4-(2-metilpropil)

Tabela 16 – Compostos voláteis identificados somente em grãos defeituosos em torrefação de 60 minutos (Continuação).

Tempo de retenção*	RSI*	Probabilidade* (%)	Sinal Ruído			Compostos voláteis		
			Preto	Verde	Ardido	Café Preto	Café Verde	Café Ardido
24,26	795,50	42,36			160,5			Quinoline, 1,2,3,4-tetrahydro
24,51	795,17	62,85	104,0	115,5	213,0	Ácidobenzenoacético, metil éster	Ácido benzenoacético, metil éster	Ácido benzenoacético, metil éster
24,74	812,75	71,69	352,5		517,5	1H-Pirrol, 1-(2-furanilmetil)		1H-Pirrol, 1-(2-furanilmetil)
25,29	705,50	35,49			284,0			2,3,5-Trimetil-6-etilpirazina
25,41	859,50	25,79		151,5			1H-Indol, 5-ol	
25,49	831,00	48,46	114,0			Piridina, 2-pentyl		
25,59	886,00	28,51			328,0			2H-Ciclopenta[d]piridazina
25,72	806,00	30,03			323,5			5,6,7,8-tetrahydroquinoxaline
				184,5	283,0		2-Ciclohexen, 1-ona, 3-metil-6-(1-metiletilidene)	2-Ciclohexen-1-ona, 3-metil, 6-(1-metiletilideno)
26,57	812,25	56,43		345,5	430,0		Furfuril pentanoato	Furfuril pentanoato
27,19	719,00	41,59			48,0			5-Amino, 2-metoxifenol
27,31	728,50	30,26			286,0			Pirazina, 2,3-dimetil-5-(1-propenil), -(Z)
27,87	750,67	44,22	315,0	310,0	521,0	2-isoamil, 6-metilpirazina	2-Isoamil, 6-metilpirazina	2-Isoamil, 6-metilpirazina
28,30	714,00	31,93			199,5			Pirazina, 2-metil, 5-propil
29,81	864,00	35,13	475,0		357,5	1H-Indole		1H-Indole
32,19	749,25	36,21	683,5		239,0	Indol-3-acetaldeido		Índole, 3-acetaldeido
32,87	760,00	47,01			302,5			3-(2-Metoxypiridin-6-yl)-1-propanol
32,99	712,50	50,37		1277,0			4H-pirido[1,2-a]pirimidin-4-ona, 3,6-dimetil	
33,97	791,00	43,33		79,5			Benzonitrilo, 4-hydroxy, 3-metoxi	
34,06	726,00	35,28			165,0			Benzenamina, N,N-dietil

Tabela 16 – Compostos voláteis identificados somente em grãos defeituosos em torrefação de 60 minutos (Continuação).

Tempo de retenção*	RSI*	Probabilidade* (%)	Sinal Ruído			Compostos voláteis		
			Preto	Verde	Ardido	Café Preto	Café Verde	Café Ardido
35,22	825,00	40,51		86,5			1-H-Benzaimidazol, 1-etil	
35,79	771,00	35,27	132,0		242,0	Benzaldeido, 2,5-difluoro-3,4-dihidroxy		Benzaldeido, 2,5-difluoro, 3-5-dihydroxy
36,22	759,00	46,57			73,5			Benzaldeido, 2,5-difluoro, 3-5-dihydroxy
37,22	843,00	23,39		59,5			Furfuril, isotiocianato	
38,05	799,00	30,66	77,0			Etanona, 1-(4-hydroxy-3-metoxifenil)		
39,15	820,00	28,10		89,5			1H-Pirrol, 1-(4-metilfenil)	
39,62	739,00	34,24			92,5			1,3,5-Trimetil-2-ciclohexylbenzeno
40,25	797,75	38,79	219,5		75,0	Naftaleno, 1,2,3,4-tetrahydro-1-metil-8-(-1-metiletil)		Naftaleno, 1,2,3,4-tetrahydro-1-metil-8-(1-metiletil)
40,65	820,00	43,85		73,5	95,0		1H-Pirrol, 3,5-dimetil, 2-fenil	1H-Pirrole, 3,5-dimetil-2-fenil
46,28	869,00	44,60			50,0			Hexestrol/Fenol, 4,4' -(1,2-dietil-1,2-etanediyil)bis
56,71	736,50	47,88			96,0			Ácido octadecanóico, metil éster

* Valor médio referente a análises em duplicata; Sinal Ruído: Sinal de intensidade (S) dividido pelo ruído (N) da linha; RSI: parâmetro de compatibilidade entre o espectro desconhecido e o espectro da biblioteca.

Tabela 17 – Compostos voláteis identificados somente em grãos defeituosos em torrefação de 120 minutos

Tempo de retenção*	RSI*	Probabilidade* (%)	Sinal Ruído			Compuestos voláteis		
			Preto	Verde	Ardido	Café Preto	Café Verde	Café Ardido
1,84	890,50	50,15			50,5			Aminoacetaldeido,dimetil acetal
4,28	875,50	80,32		11190,5	12613,5		Indol,3-[(dietilamino)metil]	Indol,3-[(dietilamino)metil]
4,64	857,17	54,51	226,0	79,5	122,0	1H-Pirrol	1H-Pirrol	1H-Pirrol
6,63	912,50	81,53	89,5	194,5	246,0	4-Metiltiazol	4-Metiltiazol	4-Metiltiazol
6,69	769,00	23,55		70,0			1H-Pirrol,3-carbonitrolo	
7,65	797,25	46,13	77,5		85,0	1H-Pirrol,3-metil		1H-Pirrol,2,4-dimetil
7,52	804,50	35,07		78,5			Piridinium,1-(carboxymetil)-hydroxido,innert salt	
8,15	845,00	51,51	54,5			4-Metiltiazol		
8,74	811,25	44,28	271,5		399,5	Piridina,3-metil		Piridina,3-metil
8,99	835,50	46,02	260,5	55,0	71,0	1H-Pirrol,2,4-dimetil	1H-Pirrol,2,5-dimetil	1H-Pirrol,3,4-dimetil
9,94	894,00	55,50	158,0	100,5	114,5	1,3,5,7-Ciclooctatetraeno	1,3,5,7-Ciclooctatetraeno	1,3,5,7-Ciclooctatetraeno
11,07	881,25	39,37		1972,5	2060,5		Etanona,1-(2-furanil)	Etanona,1-(2-furanil)
11,20	723,50	31,07			831,0			Etilpirazina
11,28	790,50	35,76			968,5			Acetilcolina, clorideo
11,95	852,00	37,42		73,5	103,5		1H-Pirrol,2,4-dimetil	1H-Pirrol,2,4-dimetil
12,01	783,25	54,89	133,0		29,5	1H-Pirrol,2,etil, 4-metil		1H-Pirrol,2-etil,4-metil
12,57	890,50	29,42	59,0			Ácido benzóico,2-(metilamino)		
16,20	766,50	33,02			161,5			Etanona,1-(1H-Pirrol,2-yl-)
16,23	783,25	53,75	167,0	180,0		1H-Pirrol,2etil,4-metil	Pirrol,4-etil,2-metil	

Tabela 17 – Compostos voláteis identificados somente em grãos defeituosos em torrefação de 120 minutos (Continuação).

Tempo de retenção*	RSI*	Probabilidade* (%)	Sinal Ruído			Compuestos voláteis		
			Preto	Verde	Ardido	Café Preto	Café Verde	Café Ardido
16,31	762,00	54,50	88,0			Pirrolidina,2-dodecil,1-metil		
16,62	701,25	37,44		297,0	248,5		2-(1H)-Piridinona, 3,6-dimetil	2(1H)-Piridinone,3,6-dimetil
17,63	805,50	48,58			51,0			1H-Tatrazaborole,4,5-dihydro-1,4-dimetil
17,62	776,00	43,32	109,0			2-Ciclopeten-1-ona,3,4-dimetil		
18,17	794,25	83,65		335,0	336,0		Piridina,3-propil	Piridina,3-propil
18,35	833,75	34,41		87,5	121,0		Biciclo[3.1.0]hex-2-ene-4-metilen-1-(1-metiletil)-	Biciclo[3.1.0]hex-2-ene,4-metilene-1-(1-metiletil)
18,40	841,50	26,70	380,5			n-Butilbenzeno		
18,49	828,00	45,52			102,0			1H-Pirrol,3-metil
19,13	719,00	31,03		408,0			Ácido carbamico,fenil,feniléster	
19,15	832,50	32,90			206,5			1,2,4-Triazolo[4,3 a] piridina
19,59	816,25	38,76		1770,0	1144,5		Pirazina,3-etil,2,5-dimetil	Pirazina,2-etil,2,5-dimetil
19,99	839,50	38,16	2353,0	2161,5	1984,5	Pirazina,3-etil,2,5-dimetil	2,3-Dimetil,5-etilpirazina	2,3-Dimetil,-5-etilpirazina
20,27	862,00	46,12		234,5	238,5		2-Piridinamina,5-metil	2-Piridinamina,5-metil
20,33	762,50	36,26		59,0			Benzaldeido	
20,51	721,00	58,40		54,0			1H-Inden-1-ol-2,3-dihydro	
20,78	818,00	25,90			928,5			2-Ciclohexen,1-ona,4,5-dimetil
20,90	769,17	44,34	836,6	591,5	862,5	1,5-dimetil-2-pirrole carbonitrilo	1,5-Dimetil-2-pirrole,carbonitrilo	1,5-Dimetil,2-pirrole carbonitrilo
21,55	753,00	39,25		518,5	292,5		2-Acetil,3-metilpirazina	2-Acetil-3-metilpirazina
21,61	743,50	32,67	343,0			Pirazina,2-metil,6-propil		

Tabela 17 – Compostos voláteis identificados somente em grãos defeituosos em torrefação de 120 minutos (Continuação).

Tempo de retenção*	RSI*	Probabilidade* (%)	Sinal Ruído			Compuestos voláteis		
			Preto	Verde	Ardido	Café Preto	Café Verde	Café Ardido
21,98	717,00	34,62			50,5			Boron,dietil(2,4-pentanedionato)
22,20	805,50	39,44	72,5			Borano,etilbis[2,3,4,5-tetrametilpirrol,1yl]		
22,36	795,50	40,13	170,0			3-Fluoro-o- anisidine		
22,46	712,00	33,71	271,5			2-isobutil,3-metilpirazina		
22,56	746,25	44,94	770,0		558,5	5H-5-Metil-6,7-dihydrociclopentapirazina		5H-5-Metil,6,7-dihydrociclopentapirazina
22,94	793,00	38,12		77,5			1H-Pirrol,2-carboxaldeido	
22,95	784,00	40,83			66,0			1H-Pirrol,2,3-dimetil
23,11	730,00	52,86	72,0			4-Metil,5-etiltiazol		
23,22	828,50	23,70	750,5			2-Pirazolina,1-isopropil-3,4-dimetil		
23,25	808,50	46,92			237,0			6-Metoxo,2'-nitroaurone
23,29	752,50	30,48	182,0			1,4-Diisopropil ciclohexano		
23,59	788,00	54,60	419,0	514,0	1674,0	Pirazina,3,5-dietil,2-metil	Pirazina,3,5-dietil,2-metil	Pirazina,3,5-dietil-2-metil-
23,64	720,00	34,13		995,0			2,3,5-Trimetil-6-etilpirazina	
23,94	801,00	31,33		193,5	242,0		2-Acetil-3-metilpirazina	2-Acetil,3-etilpirazina
24,19	748,00	32,14	246,5			5,8-Decadien,2-one-5,9-dimetil		
24,20	781,00	34,30		422,5	493,5		Fenol,4-etil	Fenol,4-etil
24,50	808,67	61,24	183,0	181,5	187,5	Ácido benzenoacético, metil éster	Ácido benzenoacético,metil éster	Ácido Benzenoacético, metil éster
24,75	832,50	37,60	519,5			1H-Pirrol,1-(2-furanil metil)		
24,86	835,00	23,91		162,0			2,5-Tiofenodicarboxaldeido	

Tabela 17 – Compostos voláteis identificados somente em grãos defeituosos em torrefação de 120 minutos (Continuação).

Tempo de retenção*	RSI*	Probabilidade* (%)	Sinal Ruído			Compuestos voláteis		
			Preto	Verde	Ardido	Café Preto	Café Verde	Café Ardido
24,87	801,50	30,98			80,0			3,4,5-Trihydroxyfenetilamina
25,14	793,00	25,37	1321,5	707,5	897,0	Pirazina,2-metil-6-(2-propenil)	Pirazina,2-metil-5-(1-propenil)-(Z)	Pirazina,2-metil-5-(1-propenil)-(Z)
25,39	806,50	60,38			397,0			Piridina,2-propil
25,44	830,50	38,45	388,5			Piridina,2-pentyl		
25,69	891,50	40,72	482,0		296,0	2H-Ciclopenta piridazina	[d]	2H-Ciclopenta[d]piridazina
25,76	795,00	29,23	571,0		255,5	5,6,7,8-Tetrahydro quinoxaline		5,6,7,8-Tetrahydro quinoxaline
26,58	813,50	54,92		395,0	422,0		Furfuril pentanoato	Furfuril penanoato
26,65	812,00	37,03	540,0			Ácido butanóico,3-metil,2-furanilmetil éster		
27,49	817,00	50,67	125,5			1,5-dimetil-2-pirrolecarbonitrilo		
27,83	739,50	51,94		217,5	371,5		2-Isoamil,6-metilpirazina	2-Isoamil,6-metilpirazina
27,92	772,50	56,53	448,5			2-Butil,3-metilpirazina		
28,03	794,00	43,77		98,0			1,6-Dimetil-5-oxo,1,3,5-tetrahydroimidazol[1.2a]Pirimidina	
29,67	781,50	47,32		501,0	573,5		2-Metil,5,6,7,8-tetrahydroquinoxaline	2-Metil,5,6,7,8-tetrahydroquinoxaline
29,80	873,17	29,39	319,0	214,0	348,5	1H-Indole	1H-Indol	1H-Indole
30,57	869,00	30,51		127,0			2-Butil,3,4,5,6-tetrahydropiridina	
31,57	781,00	61,61			220,5			1H-Indol,5-carboxal deido 2,3-dihydro,1-metil
32,10	851,75	39,71		623,5	425,0		2(1H)-Quinolinona,4-metil	2(1H) Quinolinone,4-metil
33,66	802,00	35,77			535,0			Biciclo[2.2.2]oct-2-ene , 1,4,5,5,6,6-hexafluoro,7-(fluorometilene)
34,44	830,00	41,87		800,0	89,5		1H-Benzaimidazol,2,5-dimetil	1H-Benzaimidazol,1-etil

Tabela 17 – Compostos voláteis identificados somente em grãos defeituosos em torrefação de 120 minutos (Continuação).

Tempo de retenção*	RSI*	Probabilidade* (%)	Sinal Ruído			Compuestos voláteis		
			Preto	Verde	Ardido	Café Preto	Café Verde	Café Ardido
34,32	762,50	38,57		68,0			2-Naftalenol,3-metoxo	
34,75	701,00	50,76	97,0			Piridina,3-(3,4-dihydro-2H-pirrol-5-yl)		
35,21	830,00	40,41		85,0			1-H-Benzaimidazol,1 etil,-	
35,81	765,00	30,11	178,0			Benzaldeido,2,5-difluoro-3,4-dihidroxy		
36,05	798,00	33,81		631,5			2(1H)-Quinolinona,3,4-Dlmetil	
37,79	717,50	41,66	217,5			3-Amino-4-metil-6-metoxiquinoline		
39,84	745,17	33,65	190,0	127,0	79,5	Naftaleno,1,2,3,4-tetrahydro-1-metil-8-(-1-metil etil)	Naftaleno,1,2,3,4-tetrahydro-1,6-dimetil,-4-(metiletil)-,(1S-cis)	Naftaleno,1,2,3,4-tetrahydro-1,6-dimetil-4-(1-metiletil)
40,55	700,00	35,14		670,0			[1,1'Bifenil]-4-ol acetato	
40,57	843,00	28,53			625,0			3-Piridinol,2-fenil
40,68	820,83	40,57	57,0	77,0	74,0	1H-Pirrol,3,5-dimetil-2-fenil	1H-Pirrol-3,5-dimetil,2-fenil	1H-Pirrol,3,5-dimetil-2-fenil
46,34	847,50	28,39	80,0			Fenol(1,1,3,3-tetrametilbutil)		
46,99	783,50	32,30	74,5			4-Nonylfenol		
47,99	861,50	38,53	50,0			Hexestrol		
56,73	734,50	41,80	108,0		123,5	Ácido octadecanóico, metil éster		Ácido octadecanóico, metil éster

* Valor médio referente a análises em duplicata; Sinal Ruído: Sinal de intensidade (S) dividido pelo ruído(N) da linha; RSI: parâmetro de compatibilidade entre o espectro desconhecido e o espectro da biblioteca.

4.4 Diferenciação de graus de torração e de grãos sadios e defeituosos

Para as análises dos dados, foi utilizada a estatística multivariada, análises de componentes principais, PCA. Esse é um método que tem por finalidade básica a redução de dados a partir de combinações lineares das variáveis originais entre as amostras (MOITA NETO & MOITA, 1998).

Inicialmente, fizeram-se as análises de componentes principais para café sadio em diferentes tempos de torração. Os resultados são apresentados na Tabela 18 e Figura 23.

Tabela 18 – Autovalores e proporção das cinco primeiras componentes principais.

	PC1	PC2	PC3	PC4	PC5
Autovalor	2,02041E+13	8,34443E+12	2,81657E+12	1,32274E+12	5,24363E+11
Proporção	0,602	0,249	0,084	0,039	0,016
Acumulado	0,602	0,851	0,935	0,974	0,990

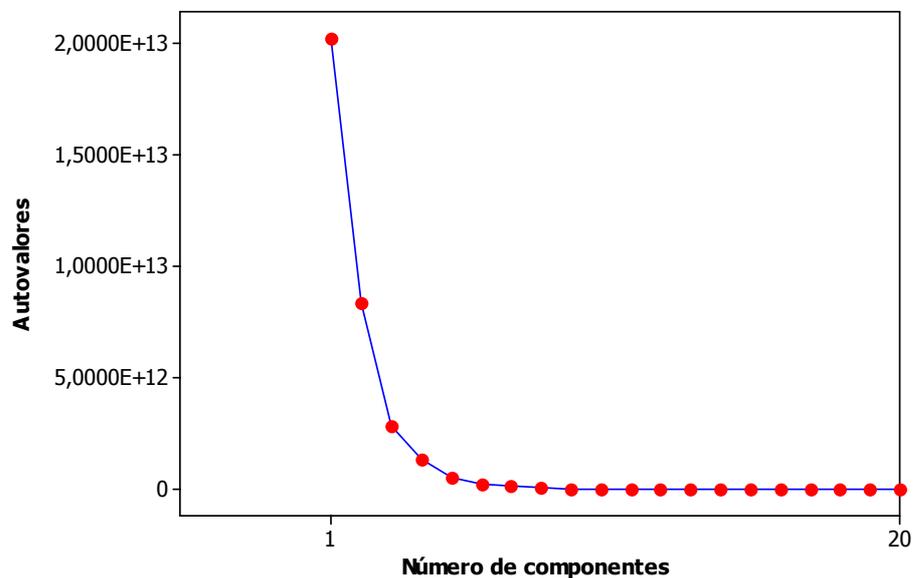


Figura 23 – Gráfico de Autovalores e número de componentes principais.

Os resultados apresentados na Tabela 16 e na Figura 23 demonstram que a primeira componente principal é a que mais influencia na variabilidade dos dados com uma proporção de 60,2 %. Já o PC2 dá um aporte menor, porém não menos importante,

da ordem de 24,9%. Analisando-se a Tabela 16, observa-se que até o PC5 consegue-se explicar 99% da variabilidade dos dados das amostras de café sadio em diferentes tempos de torração. Ressalta-se que com as duas primeiras componentes consegue-se obter uma proporção de 85,1%.

A distribuição das amostras de café sadio, em diversos graus de torração, é apresentada na Figura 24, considerando as duas primeiras componentes principais. Pode-se observar que houve uma separação dos cafés sadios segundo o grau de torração. Observa-se uma tendência de aumento do valor da primeira componente e diminuição do valor da segunda componente com o aumento do grau de torração. Este resultado era esperado, uma vez que, o processo de torração altera a composição química dos grãos de café.

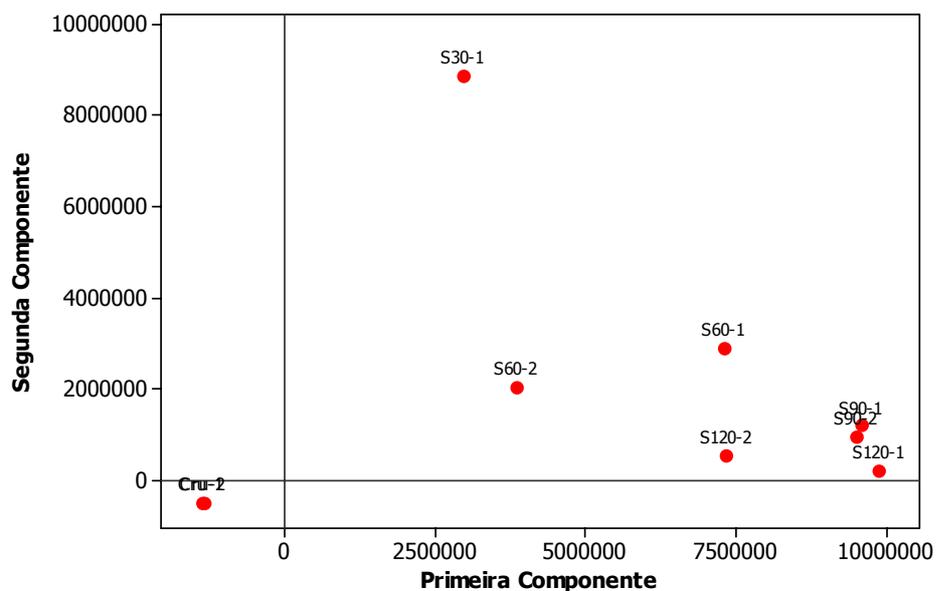


Figura 24 – Gráfico de Score de Pontos do PCA para café sadio (1 e 2 se referem as réplicas de um dado ensaio).

No gráfico dos loadings (Figura 25), podem-se observar as variáveis que influenciam cada uma das componentes principais. O composto que corresponde ao tempo de retenção de 4,26 min ($m/z=80,05$) é o que mais tem influência positiva na primeira componente. No entanto, os compostos que correspondem aos tempos de retenção de 24,19 min ($m/z=69,17$) e 23,24 min ($m/z=81,08$) são os que possuem maior influência negativa na componente citada anteriormente, como também na segunda

componente principal. Já os compostos que estão influenciando positivamente a segunda componente principal correspondem aos tempos de retenção de 13,95min ($m/z=109,09$); 15,63 min ($m/z=98,05$) e 30,75 min ($m/z=150,07$).

Os compostos que influenciam nas componentes principais foram identificados no espectro de massas como: 2 Furano carboxialdeído 5-metil, que corresponde ao tempo de retenção de 13,95 min, estando presente somente nos cafés crus e após 30 min de torração. O composto identificado como 2-Furano metanol acetato, (TR=15,63 minutos) está presente em todos os cafés torrados. O composto 2-Metoxi-4-vinilfenol, (TR= 30,75min) apresenta-se em todas as amostras analisadas nesta seção. O composto identificado como 2,3-Dicianopropanamida (TR=4,26) não foi encontrado no café cru. Das variáveis que possuem influências negativas foi possível à identificação de uma delas, 1,4-Diisopropilciclohexano corresponde ao tempo de retenção de 24,19 minutos, tendo sido observado somente em café cru e torrados aos 30 min e 90 min. Na Figura 26 apresenta-se o espectro de massas do composto para o qual não foi possível a identificação (TR=23,24min) com base na biblioteca do software.

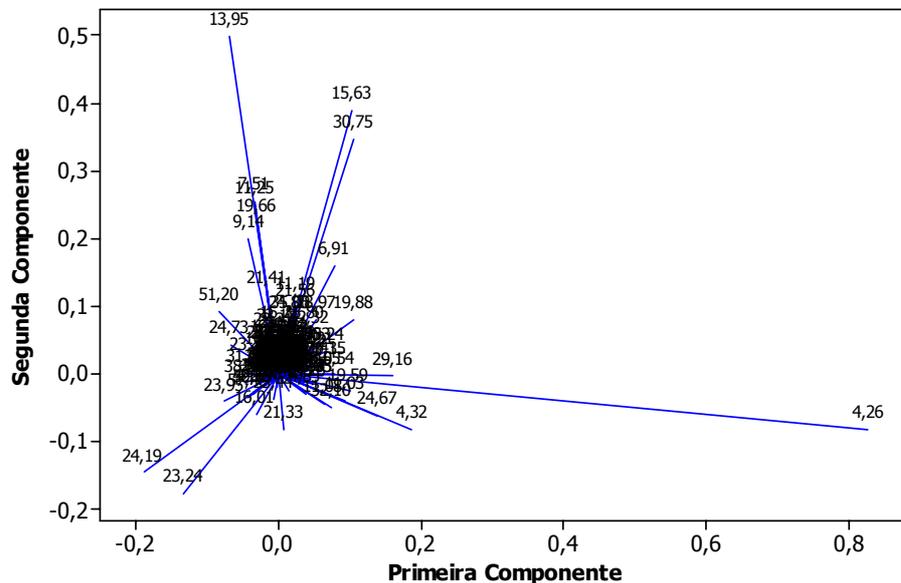


Figura 25 – Loadings de cafés sadios em diferentes tempos de torrefação.

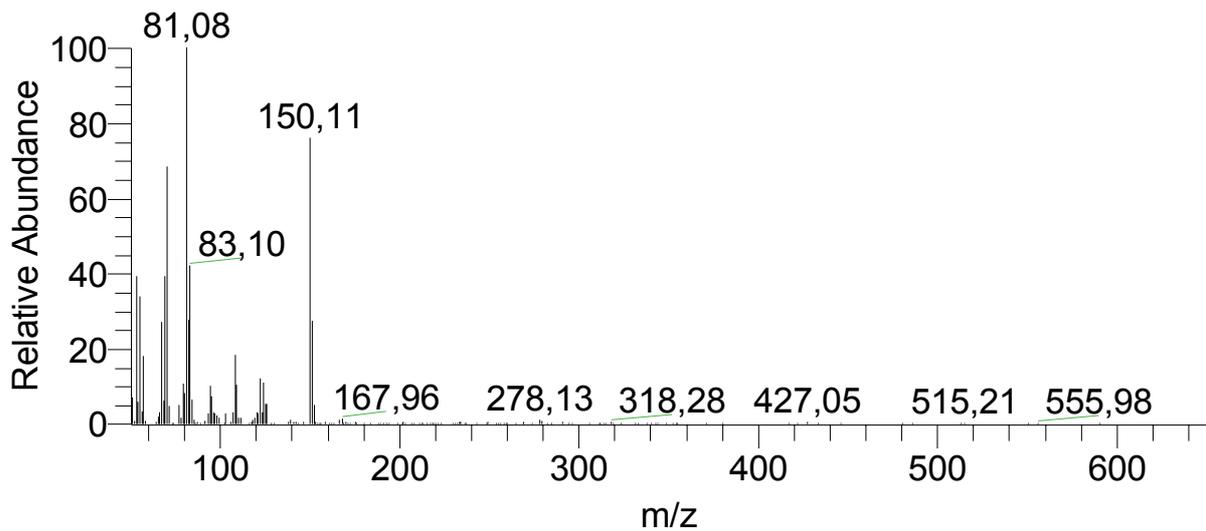


Figura 26 – Espectro de massas do composto que sai no tempo de retenção de 23,24 min.

O Dendrograma tem como objetivo agrupar os dados de forma a permitir identificar similaridades entre as amostras. No nosso estudo para café sadio, obteve-se uma clara separação em relação aos tempos de torração. Esta demonstrado na Figura 27 que há dois grupos que se diferenciam muito bem, ou seja, que não têm similaridade alguma. São eles: café cru e café torrado por 30 min, por um lado, com os outros cafés em tempos de torração maiores, ou seja, 60, 90 e 120 min de torração. Apesar de as amostras de café cru e as de 30 min de torração estarem no mesmo grupo, o dendograma está mostrando que a similaridade entre elas é bem baixa, da ordem de 10,18%.

Já no outro grupo, para cafés com tempos de torrefações maiores, pode-se dizer que os cafés torrados a 90 e 120 min possuem uma similaridade alta na ordem de 60,47%. No entanto, esses cafés possuem uma similaridade baixa (31,23%) quando comparados com torra de 60 min. Estes resultados corroboram o observado de que o tempo de torração de 30 minutos não foi suficiente para caracterizar o café como torrado adequadamente para consumo.

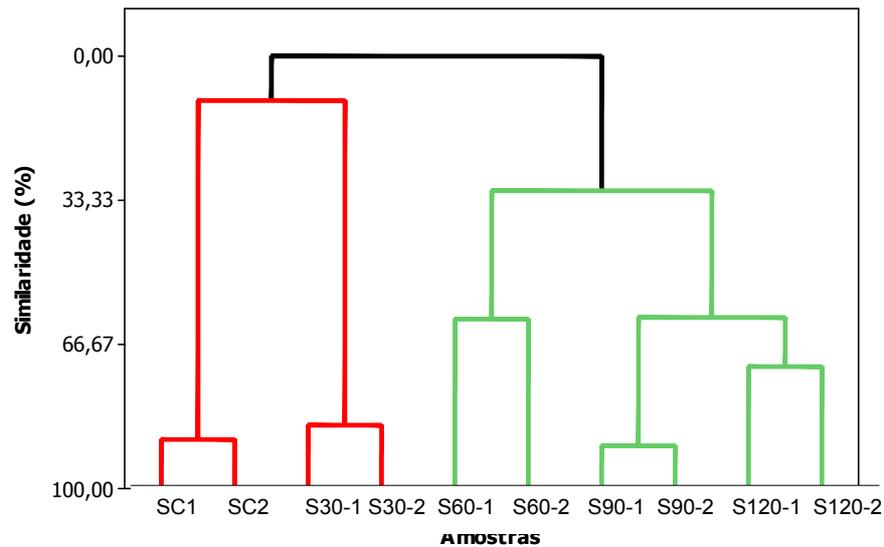


Figura 27 – Dendrograma de cafés sadios em diferentes tempos de torrefação. Amostras 1 e 2: café cru; Amostras 3 e 4: café torrado por 30 min; Amostras 5 e 6: café torrado por 60 min; Amostras 7 e 8: café torrado por 60 min; Amostras 9 e 10: café torrado por 120 min.

Para as análises de café sadio e defeituosos, na Tabela 19 e na Figura 28 são apresentados os componentes principais e suas proporções. O PC1 é o que mais influencia na variabilidade dos dados com uma proporção de 69,2%. No entanto, o PC2 aporta uma proporção na ordem de 16,5%. Com os cinco primeiros PCs, pode-se explicar 95,4% da variância total entre as amostras.

Tabela 19 – Autovalores e Proporção das cinco primeiras componentes principais para amostras de cafés sadios e defeituosos.

	PC1	PC2	PC3	PC4	PC5
Autovalor	8,19013E+13	1,94891E+13	5,83634E+12	3,75591E+12	1,96286E+12
Proporção	0,692	0,165	0,049	0,032	0,017
Acumulado	0,692	0,857	0,906	0,938	0,954

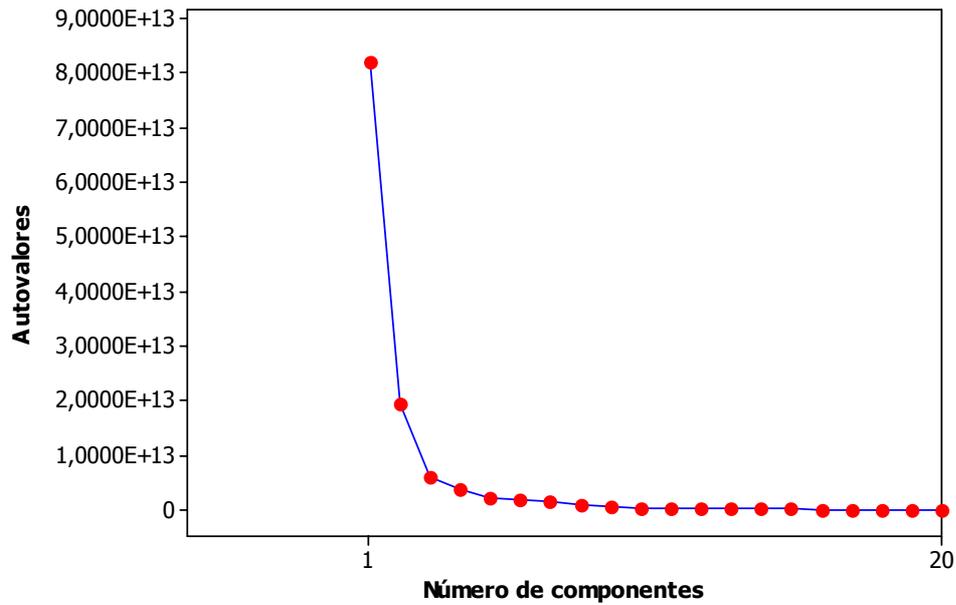


Figura 28 – Gráfico de Autovalores e número de componentes principais.

Com base nos dados de PCA para os cafés sadios e defeituosos, é possível mostrar que há uma nítida separação dos cafés, usando as duas primeiras componentes principais (Figura 29). Pode-se ver claramente que o PC1 separa os defeitos verde e preto (60 min e 120 min de torração) dos grãos sadios e ardidos, enquanto o PC2 separa os cafés crus, sadios, em diferentes tempos de torração, e o defeito ardido em ambos os tempos analisados (60 e 120 minutos). Também é possível estabelecer uma similaridade entre os grãos pretos torrados por 60 min e os grãos verde torrados por 120 min, possivelmente, o grão preto é o grão verde com um alto grau de fermentação. Outra das similaridades que pode ser estabelecidas é entre o grão sadio em alto grau de torração com o grão ardido. Possivelmente o grão ardido seja o grão sadio fermentado.

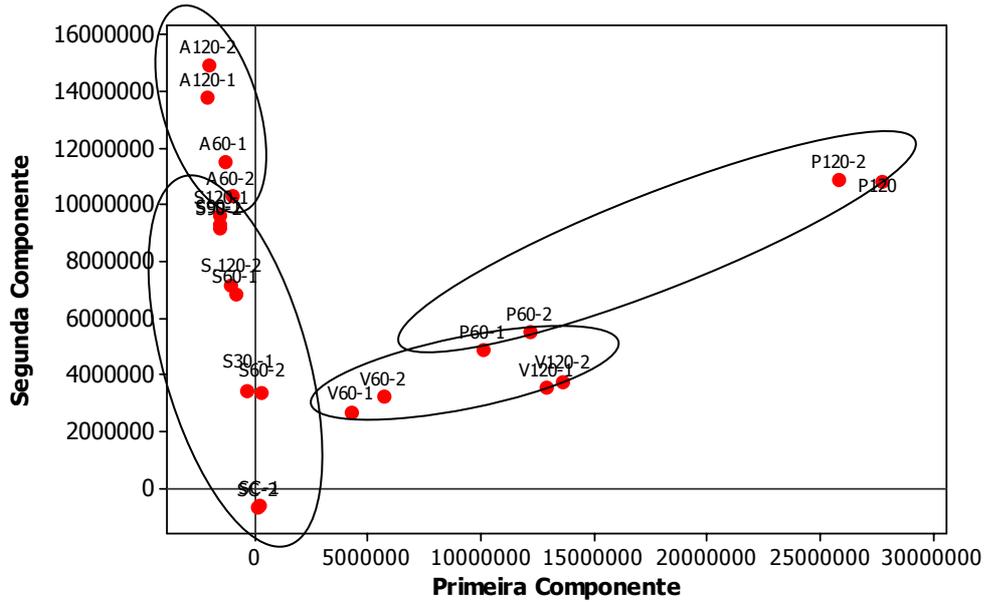


Figura 29 – Gráfico de Score de Pontos do PCA para café sadio e defeituoso. SC: café sadio cru; S30: café sadio torrado por 30 min; S60: café sadio torrado por 60 min; S90: café sadio torrado por 90 min; S120: café sadio torrado por 120 min; P60: café preto torrado por 60 min; P120: café preto torrado por 120 min; V60: café verde torrado por 60 min; V120: café verde torrado por 120 min; A60: café ardido torrado por 60 min; A120: café ardido torrado por 120 min. 1 e 2 se referem a réplicas de um dado ensaio.

Para as análises das variáveis que influenciam cada componente principal, observa-se o gráfico de Loadings. Nesse gráfico (Figura 30), pode-se observar que são duas as variáveis que apresentam maior influência positiva no PC1 e PC2, correspondendo aos tempos de retenção de 4,20 e 4,26 minutos, respectivamente. Conseguiu-se somente a identificação do composto 2,3-Dicianopropanamida, (TR=4,26 min; m/z= 80,05), que está presente em todas as amostras exceto verde 120 min e café cru. Apresenta-se na Figura 31 o espectro de massas do composto que sai no tempo de retenção de 4,20 min (m/z=81,06).

A similaridade entre as amostras de café sadio e defeituoso, está representada no dendrograma (Figura 32), que mostra dois grupos bem diferentes. Um deles corresponde ao defeito preto nos tempos de torração de 60 e 120 min, e o defeito verde a 120 min de torração. Esse pequeno grupo não tem similaridade alguma com o outro grupo, que compreende os cafés crus, sadio em diferentes tempos de torração, e ardido. As amostras de café sadio em altos tempos de torração (amostras 19 e 20 com amostras 21 e 22) apresentam uma similaridade bem alta, 84,98%. Esse pequeno grupo relaciona-se com uma similaridade de 79,36 com o café ardido 60 min (amostras 1 e 2) que, por sua vez, está relacionado ao café ardido 120 min com similaridade de 71,73% (amostras 7 e 8). Entre as amostras de café sadio 30 min (amostras 15 e 16) e 60 min (amostras 17 e 18) de torração, a similaridade está na ordem de 71,29%. Essas amostras relacionam-se com uma similaridade de 64,87% com o grupo de café cru (amostras 13 e 14) e verde 60 min (amostras 5 e 6). Já a similaridade entre o café verde 60 min (amostras 5 e 6) e o café cru (amostras 13 e 14) corresponde a 70,62%.

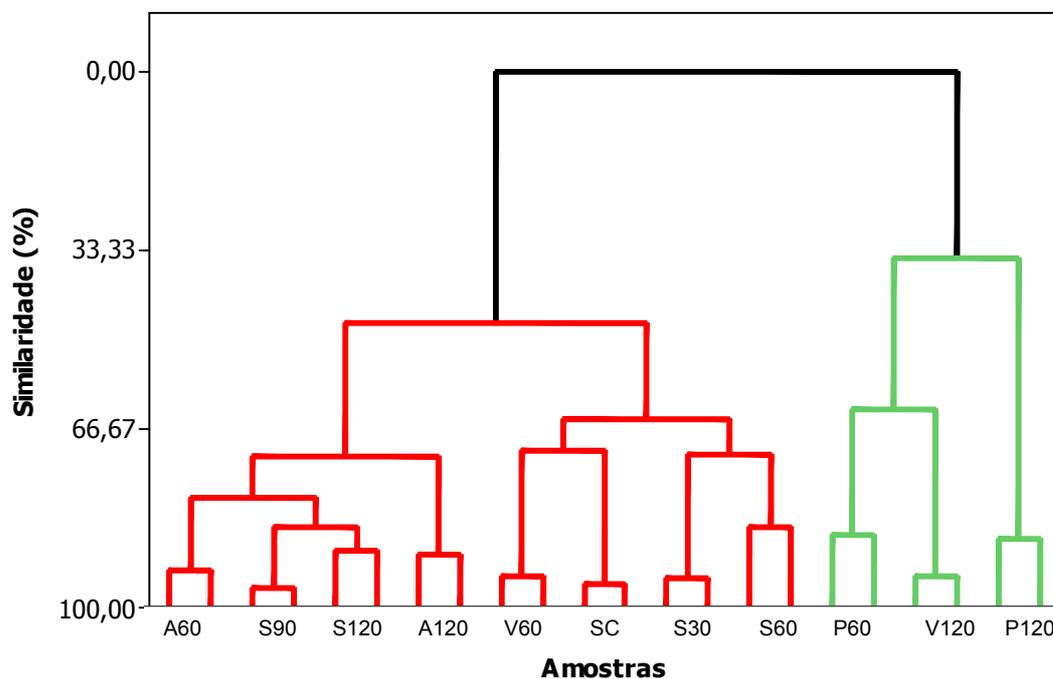


Figura 32 – Dendrograma de cafés sadios e defeituosos. Amostras 1 e 2: café ardido torrado por 60 min; Amostras 3 e 4: café preto torrado por 60 min; Amostras 5 e 6: café verde torrado por 60 min; Amostras 7 e 8: café ardido torrado por 120 min; Amostras 9 e 10: café preto torrado por 120 min. Amostras 11 e 12: café verde torrado por 120 min; Amostras 13 e 14: café sadio cru; Amostras 15 e 16: café sadio torrado por 30 min; Amostras 17 e 18: café sadio torrado por 60 min; Amostras 19 e 20: café sadio torrado por 90 min; Amostras 21 e 22: café sadio torrado por 120 min.

5 CONCLUSÕES E SUGESTÕES

Com base nos resultados obtidos no presente trabalho de estudo de viabilidade de diferenciação de grãos de café sadios e defeituosos pelo perfil de compostos voláteis, pode-se concluir que a metodologia utilizada foi satisfatória para os objetivos propostos. Através da técnica de cromatografia a gás acoplada a espectrometria de massas (CG-MS), foi possível identificar compostos característicos dos grãos de café crus e torrados, sadios e defeituosos de uma maneira geral e para cada defeito individualmente (preto, verde, ardido).

Conclui-se, também, que a metodologia de extração e concentração dos compostos voláteis do café foi apropriada, apresentando boa repetibilidade. O uso de fibras de micro-extração em fase sólida (SPME) permitiu uma captura e concentração dos compostos a serem identificados por cromatografia a gás acoplada à espectrometria de massas.

A seleção da fibra de SPME para analisar os cafés torrados e moídos foi baseada na maior quantidade de compostos que cada fibra foi capaz de adsorver. A fibra que apresentou melhores resultados foi a DVB/CAR/PDMS. As fibras PDMS/DVB e CAR/PDMS apresentaram eficiências de extração similares, sendo que, para a segunda fibra, observou-se maior abundância relativa dos compostos em comparação à primeira. Dessa maneira, conseguiu-se a identificação de diversos compostos caracterizados como possíveis marcadores, tanto para a situação em que grãos sadios e defeituosos foram submetidos às mesmas condições de torração (60 e 120 minutos), como para a situação em que os mesmos foram submetidos a condições diferentes (30 minutos para café sadio com 60 minutos para café defeituoso) e (60 minutos para café sadio com 120 min para café defeituoso).

Com a utilização das técnicas de estatística multivariada, análise de componentes principais (PCA), e de agrupamentos (clusters) foi possível observar uma separação tanto para café sadio, nos diferentes tempos de torração avaliados (café cru, torrado por 30, 60, 90 e 120 minutos) como para defeitos, também em vários graus de torração. Demonstrou-se ser possível a diferenciação entre os diversos tipos de defeitos de grãos de café e os grãos de café sadios através dos perfis de compostos voláteis que cada um deles apresentou. Com base nas análises de PCA, pode-se concluir que os compostos voláteis que apresentaram maior influência com relação à variação do grau de torração foram: 2,3-Dicianopropanamida (TR=4,26 min); 2-Furano carboxialdeido 5-metil (TR=13,95 min); 2-

Furano metanol, acetato (TR=15,63 min); 2-Metoxi-4-vinilfenol (TR=30,75 min). O composto 2,3-Dicianopropanamida aumentou sua concentração ao longo da torração, enquanto o composto 2-Furano metanol, acetato diminuiu sua concentração com o aumento do grau de torração. O composto 2-Furano carboxialdeído 5-metil foi identificado somente no café cru e café torrado por 30 minutos. Na análise comparativa dos grãos sadios e defeituosos, os compostos que apresentaram maior influência foram: 2,3-Dicianopropanamida (TR=4,26 min); e um composto para o qual não foi possível a identificação (TR=4,20 min; m/z= 81,06). A presença do primeiro composto foi caracterizada nos grãos sadios e ardidos. O composto não identificado (TR=4,20 min; m/z= 81,06) foi característico de grãos verdes e pretos, e os resultados obtidos indicam que os grãos pretos podem ser originários da fermentação dos grãos verdes.

Os resultados obtidos no presente trabalho indicam que esta metodologia poderá ser utilizada em trabalhos futuros, para a detecção de grãos defeituosos em cafés torrado e moído.

Diante dos resultados aqui obtidos, propõem-se, para pesquisas futuras:

- confirmação da identificação dos compostos selecionados como marcadores de café defeituosos através da utilização de padrões;
- avaliação comparativa do perfil de compostos voláteis de cafés torrados sadios e defeituosos, utilizando outras fibras;
- avaliação dos compostos típicos de defeitos em diferentes sacas de café, com diferentes origens e safras; e
- identificação dos marcadores de grãos defeituosos em misturas conhecidas de grãos de café (sadios e defeituosos).

6 REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- ABIC. (2006) - Estatística Produção agrícola. Disponível em: <www.abic.com.br/estat.pagricola.htm>. Acesso em: setembro 2006.
- AMORIM, H. V.; SILVA, D. M. (1968). Relationship between the poliphenoloxidase activity of coffee beans and the quality of beverage. *Nature*, v. 210, p 381-382.
- AMORIM, H.V. (1978). Aspectos bioquímicos e histoquímicos de grão de café verde relacionados com deterioração de qualidade. Piracicaba: ESALQ. 85p. (Dissertação de Mestrado).
- AMSTALDEN, L. C.; LEITE, F.; MENEZES, H. (2001). Identificação e Quantificação de Voláteis de Café através de Cromatografia Gasosa de Alta Resolução/ Espectrometria de Massas Empregando um Amostrador Automático de "Headspace". *Ciênc. Tecnol. Aliment.*, Campinas, v. 21(1), p 123-128.
- ANDROCIOLI FILHO, A., CARNEIRO FILHO, F., LIMA, F.B., SCHOLZ, M.B dos S., FERREIRA, D., BONATO, L.C., CARVALHO, M. V. R de. (1999). Influência da espessura de camada e do tempo de movimentação de café no terreiro na duração da secagem e na qualidade do produto. In: CONGRESSO BRASILEIRO DE PESQUISAS CAFEEIRAS, 25., 1999, Franca-S P. Resumos ...Rio de Janeiro: MAA/PROCAFÉ, 1999. p. 203-204.
- ALMEIDA, C.; ROSÁRIO, P.; SERÔDIO, P. NOGUEIRA, J. M. F. (2004). Novas Perspectivas na Preparação de Amostras para Análise Cromatográfica, Química, v. 95 p. 69-77.
- BÁRTHOLO, G. F.; FILHO, A. A. R. M.; GUIMARÃES, P. T. G.; CHALFOUN, S. M. (1989). Cuidados na colheita, no preparo e no armazenamento do café. *Inf. Agrop.*, Belo Horizonte, v. 14, n. 162, p. 33-44.
- BARROS MELO, W. L. (2004). A importância da informação sobre do grau de torra do café e sua influência nas características organolépticas da bebida. Comunicado Técnico, 58, ISSN 1517-4786. São Carlos, SP.
- BLATES, W. e BOCHMAN, G. (1987). Model Reactions on Roasted Aroma Formation. 1. Reactions of Serine and Threonine with Sucrose under the Conditions of Coffee Roasting and Identification of New Coffee Aroma Compounds. *Journal Agr. Food Chemistry* v 35, p. 340-346.
- BORGES, M. L. A.; MENDONÇA, J. C. F.; FRANÇA, A. S.; OLIVEIRA, L. S.; CORRÊA, P. C. (2004a). Efeito da Torração em Parâmetros físicos de cafés de diferentes qualidades. *R. Bras. Armaz.*, Viçosa – Especial Café, MG, v. 8, p. 6-13.
- BORGES, M. L. A.; MENDONÇA, J.C.F.; FRANÇA, A.S., OLIVEIRA, L.S. (2004b). Perfis de Trigonelina, Ácido 5-Cafeiolquínico e Cafeína em cafés de diferentes qualidades durante a torração. *R. Bras. Armaz.*, Viçosa – Especial Café, MG, v.8, p.14-18.
- BUFFO, R., CARDELLI-FREIRE, C. (2004) Coffee flavour: an overview. *Flavour Fragancy Journal*, v. 19, p 99-104.

- CARVALHO, V. D., CHAGAS, S. J. R., CHALFOUN, S. M., BOTREL, N.; JUSTE JUNIOR, E. S. G. (1994). Relação entre a composição físico-química e química do grão beneficiado e qualidade de bebida do café. *Pesq. Agro. Bras.*, v. 29, (3), p.449-454.
- CARVALHO, V.D., CHAGAS, S. J. R., SOUZA, S. M. C. (1997). Fatores que afetam a qualidade do café. *Inf. Agrop.* Belo Horizonte, v. 18, n. 187, p. 5-20.
- CARVALHO, V.D. de; CHALFOUN, S.M. (1985). Aspectos qualitativos do café. Informe Agropecuário, Belo Horizonte, v. 11, n. 126, p. 79-92.
- CZERNY, M. e GROSH, W. (2000). Potent Odorants of Raw Arábica Coffee. Their Changes during Roasting. *Journal Agr. Food Chemistry*, v 48, p. 868-872.
- CLARKE, R.J., MACRAE, R. (1987) Coffe Technology (Eds. Clarke, R.J e Macrae , R.) Amsterdam: Elsevier Applied Science, 305p.
- CLIFFORD, M.N. (1985) Chlorogenic acids. In: CLARKE, R. J.; MACRAE, R (Eds.). *Coffee chemistry*. London: Elsevier Applied Science. v. 1, p. 153-202.
- CONAB (Companhia Nacional de Abastecimento). Disponível em: <http://www.conab.gov.br/download/nupin/SAFRAS>. Acesso em agosto 2005 e Julho 2006.
- DART, S. K.; NURSTEN, H. E. (1985) Volatile components. In: CLARKE, R. J.; MACRAE, R (Eds.). *Coffee chemistry*. London: Elsevier applied Science. v. 1, p. 223-265.
- DE MARIA, C. A. B.; TRUGO, L. C.; MOREIRA, R. F. A., WERNECK, C.C. (1994) Composition of green coffee fractions and their contribution to the volatile profile formed during roasting. *Food Chemistry*, v. 50, p. 141-145.
- DE MARIA, C. A. B., TRUGO, L. C., NETO, F. R. A., MOREIRA, R. F. A.; ALVIANO, C.S. (1996). Composition of green coffee water-soluble fractions and identification of volatiles formed during roasting. *Food Chem.*, v. 55, p. 203-207.
- DE MARIA, C. A.; MOREIRA, R. F. A; TRUGO, L. C. (1999) Componentes voláteis do café torrado. Parte I Compostos Heterocíclicos. *Química nova*, 22 v. 2 p. 209, 217.
- DE MARIA, C. A.; MOREIRA, R. F. A.; TRUGO, L. C. (2000) Componentes voláteis do café torrado. Parte II Compostos alifáticos, alicíclicos e aromáticos. *Química nova*, 23 v. 2, p. 195,202.
- DUTRA, E. R; OLIVEIRA. L. S.; FRANCA, A. S.; FERRAZ, V. P.; AFONSO, R. J. C. (2001) A preliminary study on the feasibility of using the composition of coffee roasting exhaust gas for the determination of degree of roast. *J. Food Eng.*, v.47, n.3, p.241-246.
- FARAH, A.; DE PAULIS, T.; TRUGO, L. C.; MARTIN, P.M. (2005) Effect of Roasting on the Formation of Chlorogenic Acid Lactones in Coffee. *J. Agric. Food Chemistry*. v. 53, p.1505-1513.
- FARAH, A.; MONTEIRO, M. C.; CALADO, V.; FRANCA, A. S.; TRUGO, L.C. (2006) Correlation between cup quality and chemical attributes of Brazilian coffee. *Food Chemistry*, v.98, n.2, p. 373-380.

- FERIA-MORALES, A. M. (2002) Examining the case of green coffee to illustrate the limitations of grading systems/expert tasters in sensory evaluation for quality control. *Food Quality and Preference*, v. 13, p. 355-367,
- FRANÇA, A. S.; OLIVEIRA, L. S.; MENDONÇA, J. C. F., SILVA, X. A. (2005a) Physical and chemical attributes of defective crude and roasted coffee beans. *Food Chemistry*, 90, (1-2) p. 89-94 .
- FRANÇA, A. S.; MENDONÇA, J. C. F.; OLIVEIRA, S.D. (2005b). Composition of green and roasted coffees of different cup qualities, *Lebensmittel -Wissenschaft and -Technologie, Food Science and Technology*, v.38, 7, p. 709-715.
- HERNANDEZ, J. A.; HEYD, B., IRLES, C., VALDOVINOS, B.; RYSTRAM, G. (2006) Analysis of the heat and mass transfer during coffee batch roasting. *Journal of Food Engineering*, in press. 7p.
- ILLY, A.; VIANI, R. (1995) *Espresso Coffee: The Chemistry of Quality*. London: Academic Press Limited. 253 p.
- ILLY café "la cultura del café". Disponível em: <http://www.illy_pt/science>. Acesso em agosto 2006.
- KALLIO, H.; LEINO, M.; KOULLIAS, K.; KALLIO, S.; KAITARANTA, J. (1990) Headspace of roasted ground coffee as an indicator of storage time. *Food Chemistry*, 135, 148.
- LEE, K-G.; SHIBAMOTO, T. (2002). Analysis of volatile components isolated from Hawaiian green coffee beans (*Coffea arabica* L.). *Flavour Fragancy Journal*, v. 17, p 349-351.
- MAPA (Ministério de Agricultura, Pecuária e Abastecimento). Disponível em: <<http://www.agricultura.gov.br>>. Acesso em agosto 2005
- MARTÍN, M. J., PABLOS, F., GONZÁLES, A.G. (1999). Characterization of arabica and robusta roasted coffee varieties and mixture resolution according to their metal content. *Food Chemistry*, v. 66, p. 365-370.
- MAZZAFERA, P. (1999) Chemical composition of defective coffee beans. *Food Chemistry*, v. 64, p. 547-554
- MEGAAGRO, Disponível em: <<http://www.megaagro.com.br/>>. Acesso em Julho 2006.
- MENDONÇA, J.C.F., FRANÇA, A.S., OLIVEIRA, L.S., CORRÊA, P.C. (2003) Estudo preliminar da caracterização física e química de grãos defeituosos de café (PVA) antes e após a torra. *Revista Brasileira de Armazenamento*, v. Especial Café, 7, p. 44-49.
- MENDONÇA, J. C. F.; FRANÇA, A. S.; OLIVEIRA, L. S.; BOF, C. G.; COELHO, J. V. (2005). Determinação colorimétrica de carboidratos de baixo peso molecular em grãos de café crus e torrados. IV Simpósio de pesquisa do café do Brasil.
- MOITA NETO, J. M. & MOITA, C.G. (1998). Uma Introdução á Análises Exploratória de Dados Multivariados. *Química Nova*. 21 v.4 p. 467-469.
- MONDELLO, L.; CASILLI, A.; TRANCHIDA, P.; DUGO, P.; COSTA, R.; FESTA, S.; DUGO, G. (2004) Comprehensive multidimensional GC for the characterization of roasted coffee beans. *Journal Sep. Sci.*, v. 27, p. 442-450.

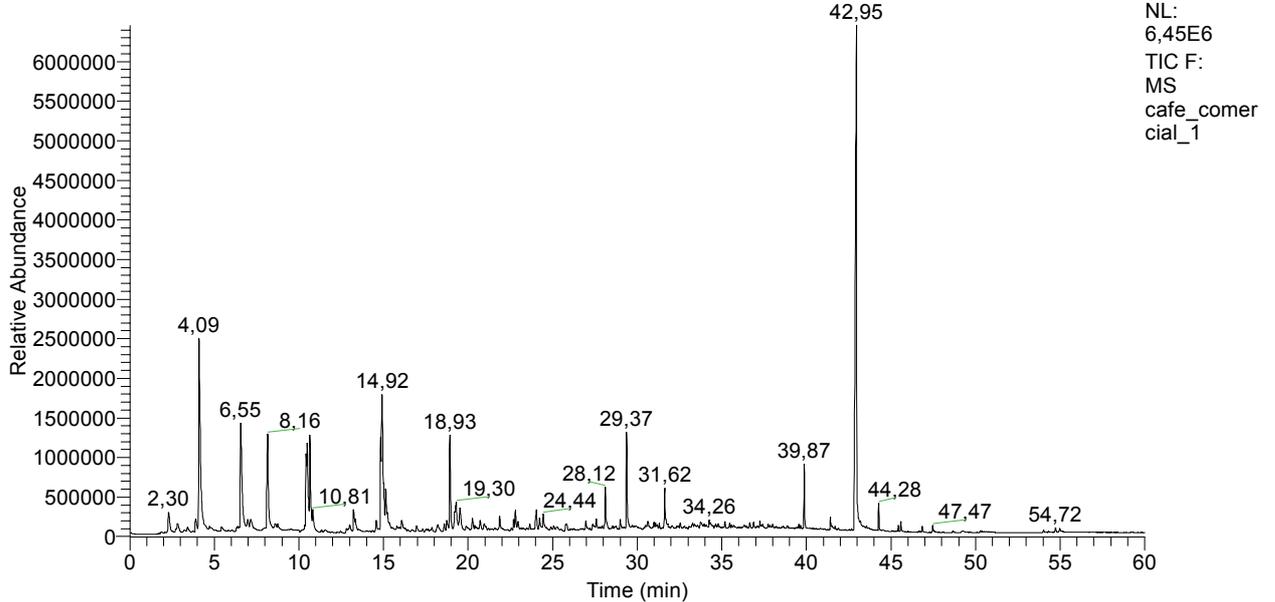
- MONDELLO, L.; COSTA, R.; TRANCHIDA, P.; DUGO, P.; LO PRESTI, M.; FESTA, S.; FAZIO, A.; DUGO, G. (2005). Reliable characterization of coffee bean aroma profiles by automated headspace solid phase microextraction-gas chromatography-mass spectrometry with the support of a dual-filter mass spectra library. *Journal Sep. Sci.*, v. 28, p 1101-1109.
- MAYER, F.; GROSCH, W. (2001) Aroma simulation on the basis of the odourant composition of roasted coffee headspace. *Flavour Frag. J*, 16, p. 180-190.
- NAVARINI, L., GILLI, R., GOMBAC, V., ABATANGELO, A. BOSCO, M., TOFFANIN, R. (1999). Polysacharides from hot water extracts of roasted coffee arabica beans: isolation and characterization. *Carbohydratos Polym*, v. 40, p.71-81.
- NUNES, F. M.; COIMBRA, M. A. (1998) Influence of polissacharide composition in foam stability of espresso coffee. *Carbohydrate Polymers*, v.37, p. 283-285.
- NUNES, F. M, COIMBRA, M. A. (2001) Chemical characterization of the high molecular weight material extracted with hot water from green and roasted arabica coffee. *Journal Agric Food Chemistry*, v. 49, p. 1773-1782.
- O CAFEZAL. Classificação: análise dos grãos determina a qualidade. Disponível em: <<http://www.coffeebreak.com.br>>. Acesso em agosto 2005.
- OLIVEIRA, S.D., FRANCA, A. S., GLÓRIA, M. B. A., BORGES, M. L. A. (2005) The effect of roasting on the presence of bioactive amines in coffees of different qualities. *Food Chemistry*, v. 90, p. 287-291.
- OLIVEIRA, L. S.; FRANCA, A. S.; MENDONÇA, J. C. F.; BARROS-JÚNIOR, M. C. (2006) Proximate composition and fatty acids profile of green and roasted defective coffee beans. *LWT – Food Science e Technology*, v.39, n.3, p.235-239.
- OOSTERVELD, A., VORAGEN, A. G. J.; SCHOLS, H. A. (2003). Effect of roasting on the carbohydrate composition of coffea arabica beans, *Carbohydrate Polymers*, 54, 183-192.
- PAWLISZYN, J. (1999) Aplications of Solid Phase Microextraction. Ed. The Royal of Chemistry. Cambridge. UK, p 655.
- PEREIRA, R. G. F. A. (1997). Efeito da inclusão de grãos defeituosos na composição química e qualidade do café (*Coffea arabica* L.) “estritamente mole”. Lavras: Universidade Federal de Lavras. 96 p. (Tese, doutorado em Ciências de Alimentos).
- PETRACCO, M. (1999) Melhoramento da qualidade do café pelo combate ao crescimento de mofos. In: I Encontro sobre produção de café com qualidade, Viçosa, MG. *Anais Viçosa*: Universidade Federal de Viçosa, p. 22-38.
- PIMENTA, C. J. (1995). Qualidade do café (*Coffea arábica* L.) originados de frutos colhidos em quatro estádios de maturação. Lavras: Universidade Federal de Lavras 94 p. (Dissertação Mestrado em Ciência dos Alimentos)
- PIMENTA, C.J. (2001) Época de colheita e tempo de permanência dos frutos à espera da secagem, na qualidade do café (*Coffea arabica* L.). Lavras: Universidade Federal de Lavras. 145 p. (Tese, doutorado em Ciência dos Alimentos).

- REDGWELL, R. J.; TROVATO, V.; CURTI, D.; FISCHER, M. (2002). Effect of roasting on degradation and structural features of polysaccharides in Arabica coffee beans, *Carbohydrate Research*, 337, p.421-431.
- ROCHA, S.; MAEZTU, L.; BARROS, A.; CID, C.; COIMBRA, M. A. (2003) Screening and distinction of coffee brews based on headspace solid phase microextraction/gás chromatography/principal component analysis. *Journal of the Science of Food and Agriculture*, v.84, p.43-51.
- ROBERTS D. D.; POLLIEN P.; MILLO. C. (2000) Solid-Phase Microextraction Method Development for Headspace Analyses of Volatile Flavor Compounds. *Journal of Agricultural and Food Chemistry*. v.48, p.2430-2437.
- ROCHA, S.; MAEZTU, L.; BARROS, A.; CID, C.; COIMBRA, M. A. (2003) Screening and distinction of coffee brews based on headspace solid phase microextraction/gás chromatography/principal component analysis. *Journal of the Science of Food and Agriculture*. v. 84 p. 43-51.
- ROJAS MONROY G. M. E. (2005) Caracterización del aroma del café molido de Puerto Rico, mediante la técnica de micro extracción en fase sólida (SPME) y cromatografía de gas acoplada a espectrometría de masas (CG/MS). Universidad de Puerto Rico Recinto Universitario de Mayaguez. 156p (Dissertação, Mestrado em Ciencia e tecnologia de Alimentos).
- RYAN, D.; SHELLIE, R.; TRANCHIDA, P.; CASILLIA, A. MONDELLO, L. MARRIOTT, P. (2004) Analysis of roasted coffee bean volatiles by using comprehensive two-dimensional gas chromatography-time-of-flight mass spectrometry. *Journal Chromatography A.*, 1054, p.57-65.
- SANZ, C., ANSORENA, D., BELLO, J. e CID, C. (2001).Optimizing headspace temperature and time sampling for identification of volatile compounds in ground roasted arabica, *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, v.49, p.1364-1369.
- SANZ, C.; MAEZTU, L.; ZAPELENA, M. J.; BELLO, J.; CID, C. (2002) Profiles of volatile compounds and sensory analysis of three blends of coffee: influence of different proportions of Arabica and Robusta and influence of roasting coffee with sugar. *Journal of the Science of Food and Agriculture*. v.82, p.840-847.
- SEMMELOCH, P., GROSCH, W., J. (1995). Analysis of roasted coffee powders and brews by gas chromatography olfactometry of headspace samples. *Agric Food and Chemistry*, v.28, p.310- 313.
- SILVA, J. S. (1999) Colheita, secagem e armazenamento do café. In: I ENCONTRO SOBRE PRODUÇÃO DE CAFÉ COM QUALIDADE, Viçosa, MG. *Anais ... Viçosa:Universidade Federal de Viçosa*. p. 39-80
- SILVERSTEIN, R. M.; WEBSTER, X. F. Identificação fotométrica dos compostos orgânicos. LTC-Livros técnicos e científicos Editora S.A. Sexta edição, 2000.
- SHIBAMOTO, T., YEO, H. (1992) In Flavor Precursor (Thermal and Enzymatic Conversions), TERANISHI, R., TATKEOKA, G.R., GÜNTERT, M., Eds ; ACS Symposiums Series 490. New York. p.175.
- SINDICAFÉ (Sindicato da Indústria de Café). Café no mundo. SINDICAFÉ, 2005. Disponível em: <http://www.sindicafe-mg.nbh.com.br/cafe_mundo.asp>. Acesso em agosto. 2005.

- SIVETZ, M., DESROSIER, N.W. (1979). Coffee technology. Westport, Connecticut: AVI Publishing Company, 716 p.
- SMITH, A. W. (1986) Introduction. In: CLARKE, R. J.; MACRAE, R.(eds.). Coffee Chemistry. London: Elsevier Applied Science, v. 1, p. 1-41.
- TEIXEIRA, A. A. (1999) Classificação do café. In: I ENCONTRO SOBRE PRODUÇÃO DE CAFÉ COM QUALIDADE, Viçosa, MG. *Anais ...* Viçosa: Universidade Federal de Viçosa. p. 81-95
- TRESSL,R. (1989). Formation of Flavor Components in Roasted Coffee. En: Thermal Generation of Aromas; Parliament, T., Mc Gorrin, R., Ho, C. Eds.; ACS Symposium Series 409; American Society: Washington, DC. U.S.A. p. 285-301.
- TRUGO, L. C (1989). Carbohydrates In: CLARKE, R.J.; MACRAE, R (Eds.). *Coffee chemistry*. London: Elsevier Applied Science, v. 1, p. 83-114.
- VAM STRATEN, S.; MAARSE, H.; DE BEAUVESER, J. C. and VISSCHER, C. A. (1985). In Cofee Chemistry (vol I) ; CLARKE, R. J.; MACRAE, R ; Elsevier Applied Science Publishers; London; p 246.
- VASCONCELOS, A.L. (2005). Caracterização de grãos defeituosos de café quanto a aspecto físico-químico e teores de aminas, para diversos graus de torração. Minas Gerais: Universidade Nacional de Minas Gerais. (Dissertação de Mestrado em Ciências de Alimentos).
- VASCONCELOS, A. L. S.; FRANCA, A. S.; GLÓRIA, M. B. A.; MENDONÇA, J. C. F. (2007) A comparative study of chemical attributes and levels of amines in defective green and roasted coffee beans. *Food Chemistry*, v.101, p.26-32
- VILELA PARREIRA, F. e CARDEAL, Z de L. (2005). Amostragem de compostos orgânicos voláteis no ar utilizando a técnica de micro-extração em fase sólida. *Química Nova*, v. 28, n4, 646-654.
- YERETZIAN, C.; JORDAN, A.; LINDINGER, W. (2003) Analysing the headspace of coffee by proton-transfer-reaction mass-spectrometry. *International Journal of Mass Spectrometry* 223-224, 115-139.
- VIANI. R. (1986) *Ulmann' s Encyclopedia of Industrial Chemistry*. V.A7, 315-39.
- WOODMAN, J. S. (1986). Carboxilics acids. In CLARKE, R.J.; MACRAE, R. (esd.). *Coffee Chemistry*. London: Elsevier Applied Science, p.266-289.
- ZAMBONIN,C.G.; BALEST.L.; DE BENEDETTO G.E.; PALMISANO F. (2005) Solid-phase microextraction-gas chromatography mass spectrometry and multivariate analysis for the characterization of roasted coffees. *Talanta* 66, 261-265.
- VIZTHUM, O. G e CLARKE, R. J. (2001) Volatile Compound. In *Coffee Recent Developments*, Eds. R.J. Clarke e O.G. Vizthum. London: Elsevier applied Science. v. 3, p. 68-89.

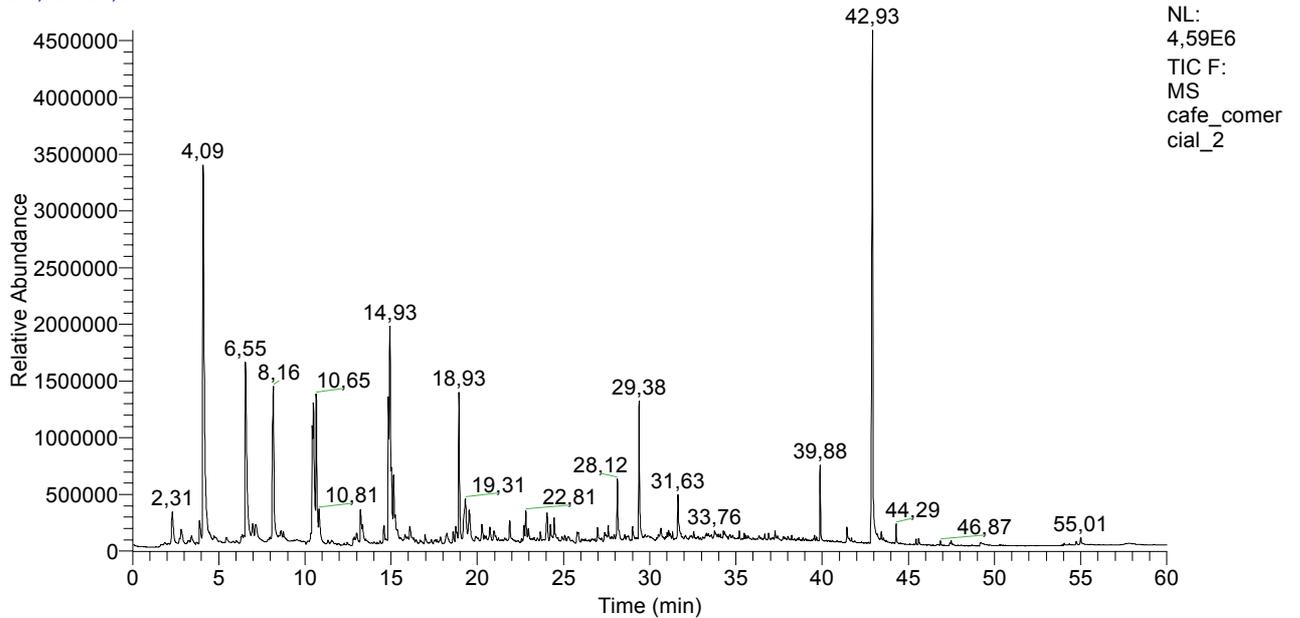
Apêndice A – Análises de repetibilidade dos cromatogramas

RT: 0,00 - 60,01



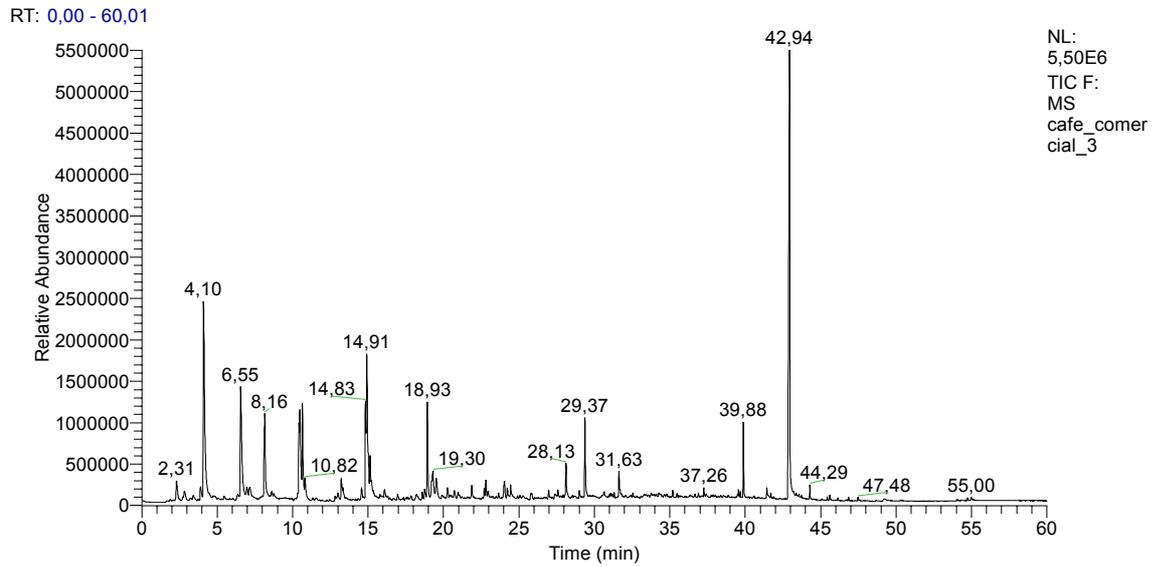
Cromatograma obtido para análises do perfil de voláteis de café comercial, fibra PDMS (amostra 1).

RT: 0,00 - 60,01



Cromatograma obtido para análises do perfil de voláteis de café comercial, fibra PDMS (amostra 2)

Apêndice A – Análises de repetibilidade dos cromatogramas (Continuação)



Cromatograma obtido para análises do perfil de voláteis de café comercial, fibra PDMS (amostra 3)

Apêndice B – Identificação dos compostos voláteis, fibra PDMS

Café Comercial												
Tempo de retenção			RSI 1	Probabilidade (%) 1	RSI 2	Probabilidade (%) 2	RSI (média)	Probabilidade (%) (média)	Sinal Ruído			Composto
Amostra 1	Amostra 2	média							Amostra 1	Amostra 2	média	
2,30	2,31	2,31	823	52,68	835	45,22	829,0	48,95	234	260	247,0	Furano, 2-metil-
2,82	2,82	2,82	938	37,63	949	12,82	943,5	25,23	100	116	108,0	Ácido carbônico, etil, 2-propenil éster
3,43	3,41	3,42	848	75,07	820	63,22	834,0	69,15	56	66	61,0	Furano, 2,5-dimetil-
3,88	3,88	3,88	868	72,66	910	78,56	889,0	75,61	151	176	163,5	Pirazina
4,09	4,09	4,09	847	44,65	867	45,12	857,0	44,89	2248	3013	2630,5	Piridina
5,42	5,44	5,43	717	15,56	716	38,76	716,5	27,16	51	45	48,0	8-Azabicyclo[3.2.1]octan-3-one, 8-metil-
6,32	6,31	6,32	821	39,6	817	64,42	819,0	52,01	124	160	142,0	1H-pirrol,1-etil
6,38	6,36	6,37	873	42,94	812	13,09	842,5	28,02	56	64	60,0	4-Metiltiazol
6,55	6,55	6,55	861	26,64	848	11,18	854,5	18,91	1275	1455	1365,0	3-Piridinamina
		6,55	841	11,46	894	47,42	867,5	29,44			1365,0	Pirimidina, 2-metil-
6,97	6,97	6,97	799	30,79	804	41,67	801,5	36,23	133	142	137,5	Fenol, 4-metil-
7,15	7,17	7,16	868	39,75	844	35,15	856,0	37,45	127	128	127,5	Furfural
8,16	8,16	8,16	864	49,02	868	51,53	866,0	50,28	1121	1238	1179,5	3-Furanmetanol
8,60	8,59	8,60	824	29,50	808	12,01	816,0	20,76	56	59	57,5	1H-Pirrol, 2,4-dimetil-
8,74	8,74	8,74	579	25,45	508	6,09	543,5	15,77	62	60	61,0	Ácido hexadecanóico, etil éster
10,48	10,48	10,48	894	60,91	874	21,62	884,0	41,27	962	1065	1013,5	Pirimidina, 4,5-dimetil-
10,65	10,65	10,65	743	37,08	637	21,44	690,0	29,26	1031	1106	1068,5	Etilpirazina
10,82	10,82	10,82	865	94,02	831	72,75	848,0	83,39	153	175	164,0	Pirazina, 2,3-dimetil-
12,80	12,80	12,80	775	39,03	741	15,73	758,0	27,38	52	88	70,0	Furano, 2-metil-

Apêndice B – Identificação dos compostos voláteis, fibra PDMS (Continuação)

Café Comercial												
Tempo de retenção			RSI 1	Probabilidade (%) 1	RSI 2	Probabilidade (%) 2	RSI (média)	Probabilidade (%) (média)	Sinal Ruído			Composto
Amostra 1	Amostra 2	média							Amostra 1	Amostra 2	média	
12,90	12,86	12,88	784	26,62	807	21,49	795,5	24,06	198	65	131,5	Piridina, 4-etil-
13,01	13,01	13,01	713	7,44	724	8,37	718,5	7,91	82	85	83,5	Hidrazina, 1-metil-1-fenil-
13,22	13,23	13,23	850	79,31	847	78,41	848,5	78,86	254	265	259,5	2-Furancarboxaldeido, 5-metil-
14,58	14,58	14,58	766	7,41	754	5,44	760,0	6,43	126	137	131,5	2-(1-Cyclohexenil)etilamina
14,83	14,83	14,83	835	37,55	822	62,16	828,5	49,86	6465	6901	6683,0	Pirazina, 2-etil-5-metil-
14,92	14,93	14,93	828	65,59	841	70,73	834,5	68,16	1587	1712	1649,5	2-Furanmetanol, acetate
15,14	15,14	15,14	715	35,09	780	45,51	747,5	40,30	468	472	470,0	Pirazina, 2-etil-3-metil-
16,08	16,08	16,08	702	42,22	688	61,65	695,0	51,94	119	122	120,5	4(H)-Piridina, N-acetil-
16,95	16,96	16,96	786	20,43	762	10,97	774,0	15,70	73	70	71,5	2-Ciclopenten-1-one, 2,3-dimetil-
17,86	17,87	17,87	632	10,24	655	6,99	643,5	8,62	53	55	54,0	Bicyclo[2.2.1]heptan-2-ol, 1,3,3-trimetil-
18,22	18,23	18,23	860	74,71	846	87,75	853,0	81,23	83	83	83,0	Etanona, 1-(1H-pirrol-2-yl)-
18,59	18,60	18,60	668	10,17	610	5,77	639,0	7,97	84	90	87,0	Cyclohexeno, 1-(2-nitro-2-propenil)-
18,75	18,75	18,75	838	77,35	845	77,88	841,5	77,62	116	117	116,5	Etanona, 1-(1-metil-1H-pirrol-2-yl)-
18,93	18,93	18,93	828	39,20	841	55,55	834,5	47,38	1114	1195	1154,5	Pirazina, 3-etil-2,5-dimetil-
19,30	19,31	19,31	787	21,65	825	22,68	806,0	22,17	318	330	324,0	Pirazina,3-etil-2,5-dimetil
		19,31	749	17,02	814	29,97	781,5	23,50			324,0	Pirazina,2,6-dietil
19,52	19,52	19,52	883	42,85	821	40,88	852,0	41,87	245	241	243,0	Mequinol /fenol, 4-methoxy-
20,25	20,26	20,26	767	54,82	792	41,69	779,5	48,26	137	135	136,0	Pirazina, (1-metiletenil)-
20,71	20,72	20,72	658	14,46	691	22,45	674,5	18,46	105	103	104,0	Octahidro-1-oxa-ciclopropa[c]indene

Apêndice B – Identificação dos compostos voláteis, fibra PDMS (Continuação)

Café Comercial												
Tempo de retenção			RSI 1	Probabilidade (%) 1	RSI 2	Probabilidade (%) 2	RSI (média)	Probabilidade (%) (média)	Sinal Ruído			Composto
Amostra 1	Amostra 2	média							Amostra 1	Amostra 2	média	
20,95	20,98	20,97	707	47,97	636	10,42	671,5	29,20	72	77	74,5	2-Metil-3-propilpirazina
21,86	21,88	21,87	851	51,52	857	62,82	854,0	57,17	162	171	166,5	5H-5-Metil-6,7-dihydrociclopentapirazina
22,70	22,72	22,71	754	17,96	709	15,71	731,5	16,84	329	352	340,5	Fenol, dietil-
22,80	22,81	22,81	823	68,04	805	65,93	814,0	66,99	222	239	230,5	Pirazina, 3,5-dietil-2-metil-
22,95	22,97	22,96	708	28,79	705	7,35	706,5	18,07	86	85	85,5	2,3,5-Trimetil-6-etilpirazina
23,64	23,66	23,65	718	8,29	728	5,58	723,0	6,94	70	71	70,5	1,3,3-Trimetilciclohex-1-ene-4-carboxaldeido,
24,00	23,93	23,97	851	32,58	851	64,64	851,0	48,61	292	110	201,0	Furano, 2-(2-furanilmetil)-5-metil-
24,04	24,05	24,05	855	93,09	857	79,94	856,0	86,52	230	223	226,5	1H-Pirrol, 1-(2-furanilmetil)-
24,23	24,24	24,24	641	13,69	647	12,78	644,0	13,24	134	133	133,5	meta-Methoxybenzenotiol
24,44	24,46	24,45	781	20,93	762	15,49	771,5	18,21	181	184	182,5	Pirazina, 2-metil-5-(1-propenil)-, (E)-
25,06	25,08	25,07	816	22,97	809	17,90	812,5	20,44	52	53	52,5	Piridina,3-(4-metil-5-trans-fenil-1,3-oxazolidin-2yl)
25,78	25,79	25,79	761	15,83	791	23,31	776,0	19,57	88	87	87,5	Pirazina, 2,5-dimetil-3-(1-propenil)-, (Z)-
26,96	26,98	26,97	801	45,09	776	16,90	788,5	31,00	107	112	109,5	2-Butil-3-metilpirazina
27,37	27,38	27,38	792	5,07	812	8,10	802,0	6,59	69	67	68,0	2(1H)-Quinazolinone
27,57	27,59	27,58	680	22,86	697	24,15	688,5	23,51	129	113	121,0	Sulfide, isopropil fenil
28,12	28,12	28,12	845	68,02	831	74,37	838,0	71,20	500	488	494,0	Fenol, 4-etil-2-metoxo-
29,00	29,01	29,01	892	82,03	902	86,47	897,0	84,25	116	113	114,5	Furano, 2,2'-[oxybis(metilene)]bis-
29,37	29,38	29,38	862	44,49	842	20,72	852,0	32,61	1138	1118	1128,0	2-Metoxo-4-vinilfenol
30,63	30,64	30,64	730	33,04	749	36,01	739,5	34,53	90	91	90,5	4-Hydroxy-7-metil-1,8-naftilidina

Apêndice B – Identificação dos compostos voláteis, fibra PDMS (Continuação)

Café Comercial												
Tempo de retenção			RSI 1	Probabilidade (%) 1	RSI 2	Probabilidade (%) 2	RSI (média)	Probabilidade (%) (média)	Sinal Ruído			Composto
Amostra 1	Amostra 2	média							Amostra 1	Amostra 2	média	
30,99	31,01	31,00	662	31,38	641	14,67	651,5	23,03	75	267	171,0	2-Ciclohexen-1-one, 4-hydroxy-3,5,5-trimetil-4-(3-oxo-1butenil)-
31,08	31,10	31,09	699	23,51	699	18,52	699,0	21,02	438	73	255,5	4H-Pirrido[1,2-a]pirimidin-4-one, 3,6-dimetil-
31,31	31,32	31,32	799	12,13	809	11,78	804,0	11,96	65	69	67,0	à-Cubebene
31,62	31,63	31,63	690	18,17	652	13,67	671,0	15,92	478	364	421,0	Benzeno, 1-metil-2-[(1-metiletil)tio]-
32,54	32,55	32,55	739	28,27	744	14,09	741,5	21,18	59	62	60,5	à-Furfuriliden-à-furilmetilamina
33,27	33,29	33,28	753	11,35	734	6,42	743,5	8,89	64	50	57,0	2(1H)-Quinolinone, 3,4-dimetil-
33,75	33,76	33,76	716	18,50	763	41,79	739,5	30,15	71	61	66,0	Naftaleno, 1,2,3,4-tetrahydro-5-metil-1-(1-metiletil)-
34,26	34,27	34,27	638	12,07	639	10,99	638,5	11,53	93	60	76,5	3-Acetil-2,4,4-trimetilciclohex-2-em-1-one
35,19	35,20	35,20	799	55,11	802	60,43	800,5	57,77	79	69	74,0	Butilato hydroxytolueno
35,47	35,48	35,48	746	18,09	766	19,80	756,0	18,95	60	53	56,5	Naftaleno, 1,2,3,5,6,8a-hexahydro-4,7-dimetil-1-(1-metiletil)-, (1S-cis)-
36,66	36,67	36,67	710	4,36	679	4,04	694,5	4,20	62	47	54,5	1,3-Benzenediol, 4-etil-
36,88	36,89	36,89	790	30,01	774	17,11	782,0	23,56	69	54	61,5	syn-Tricyclo[5.1.0.0(2,4)]oct-5-ene, 3,3,5,6,8,8-hexametil-
37,25	37,26	37,26	813	5,87	806	2,62	809,5	4,25	84	73	78,5	Dodecane, 2,6,10-trimetil-
39,55	39,56	39,56	760	19,07	722	11,89	741,0	15,48	54	43	48,5	Docosane
39,87	39,88	39,88	761	52,50	802	64,73	781,5	58,62	761	614	687,5	2-Octil benzoato
41,43	41,44	41,44	625	2,41	639	3,71	632,0	3,06	146	122	134,0	Antraceno, 9,10-dihidro-9-fenil-
42,95	42,93	42,94	856	94,12	867	95,83	861,5	94,98	5927	4141	5034,0	Cafeína
***	43,44	43,44	***	***	821	24,96	821,0	24,96	***	66	66,0	1-Propanona, 2-(dietilamino)-1-fenil-

Apêndice B – Identificação dos compostos voláteis, fibra PDMS (Continuação)

Café Comercial												
Tempo de retenção			RSI 1	Probabilidade (%) 1	RSI 2	Probabilidade (%) 2	RSI (média)	Probabilidade (%) (média)	Sinal Ruído			Composto
Amostra 1	Amostra 2	média							Amostra 1	Amostra 2	média	
44,28	44,29	44,29	797	63,97	776	62,35	786,5	63,16	322	157	239,5	Ácido hexadecanóico, metil éster
45,44	45,44	45,44	641	15,04	509	9,05	575,0	12,05	75	46	60,5	Benzeno,1,3,5-trietenil,2,4,6-trietil
45,59	45,60	45,60	677	25,70	680	18,41	678,5	22,06	120	52	86,0	Ácido hexadecanóico, etil éster
46,85	46,87	46,86	767	19,22	761	27,00	764,0	23,11	68	39	53,5	Benzilamina, 4-(1-metiletil)-N,à-difenil-
47,47	47,49	47,48	742	18,70	730	5,30	736,0	12,00	87	39	63,0	5,8-ácido octadecadienóico, metil éster
54,72	54,75	54,74	744	45,97	694	31,63	719,0	38,80	54	27	40,5	Noretindrone
54,99	55,00	55,00	838	19,96	863	27,30	850,5	23,63	45	56	50,5	Ácido 1,2-Benzenodicarboxílico, diidooctil éster

Amostras 1 e 2: se referem às réplicas de um dado ensaio; média: valor médio referente a análises em duplicata; Sinal Ruído: Sinal de intensidade (S) dividido pelo ruído(N) da linha; RSI: parâmetro de compatibilidade entre o espectro desconhecido e o espectro da biblioteca.

Apêndice C – Identificação dos compostos voláteis, fibra CAR/PDMS

Café Comercial

Tempo de retenção			RSI 1	Probabilidade (%) 1	RSI 2	Probabilidade (%) 2	RSI (média)	Probabilidade (%) (média)	Sinal Ruído			Composto
Amostra 1	Amostra 2	Média							Amostra 1	Amostra 2	Média	
2,34	2,32	2,33	805	56,62	779	27,72	792,0	42,17	100	90	95,0	Furano,2-metil
2,74	2,73	2,74	788	32,30	761	14,36	774,5	23,33	595	458	526,5	Ciclopropil metil carbinol
2,90	2,87	2,89	946	64,00	958	13,22	952,0	38,61	75	62	68,5	Ácido carbônico,etil,2-propenil éster
3,90	3,90	3,90	835	74,90	937	54,62	886,0	64,76	218	256	237,0	Pirazina
4,19	4,16	4,18	851	30,20	820	25,93	835,5	28,07	2433	2809	2621,0	Piridina
6,50	6,44	6,47	719	35,66	732	47,32	725,5	41,49	34	95	64,5	Ciclotriciloxano haxametil
6,66	6,66	6,66	802	22,25	874	47,51	838,0	34,88	2150	2312	2231,0	Pirimidina,2-metil
7,03	7,02	7,03	790	29,33	782	29,90	786,0	29,62	662	575	618,5	Fenol,3-metil
7,20	7,18	7,19	834	46,19	798	38,85	816,0	42,52	933	867	900,0	Furfural
8,03	8,03	8,03	768	39,11	831	48,64	799,5	43,88	67	49	58,0	Furano,2-(2-propenil)
8,96	9,03	9,00	804	42,83	811	34,74	807,5	38,79	2191	2463	2327,0	2-Furanmetanol
9,21	9,26	9,24	729	18,74	746	59,21	737,5	38,98	63	93	78,0	1,3-Oxatiane,2-[1,1-dimetiletil]2-metil
9,78	9,72	9,75	888	55,23	906	41,53	897,0	48,38	88	74	81,0	1,3,5,7-Cciclooctatetraeno
10,73	10,74	10,74	728	12,55	796	29,99	762,0	21,27	66	65	65,5	4H-Pyran-4-ona,-5-hidroxy,2-metil
11,08	11,06	11,07	788	18,65	738	14,42	763,0	16,54	8389	8816	8602,5	1,4-Benzenodiamina
		11,07	765	15,76	814	18,35	789,5	17,06			8602,5	Pirimidina,4,5-dimetil
11,16	11,10	11,13	815	24,86	801	39,47	808,0	32,17	3043	2495	2769,0	Etilpirazina
11,27	11,26	11,27	701	48,41	712	55,34	706,5	51,88	6734	5767	6250,5	1(H)-Imidazole-4-acetonitrilo

Apêndice C – Identificação dos compostos voláteis, fibra CAR/PDMS (Continuação)

Café Comercial

Tempo de retenção			RSI 1	Probabilidade (%) 1	RSI 2	Probabilidade (%) 2	RSI (média)	Probabilidade (%) (média)	Sinal Ruído			Composto
Amostra 1	Amostra 2	Média							Amostra 1	Amostra 2	Média	
11,40	11,41	11,41	836	76,20	780	26,53	808,0	51,37	1046	504	775,0	Pirazina,2,6-dimetil
11,92	11,93	11,93	797	49,69	785	44,33	791,0	47,01	118	120	119,0	Benzenamina,4,(2H-tetrazol-2-yl)
12,07	12,07	12,07	596	15,05	583	15,55	589,5	15,30	137	152	144,5	1,3,2-Dioxaborolane,2-etil,4-(3-oxiranilpropil)
12,74	12,76	12,75	716	49,36	700	29,99	708,0	39,68	62	42	52,0	1H-Pirrol,1-butil
13,01	13,05	13,03	738	12,09	708	16,44	723,0	14,27	53	56	54,5	2-Amino-4,5-dimetil-oxazole
13,37	13,37	13,37	861	38,29	882	47,59	871,5	42,94	164	230	197,0	Furano,2-metil
13,42	13,43	13,43	809	39,33	751	34,26	780,0	36,80	1183	1132	1157,5	Piridina,4-etil
13,57	13,57	13,57	778	13,72	817	17,59	797,5	15,66	375	331	353,0	1,2,4-Tiroxolane,3,5-difenil
14,04	14,04	14,04	809	80,45	824	81,82	816,5	81,14	2515	2451	2483,0	2-Furancarboxaldeido,5-metil
14,16	14,15	14,16	913	27,83	957	25,31	935,0	26,57	1611	1657	1634,0	Ácido propanóico,etenil éster
14,35	14,35	14,35	643	13,07	711	14,77	677,0	13,92	85	94	89,5	Benzeno,1-fluoro,4-metil
14,66	14,61	14,64	972	52,66	974	25,28	973,0	38,97	130	68	99,0	Metil,2-furoato
15,37	15,36	15,37	725	9,10	739	20,15	732,0	14,63	372	209	290,5	3,5-Dimetilciclohex-1-ene-4-carboxaldeido
15,75	15,75	15,75	840	41,65	780	12,75	810,0	27,20	7394	6487	6940,5	1,3-Benzodioxole
		15,75	790	12,99	780	26,07	785,0	19,53			6940,5	Pirazina,2-etil,6-metil
15,90	15,87	15,89	601	29,83	629	48,74	615,0	39,29	2810	2316	2563,0	Ácido,2-furanpropionico
16,04	15,97	16,01	843	76,01	840	71,69	841,5	73,85	3722	3112	3417,0	2,Furanmetanol, acetato
16,19	16,16	16,18	784	32,37	764	27,96	774,0	30,17	1810	1665	1737,5	3-Piridinamina,2,6-dimetil
16,34	16,29	16,32	795	36,53	832	33,51	813,5	35,02	4155	3952	4053,5	Nicotinil álcool

Apêndice C – Identificação dos compostos voláteis, fibra CAR/PDMS (Continuação)

Café Comercial

Tempo de retenção			RSI 1	Probabilidade (%) 1	RSI 2	Probabilidade (%) 2	RSI (média)	Probabilidade (%) (média)	Sinal Ruído			Composto
Amostra 1	Amostra 2	Média							Amostra 1	Amostra 2	Média	
		16,32	740	35,14	797	50,31	768,5	42,73			4053,5	1H-Pirrol-2-carboxaldeido,1-metil-
16,51	16,49	16,50	832	26,77	840	55,53	836,0	41,15	263	203	233,0	1-Propanona,1-(2-furanyl)
16,80	16,78	16,79	751	36,51	759	31,25	755,0	33,88	210	185	197,5	Pirazina,(1-metiletenil)-/isopropenilpirazina
16,97	16,95	16,96	745	26,19	771	57,09	758,0	41,64	184	188	186,0	Pirazina,(1-metiletenil)
17,20	17,18	17,19	761	65,69	740	30,00	750,5	47,85	923	925	924,0	4(H)-Piridina,N-acetil
17,37	17,35	17,36	706	16,74	726	10,62	716,0	13,68	357	295	326,0	Ciclohexanometanol,4-metilene
17,68	17,63	17,66	840	63,23	845	48,05	842,5	55,64	141	194	167,5	1H-Pirrole-2-carboxaldeido
17,79	17,77	17,78	755	52,24	781	74,15	768,0	63,20	203	218	210,5	Etanona,1-(2-piridinil)
18,09	18,03	18,06	612	12,36	711	14,85	661,5	13,61	376	260	318,0	2-Ciclopenten-1-ona-2-hydroxy-3-metil
18,14	18,10	18,12	756	14,47	699	12,30	727,5	13,39	345	591	468,0	1-Metoxy-1,3-ciclohexadieno
18,39	18,41	18,40	689	10,69	629	19,29	659,0	14,99	58	55	56,5	Benzenetiol,4-metil
18,56	18,54	18,55	656	14,83	599	12,09	627,5	13,46	56	49	52,5	Pirazina,(2-metilpropil)
18,71	18,70	18,71	697	41,95	650	40,03	673,5	40,99	92	72	82,0	Triciclo[2.2.1.02,6]heptan-3-ona,oxime
18,79	18,78	18,79	804	14,85	812	26,27	808,0	20,56	183	170	176,5	4-Piridazinamida
19,13	19,12	19,13	649	29,35	626	8,23	637,5	18,79	84	63	73,5	1H-Pirrol,1-pentil
19,50	19,46	19,48	647	23,09	771	40,04	709,0	31,57	124	85	104,5	2-Ciclopenten,1-ona,3-etil,-2-hidroxy
19,72	19,71	19,72	803	37,15	805	34,74	804,0	35,95	223	213	218,0	Furano,2-etil,5-metil
19,97	19,97	19,97	850	54,30	712	26,06	781,0	40,18	69	881	475,0	Pirazina,isopropenil
20,21	20,21	20,21	735	55,87	758	32,68	746,5	44,28	1137	566	851,5	Etanona,1-(1-metil,1H-pirrol,2-yl)-

Apêndice C – Identificação dos compostos voláteis, fibra CAR/PDMS (Continuação)

Café Comercial

Tempo de retenção			RSI 1	Probabilidade (%) 1	RSI 2	Probabilidade (%) 2	RSI (média)	Probabilidade (%) (média)	Sinal Ruído			Composto
Amostra 1	Amostra 2	Média							Amostra 1	Amostra 2	Média	
20,30	20,30	20,30	655	23,18	634	8,65	644,5	15,92	479	1770	1124,5	2,7-Dioxatriciclo[4.4.0.0(3,8)]dec-4-ene
20,42	20,37	20,40	785	90,30	814	87,50	799,5	88,90	1834	1770	1802,0	Etanona,1-(1H-pirrol,2-yl)-
20,51	20,49	20,50	822	51,52	821	39,28	821,5	45,40	1358	1396	1377,0	Pirazina,3-etil-2,5-dimetil
20,81	20,80	20,81	898	71,81	882	48,46	890,0	60,14	751	670	710,5	Furano,2,2'-metilenebis-
20,90	20,89	20,90	808	25,04	790	22,09	799,0	23,57	2723	2718	2720,5	2,3-Dimetil,5-etilpirazina
21,19	21,18	21,19	856	56,65	840	25,73	848,0	41,19	1829	1672	1750,5	Mequinol/ fenol,4-metoxo
		21,19	784	18,98	790	18,16	787,0	18,57			1750,5	Fenol,2-metoxo
21,60	21,61	21,61	520	4,42	523	5,44	521,5	4,93	47	55	51,0	1(2H)-Naftalenona,-octahydro,-8a-metil-
21,86	21,85	21,86	717	26,99	703	33,33	710,0	30,16	111	90	100,5	2-Ciclohexen,-1-ona,4,5-dimetil
22,00	21,99	22,00	791	52,21	747	32,44	769,0	42,33	449	425	437,0	Isopropenilpirazina
22,16	22,18	22,17	770	63,50	760	49,13	765,0	56,32	277	287	282,0	1-Ciclopenten-1-carboxilic acid
22,24	22,22	22,23	740	51,38	771	62,80	755,5	57,09	1192	1273	1232,5	Tiazol,2-metil,4-propil
22,57	22,56	22,57	651	18,17	667	17,09	659,0	17,63	512	587	549,5	2H-Indeno[1,2b]oxirene,octahydro-,(1áa,1bá,5aà,6aà)
22,66	22,64	22,65	856	84,86	877	89,89	866,5	87,38	1816	2258	2037,0	Maltol
22,76	22,77	22,77	759	58,17	745	43,05	752,0	50,61	303	423	363,0	2-Acetil,3-metilpirazina
22,96	22,94	22,95	585	22,67	571	16,71	578,0	19,69	151	601	376,0	Benzenamina,2-etoxy
23,11	23,09	23,10	825	66,47	808	64,17	816,5	65,32	218	234	226,0	2-Ciclopenten-1-ona-3-etil-2-hidroxy-
23,49	23,48	23,49	691	41,58	680	7,71	685,5	24,65	122	96	109,0	2,4-Heptadienal,2,4-dimetil-
23,88	23,87	23,88	790	31,78	772	29,53	781,0	30,66	388	376	382,0	Piridina,2-(4-metil,5-trans,fenil,1,3-oxazolidin-2-yl)

Apêndice C – Identificação dos compostos voláteis, fibra CAR/PDMS (Continuação)

Café Comercial

Tempo de retenção			RSI 1	Probabilidade (%) 1	RSI 2	Probabilidade (%) 2	RSI (média)	Probabilidade (%) (média)	Sinal Ruído			Composto
Amostra 1	Amostra 2	Média							Amostra 1	Amostra 2	Média	
24,09	24,10	24,10	753	42,42	838	46,44	795,5	44,43	263	283	273,0	1H-Pirrol,2-carboxaldeido,1-metil-
24,16	24,15	24,16	700	26,17	672	22,09	686,0	24,13	100	88	94,0	Ciclohexano,2-propenil-
24,58	24,56	24,57	643	15,54	601	11,44	622,0	13,49	62	67	64,5	Ciclohexanona,2-acetil
24,96	24,95	24,96	747	35,37	713	24,00	730,0	29,69	317	372	344,5	4-Piridinamina,N,N,2,6-tetrametil
		24,96	759	27,09	718	30,53	738,5	28,81			344,5	Pirazina,3,5-dietil,2-metil-
25,12	25,11	25,12	603	23,42	589	18,07	596,0	20,75	221	246	233,5	Ciclopentasiloxano,decametil
25,69	25,69	25,69	751	38,32	700	28,33	725,5	33,33	62	57	59,5	3-Metoxy,2-metil,ciclohex-2-enona
25,96	25,96	25,96	610	9,84	664	11,23	637,0	10,54	140	150	145,0	Ácido benzenoacético,3-hidroxy
26,35	26,32	26,34	843	55,43	754	40,69	798,5	48,06	483	490	486,5	Furano,2-(2-furanilmetil)-5-metil
26,42	26,41	26,42	866	97,88	882	98,57	874,0	98,23	501	500	500,5	1H-Pirrol,1-(2-furanilmetil)-
26,61	26,62	26,62	847	80,06	786	46,48	816,5	63,27	351	405	378,0	2-Ácido furancarboxílico,3-metil,metil éster
26,89	26,89	26,89	769	20,37	762	19,36	765,5	19,87	350	412	381,0	Pirazina,2-metil-5-(2-propenil)-
27,07	27,07	27,07	711	19,07	613	15,55	662,0	17,31	130	128	129,0	Fenol,4-(1-metilpropil)-
27,43	27,42	27,43	507	11,28	565	12,19	536,0	11,74	41	59	50,0	1,3-Propanodiol,2-metil-1-fenil-3-(p-tolyl)
27,59	27,58	27,59	781	17,03	785	21,75	783,0	19,39	72	94	83,0	Piridina,3-(4-metil-5-trans-fenil-1,3-oxazolidin-2-yl)
27,81	27,80	27,81	638	38,30	649	21,56	643,5	29,93	74	87	80,5	2-Oxabiciclo[3.1.0]hex-3-ene-6-carboxílico acid,etil éster
28,47	28,46	28,47	660	8,69	660	6,47	660,0	7,58	121	155	138,0	Pirazina,2,5-dimetil-3-(1-propenil)-,(E)
28,83	28,83	28,83	588	7,07	595	7,29	591,5	7,18	46	50	48,0	C3H140
29,75	29,76	29,76	611	16,21	695	11,46	653,0	13,84	42	52	47,0	5-Allil-2-amino-4-hidroxy-6-metilpirimidina

Apêndice C – Identificação dos compostos voláteis, fibra CAR/PDMS (Continuação)

Café Comercial

Tempo de retenção			RSI 1	Probabilidade (%) 1	RSI 2	Probabilidade (%) 2	RSI (média)	Probabilidade (%) (média)	Sinal Ruído			Composto
Amostra 1	Amostra 2	Média							Amostra 1	Amostra 2	Média	
30,01	30,01	30,01	751	46,27	788	56,55	769,5	51,41	62	70	66,0	2-Butil,3-metilpirazina
30,48	30,47	30,48	841	17,48	860	23,08	850,5	20,28	105	119	112,0	2-Hidroxy,1,7-naftiridina
30,65	30,65	30,65	539	12,77	500	9,08	519,5	10,93	39	52	45,5	Ácido benzóico,2-mercapto
30,98	30,97	30,98	697	57,64	703	66,29	700,0	61,97	198	297	247,5	Ácido fosfonico,metil-,bis(trimetilsilil) éster
31,63	31,63	31,63	852	74,14	884	86,08	868,0	80,11	809	1065	937,0	Fenol,4-etil,2-metoxo
32,45	32,45	32,45	881	22,23	899	29,37	890,0	25,80	81	110	95,5	Indol/1H-indol
32,92	32,91	32,92	858	59,00	875	70,80	866,5	64,90	120	144	132,0	Furano,2,2'[oxybis(metilene)]bis
33,09	33,09	33,09	880	34,00	895	40,46	887,5	37,23	80	125	102,5	4-Hidroxy,2-metilacetofenona
33,49	33,50	33,50	800	62,58	885	49,31	842,5	55,95	1126	1543	1334,5	2-Metoxo-4-vinilfenol
38,35	38,35	38,35	737	86,60	744	83,03	740,5	84,82	54	84	69,0	Trimetil silifosfato
41,68	41,69	41,69	836	92,06	828	92,95	832,0	92,51	53	52	52,5	Cicloheptasiloxano, tetradecametil
41,95	41,95	41,95	836	60,55	829	63,13	832,5	61,84	42	53	47,5	Butilato hidroxytolueno
42,65	42,65	42,65	757	17,37	763	14,57	760,0	15,97	52	49	50,5	3,3-iisopropoxy,1,1,1,5,5,5,haxametiltrisiloxano
44,84	44,85	44,85	820	86,90	839	93,66	829,5	90,28	55	57	56,0	Ciclooctasiloxano,hexadecametil
46,44	46,45	46,45	556	17,07	547	11,48	551,5	14,28	242	199	220,5	C2H23015
47,37	47,36	47,37	844	92,65	860	92,34	852,0	92,50	288	81	184,5	Cafeína
47,48	47,48	47,48	854	16,83	851	16,75	852,5	16,79	42	270	156,0	1,2-Ácido benzenodicarboxílico,butil,ciclohexyl éster
47,65	47,65	47,65	594	19,12	577	17,18	585,5	18,15	85	66	75,5	1,3-Dioxano,5-(hexadeciloxy)-2-pentadecil-,trans

Amostras 1 e 2: se referem às réplicas de um dado ensaio; média: valor médio referente a análises em duplicata; Sinal Ruído: Sinal de intensidade (S) dividido pelo ruído(N) da linha; RSI: parâmetro de compatibilidade entre o espectro desconhecido e o espectro da biblioteca.

Apêndice D – Identificação dos compostos voláteis, fibra PDMS/DVB

Café Comercial												
Tempo de retenção			RSI 1	Probabilidade (%) 1	RSI 2	Probabilidade (%) 2	RSI (médio)	Probabilidade (%) (média)	Sinal Ruído			Composto
Amostra 1	Amostra 2	Média							Amostra 1	Amostra 2	Média	
3,45	3,46	3,46	820	51,55	936	43,32	878,0	47,44	88	39	63,5	Pirazina
3,62	3,62	3,62	883	63,34	896	62,21	889,5	62,78	1263	577	920,0	Piridina
3,96	3,93	3,95	819	28,94	785	16,94	802,0	22,94	407	337	372,0	Piperidina, 1-metil
		3,95	808	19,85	779	12,96	793,5	16,41			372,0	1-Metil,2-piperidinametanol
4,40	4,39	4,40	708	37,52	700	15,02	704,0	26,27	683	262	472,5	1-(2-metil-propenil)-aziridina
5,02	5,01	5,02	832	57,86	787	72,88	809,5	65,37	233	308	270,5	Ciclotrisiloxano, hexametil
5,15	5,16	5,16	886	20,77	853	15,18	869,5	17,98	789	488	638,5	4-Piridinamina
5,47	5,49	5,48	847	30,24	829	41,75	838,0	36,00	148	96	122,0	Furfural
6,21	6,15	6,18	862	55,02	870	68,98	866,0	62,00	1827	1260	1543,5	3-Furamnetanol
6,50	6,48	6,49	510	5,31	648	4,71	579,0	5,01	134	65	99,5	Cicloheptano,1,3-dicloro-cis
7,81	7,80	7,81	900	49,36	892	35,53	896,0	42,45	854	588	721,0	Pirimidina,4,5-dimetil
7,94	7,93	7,94	807	57,92	736	22,48	771,5	40,20	3090	491	1790,5	Pirazina, etil
8,07	8,05	8,06	768	76,16	874	89,32	821,0	82,74	338	239	288,5	Pirazina,2,3-dimetil
8,60	8,57	8,59	651	17,81	677	29,05	664,0	23,43	93	167	130,0	Aziridine, 2-(1,1-dimetil)-1-etil-3-metil-, trans-
8,89	8,82	8,86	791	41,58	848	66,18	819,5	53,88	86	88	87,0	Ciclotrisiloxano, hexametil
9,45	9,45	9,45	832	45,99	877	65,3	854,5	55,65	219	104	161,5	Furano,2-metil
9,52	9,53	9,53	830	30,91	825	29,88	827,5	30,40	128	90	109,0	Piridina,3-etil ou piridina,4-etil

Apêndice D – Identificação dos compostos voláteis, fibra PDMS/DVB (Continuação)

Café Comercial												
Tempo de retenção			RSI 1	Probabilidade (%) 1	RSI 2	Probabilidade (%) 2	RSI (médio)	Probabilidade (%) (média)	Sinal Ruído			Composto
Amostra 1	Amostra 2	Média							Amostra 1	Amostra 2	Média	
9,65	9,67	9,66	757	10,53	780	10,08	768,5	10,31	97	88	92,5	1,2,4-Trioxolane, 3,5-difenil
9,81	9,81	9,81	852	83,02	893	85,42	872,5	84,22	803	634	718,5	2-Furancarboxaldeido,5-metil
10,46	10,46	10,46	787	67,72	782	63,21	784,5	65,47	81	57	69,0	2-n-Butil furano
10,85	10,82	10,84	801	29,17	804	29,4	802,5	29,29	105	392	248,5	Ácido benzenosulfônico,4-hidroxy
	10,89	10,89			640	4,54	640,0	4,54		87	87,0	4-Ciclohexylidenebutiraldeido
11,14	11,13	11,14	855	58,45	836	47,18	845,5	52,82	2021	1764	1892,5	2-Furanmetanol, acetato
11,89	11,90	11,90	635	40,61	779	69,95	707,0	55,28	108	61	84,5	1H-Pirrol-2-acetonitrilo, 1-metil
12,11	12,12	12,12	716	67,32	724	65,84	720,0	66,58	362	303	332,5	4(H)-Piridina,N-acetil
12,46	12,44	12,45	818	27,17	824	37,15	821,0	32,16	96	87	91,5	2-Ciclopenten-1-ona,2-hidroxy-3-metil
12,64	12,65	12,65	747	35,62	772	48,77	759,5	42,20	63	53	58,0	Etanona, 1-(2-piridinil)
12,88	12,88	12,88	772	20,01	748	5,69	760,0	12,85	99	88	93,5	Furano,2,3,5-trimetil
13,33	13,35	13,34	753	11,30	745	25,25	749,0	18,28	77	62	69,5	Nona-3,5-dien-2-one
13,68	13,69	13,69	648	13,17	712	19,85	680,0	16,51	61	58	59,5	Ácido carboxílico, 1-allilciclopropano
14,09	14,08	14,09	844	84,60	831	81,52	837,5	83,06	243	243	243,0	Etanona, 1-(1H-pirrol-2-yl)-
14,33	14,34	14,34	670	41,13	579	9,47	624,5	25,30	100	98	99,0	5,8,10-Undecatrien-3-ol
14,47	14,47	14,47	776	52,01	749	49,32	762,5	50,67	264	238	251,0	Benzenamina, 4-metoxo-
14,64	14,64	14,64	822	58,23	812	46,31	817,0	52,27	836	759	797,5	Pirazina, 2,6-dietil-
14,90	14,91	14,91	831	54,59	855	32,53	843,0	43,56	343	278	310,5	Furano, 2,2'-metilenebis-

Apêndice D – Identificação dos compostos voláteis, fibra PDMS/DVB (Continuação)

Café Comercial												
Tempo de retenção			RSI 1	Probabilidade (%) 1	RSI 2	Probabilidade (%) 2	RSI (médio)	Probabilidade (%) (média)	Sinal Ruído			Composto
Amostra 1	Amostra 2	Média							Amostra 1	Amostra 2	Média	
14,97	14,98	14,98	789	31,03	816	29,23	802,5	30,13	926	817	871,5	2,3-Dimetil-5-etilpirazina
15,16	15,17	15,17	895	54,92	887	32,48	891,0	43,70	585	558	571,5	Fenol, 4-metoxi- (Mequinol)
15,47	15,48	15,48	764	35,26	768	26,75	766,0	31,01	54	34	44,0	3-Ciclohexen-1-amine, 6-(4-metilfenil)-2,5-difenil-, (1à,2à,5à,6à)-
15,72	15,73	15,73	785	22,57	812	44,04	798,5	33,31	63	57	60,0	2-Ciclohexen-1-one, 4,4-dimetil-
15,85	15,86	15,86	772	37,44	760	30,71	766,0	34,08	185	170	177,5	1,5-Dimetil-2-pirrolcarbonitrilo
15,93	15,94	15,94	799	58,80	803	49,50	801,0	54,15	433	369	401,0	1-Ácidocarboxílico, 1-ciclopenteno
16,03	16,03	16,03	850	35,49	846	27,45	848,0	31,47	530	506	518,0	Isotiazole, 3,4-dimetil-
16,23	16,23	16,23	667	9,10	671	18,38	669,0	13,74	432	350	391,0	Octahidro-1-oxa-ciclopropa[c]indene
16,43	16,44	16,44	752	66,78	758	69,46	755,0	68,12	668	606	637,0	2-Acetil-3-metipirazina
16,53	16,54	16,54	601	7,62	577	3,74	589,0	5,68	278	258	268,0	3-Oxabicyclo[3.3.0]octan-2-one, 4-metoxi-6-metilene-, E-
17,01	17,02	17,02	744	7,23	752	5,05	748,0	6,14	146	162	154,0	1,3-Heptadiene, 5,5-dimetil-
17,33	17,34	17,34	752	51,02	752	49,72	752,0	50,37	283	261	272,0	5H-5-Metil-6,7-dihydrociclopentapirazina
17,49	17,52	17,51	803	7,20	622	18,93	712,5	13,07	60	51	55,5	1H-Pirrol, 2,3-dihidro-1-metil
17,96	17,97	17,97	858	16,59	865	8,2	861,5	12,40	406	326	366,0	1-Piperidino-1-etenil-ciclopropano
18,08	18,09	18,09	714	16,46	718	23,65	716,0	20,06	234	215	224,5	Fenol, dietil-
18,19	18,21	18,20	873	38,26	887	34,86	880,0	36,56	420	366	393,0	Ciclopentasiloxano, decametil-
18,60	18,62	18,61	762	10,83	767	22,07	764,5	16,45	84	77	80,5	5-Acetil, 2-metilpiridina
18,80	18,81	18,81	788	49,51	753	15,76	770,5	32,64	53	55	54,0	2-Etil-3-metoxi-2ciclopentenona

Apêndice D – Identificação dos compostos voláteis, fibra PDMS/DVB (Continuação)

Café Comercial												
Tempo de retenção			RSI 1	Probabilidade (%) 1	RSI 2	Probabilidade (%) 2	RSI (médio)	Probabilidade (%) (média)	Sinal Ruído			Composto
Amostra 1	Amostra 2	Média							Amostra 1	Amostra 2	Média	
18,97	18,98	18,98	726	12,13	710	4,32	718,0	8,23	118	129	123,5	1,3,3-Trimetilciclohex-1-ene-4-carboxaldeido, (+,-)-
19,13	19,14	19,14	845	40,88	761	16,05	803,0	28,47	81	69	75,0	Nicotinil álcool
19,29	19,31	19,30	850	67,90	827	37,6	838,5	52,75	456	464	460,0	Furano, 2-(2-furanilmetil)-5-metil-
19,35	19,36	19,36	898	98,44	890	98,27	894,0	98,36	418	429	423,5	1H-Pirrol, 1-(2-furanilmetil)-
19,55	19,57	19,56	679	18,95	660	19,87	669,5	19,41	221	213	217,0	2,6-Dimetil-4-tiopirone
19,76	19,77	19,77	798	23,98	794	19,52	796,0	21,75	260	262	261,0	Piridina, 3-(4-metil-5-cis-fenil-1,3-oxazolidin-2-yl)-
19,90	19,91	19,91	841	8,22	606	6,69	723,5	7,46	117	132	124,5	Benzaldeido, 4-etoxy-
20,17	20,17	20,17	718	10,30	742	21,08	730,0	15,69	165	153	159,0	2-Metilindoline
20,47	20,49	20,48	720	10,10	653	5,09	686,5	7,60	105	114	109,5	Biciclo[4.4.0]dec-5-em-4-ona-1-ácido carboxílico
21,04	21,05	21,05	688	11,41	695	14,46	691,5	12,94	185	193	189,0	Pirazina, 2,5-dimetil-3-(1-propenil)-, (E)-
21,33	21,33	21,33	745	16,87	708	7,58	726,5	12,23	149	160	154,5	Ácido,2-propenóico,3-(2-hidroxyfenil)-(E)-
21,44	21,45	21,45	585	22,04	538	9,97	561,5	16,01	143	115	129,0	2,5-Pirrolidinediona, 1-(2-metilene-3-butenil)-
21,80	21,8	21,80	634	12,04	623	4,11	628,5	8,08	52	46	49,0	4-Metilmercaptoanilina
21,99	21,99	21,99	931	89,03	900	74,42	915,5	81,73	201	80	140,5	Ciclotetrasiloxano, octametil
22,11	22,13	22,12	565	8,07	508	7,07	536,5	7,57	101	79	90,0	Pirrolidina,1-(1-ciclohepten-1-yl)-
22,29	22,30	22,30	810	47,33	790	42,00	800,0	44,67	166	163	164,5	2-Butil-3-metilpirazina
22,42	22,44	22,43	594	6,48	595	5,87	594,5	6,18	111	105	108,0	Piridina, 2-(1-propilbutil)-
22,53	22,53	22,53	652	45,83	639	39,74	645,5	42,79	223	215	219,0	6-(5-Metil-furano-2-yl)-hexano-2-one

Apêndice D – Identificação dos compostos voláteis, fibra PDMS/DVB (Continuação)

Café Comercial												
Tempo de retenção			RSI 1	Probabilidade (%) 1	RSI 2	Probabilidade (%) 2	RSI (médio)	Probabilidade (%) (média)	Sinal Ruído			Composto
Amostra 1	Amostra 2	Média							Amostra 1	Amostra 2	Média	
22,72	22,74	22,73	863	14,03	841	8,76	852,0	11,40	290	270	280,0	2-Hydroxy-1,7-naftiridine
23,03	23,03	23,03	730	25,95	758	27,9	744,0	26,93	635	520	577,5	Ácido etanóico, S-fenil éster
23,34	23,36	23,35	825	44,99	848	19,99	836,5	32,49	60	62	61,0	Indane-4-carboxaldeido
23,64	23,65	23,65	847	79,35	876	79,05	861,5	79,20	1597	1631	1614,0	Fenol, 4-etil-2-metoxo-
24,14	24,14	24,14	863	9,51	858	12,26	860,5	10,89	108	105	106,5	2-Piridinametanol (Piconol)
24,36	24,37	24,37	893	30,24	899	43,35	896,0	36,80	250	246	248,0	Índole
24,68	24,69	24,69	911	83,92	898	77,01	904,5	80,47	517	498	507,5	Furano, 2,2'- [oxybis(metilene)]bis-
24,81	24,83	24,82	839	22,55	858	40,28	848,5	31,42	520	524	522,0	Fenol, m-tert-butil- 4-Hydroxy-3- metilacetofenona
		24,82	808	14,80	867	45,72	837,5	30,26				
25,26	25,26	25,26	874	51,82	872	56,49	873,0	54,16	5076	5262	5169,0	2-Metoxo-4-vinilfenol
25,56	25,56	25,56	707	15,55	715	10,12	711,0	12,84	230	245	237,5	3,4-Piridinadimetanol, 6- metil-
25,76	25,76	25,76	792	23,23	780	40,08	786,0	31,66	545	502	523,5	Pirazolo(2,3-a)piridina, 7- metil-
25,83	25,85	25,84	912	95,71	919	98,25	915,5	96,98	223	212	217,5	Ciclohexasiloxano, dodecametil-
25,99	26,02	26,01	737	41,20	698	28,50	717,5	34,85	142	136	139,0	1-Acetil-3-(6-metil-3piridil)- pirazolina
26,13	26,14	26,14	595	7,63	596	10,31	595,5	8,97	58	66	62,0	2-Butine-1,4-diamine, N,N,N',N'-tetraetil-
26,52	26,54	26,53	874	35,13	826	33,38	850,0	34,26	262	259	260,5	2(1H)-Quinolinone, 4-metil-
26,74	26,76	26,75	739	31,03	746	37,26	742,5	34,15	349	340	344,5	4-Hidroxy-7-metil-1,8- naftilidina
26,97	26,98	26,98	648	12,76	794	16,76	721,0	14,76	76	199	137,5	Fenol, 3-undecyl-

Apêndice D – Identificação dos compostos voláteis, fibra PDMS/DVB (Continuação)

Café Comercial												
Tempo de retenção			RSI 1	Probabilidade (%) 1	RSI 2	Probabilidade (%) 2	RSI (médio)	Probabilidade (%) (média)	Sinal Ruído			Composto
Amostra 1	Amostra 2	Média							Amostra 1	Amostra 2	Média	
27,20	27,20	27,20	711	14,73	705	9,12	708,0	11,93	153	453	303,0	Indenona, 5-metilamino-2,3-dihydro-
27,27	27,26	27,27	647	31,00	653	26,29	650,0	28,65	587	152	369,5	Benzeno, 1-metil-3-[(1-metiletil)thio]-
27,38	27,40	27,39	714	18,32	703	15,86	708,5	17,09	207	207	207,0	4H-Pyrrol[1,2-a]pirimidin-4-one, 3,6-dimetil-
27,50	27,53	27,52	810	69,65	851	86,21	830,5	77,93	214	202	208,0	Benzeno, 4-etenil-1,2-dimetoxy-
27,69	27,70	27,70	572	7,12	591	7,27	581,5	7,20	66	73	69,5	Naftaleno, 1,2,3,4,4a,7-hexahidro-1,6-dimetil-4-(1-metiletil)-
28,14	28,15	28,15	701	23,05	703	24,09	702,0	23,57	880	841	860,5	Benzeno, 1-metil-4-[(1-metiletil)thio]-
28,21	28,23	28,22	717	27,82	711	16,72	714,0	22,27	1394	1229	1311,5	Naftaleno, 1,2,3,4-tetrahidro-6-propil-
28,71	28,72	28,72	784	17,79	773	6,16	778,5	11,98	128	128	128,0	2-Naftalenol, 3-metoxy-
29,18	29,19	29,19	553	15,82	512	7,24	532,5	11,53	143	126	134,5	1,3-Dioxane, 5-(hexadecioxy)-2-pentadecil-, trans-
29,37	29,38	29,38	798	78,36	789	89,56	793,5	83,96	235	212	223,5	à-Furfuriliden-à-furilmetilamine
29,79	29,81	29,80	628	22,07	501	4,55	564,5	13,31	67	64	65,5	2,5-Furandiona, 3-metil-4-propil-
30,10	30,12	30,11	684	38,77	711	41,15	697,5	39,96	113	119	116,0	Pentanamida, 4-(fenilimino)-N-fenyl-
30,27	30,29	30,28	721	69,30	740	70,25	730,5	69,78	63	75	69,0	Benzeno, 1-metil-3,5-bis[(trimetilsilil)oxy]-
30,41	30,42	30,42	734	8,27	752	21,15	743,0	14,71	208	198	203,0	2(1H)-Quinolinone, 3,4-dimetil-
30,56	30,58	30,57	610	8,06	610	6,45	610,0	7,26	128	122	125,0	Formamide, N,N'-[1,4-fenilenebis(metilene)]bis-
30,84	30,85	30,85	687	30,99	651	19,01	669,0	25,00	87	83	85,0	7-Cloro-2,3-dihidro-3-(4-N,N-dimetilaminobenzilidene)-5-fenyl-1H-1,4-benzodiazepin-2-one
30,94	30,96	30,95	781	47,51	849	77,56	815,0	62,54	520	529	524,5	2,4(1H,3H)-pirimidinedione, 5-(1,1-dimetiletil)-

Apêndice D – Identificação dos compostos voláteis, fibra PDMS/DVB (Continuação)

Café Comercial												
Tempo de retenção			RSI 1	Probabilidade (%) 1	RSI 2	Probabilidade (%) 2	RSI (médio)	Probabilidade (%) (média)	Sinal Ruído			Composto
Amostra 1	Amostra 2	Média							Amostra 1	Amostra 2	Média	
31,17	31,18	31,18	732	10,71	752	3,34	742,0	7,03	158	164	161,0	Naftaleno, 1,2,3,4-tetrahydro-5-metil-1-(1-metiletil)-
31,89	31,90	31,90	759	52,41	719	11,54	739,0	31,98	138	138	138,0	Benzonitrilo,4-hidroxy-3-metoxo
32,03	32,04	32,04	783	37,20	760	42,13	771,5	39,67	115	110	112,5	2,3-Dihydro-4,7-dimetil-1H-1,5-benzodiazepin-2-one
32,45	32,47	32,46	603	9,28	623	5,73	613,0	7,51	72	73	72,5	Heptanal, 2-(fenilmetilene)-
32,88	32,91	32,90	830	92,31	832	93,11	831,0	92,71	162	145	153,5	Cicloheptasiloxano, tetradecametil-
33,31	33,34	33,33	812	60,54	831	66,31	821,5	63,43	108	99	103,5	Butilato hidroxitolueno
34,05	34,06	34,06	649	7,17	644	3,98	646,5	5,58	78	70	74,0	Ciclohexanona, 6-furfurylidene-2,2-dimetil-
35,00	35,02	35,01	776	21,05	844	24,36	810,0	22,71	53	47	50,0	1H-Pirrole, 3,5-dimetil-2-fenil-
35,17	35,22	35,20	729	55,70	622	7,44	675,5	31,57	101	65	83,0	Ácido dodecanóico, bis(tert-butildimetilsilil) éster
35,87	35,89	35,88	779	19,84	765	14,52	772,0	17,18	76	74	75,0	syn-Tricyclo[5.10.0(2,4)]oct-5-ene, 3,3,5,6,8,8-hexametil-
38,80	38,81	38,81	926	93,43	903	92,13	914,5	92,78	145	124	134,5	Ciclooctasiloxane, hexadecametil-
39,79	39,80	39,80	792	45,48	799	42,78	795,5	44,13	182	92	137,0	2-Octil benzoato
40,44	40,44	40,44	616	46,63	607	24,48	611,5	35,56	68	52	60,0	Ciclodecasíloxano, eicosametil-
42,09	42,11	42,10	819	86,55	875	89,83	847,0	88,19	160	133	146,5	Ciclononasíloxano, octadecametil-
42,59	42,60	42,60	885	95,62	879	95,44	882,0	95,53	3208	3531	3369,5	Cafeína
42,81	42,82	42,82	900	26,49	853	7,62	876,5	17,06	55	101	78,0	Ácido 1,2-Benzenodicarboxílico, butil ciclohexil éster
43,65	43,67	43,66	803	64,28	794	63,6	798,5	63,94	196	189	192,5	Ácido hexadecanóico, metil éster
44,42	44,43	44,43	769	85,7	787	83,12	778,0	84,41	138	110	124,0	Ciclodecasíloxano, eicosametil-

Apêndice D – Identificação dos compostos voláteis, fibra PDMS/DVB (Continuação)

Café Comercial												
Tempo de retenção			RSI 1	Probabilidade (%) 1	RSI 2	Probabilidade (%) 2	RSI (médio)	Probabilidade (%) (média)	Sinal Ruído			Composto
Amostra 1	Amostra 2	Média							Amostra 1	Amostra 2	Média	
45,31	45,33	45,32	685	63,22	695	59,59	690,0	61,41	132	91	111,5	Ciclododecasiloxano, eicosametil-
46,34	46,35	46,35	762	67,65	751	66,11	756,5	66,88	126	93	109,5	Ciclododecasiloxano, eicosametil-
47,14	47,14	47,14	709	60,97	716	50,66	712,5	55,82	88	60	74,0	Ciclododecasiloxano, eicosametil-
47,99	48,01	48,00	912	52,04	909	75,14	910,5	63,59	107	85	96,0	Ciclononasiloxane, octadecametil-
49,51	49,52	49,52	803	82,53	804	85,37	803,5	83,95	102	81	91,5	Ciclododecasiloxano, eicosametil-
51,26	51,27	51,27	762	65,35	765	69,51	763,5	67,43	66	51	58,5	Ciclododecasiloxano, eicosametil-

Amostras 1 e 2: se referem às réplicas de um dado ensaio; média: valor médio referente a análises em duplicata; Sinal Ruído: Sinal de intensidade (S) dividido pelo ruído(N) da linha; RSI: parâmetro de compatibilidade entre o espectro desconhecido e o espectro da biblioteca.

Apêndice E – Identificação dos compostos voláteis, fibra DVB/CAR/PDMS

Café Comercial

Tempo de retenção			RSI 1	Probabilidade (%) 1	RSI 2	Probabilidade (%) 2	RSI (média)	Probabilidade (%) (média)	Sinal Ruído			Composto
Amostra 1	Amostra 2	Média							Amostra 1	Amostra 2	Média	
2,28	2,28	2,28	806	60,10	758	17,62	782,0	38,86	113	69	91,0	Furano,2-metil
3,86	3,85	3,86	892	77,92	897	77,28	894,5	77,60	367	210	288,5	Pirazina
4,14	4,11	4,13	842	42,33	848	20,35	845,0	31,34	3801	2447	3124,0	Piridina
4,47	4,45	4,46	948	72,12	932	31,80	940,0	51,96	65	80	72,5	Metil,2-butinoato
4,79	4,78	4,79	786	29,40	747	10,31	766,5	19,86	81	34	57,5	1-Metil-2-piperidinemetanol
5,41	5,41	5,41	725	40,96	693	8,17	709,0	24,57	99	39	69,0	8-Azabicyclo[3.2.1]octan-3-one, 8-metil-
6,32	6,31	6,32	857	26,59	887	62,35	872,0	44,47	126	58	92,0	Ciclotrisiloxano hexametil
6,59	6,56	6,58	806	22,71	843	26,86	824,5	24,79	2826	1676	2251,0	4-Piridinamina
6,96	6,95	6,96	837	31,65	830	38,92	833,5	35,29	723	358	540,5	Fenol,4-metil
7,08	7,05	7,07	835	43,62	841	50,20	838,0	46,91	1017	736	876,5	3-Furaldeido
7,92	7,91	7,92	789	27,18	829	45,69	809,0	36,44	74	42	58,0	Furano, 2-(2-propenil)-
8,57	8,44	8,51	863	74,22	814	33,16	838,5	53,69	2426	2003	2214,5	3-Furanmetanol
8,59	8,48	8,535	832	46,21	857	37,75	844,5	41,98	144	782	463,0	Piridine, 3-metil-
8,95	8,87	8,91	706	13,13	757	13,36	731,5	13,25	161	108	134,5	1,3-Oxathiane, 2-(1,1-dimetiletil)-2-metil-
9,39	9,38	9,385	818	55,04	836	42,60	827,0	48,82	144	90	117,0	Tiazole, 2,4-dimetil-
9,52	9,48	9,50	844	52,92	816	59,82	830,0	56,37	113	62	87,5	1,3,5,7-Ciclooctatetraeno
10,42	10,41	10,42	716	31,71	745	75,29	730,5	53,50	88	262	175,0	Ácido,2,3-pentadienóico-,etil éster

Apêndice E – Identificação dos compostos voláteis, fibra DVB/CAR/PDMS (Continuação)

Café Comercial												
Tempo de retenção			RSI 1	Probabilidade (%) 1	RSI 2	Probabilidade (%) 2	RSI (média)	Probabilidade (%) (média)	Sinal Ruído			Composto
Amostra 1	Amostra 2	Média							Amostra 1	Amostra 2	Média	
10,58	10,59	10,59	791	16,75	721	10,42	756,0	13,59	2364	1546	1955,0	1,2,5-Trimetilpirrol
10,78	10,73	10,76	654	21,54	676	20,08	665,0	20,81	6883	1012	3947,5	Etenilpirazina
10,95	10,91	10,93	814	56,72	819	12,17	816,5	34,45	617	223	420,0	Pirazina, 2,3-dimetil-
11,46	11,43	11,45	806	69,26	764	64,59	785,0	66,93	184	143	163,5	Pirazina, etenil-
12,80	12,78	12,79	818	31,15	824	34,84	821,0	33,00	443	259	351,0	Piridine, 4-etil-
13,01	13,00	13,01	717	16,63	710	26,33	713,5	21,48	373	265	319,0	Bicyclo[2.2.2]oct-2-ene-1-carboxamide
13,32	13,29	13,31	807	78,83	827	83,54	817,0	81,19	3145	2706	2925,5	2-Furancarboxaldeido, 5-metil-
13,95	13,92	13,94	949	64,09	957	69,52	953,0	66,81	55	40	47,5	Metil 2-fuorato
14,59	14,59	14,59	730	29,89	667	17,61	698,5	23,75	177	100	138,5	3,5-Dimetilcyclohex-1-ene-4-carboxaldeido
14,78	14,72	14,75	844	56,56	855	28,45	849,5	42,51	1975	446	1210,5	Ácido benzenosulfônico, 4-hidroxy-
		14,75	820	16,94	865	32,20	842,5	24,57			1210,5	Fenol
14,90	14,89	14,90	814	40,73	781	22,42	797,5	31,58	8860	6360	7610,0	Pirazina, 2-etil-6-metil-
15,06	15,03	15,05	863	74,51	887	74,06	875,0	74,29	3975	2945	3460,0	2-Furanmetanol, acetato
15,24	15,22	15,23	619	53,56	732	20,29	675,5	36,93	1014	2121	1567,5	Ciclotetrasiloxano octametil
15,33	15,30	15,32	822	66,87	842	61,21	832,0	64,04	3061	662	1861,5	1H-Pirrol-2-carboxaldeido, 1-metil-
15,53	15,53	15,53	884	88,76	899	77,56	891,5	83,16	161	123	142,0	1-Propanona, 1-(2-furanil)-
15,80	15,78	15,79	761	44,75	808	42,02	784,5	43,39	289	250	269,5	Pirazina, (1-metiletetil)-

Apêndice E – Identificação dos compostos voláteis, fibra DVB/CAR/PDMS (Continuação)

Café Comercial												
Tempo de retenção			RSI 1	Probabilidade (%) 1	RSI 2	Probabilidade (%) 2	RSI (média)	Probabilidade (%) (média)	Sinal Ruído			Composto
Amostra 1	Amostra 2	Média							Amostra 1	Amostra 2	Média	
15,95	15,95	15,95	764	39,28	739	31,83	751,5	35,56	357	341	349,0	Pirazina, (1-metiletetil)-
16,13	16,11	16,12	751	15,39	777	10,17	764,0	12,78	1260	981	1120,5	4(H)-Piridina, N-acetil-
16,65	16,67	16,66	770	72,36	742	81,68	756,0	77,02	301	208	254,5	ETanona 1-(2-pyridinil)-
16,95	16,95	16,95	762	11,33	696	7,20	729,0	9,27	287	220	253,5	1,2,4,4-Tetrametilciclopenteno
17,15	17,14	17,15	901	26,07	917	24,10	909,0	25,09	415	308	361,5	2-Butine
17,24	17,24	17,24	672	36,95	664	10,10	668,0	23,53	85	81	83,0	Benzenotiol, 3-metil
		17,24	660	14,9	727	34,44	693,5	24,67			83,0	benzenometanetriol
17,35	17,35	17,35	659	20,78	825	14,67	742,0	17,73	81	156	118,5	2-Piridinamina
17,49	17,49	17,49	681	47,09	761	73,26	721,0	60,18	90	65	77,5	Tricyclo[2.2.1.0 ^{2,6}]heptan-3-one, oxime
17,54	17,56	17,55	738	21,86	789	31,01	763,5	26,44	138	120	129,0	Ciclohexeno, 1-metil-3-(1-metiletetil)-
17,67	17,67	17,67	796	73,06	721	17,23	758,5	45,15	115	68	91,5	1-(1-Cianociclopentil)pirrolidina
17,76	17,76	17,76	891	33,24	896	46,55	893,5	39,90	259	244	251,5	[1,2,4]Triazolo[1,5-a]piridina
17,87	17,88	17,88	645	54,27	620	31,72	632,5	43,00	100	65	82,5	1H-Pirrol, 1-pentil-
17,99	17,99	17,99	753	14,42	722	3,36	737,5	8,89	91	63	77,0	2-Ciclopenten-1-one, 3-etil-2-hydroxy-
18,19	18,19	18,19	729	26,35	831	36,30	780,0	31,33	53	32	42,5	Etanona, 1-(1cilcohexen-1-yl)-
18,33	18,33	18,33	807	74,61	842	73,24	824,5	73,93	288	250	269,0	Furano, 2-etil-5-metil-
18,64	18,58	18,61	840	82,21	813	61,87	826,5	72,04	624	544	584,0	Etanona, 1-(1H-pirrol-2-yl)-

Apêndice E – Identificação dos compostos voláteis, fibra DVB/CAR/PDMS (Continuação)

Café Comercial												
Tempo de retenção			RSI 1	Probabilidade (%) 1	RSI 2	Probabilidade (%) 2	RSI (média)	Probabilidade (%) (média)	Sinal Ruído			Composto
Amostra 1	Amostra 2	Média							Amostra 1	Amostra 2	Média	
18,79	18,80	18,80	827	68,67	816	77,23	821,5	72,95	357	275	316,0	Etanona, 1-(1-metil-1H-pirrol-2-yl)-
19,00	19,00	19,00	850	63,08	806	24,25	828,0	43,67	1683	1110	1396,5	Pirazina, 3-etil-2,5-dimetil-
		19,00	819	23,03	817	53,69	818,0	38,36			1396,5	Pirazina, 2,6-dietil-
19,30	19,31	19,31	847	55,05	830	54,92	838,5	54,99	768	651	709,5	Furano, 2,2'-metilenebis-
19,59	19,60	19,60	827	29,39	825	36,27	826,0	32,83	2066	1745	1905,5	Mequinol
19,95	19,96	19,96	678	11,09	672	18,11	675,0	14,60	484	69	276,5	Benzeno, etil-1,2,4-trimetil-
20,19	20,20	20,20	781	32,49	751	20,44	766,0	26,47	593	579	586,0	2-Ciclohexen-1-one, 4,5-dimetil-
20,31	20,31	20,31	761	28,16	739	36,15	750,0	32,16	532	438	485,0	1,5-Dimetil-2-pirrolecarbonitrilo
20,44	20,46	20,45	789	66,71	754	65,44	771,5	66,08	220	182	201,0	1-Cyclopentene-1-ácido carboxílico
20,52	20,54	20,53	718	25,84	718	28,37	718,0	27,11	1587	1376	1481,5	Tiazol, 2-metil-4-propil-
20,78	20,80	20,79	723	34,19	720	32,27	721,5	33,23	865	828	846,5	2-Mercaptofenol
20,97	20,99	20,98	700	5,56	680	4,67	690,0	5,12	542	638	590,0	Pirazina, 2-metil-5-propil-
21,13	21,13	21,13	736	54,87	650	9,76	693,0	32,32	426	370	398,0	2-Ciclopenten-1-one, 3-etil-2-hydroxy-
21,32	21,35	21,34	577	36,15	581	50,57	579,0	43,36	77	31	54,0	Metanetiona, (2,5-dimetilfenil)-(2,4,6-trimetilfenil)-, S-oxide
21,59	21,62	21,61	667	30,57	686	30,38	676,5	30,48	158	142	150,0	2,4-Heptadienal, 2,4-dimetil-
21,93	21,95	21,94	760	54,88	714	16,60	737,0	35,74	634	652	643,0	Piridina, 2-(4-metil-5-trans-1,3-oxazolidin-2-yl)-

Apêndice E – Identificação dos compostos voláteis, fibra DVB/CAR/PDMS (Continuação)

Café Comercial												
Tempo de retenção			RSI 1	Probabilidade (%) 1	RSI 2	Probabilidade (%) 2	RSI (média)	Probabilidade (%) (média)	Sinal Ruído			Composto
Amostra 1	Amostra 2	Média							Amostra 1	Amostra 2	Média	
22,11	***	22,11	678	45,26	***	***	678,0	45,26	103	***	103,0	3H-2-Benzopiran-3-one, octahydro-
22,54	22,54	22,54	733	19,04	709	11,33	721,0	15,19	25	70	47,5	Tiofeno,e,3-dietil
22,74	22,77	22,76	711	10,58	703	20,03	707,0	15,31	489	335	412,0	Fenol, 3,5-dietil-
22,84	22,86	22,85	711	37,80	679	17,01	695,0	27,41	553	461	507,0	Pirazina, 3,5-dietil-2-metil-
22,97	22,99	22,98	895	86,17	711	73,73	803,0	79,95	337	275	306,0	Ciclotrisiloxano dexametil
23,30	23,3	23,30	783	46,51	714	15,66	748,5	46,51	66	54	60,0	5-Acetil-2-metilpiridina
		23,30	798	26,63	781	10,25	789,5	18,44			60,0	Etanona, 1-(3-aminofenil)-
23,51	23,52	23,52	759	43,84	720	30,46	739,5	37,15	107	68	87,5	1-Oxetan-2-one, 4,4-dietil-3- metilene-
23,69	23,71	23,70	704	11,48	652	4,44	678,0	7,96	218	168	193,0	1,3,3-Trimetilcyclohex-1-ene- 4-carboxaldeido, (+,-)-
24,10	24,12	24,11	858	92,28	860	96,86	859,0	94,57	699	677	688,0	1H-Pirrole, 1-(2-furanylmethyl)-
24,26	24,29	24,28	834	72,22	815	65,46	824,5	68,84	547	591	569,0	Ácido 2-furancarboxílico,3- metio-, metil éster
24,49	24,53	24,51	792	13,23	782	14,33	787,0	13,78	512	448	480,0	Piridina, 3-(4-metil-5-cis- fenil-1,3-oxazolidin-2-yl)-
24,81	24,83	24,82	592	29,27	626	7,22	609,0	18,25	77	69	73,0	Benzenamina, 4-metoxi-2- metil-
24,93	24,96	24,95	703	9,86	758	17,86	730,5	13,86	180	128	154,0	5-(p-Tolyl)-1H-tetrazole
25,11	25,12	25,12	755	20,44	698	10,13	726,5	15,29	127	134	130,5	Piridina, 3-(4-metil-5-cis- fenil-1,3-oxazolidin-2-yl)-
25,29	25,3	25,3	422	8,09	538	13,26	480,0	10,68	134	145	139,5	Ácido ciclopentacarboxílico, 2-carboximetil-3-metil
25,57	25,72	25,65	801	23,87	819	35,99	810,0	29,93	51	119	85,0	1,2-Benzenodiol

Apêndice E – Identificação dos compostos voláteis, fibra DVB/CAR/PDMS (Continuação)

Café Comercial												
Tempo de retenção			RSI 1	Probabilidade (%) 1	RSI 2	Probabilidade (%) 2	RSI (média)	Probabilidade (%) (média)	Sinal Ruído			Composto
Amostra 1	Amostra 2	Média							Amostra 1	Amostra 2	Média	
25,85	25,87	25,86	862	31,63	920	62,78	891,0	47,21	371	320	345,5	Furano-3-fenil
26,13	26,16	26,15	754	17,46	719	11,09	736,5	14,28	133	171	152,0	Spiro[3.4]octan-1-one-5-metil,cis
***	26,23	26,23	***	***	821	39,39	821,0	39,39	***	156	156,0	Ácido 2-propenóico,3-(2-hidroxyfenil)-,(E)
26,62	26,70	26,66	600	11,33	601	7,13	600,5	9,23	44	71	57,5	2-Metil-6-(1-propenil)piperidina,[2R[2à,6à[E]]-
26,82	***	26,82	922	81,76	****	****	922,0	81,76	126	****	126,0	Ciclotetrasiloxano, octametil-
26,95	26,99	26,97	741	35,59	707	4,86	724,0	20,23	101	115	108,0	N-(1H-2-Oxo-pirimidin-4-yl)-2-aminopropanoic acid
27,15	27,19	27,17	739	12,30	756	8,62	747,5	10,46	239	214	226,5	2-Isoamil-6-metilpirazina
27,28	27,31	27,3	560	8,33	542	10,59	551,0	9,46	138	136	137,0	Piridina,2 (1-propilbutil)
27,40	27,43	27,42	620	14,25	564	5,90	592,0	10,08	84	77	80,5	6-(5-Methyl-furan-2yl)-hexan-2-one
27,59	27,61	27,60	856	14,76	856	21,30	856,0	18,03	183	461	322,0	2-Hydroxy-1,7-naftiridina
27,87	27,91	27,89	687	31,70	679	28,79	683,0	30,25	170	485	327,5	Sulfide, isopropil fenil
27,95	27,99	27,97	632	44,20	730	55,69	681,0	49,95	204	201	202,5	Ácido fosfonico,metil-,bis(trimetilsilil) éster
28,30	28,37	28,34	764	41,93	822	41,09	793,0	41,51	213	528	370,5	3,4-Dihidroxyacetofenona
28,53	28,57	28,55	844	75,25	872	81,56	858,0	78,41	2136	2421	2278,5	Fenol, 4-ethyl-2-methoxy-
29,01	29,07	29,04	647	16,81	604	6,99	625,5	11,90	93	111	102,0	2-Metil-5,6,7,8-tetrahydroquinoxaline
29,23	29,29	29,26	875	33,58	906	45,48	890,5	39,53	213	324	268,5	Indol
29,59	29,63	29,61	911	80,73	913	85,93	912,0	83,33	357	521	439,0	Furan, 2.2'-[oxybis(methylene)]bis-

Apêndice E – Identificação dos compostos voláteis, fibra DVB/CAR/PDMS (Continuação)

Café Comercial												
Tempo de retenção			RSI 1	Probabilidade (%) 1	RSI 2	Probabilidade (%) 2	RSI (média)	Probabilidade (%) (média)	Sinal Ruído			Composto
Amostra 1	Amostra 2	Média							Amostra 1	Amostra 2	Média	
30,12	30,21	30,17	853	27,29	870	56,74	861,5	42,02	3351	5686	4518,5	2-Metoxi-4-vinilfenol
30,48	30,53	30,51	740	30,65	714	15,03	727,0	22,84	89	186	137,5	3,4-Piridinedimetanol, 6-metil-
30,78	30,83	30,81	905	97,74	923	95,18	914,0	96,46	157	161	159,0	Ciclohexasiloxano, dodecametil-
31,48	31,52	31,50	812	34,37	793	26,43	802,5	30,40	85	188	136,5	Indol-3-acetaldeide
31,65	31,71	31,68	785	13,55	780	49,32	782,5	31,44	694	305	499,5	4-Hdroxy-7-metil-1,8-naftilidina
31,75	31,79	31,77	703	18,94	665	6,69	684,0	12,82	92	181	136,5	4-Metilaminofenol
32,12	32,19	32,16	713	10,31	615	11,99	664,0	11,15	78	138	108,0	Benzeno,1-etoxy-4-fluoro
32,33	32,37	32,35	686	20,15	686	17,77	686,0	18,96	87	178	132,5	Naftaleno, 1,2,3,4-tetrahydro-6-propil-
32,46	32,50	32,48	833	77,20	848	77,78	840,5	77,49	122	262	192,0	Benzeno, 4-etenil-1,2-dimetoxy-
32,62	32,67	32,65	831	14,42	760	4,22	795,5	9,32	103	113	108,0	à-Cubebene
33,07	33,12	33,10	668	13,01	675	17,80	671,5	15,41	356	526	441,0	Benzeno, 1-metil-4-[(1-metiletil)thio]-
33,16	33,21	33,19	686	11,05	739	36,81	712,5	23,93	445	930	687,5	Naftaleno, 1,2,3,4-tetrahydro-6-propil-
33,23	33,3	33,27	713	15,09	824	11,16	768,5	13,13	156	176	166,0	Furano-,2-propil
33,69	33,72	33,71	582	4,45	558	5,68	570,0	5,07	107	199	153,0	Docosane
34,08	34,13	34,11	775	19,73	678	12,39	726,5	16,06	117	131	124,0	Naftaleno, 1,2-dihidro-1,5,8-trimetil-
34,16	34,2	34,18	676	16,48	680	22,13	678,0	19,31	86	298	192,0	3,5-Diisopropoxy-1,1,1,7,7,7-hexametil-3,5-bis(trimetilsiloxo)tetrasiloxane

Apêndice E – Identificação dos compostos voláteis, fibra DVB/CAR/PDMS (Continuação)

Café Comercial												
Tempo de retenção			RSI 1	Probabilidade (%) 1	RSI 2	Probabilidade (%) 2	RSI (média)	Probabilidade (%) (média)	Sinal Ruído			Composto
Amostra 1	Amostra 2	Média							Amostra 1	Amostra 2	Média	
34,34	34,38	34,36	765	43,72	788	76,34	776,5	60,03	98	233	165,5	à-Furfuriliden-à-furilmetilamina
34,76	34,80	34,78	576	13,39	560	26,14	568,0	19,77	43	55	49,0	2,5-Furandione, 3-metil-4-propil-
35,08	35,11	35,10	678	17,34	681	40,13	679,5	28,74	36	107	71,5	Pentanamida, 4-(fenilimino)-N-fenil-
35,37	35,43	35,40	668	46,59	687	45,24	677,5	45,92	39	145	92,0	1,2-Dihydro-1-dimetil-harmalol
35,53	35,57	35,55	643	5,55	691	3,20	667,0	4,38	34	88	61,0	2-Benzoxazolamia, N-etil-
36,14	36,19	36,17	722	5,74	724	10,79	723,0	8,27	64	140	102,0	Naftaleno, 1,2,3,4-tetrahydro-5-metil-1-(1-metiletil)-
36,88	36,93	36,91	524	5,69	581	6,84	552,5	6,27	29	93	61,0	N-Metil-1-fenilciclohexilamina
37,09	37,06	37,08	639	12,99	703	13,80	671,0	13,40	24	74	49,0	Naftaleno, 1,2,3,4-tetrahydro-5-metil-1-(1-metiletil)-
37,43	37,49	37,46	600	8,09	708	5,45	654,0	6,77	32	70	51,0	Benzeno, 1-heptenyl-
37,75	37,80	37,78	720	9,37	685	7,68	702,5	8,53	56	103	79,5	Docosane
37,88	37,92	37,90	828	94,04	833	94,40	830,5	94,22	89	88	88,5	Cicloheptasiloxane, tetradecametil-
38,30	38,35	38,33	850	60,02	828	64,29	839,0	62,16	198	194	196,0	Butilate Hydroxytolueno
38,70	38,75	38,73	802	32,25	726	14,82	764,0	23,54	47	51	49,0	Nataleno, 1,2,3,5,6,8a-hexahydro-4,7-dimethyl-1-(1-metiletil)-(1S-cis)-
40,19	40,25	40,22	809	13,44	807	14,68	808,0	14,06	44	61	52,5	Megastigmatrienone
***	40,51	40,51	****	***	641	4,92	641,0	4,92	***	61	61,0	Fenilamine, N,4,5-trimetil-2-nitro-

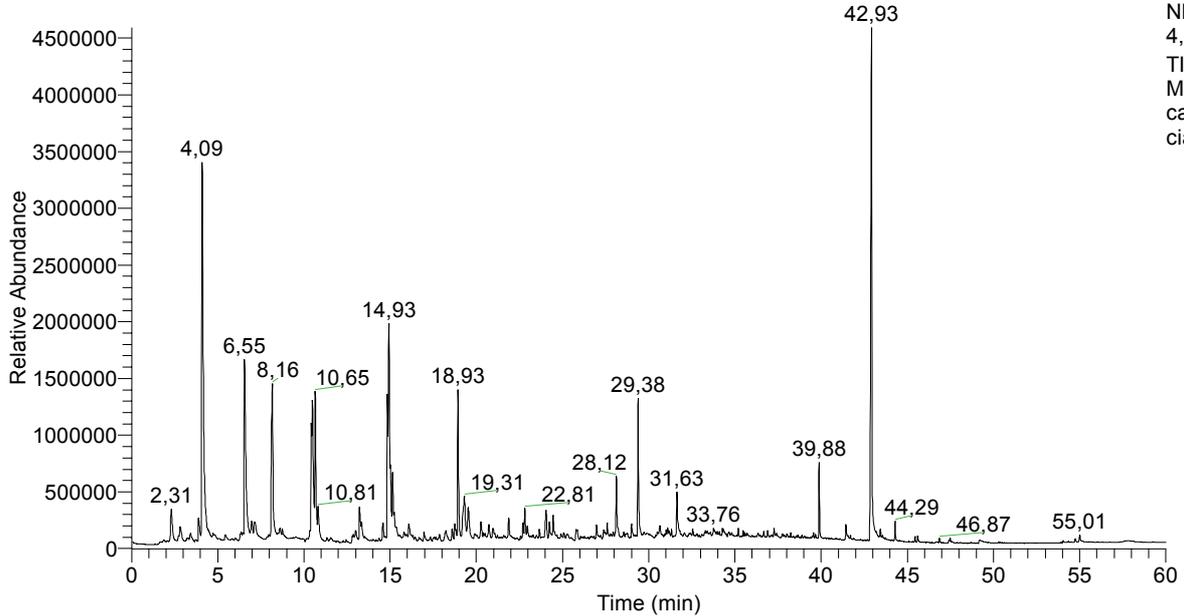
Apêndice E – Identificação dos compostos voláteis, fibra DVB/CAR/PDMS (Continuação)

Café Comercial												
Tempo de retenção			RSI 1	Probabilidade (%) 1	RSI 2	Probabilidade (%) 2	RSI (média)	Probabilidade (%) (média)	Sinal Ruído			Composto
Amostra 1	Amostra 2	Média							Amostra 1	Amostra 2	Média	
40,87	40,91	40,89	785	28,11	800	32,43	792,5	30,27	36	78	57,0	Syn-Tricyclo[5.1.0.0(2,4)]oct-5-ene, 3,3,5,6,8,8-hexametil-
41,61	41,64	41,63	721	25,28	725	8,14	723,0	16,71	34	85	59,5	Docosane
45,69	45,72	45,71	788	25,40	778	26,21	783,0	25,81	14	202	108,0	2-Octil benzoato
50,37	50,53	50,45	828	94,70	875	96,32	851,5	95,51	423	1683	1053,0	Cafeína
****	51,15	51,15	***	****	886	30,17	886,0	30,17	****	255	255,0	Dibutil ftalato
52,80	52,83	52,82	710	3,95	779	62,78	744,5	33,37	15	73	44,0	Ácido Hexadecanóico, metil éster
54,03	54,05	54,04	783	80,21	788	87,10	785,5	83,66	47	58	52,5	Cyclodecasiloxano, eicosametil-
55,25	55,27	55,26	742	10,68	766	25,67	754,0	18,18	35	104	69,5	1,5,6,7-Tetrametil-3-fenylbicyclo[3.2.0]hepta-2,6-diene
56,38	56,40	56,39	742	67,49	750	67,39	746,0	67,44	44	58	51,0	Ciclodecasiloxano, eicosametil-
58,06	58,08	58,07	817	45,86	833	53,84	825,0	49,85	45	59	52,0	Ciclononasiloxano, octadecametil-
59,52	59,54	59,53	808	84,07	794	84,40	801,0	84,24	48	52	50,0	Ciclodecasiloxano, eicosametil-

Amostras 1 e 2: se referem às réplicas de um dado ensaio; média: valor médio referente a análises em duplicata; Sinal Ruído: Sinal de intensidade (S) dividido pelo ruído(N) da linha; RSI: parâmetro de compatibilidade entre o espectro desconhecido e o espectro da biblioteca.

Apêndice F – Duplicata dos Cromatogramas

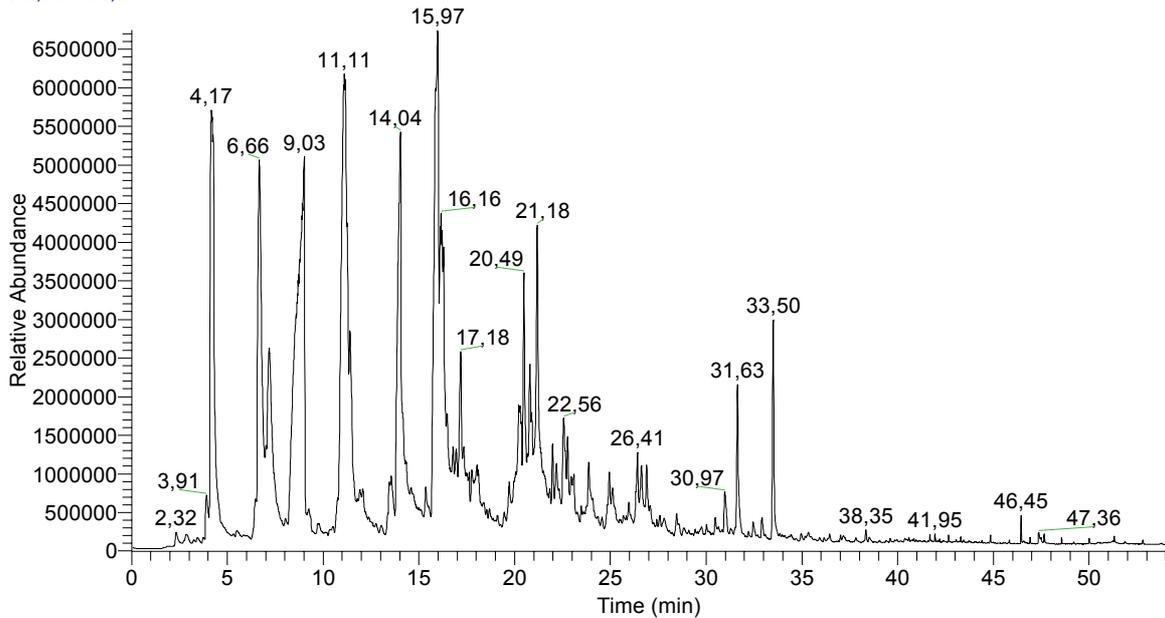
RT: 0,00 - 60,01



NL:
4,59E6
TIC F:
MS
cafe_comerc
ial_2

Duplicata do cromatograma obtido para análises de café comercial utilizando fibra PDMS.

RT: 0,00 - 54,01

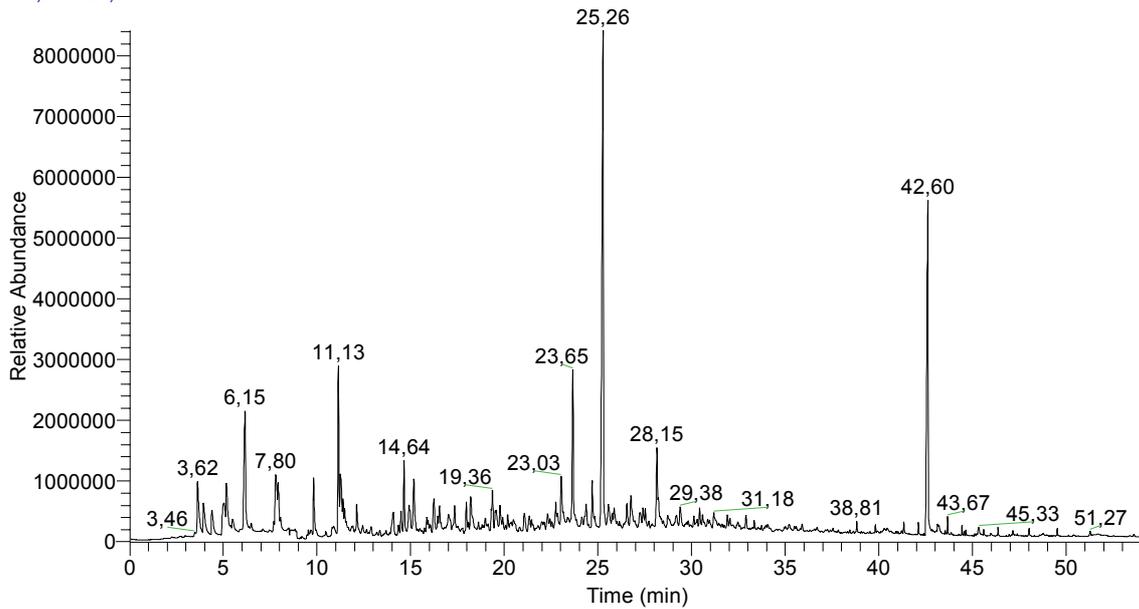


NL:
6,74E6
TIC F:
MS
cafécomerc
ial_CAR_P
DMS_2

Cromatograma obtido para análises de café comercial utilizando fibra CAR/PDMS.

Apêndice F – Duplicata dos Cromatogramas (Continuação)

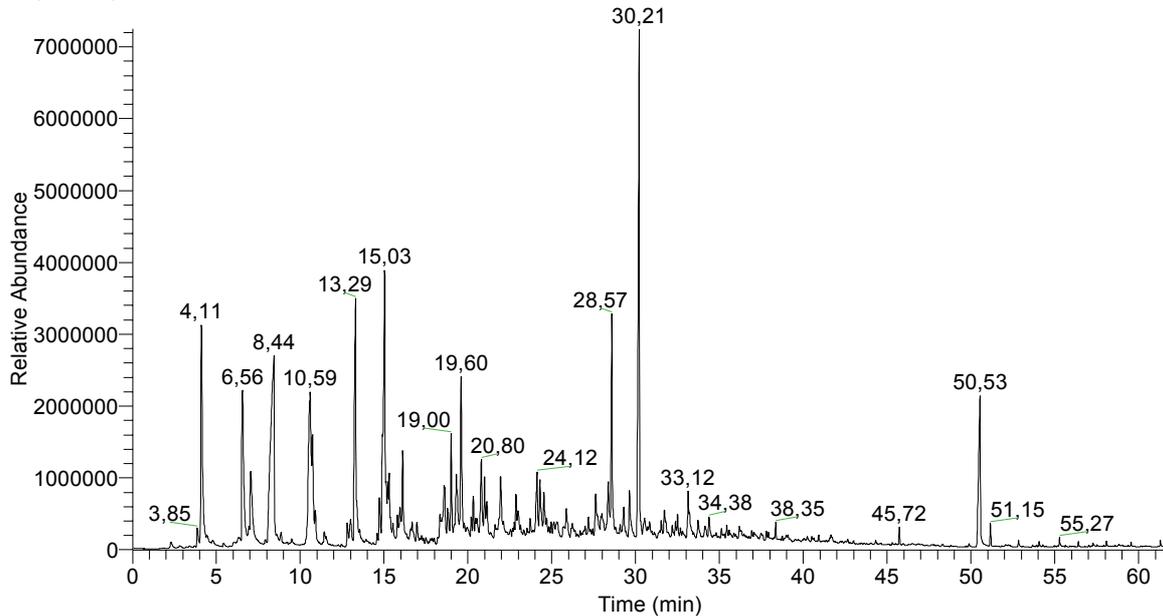
RT: 0,00 - 54,19



NL:
8,41E6
TIC F:
MS
cafecomerc
ial_PDMS_
DVB_2

Cromatograma obtido para análises de café comercial utilizando fibra PDMS/DVB.

RT: 0,00 - 61,68

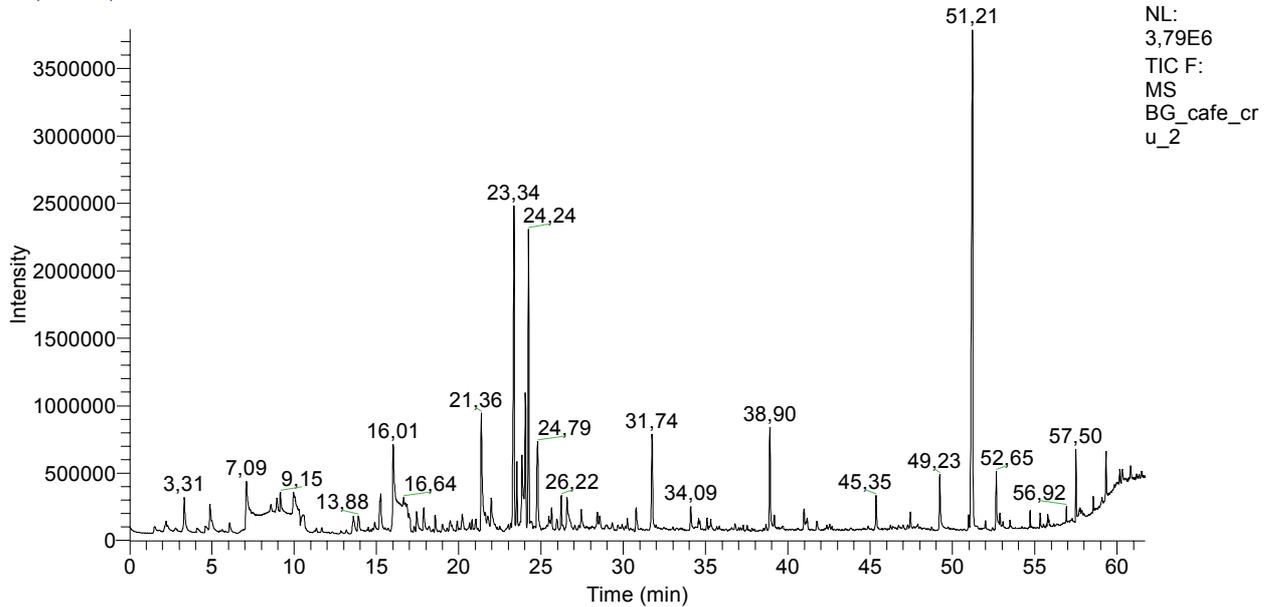


NL:
7,25E6
TIC F:
MS
cafe_comer
cial_DVB_
CAR_PDM
S_2

Cromatograma obtido para análises de café comercial utilizando fibra DVB/CAR/PDMS.

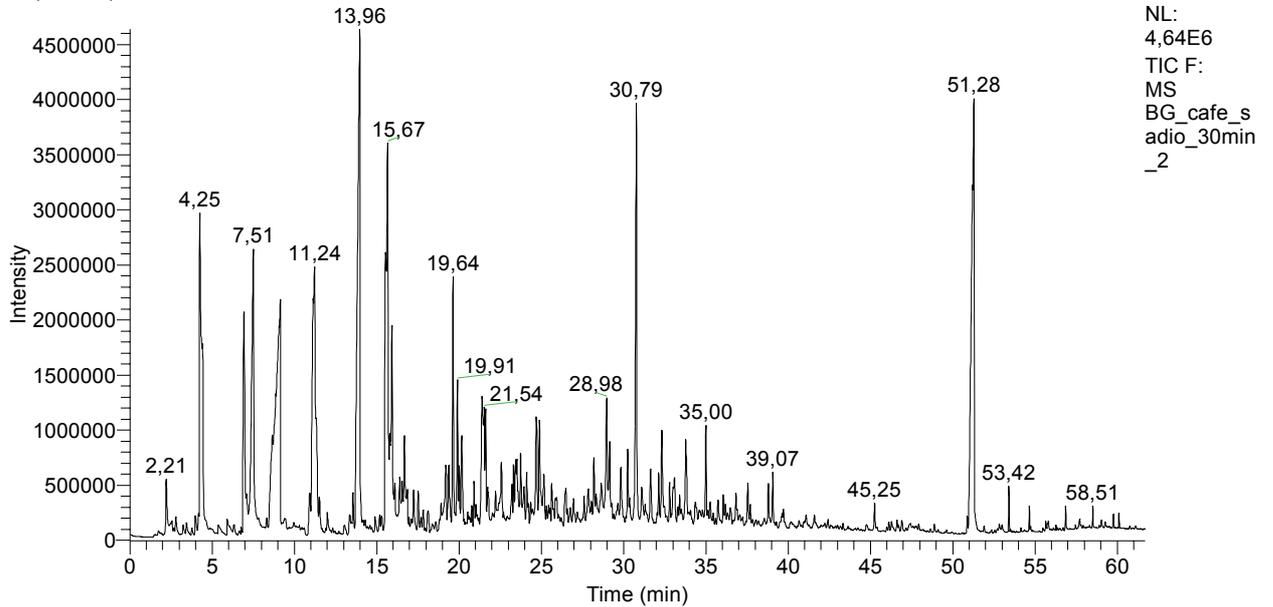
Apêndice F – Duplicata dos Cromatogramas (Continuação)

RT: 0,00 - 61,69



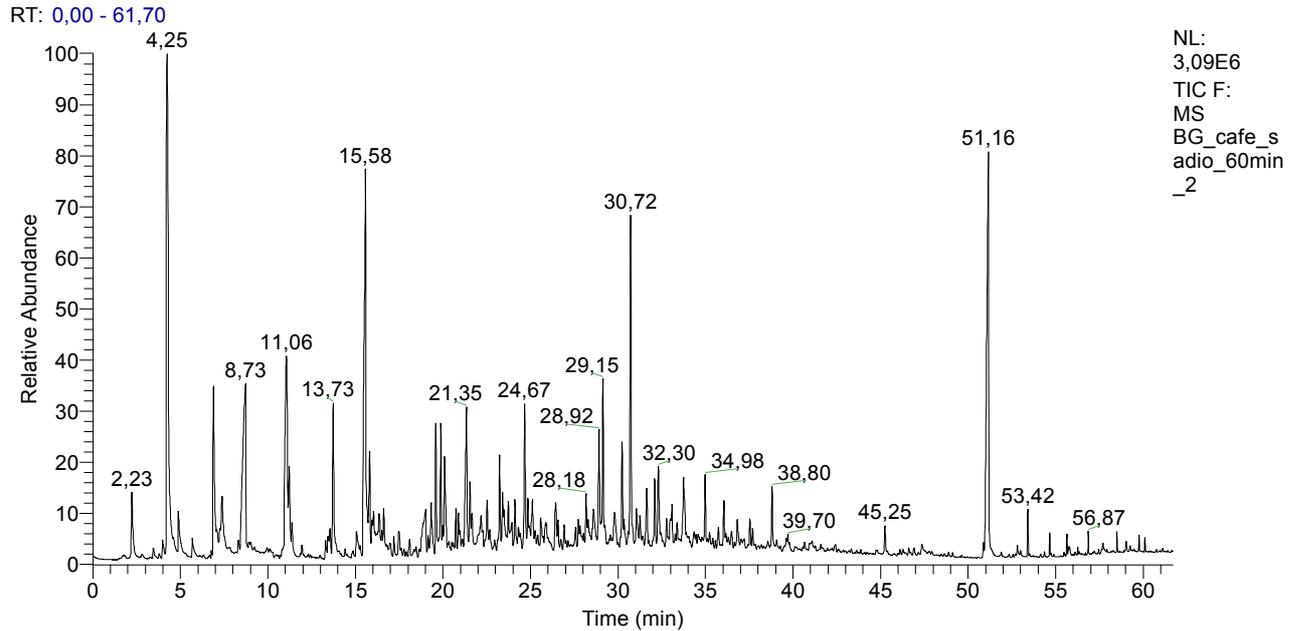
Cromatograma obtido para análises do perfil de voláteis de café cru, fibra DVB/CAR/PDMS.

RT: 0,00 - 61,68

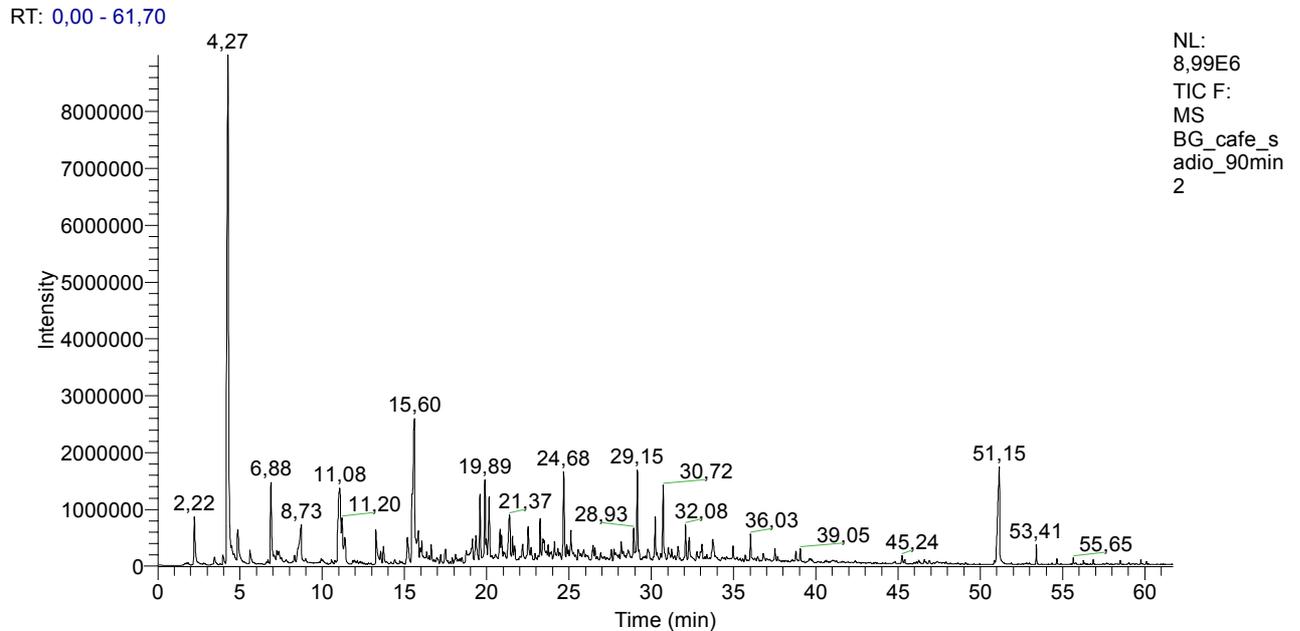


Cromatograma obtido para análises do perfil de voláteis de café torrado a 200°C por 30 minutos, fibra DVB/CAR/PDMS.

Apêndice F – Duplicata dos Cromatogramas (Continuação)



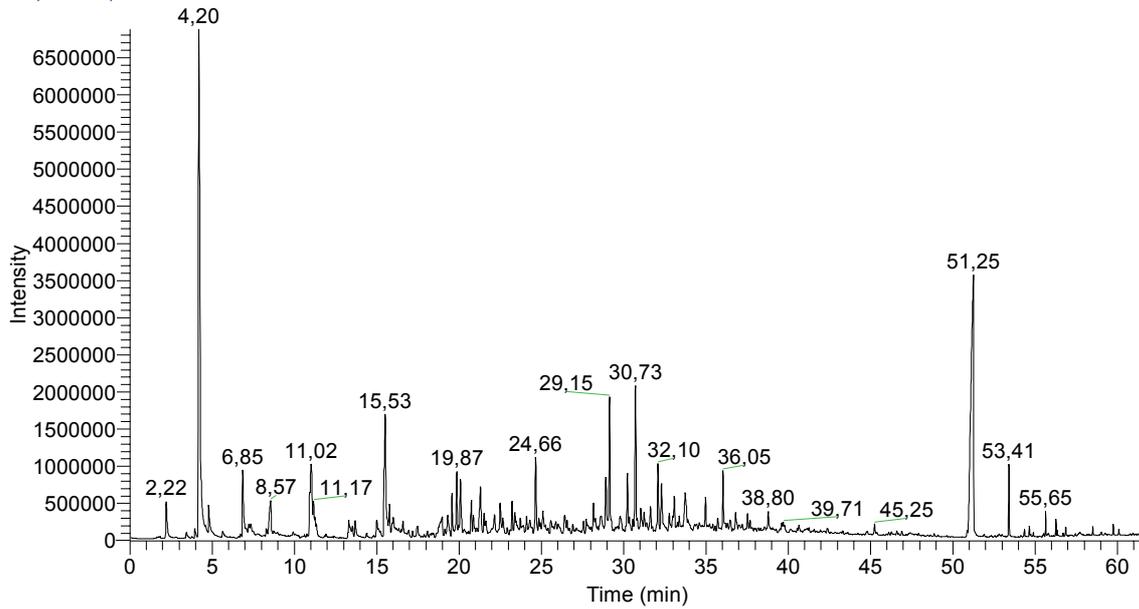
Cromatograma obtido para análises do perfil de voláteis de café torrado a 200°C por 60 minutos, fibra DVB/CAR/PDMS.



Cromatograma obtido para análises do perfil de voláteis de café torrado a 200°C por 90 minutos, fibra DVB/CAR/PDMS.

Apêndice F – Duplicata dos Cromatogramas (Continuação)

RT: 0,00 - 61,68



NL:
6,88E6
TIC F:
MS
BG_cafe_s
adio_120mi
n_2

Cromatograma obtido para análises do perfil de voláteis de café torrado a 200°C por 120 minutos, fibra DVB/CAR/PDMS.

Apêndice G – Identificação dos compostos voláteis, fibra DVB /CAR/PDMS

Café Cru												
Tempo de retenção			RSI 1	Probabilidade (%) 1	RSI 2	Probabilidade (%) 2	RSI (médio)	Probabilidade (%) (média)	Sinal Ruído			Composto
Amostra 1	Amostra 2	Média							Amostra 1	Amostra 2	Média	
1,49	1,52	1,51	660	19,27	614	13,02	637,0	16,15	75	36	55,5	Benzenometamina, pentametil à(2,4,6,trimetilfenil)
2,23	2,21	2,22	665	21,49	623	10,07	644,0	15,78	67	62	64,5	Benzenometamina, pentametil à(2,4,6,trimetilfenil)
3,29	3,31	3,30	911	98,06	939	98,11	925,0	98,09	165	205	185,0	Tricloroetileno
4,43	4,43	4,43	836	46,54	837	39,15	836,5	42,85			344,0	Piridina
4,58	4,58	4,58	840	36,66	830	28,42	835,0	32,54	648	40	344,0	2,4-Pentadienonitrilo
4,88	4,88	4,88	861	32,25	856	25,26	858,5	28,76	130	165	147,5	Spiro[2.4]hepta4,6-dieno
6,06	6,07	6,07	741	11,08	723	10,33	732,0	10,71	57	57	57,0	4-Hexen,1-ol-,(E)
7,09	7,09	7,09	694	58,78	649	21,51	671,5	40,15	376	276	326,0	3,3-Diisopropoxy-1,1,1,5,5,5-hexametiltrisiloxano
8,56	8,57	8,57	873	34,42	820	17,78	846,5	26,10	64	50	57,0	Etilbenzeno
8,94	8,95	8,95	875	23,05	848	24,41	861,5	23,73	197	85	141,0	Benzeno,1,2-dimetil
9,15	9,15	9,15	860	15,6	742	10,09	801,0	12,85	137	125	131,0	1-Penteno,3-metil
9,44	***	9,44	693	50,76	***	***	693,0	50,76	409	****	409,0	3,3-Diisopropoxy-1,1,1,5,5,5-hexametiltrisiloxano
9,94	9,95	9,95	888	48,64	874	38,5	881,0	43,57	197	146	171,5	1,3,5,7-Ciclooxatetraeno
10,28	10,30	10,29	657	35,77	717	10,48	687,0	23,13	120	86	103,0	3,3-Diisopropoxy-1,1,1,5,5,5-hexametiltrisiloxano
10,55	10,60	10,58	835	55,16	809	44,88	822,0	50,02	89	75	82,0	2-Cloroanilina-5-ácido sulônico(fibra)
13,53	13,59	13,56	854	19,68	875	29,2	864,5	24,44	97	101	99,0	Benzeno,1-etil,2-metil/ Tolueno,o-etil
13,87	13,88	13,88	666	35,71	671	43,13	668,5	39,42	99	99	99,0	Etanona,1,2-difenil,oxime-
13,93	13,94	13,94	826	18,9	****	****	826,0	18,90	302	194	248,0	Piridina,3-etil (não sai na duplicata)

Apêndice G – Identificação dos compostos voláteis, fibra DVB /CAR/PDMS (Continuação)

Café Cru												
Tempo de retenção			RSI 1	Probabilidade (%) 1	RSI 2	Probabilidade (%) 2	RSI (médio)	Probabilidade (%) (média)	Sinal Ruído			Composto
Amostra 1	Amostra 2	Média							Amostra 1	Amostra 2	Média	
14,82	14,89	14,86	824	23,83	818	25,68	821,0	24,76	80	53	66,5	Fenol
		14,86	819	24,55	827	31,87	823,0	28,21			66,5	Ácido benzenosulfônico,4-hidroxy
15,10	15,17	15,14	833	17,69	838	23,35	835,5	20,52	697	656	676,5	Benzeno,1-etil,3-metil/Tolueno,m-etil
15,18	15,24	15,21	730	12,54	740	15,06	735,0	13,80	215	220	217,5	Furano,2-pentil
15,93	16,01	15,97	766	86,51	773	88,33	769,5	87,42	673	473	573,0	Ciclotetrasiloxano,octametil
16,56	16,65	16,61	705	71,36	754	85,19	729,5	78,28	216	86	151,0	Ciclotetrasiloxano,octametil
17,34	17,43	17,39	821	15,49	802	22,34	811,5	18,92	118	120	119,0	Benzil álcool/Benzenometanol
17,77	17,87	17,82	862	17,18	893	35,77	877,5	26,48	145	137	141,0	1,3,5-Cicloheptatrieno
18,48	18,56	18,52	592	11,51	567	12,09	579,5	11,80	108	102	105,0	2-Ciclohexen-1-ol,2-metil-5-(1-metiletenil)-,cis
19,39	19,48	19,44	832	16,92	832	19,09	832,0	18,01	67	65	66,0	Benzeno,metil(1-metiletil)
19,80	19,90	19,85	781	15,97	701	11,99	741,0	13,98	68	61	64,5	Benzeno,metil-2-(1-metiletil)
20,13	20,20	20,17	675	22,11	677	44,06	676,0	33,09	147	98	122,5	3,3-Diisopropoxy-1,1,1,5,5,5-hexametiltrisiloxano
20,71	20,80	20,76	719	21,85	710	22,09	714,5	21,97	63	62	62,5	Tetradecano,1-cloro/Miristilclorideo
20,94	21,03	20,99	831	13,46	823	11,08	827,0	12,27	71	68	69,5	Octilacetileno
21,27	21,36	21,32	898	70,9	892	64,63	895,0	67,77	640	701	670,5	Feniletil álcool
21,67	21,74	21,71	449	14,98	620	16,48	534,5	15,73	74	66	70,0	Ácido octadecanóico,3-octadeceniléster(E)
21,87	21,96	21,92	747	12,51	713	15,89	730,0	14,20	273	172	222,5	2,7-Difenilindole
23,24	23,34	23,29	834	32,66	815	55,77	824,5	44,22	1904	1937	1920,5	1,4-Diisopropilciclohexano
23,42	23,53	23,48	753	22,83	755	18,09	754,0	20,46	413	391	402,0	Ciclohexano1,1`-(1-metiletilidene)bis-

Apêndice G – Identificação dos compostos voláteis, fibra DVB /CAR/PDMS (Continuação)

Café Cru												
Tempo de retenção			RSI 1	Probabilidade (%) 1	RSI 2	Probabilidade (%) 2	RSI (médio)	Probabilidade (%) (média)	Sinal Ruído			Composto
Amostra 1	Amostra 2	Média							Amostra 1	Amostra 2	Média	
23,73	23,84	23,79	825	91,38	891	91,26	858,0	91,32	675	426	550,5	Ciclopentasiloxano,decametil
23,93	24,04	23,99	748	17,78	758	14,55	753,0	16,17	830	810	820,0	Ciclohexano,1,1`-(1-metiletilidene)bis-
24,13	24,24	24,19	787	27,51	794	34,85	790,5	31,18	1852	1797	1824,5	1,4-Diisopropilciclohexano
24,62	24,74	24,68	823	79,53	787	79,82	805,0	79,68	1753	1945	1849,0	Pirazina,2-metoxo-3-(2-metilpropil)/2-isobutil, 3-metoxypirazina
24,68	24,79	24,74	807	31,46	814	25,66	810,5	28,56	544	529	536,5	1-Isopropil-1,4,5-trimetilciclohexano
25,36	25,46	25,41	843	12,1	807	15,09	825,0	13,60	108	74	91,0	1H-Indeno,2,3-dihidro-2,2-dimetil
25,53	25,63	25,58	762	29,45	755	31,33	758,5	30,39	134	129	131,5	Ciclohexanol,2,3-dimetil
25,80	25,94	25,87	789	5,7	825	15,81	807,0	10,76	67	67	67,0	3-Octino,5-metil
26,11	26,22	26,17	741	15,92	737	16,1	739,0	16,01	220	208	214,0	Ciclohexano,1,1`'(1,2-dimetil-1,2-etanediyl)bis-
26,45	26,57	26,51	912	59,49	903	43,12	907,5	51,31	270	197	233,5	Benzotiazol
27,35	27,44	27,40	745	80,53	754	78,56	749,5	79,55	196	124	160,0	Ciclotetrasiloxano,octametil
28,31	28,41	28,36	588	27,44	584	18,55	586,0	23,00	124	100	112,0	Fluoren,3-ol,3,6-dimetoxo-3-(2-feniletinil)
28,45	28,55	28,50	621	42,02	585	22,23	603,0	32,13	100	78	89,0	Fluoren,3-ol,3,6-dimetoxo-3-(2-feniletinil)
29,12	29,24	29,18	850	73,08	734	56,78	792,0	64,93	71	59	65,0	Fenol,4-etil,2-metoxo
30,13	30,24	30,19	845	9,11	812	10,99	828,5	10,05	79	69	74,0	6-Metiltridecano
30,66	30,78	30,72	841	38,24	851	47,57	846,0	42,91	140	142	141,0	2-Metoxo,4-vinilfenol
33,99	34,09	34,04	864	78,14	734	66,24	799,0	72,19	185	142	163,5	Ciclopentasiloxano,decametil
34,54	34,57	34,56	760	20,38	764	12,2	762,0	16,29	69	69	69,0	Docosano
34,97	35,07	35,02	678	35,57	692	53,39	685,0	44,48	89	73	81,0	3,3-Diisopropoxy-1,1,1,5,5,5-hexametiltrisiloxano

Apêndice G – Identificação dos compostos voláteis, fibra DVB /CAR/PDMS (Continuação)

Café Cru												
Tempo de retenção			RSI 1	Probabilidade (%) 1	RSI 2	Probabilidade (%) 2	RSI (médio)	Probabilidade (%) (média)	Sinal Ruído			Composto
Amostra 1	Amostra 2	Média							Amostra 1	Amostra 2	Média	
35,20	35,31	35,26	675	16,38	680	32,83	677,5	24,61	73	67	70,0	3,3-Diisopropoxy-1,1,1,5,5,5-hexametiltrisiloxano
37,16	37,28	37,22	805	53,42	787	45,5	796,0	49,46	50	34	42,0	2,5-Ciclohexadiene-1,4-diona,2,6-bis(1,1-dimetiletil)
38,79	38,90	38,85	831	94,44	823	92,72	827,0	93,58	594	615	604,5	Ciclopentasiloxano,decametil
39,06	39,18	39,12	792	42,62	812	57,14	802,0	49,88	128	79	103,5	Butilato hidroxytolueno
40,88	40,98	40,93	714	63,36	684	43,11	699,0	53,24	162	129	145,5	Ciclohexasiloxano, dodecametil
41,06	41,16	41,11	715	36,96	703	34,92	709,0	35,94	83	73	78,0	Ácido octadecanóico, bis(tert-butildimeetilsilil)éster
41,66	41,75	41,71	719	49,22	704	48,22	711,5	48,72	59	56	57,5	Ácido octadecanóico, bis(tert-butildimeetilsilil)éster
44,75	44,88	44,82	712	16,91	609	13,09	660,5	15,00	51	22	36,5	C2H340
45,25	45,35	45,30	806	92,75	817	95,29	811,5	94,02	196	205	200,5	Ciclooctasoloxano, hexadecametil
46,26	46,37	46,32	823	23,77	764	19,9	793,5	21,84	55	17	36,0	Fenol,4-(1,1-dimetilpropil)-
46,60	46,71	46,66	761	47,37	675	28,03	718,0	37,70	83	22	52,5	n-Nonylfenol
46,90	47,00	46,95	772	57,24	***	***	772,0	57,24	71	23	47,0	n-Nonylfenol
47,33	47,44	47,39	648	59,51	638	59,6	643,0	59,56	121	104	112,5	3,3-Diisopropoxy-1,1,1,5,5,5-hexametiltrisiloxano
49,12	49,23	49,18	522	18,99	565	27,76	543,5	23,38	341	332	336,5	C27H4605
51,09	51,21	51,15	860	92,48	878	94,21	869,0	93,35	2594	3005	2799,5	Cafeina
51,90	52,00	51,95	890	22,4	882	23,33	886,0	22,87	36	53	44,5	Dibutilftalato
52,57	52,65	52,61	653	19,08	656	22,5	654,5	20,79	316	351	333,5	Biciclo[4.1.0]hepta,2,4-diene,2,3,4,5,tetraetil-7,7-difenil
52,80	52,88	52,84	662	56,61	690	63,87	676,0	60,24	101	96	98,5	Ciclooctasoloxano, hexadecametil
54,66	54,72	54,69	760	89,22	750	90,62	755,0	89,92	115	109	112,0	Ciclooctasoloxano, hexadecametil

Apêndice G – Identificação dos compostos voláteis, fibra DVB /CAR/PDMS (Continuação)

Café Cru												
Tempo de retenção			RSI 1	Probabilidade (%) 1	RSI 2	Probabilidade (%) 2	RSI (médio)	Probabilidade (%) (média)	Sinal Ruído			Composto
Amostra 1	Amostra 2	Média							Amostra 1	Amostra 2	Média	
55,26	55,32	55,29	458	18,02	439	9,09	448,5	13,56	78	88	83,0	C28H33CLO3
55,73	55,78	55,76	679	35,45	622	36	650,5	35,73	80	80	80,0	Octasiloxano, hexadecametil
56,87	56,92	56,90	718	71,49	695	70,38	706,5	70,94	116	108	112,0	Ciclodecasoloxano, eicosametil
57,23	57,26	57,25	689	45,55	591	53,05	640,0	49,30	69	26	47,5	Ciclodecasoloxano, eicosametil
57,45	57,50	57,48	522	22,55	590	24,09	556,0	23,32	392	436	414,0	C27H33NO8
57,70	57,74	57,72	592	64,54	662	69,92	627,0	67,23	53	72	62,5	Ciclodecasoloxano, eicosametil
59,28	59,33	59,31	521	9,65	499	7,09	510,0	8,37	276	289	282,5	3,3-Diisopropoxy-1,1,1,5,5,5-hexametiltrisiloxano
59,77	***	59,77	775	30,8	****	***	775,0	30,80	70	***	70,0	Ácido hexadecanóico, mono(2-etilhexil)éster
60,10	60,16	60,13	715	83,46	698	75,43	706,5	79,45	96	104	100,0	Ciclononasiloxano, octadecametil
60,26	60,31	60,29	486	16,64	399	9,08	442,5	12,86	102	96	99,0	C31H50O3
60,75	60,82	60,79	489	30,98	401	26,09	445,0	28,54	91	91	91,0	C31H50O3
61,43	61,50	61,47	523	43,5	600	56,78	561,5	50,14	53	42	47,5	Ciclodecasoloxano, eicosametil

Amostras 1 e 2: se referem às réplicas de um dado ensaio; média: valor médio referente a análises em duplicata; Sinal Ruído: Sinal de intensidade (S) dividido pelo ruído(N) da linha; RSI: parâmetro de compatibilidade entre o espectro desconhecido e o espectro da biblioteca.

Apêndice H – Identificação dos compostos voláteis, fibra DVB /CAR/PDMS

Café Sadio 30 min												
Tempo de retenção			RSI 1	Probabilidade (%) 1	RSI 2	Probabilidade (%) 2	RSI (médio)	Probabilidade (%) (médio)	Sinal Ruído			Composto
Amostra 1	Amostra 2	Média							Amostra 1	Amostra 2	Média	
2,22	2,21	2,22	789	33,06	798	52,35	793,5	42,71	392	344	368,0	Furano,2-metil-
2,53	2,58	2,56	860	11,49	844	14,1	852,0	12,80	76	67	71,5	Benzo [a] Naftaceno
2,80	2,80	2,80	753	23,88	748	20,88	750,5	22,38	106	97	101,5	Ácido propionico,propil éster
3,25	3,24	3,25	880	14,14	919	26,39	899,5	20,27	66	61	63,5	propanóico ácido anidrido/anidrido metilacético
3,45	3,44	3,45	868	75,72	873	76,7	870,5	76,21	87	78	82,5	furano, 2,5-dimetil
3,79	3,78	3,79	842	42,6	799	28,27	820,5	35,44	50	45	47,5	Ácido benzenosulfonico,4-hydroxy
3,98	3,99	3,99	783	52,24	758	44,55	770,5	48,40	114	45	79,5	Pirazina
4,18	4,18	4,18	847	73,21	871	84,51	859,0	78,86	506	390	448,0	Ácido,2,4-pentadienóico,1-ciclopenten -3-on-1yj-éster
4,25	4,25	4,25	799	42,23	806	46,9	802,5	44,57	2017	2007	2012,0	Piridina
5,31	5,38	5,35	859	38,56	791	14,64	825,0	26,60	68	56	62,0	1-metil-2piperidinametanol
5,90	5,93	5,92	673	14,66	643	9,64	658,0	12,15	109	99	104,0	8-Azabicyclo[3.2.1]-octan-3-ona-8-metil
6,35	6,34	6,35	765	48,3	747	45,74	756,0	47,02	62	64	63,0	3[2H]-furanona,dihidro-2-metil-
6,95	6,95	6,95	824	22,28	795	16,62	809,5	19,45	1378	1375	1376,5	pirimidina,2 metil
7,51	7,51	7,51	760	43,7	796	42,54	778,0	43,12	1644	1690	1667,0	Furfural
8,32	8,32	8,32	811	56,25	829	52,75	820,0	54,50	59	61	60,0	Furano,2-(2-propenil)-
9,12	9,15	9,14	813	36,11	807	49,73	810,0	42,92	1359	1417	1388,0	3-furanmetanol
9,47	9,45	9,46	604	12,45	649	25,4	626,5	18,93	56	51	53,5	Glicina,N- (carboximetil)-N-nitroso
9,98	9,97	9,98	904	34,88	891	49,82	897,5	42,35	52	52	52,0	1,3,5,7-ciclooctatetraeno

Apêndice H – Identificação dos compostos voláteis, fibra DVB /CAR/PDMS (Continuação)

Café Sadio 30 min												
Tempo de retenção			RSI 1	Probabilidade (%) 1	RSI 2	Probabilidade (%) 2	RSI (médio)	Probabilidade (%) (médio)	Sinal Ruído			Composto
Amostra 1	Amostra 2	Média							Amostra 1	Amostra 2	Média	
10,30	10,30	10,30	795	16,29	609	13,55	702,0	14,92	54	47	50,5	Ácido 2-piepridina carboxílico
10,94	10,93	10,94	745	50,64	740	60,27	742,5	55,46	168	176	172,0	2,3-pentadienóico ácido,etil éster
11,17	11,14	11,16	780	50,92	769	31,38	774,5	41,15	6142	6413	6277,5	Pirazina,2,6-dimetil
11,23	11,24	11,24	696	19,19	676	20,78	686,0	19,99	1553	1553	1553,0	3-(5-metilfúril)-N-furamidopropionamida
11,34	11,33	11,34	787	52,31	700	33,09	743,5	42,70	2904	2994	2949,0	Etilpirazina
11,54	11,54	11,54	820	30,78	821	51,16	820,5	40,97	139	154	146,5	pirazina,2,3-dimetil
12,01	12,00	12,01	827	69,56	787	35,06	807,0	52,31	127	131	129,0	pirazina,etenil/pirazina vinil-
13,06	13,06	13,06	744	23,98	739	25,76	741,5	24,87	55	58	56,5	3-Ciano,3-metil-4-oxopentanamida
13,38	13,36	13,37	889	75,99	847	60,05	868,0	68,02	114	116	115,0	furano-2-metil-
13,57	13,56	13,57	837	9,51	803	12,09	820,0	10,80	218	240	229,0	Benzeno,1-metoxo,2-metil
13,98	13,96	13,97	811	83,09	793	76,78	802,0	79,94	3220	3139	3179,5	2-furancarboxaldeido,5-metil-
14,29	14,20	14,25	582	29,09	512	17,09	547,0	23,09	51	30	40,5	Ácido benzóico,2-formil,4,6-dimetoxo - 8,8-dimetoxo-oct-2yl-éster
14,90	14,91	14,91	753	24,25	772	21,09	762,5	22,67	90	98	94,0	2-n-butilfurano/2-butilfurano
15,20	15,19	15,20	695	6,33	652	4,33	673,5	5,33	103	101	102,0	Ciclohexen,1-(-2-propenil)
15,29	15,31	15,30	856	44,64	818	21,09	837,0	32,87	322	94	208,0	Ácido benzenosulfônico,4-hydroxy
15,53	15,54	15,54	750	28,75	750	37,52	750,0	33,14	5896	6117	6006,5	pirazina,2 etil,5-metil
15,68	15,67	15,68	839	53,31	834	70,9	836,5	62,11	2442	2392	2417,0	2-furanmetanol,acetato
15,94	15,93	15,94	856	73,71	821	62,58	838,5	68,15	1189	1136	1162,5	1H-pirrol-2-carboxaldeido-1-metil
16,11	16,11	16,11	905	88,09	888	84,07	896,5	86,08	855	160	507,5	1-Propanona,1-(2-furanil)

Apêndice H – Identificação dos compostos voláteis, fibra DVB /CAR/PDMS (Continuação)

Café Sadio 30 min												
Tempo de retenção			RSI 1	Probabilidade (%) 1	RSI 2	Probabilidade (%) 2	RSI (médio)	Probabilidade (%) (médio)	Sinal Ruído			Composto
Amostra 1	Amostra 2	Média							Amostra 1	Amostra 2	Média	
16,41	16,40	16,41	824	61,18	827	70,77	825,5	65,98	252	255	253,5	Isopropenilpirazina
16,56	16,55	16,56	792	55,65	796	61,93	794,0	58,79	232	241	236,5	Isopropenilpirazina
16,70	16,69	16,70	670	17,95	685	23,78	677,5	20,87	529	544	536,5	2(1H)-Piridinone,3,6-dimetil
16,88	16,88	16,88	868	63,42	823	54,06	845,5	58,74	217	218	217,5	1H-pirrol-2-carboxaldeido-1-metil
17,11	17,11	17,11	805	46,43	822	53,97	813,5	50,20	227	229	228,0	1,4-Ciclohex-2-enedione
17,25	17,25	17,25	519	8,19	573	11,08	546,0	9,64	239	247	243,0	trans-1,10-Dimetil-trans-9-decal
17,53	17,53	17,53	820	27,81	758	18,37	789,0	23,09	236	251	243,5	2-Acetil,5-metil furano
17,71	17,70	17,71	863	50,23	891	55,5	877,0	52,87	602	570	586,0	2,5-Furanodiona
17,84	17,83	17,84	669	34,03	663	28,48	666,0	31,26	128	135	131,5	Benzenometanotiol
18,16	18,14	18,15	785	31,24	766	25,79	775,5	28,52	128	136	132,0	1-(1,2-Dimetil-ciclopent-2-enyl)etanona
18,37	18,37	18,37	920	14,31	860	38,4	890,0	26,36	47	53	50,0	1,2,4-Triazolo[4,3 a] piridina
18,60	18,61	18,61	709	38,83	750	30,18	729,5	34,51	64	65	64,5	Ciclohexanona,2-etil-2-propil
18,93	18,92	18,93	759	44,4	751	27,8	755,0	36,10	134	148	141,0	1-Butanona,1-(2-furanil)
19,20	19,19	19,20	747	48,88	704	35,28	725,5	42,08	348	357	352,5	1H-pirrol-2-carboxaldeido-1-metil
19,40	19,39	19,40	808	82,42	783	77,73	795,5	80,08	331	356	343,5	Etanona-1-(1-metil-1H-pirrol-2-yl-)
19,65	19,64	19,65	785	36,73	807	31,52	796,0	34,13	1441	1568	1504,5	Pirazina,2,6-dimetil
19,92	19,91	19,92	885	58,74	884	63,42	884,5	61,08	849	914	881,5	Furano,2,2'-metilenebis-
20,02	20,02	20,02	793	22,81	808	26,82	800,5	24,82	1295	1465	1380,0	Pirazina,3-etil-2,5-dimetil
20,17	20,17	20,17	809	29,63	882	35,82	845,5	32,73	509	565	537,0	Fenol,2-metoxo
20,55	20,53	20,54	731	10,62	804	20,09	767,5	15,36	74	85	79,5	Pirazina,2-metil-5-(1-propenil)-(Z)

Apêndice H – Identificação dos compostos voláteis, fibra DVB /CAR/PDMS (Continuação)

Café Sadio 30 min												
Tempo de retenção			RSI 1	Probabilidade (%) 1	RSI 2	Probabilidade (%) 2	RSI (médio)	Probabilidade (%) (médio)	Sinal Ruído			Composto
Amostra 1	Amostra 2	Média							Amostra 1	Amostra 2	Média	
20,79	20,78	20,79	690	6,68	706	13,37	698,0	10,03	128	133	130,5	1H-Indene,octahydro-trans
20,93	20,91	20,92	689	18,7	690	12,45	689,5	15,58	267	288	277,5	1H-pirrol-2-acetonitrilo,1-metil-
21,05	21,04	21,05	800	71,82	759	52,16	779,5	61,99	413	421	417,0	2-ciclopenteno-1- ácido carboxílico
21,41	21,41	21,41	644	23,65	564	17,42	604,0	20,54	755	791	773,0	C7H6O4
21,55	21,54	21,55	882	92,64	868	81,87	875,0	87,26	691	696	693,5	Maltol
21,63	21,62	21,63	734	31,35	735	33,92	734,5	32,64	2306	2559	2432,5	2-acetil-3-metilpirazina
21,76	21,76	21,76	644	47,77	631	26,59	637,5	37,18	175	180	177,5	3-Oxabiciclo[3.3.0]oct-6-em-2-ona, 4-metoxo-7-metil
22,04	22,04	22,04	563	23,31	546	22,07	554,5	22,69	53	36	44,5	Metanetiona,(2,5-dimetilfenil)-(2,4,6-trimetilfenil),S-oxide
22,23	22,22	22,23	864	67,7	865	56,76	864,5	62,23	147	169	158,0	1-Propanona,1-(5-metil, 2-furanil)
22,59	22,58	22,59	764	32,4	717	23,79	740,5	28,10	335	362	348,5	5H-5Metil-5,6-diciclopentapirazina
22,66	22,66	22,66	795	53,14	816	68,27	805,5	60,71	252	257	254,5	1H-pirrol-2-carboxaldeido-1-metil
23,23	23,23	23,23	733	60,48	759	38,21	746,0	49,35	438	494	466,0	1,4-Diisopropilciclohexano
23,32	23,32	23,32	680	30,59	766	69,3	723,0	49,95	354	348	351,0	6-Metoxo-2´nitroaurone
23,46	23,44	23,45	800	35,25	768	17,56	784,0	26,41	743	753	748,0	3,4-Dimetil-1H-pirrol-2-carboxaldeido
23,53	23,53	23,53	712	17,04	744	37,49	728,0	27,27	354	385	369,5	Pirazina,3,5-dietil-2-metil
23,61	23,59	23,60	882	88,24	867	76,89	874,5	82,57	620	719	669,5	3-Ciclohexen,1-amina,6(4-metilfenil)2,5-difenil-,(1à,2à 5à,6à)
23,75	23,75	23,75	876	81,42	884	86,75	880,0	84,09	455	421	438,0	Ciclopentasiloxano decametil
23,97	23,95	23,96	508	5,31	481	6,27	494,5	5,79	203	210	206,5	C12H14O5
24,14	24,13	24,14	800	45,6	813	31,59	806,5	38,60	297	309	303,0	1,4-Diisopropilciclohexano

Apêndice H – Identificação dos compostos voláteis, fibra DVB /CAR/PDMS (Continuação)

Café Sadio 30 min												
Tempo de retenção			RSI 1	Probabilidade (%) 1	RSI 2	Probabilidade (%) 2	RSI (médio)	Probabilidade (%) (médio)	Sinal Ruído			Composto
Amostra 1	Amostra 2	Média							Amostra 1	Amostra 2	Média	
24,22	24,21	24,22	755	59,11	749	37,8	752,0	48,46	463	502	482,5	1-Propanona,1-(2-furanil)
24,37	24,36	24,37	702	14,46	609	12,89	655,5	13,68	113	124	118,5	1,4-Naftalenodiol,decahydro
24,71	24,70	24,71	767	34,43	800	42,54	783,5	38,49	564	614	589,0	Furano,2-(2-furanilmetil)-5-metil
24,90	24,89	24,90	782	49,44	709	65,85	745,5	57,65	558	586	572,0	Ácido,2-furancarboxílico-3-metil, metil éster
25,18	25,16	25,17	753	19,09	745	13,08	749,0	16,09	253	275	264,0	Pirazina,2-metil-5-(1-propenil)-(Z)
25,32	25,32	25,32	678	20,96	674	34,85	676,0	27,91	86	89	87,5	Piperidina,2-(1H-pirrol,2yl)
25,47	25,46	25,47	722	10,3	748	9,78	735,0	10,04	88	97	92,5	Benzenamina,4-metoxo-N-metil
25,55	25,55	25,55	879	48,37	873	28,53	876,0	38,45	422	446	434,0	1H-Pirrol,[2.3-b]piridina,2-metil
25,65	25,63	25,64	736	23,47	772	55,68	754,0	39,58	237	244	240,5	2-Metilindoline/1H-Indol,2,3-dihydro, 2-metil
25,87	25,86	25,87	710	29,75	697	26,55	703,5	28,15	266	300	283,0	Etanona,1-(3,5-dimetilpirazinil)
25,95	25,94	25,95	602	15,54	623	21,44	612,5	18,49	167	165	166,0	Benzaldeido,2-amino-5metoxy
26,46	26,44	26,45	914	43,31	920	53,04	917,0	48,18	582	713	647,5	Furano,3-fenil
26,50	26,50	26,50	647	19,67	667	31,13	657,0	25,40	232	238	235,0	Pirazina,2,5-dimetil,3-propil
26,60	26,60	26,60	738	60,86	707	30,37	722,5	45,62	134	143	138,5	ácido butanóico,3-metil-, 2-furanilmetil-éster
26,78	26,76	26,77	728	28,87	733	56,51	730,5	42,69	93	106	99,5	Piridina,3-metil,1oxide
26,98	26,96	26,97	635	6,14	617	8,26	626,0	7,20	140	155	147,5	C12H20
27,22	27,19	27,21	734	9,05	700	20,31	717,0	14,68	62	64	63,0	2-furancarboxaldeido,5 (hydroxymetil)
27,62	27,60	27,61	602	10,66	683	27,08	642,5	18,87	146	159	152,5	4-Amino-3-metoxypirazolo [3.4d]pirimidina
27,87	27,86	27,87	714	10,77	735	8,43	724,5	9,60	171	189	180,0	(2-metil-ciclohex-2-enilidene)acetaldeido

Apêndice H – Identificação dos compostos voláteis, fibra DVB /CAR/PDMS (Continuação)

Café Sadio 30 min												
Tempo de retenção			RSI 1	Probabilidade (%) 1	RSI 2	Probabilidade (%) 2	RSI (médio)	Probabilidade (%) (médio)	Sinal Ruído			Composto
Amostra 1	Amostra 2	Média							Amostra 1	Amostra 2	Média	
28,21	28,20	28,21	855	24,44	863	41,02	859,0	32,73	286	361	323,5	2-Hydroxy-1,7-Naftiridina
28,65	28,64	28,65	857	56,49	873	46,84	865,0	51,67	133	178	155,5	4-Metilpirrolo[1.2a]pirazina
28,99	28,98	28,99	801	50,61	806	38,38	803,5	44,50	644	721	682,5	3,4-Dihydroxyacetofenona
29,17	29,16	29,17	837	78,95	766	68,4	801,5	73,68	482	465	473,5	Fenol,4-etil,2-metoxyp-Etilguayacol
29,30	29,28	29,29	799	45,3	739	33,63	769,0	39,47	342	373	357,5	2-Isopropenil-3,6-dimetilpirazina
29,67	29,66	29,67	799	41,99	808	29,09	803,5	35,54	101	108	104,5	1H-Pirrole,2-carboxaldeido,1-metil
29,85	29,84	29,85	548	10,71	547	13,46	547,5	12,09	332	344	338,0	Dietilfenilfosfine
30,26	30,26	30,26	850	40,11	875	76,58	862,5	58,35	436	464	450,0	furano,2,2'-[oxibis(metilene)]bis-
30,39	30,37	30,38	819	29,38	839	45,82	829,0	37,60	639	742	690,5	4-Hydroxy,3-metilacetofenona
30,79	30,79	30,79	846	42,72	829	30,14	837,5	36,43	2595	2658	2626,5	2-Metoxi,4-vinilfenol
31,12	31,12	31,12	625	29,12	632	36,47	628,5	32,80	193	209	201,0	4-Metoximetil,4-fenil,1-buteno
31,33	31,32	31,33	816	24,94	850	35,79	833,0	30,37	96	109	102,5	4-Metilpirrolo[1.2a]pirazina
31,65	31,65	31,65	912	97,94	915	97,69	913,5	97,82	396	341	368,5	Ciclopentasiloxano decametil
32,15	32,14	32,15	837	24,66	858	34,23	847,5	29,45	307	318	312,5	2(1H)-Quinolinona,4-metil
32,34	32,33	32,34	757	17,48	730	15,68	743,5	16,58	479	588	533,5	2-Amino,4-hydroxyquinolina
32,50	32,50	32,50	814	24,8	799	23,33	806,5	24,07	355	393	374,0	3-Piridinacarbonitrilo,6-etil,5-metil
32,61	32,61	32,61	854	23,64	811	21,87	832,5	22,76	159	159	159,0	2-Piridinamina,5-metil
32,81	32,80	32,81	755	41,56	753	44,19	754,0	42,88	243	254	248,5	1,8(2H,5H)Isoquinolinediona,6,7-dihydro-3-hydroxy
28,06	28,05	28,06	685	37,73	636	20,37	660,5	29,05	82	90	86,0	6-(5-Metilfuran-2-yl)hexan-2-ona

Apêndice H – Identificação dos compostos voláteis, fibra DVB /CAR/PDMS (Continuação)

Café Sadio 30 min												
Tempo de retenção			RSI 1	Probabilidade (%) 1	RSI 2	Probabilidade (%) 2	RSI (médio)	Probabilidade (%) (médio)	Sinal Ruído			Composto
Amostra 1	Amostra 2	Média							Amostra 1	Amostra 2	Média	
33,02	33,00	33,01	718	24,73	702	19,9	710,0	22,32	1413	1393	1403,0	4H-pirido[1,2-a]pirimidin-4-ona, 3,6-dimetil
33,11	33,09	33,10	797	58,56	792	55,75	794,5	57,16	282	284	283,0	Benzeno,4-etenil,1,2-dimetoxo
33,42	33,41	33,42	768	24,36	822	37,61	795,0	30,99	136	166	151,0	2,5-Dihydroxypropiofenona
33,80	33,78	33,79	627	10,43	670	14,9	648,5	12,67	503	520	511,5	Benzeno,1-metil-3-[(metiletil)tio]
34,08	34,06	34,07	786	34,55	730	20,02	758,0	27,29	89	81	85,0	Benzenamida,N,N-dietil
34,37	34,37	34,37	665	9,65	695	28,54	680,0	19,10	136	141	138,5	C19H23O4
34,60	34,60	34,60	591	11,35	509	9,56	550,0	10,46	94	88	91,0	Piridina,3-(3,4-dihydro-2H-pirrol-5-yl)
34,81	34,80	34,81	896	36,29	888	46,64	892,0	41,47	81	90	85,5	Bezeno,2-[1,3-butadienil]1,3,5-trimetil
35,02	35,00	35,01	775	80,81	786	82,99	780,5	81,90	618	630	624,0	à furfuralideno-à-furilmetilamina
35,28	35,27	35,28	453	14,03	502	8,26	477,5	11,15	152	141	146,5	C28H43O6
35,45	35,45	35,45	448	6,69	460	10,34	454,0	8,52	68	72	70,0	C13H20O3
35,76	35,74	35,75	740	19,71	748	36,71	744,0	28,21	145	152	148,5	Benzaldeido,2,5-difluoro,3,4-dihydroxy
36,08	36,07	36,08	689	24,55	680	26,63	684,5	25,59	189	179	184,0	1,2-Dihydro-1-demetil-harmalol
36,19	36,18	36,19	704	36,04	628	27,66	666,0	31,85	406	437	421,5	Benzonitrilo,2,4-dimetoxo
36,32	36,33	36,33	730	21,48	769	26,5	749,5	23,99	294	66	180,0	Benzaldeido,2,5-difluoro,3,4-dihydroxy
36,50	36,49	36,50	677	15,33	707	9,33	692,0	12,33	90	100	95,0	Benzimidazole,2-etil,1-propil
36,84	36,83	36,84	711	14,54	691	10,76	701,0	12,65	185	199	192,0	3-Amino,4-metil,6-metoxoquinolina
37,09	37,07	37,08	725	37,23	653	17,63	689,0	27,43	66	64	65,0	Benzimidazole,2-etil,1-propil
37,25	37,24	37,25	647	4,17	513	8,67	580,0	6,42	49	53	51,0	Despropil fentanil

Apêndice H – Identificação dos compostos voláteis, fibra DVB /CAR/PDMS (Continuação)

Café Sadio 30 min												
Tempo de retenção			RSI 1	Probabilidade (%) 1	RSI 2	Probabilidade (%) 2	RSI (médio)	Probabilidade (%) (médio)	Sinal Ruído			Composto
Amostra 1	Amostra 2	Média							Amostra 1	Amostra 2	Média	
37,56	37,55	37,56	579	4,21	593	6,78	586,0	5,50	277	271	274,0	2,2-Dibromocicloheptanona
37,72	37,70	37,71	661	31,35	723	21,29	692,0	26,32	130	135	132,5	4H-pirido[1,2-a]pirimidin-4-ona,3,6-dimetil
38,81	38,80	38,81	843	96,13	876	89,67	859,5	92,90	291	278	284,5	Ciclopentasiloxano decametil
39,08	39,07	39,08	836	56,27	843	66,84	839,5	61,56	407	352	379,5	Butilato hydroxytolueno
39,72	39,72	39,72	549	6,93	548	9,64	548,5	8,29	119	119	119,0	C13H16O2
41,10	41,10	41,10	703	30,58	890	45,32	796,5	37,95	96	80	88,0	Ácido dodecanedióico,dimetilsilil (fibra)
41,62	41,60	41,61	753	10,36	609	12,45	681,0	11,41	85	80	82,5	C13H18O
42,44	42,43	42,44	682	7,93	685	13,43	683,5	10,68	59	56	57,5	Docosano
45,26	45,25	45,26	794	88,06	838	95,88	816,0	91,97	171	176	173,5	Ciclopentasiloxano decametil
46,13	46,12	46,13	722	7,27	729	10,15	725,5	8,71	50	57	53,5	Docosano
46,29	46,28	46,29	793	26,53	794	22,2	793,5	24,37	77	62	69,5	Fenol,4-(1,1,3,3-tetrametil,butil)
46,63	46,62	46,63	773	62,07	754	53,12	763,5	57,60	90	69	79,5	n-Nonylfenol
46,93	46,90	46,92	713	31,37	609	28,79	661,0	30,08	77	66	71,5	1,3-Ciclohexadiene-1-ácido carboxílico, 2,6,6,trimetil,etil éster
51,30	51,28	51,29	877	94,73	852	93,63	864,5	94,18	2706	2704	2705,0	Cafeína
52,85	52,83	52,84	588	22,36	626	22	607,0	22,18	56	53	54,5	Hexasiloxano,dodecametil (coluna)
53,01	53,00	53,01	634	68,97	709	57,89	671,5	63,43	51	50	50,5	Ciclopentasiloxano decametil
53,42	53,42	53,42	730	59,57	740	59,97	735,0	59,77	269	294	281,5	hexadecanóico ácido, metil éster/ácido palmitico,metil éster
54,66	54,66	54,66	772	88,83	700	79,89	736,0	84,36	157	162	159,5	Ciclopentasiloxano decametil
55,66	55,65	55,66	758	36,06	709	29,9	733,5	32,98	72	63	67,5	1,5,6,7-tetrametil-3-fenilbiciclo[3.2.o]hepta, 2,6-diene

Apêndice H – Identificação dos compostos voláteis, fibra DVB /CAR/PDMS (Continuação)

Café Sadio 30 min												
Tempo de retenção			RSI 1	Probabilidade (%) 1	RSI 2	Probabilidade (%) 2	RSI (médio)	Probabilidade (%) (médio)	Sinal Ruído			Composto
Amostra 1	Amostra 2	Média							Amostra 1	Amostra 2	Média	
55,82	55,81	55,82	660	73,6	780	67,89	720,0	70,75	67	63	65,0	Ciclopentasiloxano decametil
56,88	56,87	56,88	745	72,15	743	67,89	744,0	70,02	148	163	155,5	Ciclopentasiloxano decametil
59,77	59,77	59,77	812	35,99	833	51,84	822,5	43,92	79	90	84,5	Ácido hexadecanóico, mono, (2-etilhexyl)éster

Amostras 1 e 2: se referem às réplicas de um dado ensaio; media: valor médio referente a análises em duplicata; Sinal Ruído: Sinal de intensidade (S) dividido pelo ruído(N) da linha; RSI: parâmetro de compatibilidade entre o espectro desconhecido e o espectro da biblioteca.

Apêndice I – Identificação dos compostos voláteis, fibra DVB /CAR/PDMS

Café Sadio 60 min												
Tempo de retenção			RSI 1	Probabilidade (%) 1	RSI 2	Probabilidade (%) 2	RSI (médio)	Probabilidade (%) (médio)	Sinal Ruído			Composto
Amostra 1	Amostra 2	Média							Amostra 1	Amostra 2	Média	
2,22	2,23	2,23	823	66,12	853	64,65	838,0	65,39	489	349	419,0	furano,2-metil-
3,45	3,46	3,46	837	72,62	846	72,90	841,5	72,76	93	55	74,0	furano, 2,5-dimetil
3,97	3,98	3,98	897	72,01	897	76,81	897,0	74,41	116	96	106,0	pirazina
4,16	4,17	4,17	995	42,97	928	31,71	961,5	37,34	112	108	110,0	1H-1,2,3-Triazol
4,24	4,25	4,25	800	27,52	761	15,90	780,5	21,71	4766	2665	3715,5	2,3-Dicianopropionamida
4,33	4,32	4,33	803	68,1	863	73,68	833,0	70,89	10428	8030	9229,0	Piridina
5,02	4,88	4,95	797	31,43	836	27,28	816,5	29,36	243	217	230,0	1-metil-2piperidinametanol
5,67	5,68	5,68	704	15,08	698	26,78	701,0	20,93	236	104	170,0	8-Azabicyclo[3.2.1]octan-3-ona-8-metil
6,74	6,77	6,76	902	70,75	884	62,80	893,0	66,78	50	37	43,5	Piridina,3-metil
6,90	6,90	6,90	826	37,62	809	17,82	817,5	27,72	1288	902	1095,0	4-piridinamina
7,25	7,25	7,25	813	83,2	734	75,43	773,5	79,32	297	213	255,0	Furano,2-(metoxymetil)
7,38	7,37	7,38	827	39,9	854	38,64	840,5	39,27	338	286	312,0	furfural
8,31	8,32	8,32	799	21,38	818	54,02	808,5	37,70	87	60	73,5	Furano,2-(2-propenil)-
8,87	8,73	8,80	850	49,45	836	42,66	843,0	46,06	921	877	899,0	3-furanmetanol
11,05	11,03	11,04	798	36,24	865	49,01	831,5	42,63	5023	4502	4762,5	Pirazina,2,6-dimetil
11,11	11,06	11,09	730	46,57	722	48,16	726,0	47,37	1272	1024	1148,0	3-(5-metilfúril)-N-furamidopropionamida
11,27	11,22	11,25	686	36,91	705	52,01	695,5	44,46	26,78	415	220,9	(1H)Imidazole,4-acetonitrilo
11,41	11,38	11,40	770	18,14	837	61,77	803,5	39,96	370	120	245,0	Pirazina,2,3-dimetil
11,96	11,94	11,95	792	36,65	781	24,82	786,5	30,74	81	63	72,0	Benzenamina,4-(2H-tetrazol-2-yl)

Apêndice I – Identificação dos compostos voláteis, fibra DVB /CAR/PDMS (Continuação)

Café Sadio 60 min												
Tempo de retenção			RSI 1	Probabilidade (%) 1	RSI 2	Probabilidade (%) 2	RSI (médio)	Probabilidade (%) (médio)	Sinal Ruído			Composto
Amostra 1	Amostra 2	Média							Amostra 1	Amostra 2	Média	
13,31	13,30	13,31	845	63,08	837	65,39	841,0	64,24	491	97	294,0	Furano,2-metil-
13,38	13,43	13,41	847	43,06	700	40,36	773,5	41,71	210	430	320,0	Piridina,4-etil
13,56	13,55	13,56	829	15,00	789	13,77	809,0	14,39	203	141	172,0	Fenol,2,5-dimetil
13,77	13,73	13,75	831	82,93	832	83,10	831,5	83,02	963	809	886,0	2-Furancarboxaldeido,5-metil-
14,77	14,79	14,78	724	48,55	747	66,70	735,5	57,63	146	84	115,0	2-n-Butilfurano/2-butilfurano
14,87	14,86	14,87	746	40,25	720	12,02	733,0	26,14	51	33	42,0	3(2H)-Tiofenona,dihydro-2-metil
15,21	15,07	15,14	862	26,41	830	28,57	846,0	27,49	247	133	190,0	Ácido benzenosulfônico,4-hydroxy
15,30	15,28	15,29	835	35,86	789	9,08	812,0	22,47	649	454	551,5	Pirrolidina,2-butl,1-metil
15,49	15,45	15,47	821	38,16	831	46,84	826,0	42,50	5023	3957	4490,0	Pirazina,2-etil,6-metil
15,64	15,58	15,61	848	71,93	856	78,50	852,0	75,22	2465	2050	2257,5	2-Furanmetanol,acetato
15,72	15,67	15,70	772	55,55	820	66,77	796,0	61,16	1995	1596	1795,5	Pirazina,trimetil
15,87	15,82	15,85	848	74,08	807	61,68	827,5	67,88	567	500	533,5	1H-Pirrol-2-carboxaldeido,1-metil
16,07	16,04	16,06	892	90,71	857	84,81	874,5	87,76	171	178	174,5	1-Propanona,1-(2-furanil)
16,37	16,36	16,37	829	46,86	773	33,70	801,0	40,28	167	185	176,0	Pirazina,(1-metiletetil)/isopropenilpirazina
16,52	16,51	16,52	772	72,22	783	53,79	777,5	63,01	195	427	311,0	1H-Pirrol-2-acetonitrilo,1-metil
16,65	16,62	16,64	744	58,85	766	49,54	755,0	54,20	291	229	260,0	4(H)-Piridina,N-acetil
17,12	16,97	17,05	735	11,09	789	21,00	762,0	16,05	44	66	55,0	2-Ciclopenten-1-ona,2-hydroxy,3-metil
17,21	17,20	17,21	795	69,16	775	36,68	785,0	52,92	144	105	124,5	Etanona,1-(2-piridinil)
17,49	17,48	17,49	947	48,02	848	54,89	897,5	51,46	218	133	175,5	2-Acetil,5-metilfurano

Apêndice I – Identificação dos compostos voláteis, fibra DVB /CAR/PDMS (Continuação)

Café Sadio 60 min												
Tempo de retenção			RSI 1	Probabilidade (%) 1	RSI 2	Probabilidade (%) 2	RSI (médio)	Probabilidade (%) (médio)	Sinal Ruído			Composto
Amostra 1	Amostra 2	Média							Amostra 1	Amostra 2	Média	
17,52	17,49	17,51	884	39,64	866	38,57	875,0	39,11	645	466	555,5	2,2' Bifurano
17,64	17,61	17,63	823	22,03	883	67,39	853,0	44,71	361	245	303,0	2,5-Furandiona
17,80	17,78	17,79	696	35,69	723	21,28	709,5	28,49	54	37	45,5	Benzenometanotiol
18,06	18,05	18,06	674	31,12	697	34,23	685,5	32,68	125	92	108,5	1H-Pirrol-2-carboxaldeido-1-metil
18,11	18,11	18,11	803	34,33	823	53,86	813,0	44,10	137	90	113,5	Ciclohexen,1-metil-3-(1-metiletil)
18,37	18,37	18,37	604	17,31	585	11,06	594,5	14,19	50	34	42,0	Biciclo[3.1.0]hex-2-em-2ol,2-metil-5-(1-metiletil)., (1à,2à,5à)
18,52	18,47	18,50	722	16,97	740	19,82	731,0	18,40	67	55	61,0	2-Ciclopenten-1-ona,3-etil,2-hydroxy
18,71	18,66	18,69	679	19,2	833	24,27	756,0	21,74	100	95	97,5	Fenol,2-metil
19,16	19,03	19,10	860	98,08	839	96,62	849,5	97,35	380	234	307,0	Etanona,1-(1-H-Pirrol-2-yl-)
***	19,15	19,15	***	***	838	28,48	838,0	28,48	***	90	90,0	Isopropenilpirazina
19,35	19,33	19,34	842	81,14	868	81,07	855,0	81,11	373	272	322,5	Etanona,1-(1-metil, 1H-Pirrol,2yl)
19,42	19,40	19,41	701	12,06	6,94	9,84	354,0	10,95	170	129	149,5	Ciclohexanona,2-(1-metiletilidene)
19,61	19,59	19,60	828	57,95	821	42,33	824,5	50,14	1062	700	881,0	Pirazina,2,6-dietil
19,90	19,88	19,89	891	45,47	895	56,05	893,0	50,76	1103	686	894,5	Furano,2,2'-metilenebis-
19,99	19,98	19,99	770	16,05	824	36,68	797,0	26,37	1171	686	928,5	2,3-Dimetil,5-etilpirazina
20,15	20,10	20,13	828	34,79	880	17,40	854,0	26,10	762	496	629,0	Fenol, 4-metoxo
20,19	20,16	20,18	628	12,7	707	28,28	667,5	20,49	868	525	696,5	2-Furanmetanol,propanoato
20,52	20,51	20,52	741	14,18	736	11,68	738,5	12,93	68	39	53,5	Benzenmetanol,à metil
20,79	20,75	20,77	760	16,67	760	18,01	760,0	17,34	295	214	254,5	2-Ciclohexen,1-ona,4,5-dimetil

Apêndice I – Identificação dos compostos voláteis, fibra DVB /CAR/PDMS (Continuação)

Café Sadio 60 min												
Tempo de retenção			RSI 1	Probabilidade (%) 1	RSI 2	Probabilidade (%) 2	RSI (médio)	Probabilidade (%) (médio)	Sinal Ruído			Composto
Amostra 1	Amostra 2	Média							Amostra 1	Amostra 2	Média	
20,90	20,89	20,90	703	26,05	720	12,90	711,5	19,48	312	190	251,0	1H-Pirrol-2-acetonitrilo,1-metil
21,02	20,98	21,00	771	64,08	763	44,57	767,0	54,33	374	315	344,5	1-Ciclopenten,1 ácido carboxílico
21,39	21,35	21,37	843	82,92	837	56,76	840,0	69,84	741	745	743,0	Maltol
21,59	21,55	21,57	700	24,4	751	30,40	725,5	27,40	469	343	406,0	2-Acetil-3-metilpirazina
21,73	21,66	21,70	600	21,7	611	11,74	605,5	16,72	179	410	294,5	C9H14O3
22,20	22,18	22,19	891	71,75	824	70,40	857,5	71,08	223	158	190,5	1-Propanona,1-(5-metil, 2-furanil)
22,48	22,30	22,39	812	30,22	837	45,79	824,5	38,01	382	229	305,5	1H-pirrol-2-carboxaldeido-1-metil
22,54	22,52	22,53	712	26,78	701	12,19	706,5	19,49	390	254	322,0	Etanona,1-(2-piridinil),- oxime
22,70	22,69	22,70	560	12,12	597	9,78	578,5	10,95	122	101	111,5	O-Bromoatropina
22,97	22,96	22,97	530	14,04	568	6,76	549,0	10,40	69	54	61,5	C11H16N2O2
23,15	23,15	23,15	878	10,08	784	8,09	831,0	9,09	211	156	183,5	1H-Indol,5-ol
23,28	23,24	23,26	736	31,87	836	16,52	786,0	24,20	632	508	570,0	1-Piperidino-1-etenil,ciclopropano
23,44	23,41	23,43	777	25,28	789	26,58	783,0	25,93	375	304	339,5	3,4-Dimetil,1H-Pirrol-2-carboxaldeido
23,74	23,73	23,74	888	94,14	890	87,67	889,0	90,91	348	247	297,5	Ciclopentasiloxano,decametil
23,94	23,94	23,94	645	6,03	592	11,44	618,5	8,74	173	124	148,5	4,4,8-trimetil-non-5-enal
24,12	24,12	24,12	775	21,09	609	13,44	692,0	17,27	292	250	271,0	1,4-Diisopropil ciclohexeno
24,34	24,32	24,33	673	15,79	635	11,89	654,0	13,84	148	108	128,0	1,4-Naftalenodiol,decahydro-,(1á,4á,4aa,8aa)
24,48	24,41	24,45	659	16,82	599	9,71	629,0	13,27	92	147	119,5	Benzenamina,4-etoxy
24,68	24,67	24,68	889	60,41	876	52,70	882,5	56,56	1049	774	911,5	Furano,2-(2-furanilmetil)-5-metil

Apêndice I – Identificação dos compostos voláteis, fibra DVB /CAR/PDMS (Continuação)

Café Sadio 60 min												
Tempo de retenção			RSI 1	Probabilidade (%) 1	RSI 2	Probabilidade (%) 2	RSI (médio)	Probabilidade (%) (médio)	Sinal Ruído			Composto
Amostra 1	Amostra 2	Média							Amostra 1	Amostra 2	Média	
24,87	24,86	24,87	790	27,9	690	15,50	740,0	21,70	318	258	288,0	2-Ácido furancarboxílico,3-metil,metiléster
25,14	25,11	25,13	790	20,45	783	20,90	786,5	20,68	337	246	291,5	Pirazina,2-metil-5-(1-propenil)-(Z)
25,29	25,28	25,29	711	13,44	709	17,66	710,0	15,55	216	71	143,5	Benzaldeido,4-etoxy
25,44	25,42	25,43	802	17,09	787	12,88	794,5	14,99	100	51	75,5	4,5-Dimetil-3H-isobenzofuran-2-ona-
25,60	25,59	25,60	756	29,97	751	30,92	753,5	30,45	237	150	193,5	2-Metilindoline
25,75	25,73	25,74	860	44,97	808	15,75	834,0	30,36	231	161	196,0	Quinoxaline
25,92	25,88	25,90	622	8,77	609	12,35	615,5	10,56	182	131	156,5	Benzaldeido,2-amino,5-metoxy
26,19	***	26,19	848	41,18	***	***	848,0	41,18	82	***	82,0	1,2-Benzenodiol
26,43	26,40	26,42	910	53,26	858	14,20	884,0	33,73	584	401	492,5	Furano,3-fenil
26,47	26,43	26,45	723	30,07	672	27,52	697,5	28,80	206	255	230,5	Pirazina,2,5-dimetil-3-(1-propenil)-,(Z)
26,58	26,58	26,58	802	68,27	739	48,49	770,5	58,38	282	246	264,0	Ácido pentanóico,2-furanilmetiléster
26,73	26,73	26,73	607	9,78	625	11,33	616,0	10,56	93	57	75,0	3,4,5,6,7,8-hexahydro-2H-chromene
26,94	26,93	26,94	530	7,89	592	9,88	561,0	8,89	175	131	153,0	[1,1'-Biciclohexil]-3-ol
27,18	27,16	27,17	781	17,92	880	16,81	830,5	17,37	56	34	45,0	7(1H)-Quinolone,2,3,4,4,5,6-hexahydro,1-metil
27,59	27,58	27,59	648	17,68	600	13,44	624,0	15,56	158	103	130,5	5-Allyl-2-amino-4-hydroxy-6-metilpirimidina
27,76	27,74	27,75	630	8,61	578	12,25	604,0	10,43	226	142	184,0	Imidazole, 4-trifluoro-acetil
28,04	28,04	28,04	609	9,02	613	9,56	611,0	9,29	70	52	61,0	6-(5-Metilfurano-2-yl)-hexan-2-ona
28,19	28,18	28,19	841	24,31	851	30,01	846,0	27,16	384	261	322,5	2-Hydroxy,1,7-naftiridina
28,62	28,60	28,61	819	18,86	854	31,92	836,5	25,39	202	171	186,5	4-Metilpirrolo[1.2a]pirazina
28,96	28,92	28,94	795	35,99	789	23,37	792,0	29,68	778	595	686,5	3,4-Dihydroxyacetofenona

Apêndice I – Identificação dos compostos voláteis, fibra DVB /CAR/PDMS (Continuação)

Café Sadio 60 min												
Tempo de retenção			RSI 1	Probabilidade (%) 1	RSI 2	Probabilidade (%) 2	RSI (médio)	Probabilidade (%) (médio)	Sinal Ruído			Composto
Amostra 1	Amostra 2	Média							Amostra 1	Amostra 2	Média	
29,16	29,15	29,16	830	76,16	815	70,93	822,5	73,55	1035	879	957,0	Fenol,4-etil,2-metoxyp-Etilguayacol
29,83	29,80	29,82	515	16,7	671	17,79	593,0	17,25	267	178	222,5	C13H20O3
30,26	30,23	30,25	863	61,95	862	76,39	862,5	69,17	741	559	650,0	Furano,2,2'-[oxibis(metilene)]bis-
30,38	30,35	30,37	887	30,21	884	42,46	885,5	36,34	944	604	774,0	4-Hydroxy,2-metilacetofenona
30,77	30,72	30,75	841	26,82	860	43,74	850,5	35,28	2281	1766	2023,5	2-Metoxyp,4-vinilfenol
31,09	31,05	31,07	622	33,02	602	29,48	612,0	31,25	308	188	248,0	4-Metoxymetil,-4-fenil,1-buteno
31,29	31,26	31,28	859	36,97	822	34,19	840,5	35,58	223	153	188,0	4-Metilpirrolo[1.2a]pirazina
31,40	31,42	31,41	815	38,18	817	16,34	816,0	27,26	311	46	178,5	2,7-Naftalenodiol
31,64	31,64	31,64	896	97,81	876	89,96	886,0	93,89	333	307	320,0	Ciclohexasiloxano,dodecametil
32,12	32,10	32,11	799	19,26	810	15,21	804,5	17,24	531	366	448,5	2(1H)-Quinolinona,4-metil
32,33	32,30	32,32	753	25,09	731	20,12	742,0	22,61	621	429	525,0	2-Amino,4-hydroxyquinolina
32,48	32,45	32,47	832	48,52	871	32,78	851,5	40,65	312	229	270,5	3-Piridinacarbonitrilo,6-etil,5-metil
32,79	32,78	32,79	696	24,45	694	13,45	695,0	18,95	244	147	195,5	1,8(2H,5H)Isoquinolinediona,6,7-dihydro-3-hydroxy
33,00	32,99	33,00	703	37,47	748	23,93	725,5	30,70	1271	962	1116,5	4H-pirido[1,2-a]pirimidin-4-ona,3,6-dimetil
33,10	33,09	33,10	805	62,43	844	83,21	824,5	72,82	342	209	275,5	Benzeno,4-etenil,1,2-dimetoxyp
33,29	33,27	33,28	818	12,9	791	10,99	804,5	11,95	344	44	194,0	2',4'-Dihydroxy,3-metilacetofenona
33,41	33,38	33,40	831	50,6	861	28,11	846,0	39,36	192	103	147,5	2,5-Dihydroxypropiofenona
33,76	33,75	33,76	704	27,91	700	24,31	702,0	26,11	553	350	451,5	Benzeno,1-metil-3-[(metiletil)tio]
33,95	33,91	33,93	784	14,52	720	9,09	752,0	11,81	268	199	233,5	Furano,2-propil
34,35	34,34	34,35	634	13,89	502	8,37	568,0	11,13	94	83	88,5	C12H18O

Apêndice I – Identificação dos compostos voláteis, fibra DVB /CAR/PDMS (Continuação)

Café Sadio 60 min												
Tempo de retenção			RSI 1	Probabilidade (%) 1	RSI 2	Probabilidade (%) 2	RSI (médio)	Probabilidade (%) (médio)	Sinal Ruído			Composto
Amostra 1	Amostra 2	Média							Amostra 1	Amostra 2	Média	
34,64	34,59	34,62	792	16	758	10,86	775,0	13,43	80	71	75,5	1-H-Benzaimidazol,2,5-dimetil,-
34,79	34,80	34,80	884	40,09	882	36,95	883,0	38,52	76	56	66,0	Benzeno,2-(1,3-Butadienil)-1,3,5-trimetil
35,00	34,98	34,99	781	79,76	785	81,39	783,0	80,58	566	394	480,0	à furfuriliden-à-furilmetilamina
35,24	35,23	35,24	556	13,9	476	13,09	516,0	13,50	115	83	99,0	C16H24BRN3
35,44	35,42	35,43	475	5,31	505	14,34	490,0	9,83	76	50	63,0	C15H18O4
35,75	35,74	35,75	738	15,87	751	19,35	744,5	17,61	162	106	134,0	Benzaldeido,2,5-difluoro-3,4-dihydroxy
36,06	36,05	36,06	717	11,69	773	16,79	745,0	14,24	390	243	316,5	2H-Isoindole,4,5,6,7-tetrametil
36,32	36,31	36,32	700	20,09	784	18,29	742,0	19,19	84	53	68,5	Tiofeno,2-(fenilmetil)-
36,49	36,49	36,49	730	11,25	609	9,78	669,5	10,52	130	87	108,5	Benzeno,2-(2-Butenil)-1,3,5-trimetil
36,83	36,82	36,83	701	18,18	695	15,69	698,0	16,94	249	156	202,5	3-Amino,4-metil,6-metoxiquinolina
37,07	37,02	37,05	715	11,36	726	14,48	720,5	12,92	74	47	60,5	C30H50N2O2
37,24	37,22	37,23	489	9,49	399	6,90	444,0	8,20	83	49	66,0	C18H28O4
37,55	37,54	37,55	510	8,23	577	9,09	543,5	8,66	316	161	238,5	9,9'-Bifenantreno,octacosahydro
37,69	37,69	37,69	680	36,7	665	28,90	672,5	32,80	160	106	133,0	4H-pirido[1,2-a]pirimidin-4-ona,3,6-dimetil
38,80	38,80	38,80	828	93,72	780	95,89	804,0	94,81	266	341	303,5	Cicloheptasoloxano,decametil
39,07	39,07	39,07	841	59,18	768	36,98	804,5	48,08	297	58	177,5	Butilato hydroxytolueno
39,62	39,63	39,63	695	45,2	662	17,44	678,5	31,32	511	350	430,5	Naftaleno,1,2,3,4-tetrahydro-1,6-dimetil,-4-(metiletil)-,(1S-cis)
39,72	39,70	39,71	655	8,61	500	7,89	577,5	8,25	151	91	121,0	5-Amino,6,8-dimetoxiquinolina
40,67	40,66	40,67	832	41,17	802	20,89	817,0	31,03	82	44	63,0	1-Naftalenamina,N,N-dimetil

Apêndice I – Identificação dos compostos voláteis, fibra DVB /CAR/PDMS (Continuação)

Café Sadio 60 min												
Tempo de retenção			RSI 1	Probabilidade (%) 1	RSI 2	Probabilidade (%) 2	RSI (médio)	Probabilidade (%) (médio)	Sinal Ruído			Composto
Amostra 1	Amostra 2	Média							Amostra 1	Amostra 2	Média	
41,10	41,09	41,10	715	26,83	777	68,25	746,0	47,54	83	51	67,0	Ácido dodecadenóico,bis(terbutil, dimetil-silil)-éster(fibra)
41,61	41,59	41,60	783	13,02	709	11,09	746,0	12,06	63	39	51,0	Megastigmatrienone
42,42	42,42	42,42	557	11,53	609	10,20	583,0	10,87	63	38	50,5	Docosano
45,25	45,25	45,25	793	88,46	766	87,90	779,5	88,18	192	154	173,0	Cicloheptasoloxano,decametil
46,13	46,12	46,13	714	13,87	700	12,09	707,0	12,98	57	27	42,0	Docosano
46,28	46,28	46,28	806	22,11	786	14,70	796,0	18,41	59	29	44,0	Fenol,4-(1,1,3,3-tetrametilbutil)
46,62	46,62	46,62	759	45,73	702	37,04	730,5	41,39	67	37	52,0	n-Nonylfenol
46,91	46,91	46,91	684	23,47	685	12,29	684,5	17,88	61	37	49,0	n-Nonylfenol
47,39	47,37	47,38	603	51,02	689	56,78	646,0	53,90	62	58	60,0	Octasoloxano,hexadecametil(fibra)
51,31	51,16	51,24	845	89,77	855	93,26	850,0	91,52	3044	2171	2607,5	Cafeína
52,84	52,82	52,83	545	28,85	600	30,09	572,5	29,47	78	62	70,0	Cicloheptasiloxano,decametil
53,42	53,42	53,42	738	78,13	751	46,03	744,5	62,08	491	255	373,0	Ácido hexadecanóico,metil éster
54,66	54,66	54,66	783	88,56	769	78,90	776,0	83,73	177	119	148,0	Cicloheptasiloxano,decametil
55,65	55,66	55,66	762	20,32	765	24,62	763,5	22,47	212	50	131,0	1,5,6,7-tetrametil-3-fenilbicyclo[3.2.0]hepta,2,6-diene
55,81	55,81	55,81	673	72,74	698	67,89	685,5	70,32	82	50	66,0	Cicloheptasiloxano,decametil
56,27	56,28	56,28	786	13,81	764	10,96	775,0	12,39	110	42	76,0	Ácido 7,10-octadecanóico,metiléster
56,87	56,87	56,87	787	89,09	709	81,05	748,0	85,07	180	126	153,0	Cicloheptasiloxano,decametil
57,71	57,70	57,71	890	56,78	756	57,29	823,0	57,04	75	54	64,5	Cicloheptasiloxano,decametil
58,52	58,51	58,52	789	65,89	753	63,09	771,0	64,49	168	112	140,0	Cicloheptasiloxano,decametil
59,03	59,03	59,03	609	43,87	599	44,43	604,0	44,15	61	56	58,5	Cicloheptasiloxano,decametil

Apêndice I – Identificação dos compostos voláteis, fibra DVB /CAR/PDMS (Continuação)

Café Sadio 60 min												
Tempo de retenção			RSI 1	Probabilidade (%) 1	RSI 2	Probabilidade (%) 2	RSI (médio)	Probabilidade (%) (médio)	Sinal Ruído			Composto
Amostra 1	Amostra 2	Média							Amostra 1	Amostra 2	Média	
59,27	59,26	59,27	890	56,77	749	51,23	819,5	54,00	57	30	43,5	Cicloheptasiloxano,decametil
59,77	59,77	59,77	810	55,29	800	54,62	805,0	54,96	135	89	112,0	Ácido hexadecanóico,mono,(2-etilhexyl)éster
60,10	60,10	60,10	704	67,9	700	77,90	702,0	72,90	125	76	100,5	Cicloheptasiloxano,decametil

Amostras 1 e 2: se referem às réplicas de um dado ensaio; media: valor médio referente a análises em duplicata; Sinal Ruído: Sinal de intensidade (S) dividido pelo ruído(N) da linha; RSI: parâmetro de compatibilidade entre o espectro desconhecido e o espectro da biblioteca.

Apêndice J – Identificação dos compostos voláteis, fibra DVB /CAR/PDMS

Café Sadio 90 min												
Tempo de retenção			RSI 1	Probabilidade (%) 1	RSI 2	Probabilidade (%) 2	RSI (médio)	Probabilidade (%) (médio)	Sinal Ruído			Composto
Amostra 1	Amostra 2	Média							Amostra 1	Amostra 2	Média	
2,22	2,22	2,22	842	54,45	831	67,46	836,5	60,96	693	824	758,5	Furano,2-metil
3,46	3,45	3,46	858	68,98	870	75,81	864,0	72,40	117	134	125,5	Furano,2,5-dimetil
3,96	3,96	3,96	705	42,34	809	32,09	757,0	37,22	145	162	153,5	Pirazina
4,26	4,27	4,27	773	23,85	752	26,8	762,5	25,33	7997	8720	8358,5	2,3-Dicianopropionamida
4,33	4,33	4,33	850	66,24	780	55,08	815,0	60,66	12882	13148	13015,0	Piridina
4,85	4,86	4,86	807	21,56	797	21,12	802,0	21,34	460	530	495,0	1-Metil-2-piperidinametanol
5,61	5,60	5,61	709	23,03	679	18,56	694,0	20,80	167	234	200,5	8-Azabicyclo[3.2.1]octan-3-one,8-metil
6,71	6,69	6,70	780	60,49	827	42,8	803,5	51,65	53	70	61,5	Piridina,3-metil
6,90	6,88	6,89	796	25,62	817	23,34	806,5	24,48	1185	1403	1294,0	4-Piridinamina
7,25	7,25	7,25	771	79,05	784	74,89	777,5	76,97	185	203	194,0	Furano 2-(metoxymetil)/Furfuril metil eter
7,36	7,36	7,36	847	36,85	841	27,9	844,0	32,38	167	187	177,0	Furfural
		7,36	856	36,85	852	36,43	854,0	36,64			177,0	3-Furaldeido
8,31	8,30	8,31	794	30,01	798	31,13	796,0	30,57	100	115	107,5	Furano,2-(2-propenil)-
8,70	8,73	8,72	853	67,34	842	47,74	847,5	57,54	580	620	600,0	3-Furanmetanol
9,00	8,99	9,00	820	34,79	824	37,19	822,0	35,99	38	54	46,0	1H-Pirrol,2,5-dimetil
9,94	9,94	9,94	878	47,46	886	46,9	882,0	47,18	78	81	79,5	1,3,5,7, Ciclooctatetraeno
10,56	10,54	10,55	694	13,67	711	14,57	702,5	14,12	59	71	65,0	2-n-Butilfurano
11,03	11,02	11,03	808	32,55	798	33,76	803,0	33,16	1075	1256	1165,5	Pirazina,2,6-dimetil
11,10	11,12	11,11	889	69,36	863	57,73	876,0	63,55	3123	3868	3495,5	Etanona,1-(2-furanil)-

Apêndice J – Identificação dos compostos voláteis, fibra DVB /CAR/PDMS (Continuação)

Café Sadio 90 min												
Tempo de retenção			RSI 1	Probabilidade (%) 1	RSI 2	Probabilidade (%) 2	RSI (médio)	Probabilidade (%) (médio)	Sinal Ruído			Composto
Amostra 1	Amostra 2	Média							Amostra 1	Amostra 2	Média	
11,19	11,20	11,20	671	25,07	687	34,48	679,0	29,78	2676	3056	2866,0	Etilpirazina
11,36	11,37	11,37	662	42,16	632	33,19	647,0	37,68	359	421	390,0	1-Hepten,6-ona,2-metil
11,95	11,96	11,96	855	33,93	807	25,68	831,0	29,81	60	66	63,0	1H-Pirrol,2,4-dimetil
12,12	12,13	12,13	509	7,89	609	14,56	559,0	11,23	48	58	53,0	C15H24
13,25	13,25	13,25	835	32,25	825	36,48	830,0	34,37	471	593	532,0	Piridina,3-etil
13,54	13,55	13,55	788	17,14	808	11,58	798,0	14,36	173	209	191,0	Fenol,2,3-dimetil
13,71	13,72	13,72	800	87,50	819	70,91	809,5	79,21	260	292	276,0	2-Furancarboxaldeido,5-metil
14,40	14,40	14,40	978	70,14	985	73,52	981,5	71,83	61	70	65,5	Metil,2-furoato/2-Furancarboxaldeido ácido, metil eter
14,72	14,70	14,71	716	32,83	789	73,4	752,5	53,12	42	53	47,5	2n-Butilfurano
14,84	14,84	14,84	778	52,48	741	35,41	759,5	43,95	30	174	102,0	3(2H)-Tiofenona,dihydro,2-metil
15,16	15,18	15,17	875	32,90	864	31,8	869,5	32,35	358	453	405,5	Ácido benzenosulfonico,4-hidroxy/Fenol
15,44	15,46	15,45	813	49,42	825	59,27	819,0	54,35	4655	5265	4960,0	Pirazina,2-etil,6-metil
15,58	15,60	15,59	881	68,66	837	47	859,0	57,83	2211	2457	2334,0	2-Furanmetanol, acetato
15,67	15,68	15,68	767	37,11	807	60,45	787,0	48,78	1796	2158	1977,0	Pirazina,trimetil
15,83	15,84	15,84	817	72,51	782	61,14	799,5	66,83	420	478	449,0	1H-Pirrol-2-carboxaldeido,1-metil
16,03	16,05	16,04	870	73,00	730	73,87	800,0	73,44	284	300	292,0	1-Propanona,1-(2-furanil)
16,21	16,22	16,22	774	54,27	746	57,99	760,0	56,13	174	202	188,0	Pirrol,4-etil,2-metil
16,34	16,34	16,34	729	54,42	775	34,3	752,0	44,36	115	135	125,0	1H-Pirrol-2-acetinitrilo,1-metil
16,49	16,49	16,49	773	50,24	774	52,98	773,5	51,61	385	78	231,5	Isopropenilpirazina
16,61	16,62	16,62	694	22,78	735	21,25	714,5	22,02	239	273	256,0	4(H)-Piridina,N acetil

Apêndice J – Identificação dos compostos voláteis, fibra DVB /CAR/PDMS (Continuação)

Café Sadio 90 min												
Tempo de retenção			RSI 1	Probabilidade (%) 1	RSI 2	Probabilidade (%) 2	RSI (médio)	Probabilidade (%) (médio)	Sinal Ruído			Composto
Amostra 1	Amostra 2	Média							Amostra 1	Amostra 2	Média	
16,96	16,96	16,96	816	20,83	836	24,86	826,0	22,85	70	88	79,0	1,3, Ciclohexanediona
17,18	17,19	17,19	775	69,93	798	66,99	786,5	68,46	131	161	146,0	Etanona,1-(2-piridinil)-
17,48	17,49	17,49	934	90,17	940	97,25	937,0	93,71	211	253	232,0	2-Acetil-5-metilfurano
17,60	17,61	17,61	766	22,11	757	24,52	761,5	23,32	202	231	216,5	2,5-Furaodiona
17,89	17,90	17,90	698	14,95	609	13,89	653,5	14,42	79	102	90,5	4-Piridinamina
18,09	18,10	18,10	765	34,26	734	44,95	749,5	39,61	124	155	139,5	1-(1,2-dimetil ciclopenten-2-enyl)-etanona
18,14	18,14	18,14	774	39,05	742	45,21	758,0	42,13	251	313	282,0	Piridina,3-propil
18,26	18,26	18,26	624	54,28	623	55,23	623,5	54,76	90	114	102,0	1H-Pirrol-2,5-diona,1-[2-propenil]
18,35	18,36	18,36	713	13,53	767	30,17	740,0	21,85	65	83	74,0	Benzenoetanol
18,48	18,49	18,49	720	29,90	819	25,33	769,5	27,62	89	100	94,5	4a-(1-Hydroxy-etil)-hexahidrobzeno [1,3]dioxin-4-ona
18,75	18,75	18,75	642	13,25	683	31,89	662,5	22,57	175	204	189,5	5-Hexen-2-ona,5-metil,3-metilene
19,13	19,13	19,13	855	23,61	805	36,05	830,0	29,83	346	370	358,0	Etanona,1-(1H pirrol-2-yl)-
19,33	19,34	19,34	807	66,60	822	71,5	814,5	69,05	365	416	390,5	Etanona,1-(1-metil,1H-pirrol-2-yl)-
19,40	19,41	19,41	750	10,52	743	8,9	746,5	9,71	183	213	198,0	Furano,3-pentil
19,58	19,59	19,59	829	45,69	829	37,07	829,0	41,38	882	1131	1006,5	Pirazina,2,6-dietil
19,88	19,89	19,89	880	66,68	891	69,91	885,5	68,30	1132	1361	1246,5	Furano,2,2-metilene-bis
19,96	19,97	19,97	848	48,24	817	31,77	832,5	40,01	1113	1354	1233,5	Pirazina,3-etil-2,5-dimetil
20,13	20,14	20,14	827	37,92	858	48,89	842,5	43,41	892	1058	975,0	Fenol,2-metoxo
20,54	20,45	20,50	604	16,12	607	12,24	605,5	14,18	65	77	71,0	Benzeno,1-etil-2,4,5-trimetil
20,80	20,81	20,81	764	17,84	724	19,31	744,0	18,58	490	513	501,5	2-Ciclohexen-1-ona,4,4-dimetil

Apêndice J – Identificação dos compostos voláteis, fibra DVB /CAR/PDMS (Continuação)

Café Sadio 90 min												
Tempo de retenção			RSI 1	Probabilidade (%) 1	RSI 2	Probabilidade (%) 2	RSI (médio)	Probabilidade (%) (médio)	Sinal Ruído			Composto
Amostra 1	Amostra 2	Média							Amostra 1	Amostra 2	Média	
20,88	20,89	20,89	765	44,32	728	32,93	746,5	38,63	1343	1521	1432,0	1,5-Dimetil-2-pirrolecarbonitrilo
21,37	21,37	21,37	814	68,74	743	44,78	778,5	56,76	691	769	730,0	Maltol
21,56	21,56	21,56	759	46,64	745	50,83	752,0	48,74	367	405	386,0	2-Acetil,3-metilpirazina
21,69	21,70	21,70	692	47,47	689	35,89	690,5	41,68	217	240	228,5	3-Oxabiciclo[3.3.0]octan-2-one, 7-metilene,4-metoxo
22,17	22,18	22,18	818	24,08	832	22,94	825,0	23,51	255	258	256,5	1-Propanona,1-(5-metil,2-furanil)
22,51	22,51	22,51	704	18,65	709	14,53	706,5	16,59	493	564	528,5	Etanona,1-(2-piridinil)-,oxime
22,68	22,68	22,68	640	10,27	640	9,63	640,0	9,95	201	214	207,5	C17H23NO3
22,94	22,94	22,94	810	50,62	713	24,11	761,5	37,37	86	113	99,5	1H-Pirrol-2-carboxaldeido
23,11	23,13	23,12	744	10,06	849	20,02	796,5	15,04	277	316	296,5	3H-Indazol-3-ona-1,2-dihidro-1-metil
23,23	23,24	23,24	801	45,66	858	43,38	829,5	44,52	618	711	664,5	1-Piperidino-1-etenil-ciclopropano
23,41	23,41	23,41	792	38,85	787	24,73	789,5	31,79	330	362	346,0	3,4-dimetil-1H-Pirrol-2-carboxaldeido
23,48	23,49	23,49	723	25,91	741	18,9	732,0	22,41	1273	1581	1427,0	Pirazina,3,5-dietil-2-metil
23,72	23,73	23,73	891	91,54	808	84,52	849,5	88,03	270	258	264,0	Ciclopentasiloxano,decametil
23,92	23,92	23,92	774	10,90	553	12,92	663,5	11,91	116	135	125,5	2-Acetil,3-metilpirazina
24,10	24,12	24,11	749	27,81	752	21,12	750,5	24,47	254	308	281,0	1,4-Diisopropil ciclohexano
24,20	24,17	24,19	747	44,96	***	***	747,0	44,96	257	255	256,0	Fenol,4-etil
24,31	24,32	24,32	672	36,71	657	19,09	664,5	27,90	201	190	195,5	1-(2-Metoxo-3-pirazinil)-1-etanona
24,45	24,45	24,45	660	12,54	537	19,9	598,5	16,22	160	418	289,0	Benzenamina,4-metoxo
24,67	24,68	24,68	904	64,19	914	68,86	909,0	66,53	1371	1522	1446,5	Furano,2-(2-furanilmetil)-5-metil-
24,86	24,86	24,86	609	12,33	639	9,87	624,0	11,10	244	256	250,0	Ácido,3-furancarboxilico,2-metil,metil éster

Apêndice J – Identificação dos compostos voláteis, fibra DVB /CAR/PDMS (Continuação)

Café Sadio 90 min												
Tempo de retenção			RSI 1	Probabilidade (%) 1	RSI 2	Probabilidade (%) 2	RSI (médio)	Probabilidade (%) (médio)	Sinal Ruído			Composto
Amostra 1	Amostra 2	Média							Amostra 1	Amostra 2	Média	
24,96	24,97	24,97	734	28,38	761	22,35	747,5	25,37	221	216	218,5	2-Ciclohexen-1-ona,4,4,6-trimetil
25,11	25,11	25,11	817	38,87	806	28,9	811,5	33,89	467	510	488,5	Pirazina,2-metil-5-(2-propenil)
25,39	25,39	25,39	794	18,25	813	30,52	803,5	24,39	96	283	189,5	Indol,5-ol
25,55	25,55	25,55	748	26,63	715	34,8	731,5	30,72	183	187	185,0	Indole,,2,3-dihydro-2-metil
25,71	25,71	25,71	792	50,85	766	30,9	779,0	40,88	225	238	231,5	5,6,7,8-Tetrahydroquinoxaline
25,89	25,90	25,90	598	10,00	662	9,53	630,0	9,77	153	188	170,5	C11H18O2
26,02	26,02	26,02	780	31,02	763	37,48	771,5	34,25	101	147	124,0	2-propanal,2-metil,3-fenil
26,14	26,14	26,14	779	38,90	****	****	779,0	38,90	86	147	116,5	1,2-Benzenodiol
26,40	26,41	26,41	879	28,46	890	50,86	884,5	39,66	545	518	531,5	Furano,3-fenil
26,45	26,45	26,45	587	10,34	695	17,89	641,0	14,12	234	256	245,0	2(1H)-Naftalenona,3,4,5,6,7,8-hexahydro
26,56	26,58	26,57	811	53,60	808	64,1	809,5	58,85	221	219	220,0	Furfuril,pentanoato/Ácido pentanóico, 2-furanilmetil éster
26,71	26,71	26,71	600	26,04	615	6,09	607,5	16,07	103	62	82,5	C9H14O
26,91	26,92	26,92	548	10,38	576	5,82	562,0	8,10	135	132	133,5	[1,1'-Biciclohexyl]4-ol
27,18	27,16	27,17	628	9,09	639	12,78	633,5	10,94	59	63	61,0	1H-Indazole,5,7-dimetil
27,27	27,28	27,28	557	26,00	609	19,09	583,0	22,55	178	151	164,5	C12H16O3
27,38	27,38	27,38	419	6,41	532	6,81	475,5	6,61	72	118	95,0	C18O12N2
27,57	27,58	27,58	625	29,26	614	19,89	619,5	24,58	202	186	194,0	5-Allyl-2-amino-4-hydroxy-6-metilpirimidina
27,73	27,73	27,73	533	17,44	551	15,26	542,0	16,35	219	201	210,0	C9H11N03
28,02	28,03	28,03	608	9,75	611	10,03	609,5	9,89	73	84	78,5	C8H11N3O
28,17	28,17	28,17	832	21,38	874	49,1	853,0	35,24	330	306	318,0	2-Hydroxy,1,7-Naftiridina

Apêndice J – Identificação dos compostos voláteis, fibra DVB /CAR/PDMS (Continuação)

Café Sadio 90 min												
Tempo de retenção			RSI 1	Probabilidade (%) 1	RSI 2	Probabilidade (%) 2	RSI (médio)	Probabilidade (%) (médio)	Sinal Ruído			Composto
Amostra 1	Amostra 2	Média							Amostra 1	Amostra 2	Média	
28,28	28,28	28,28	764	11,57	738	13,45	751,0	12,51	197	171	184,0	2H-Quinolizina,1,2,4,6,7,9-hexahydro
28,59	28,59	28,59	822	21,09	831	23,66	826,5	22,38	140	145	142,5	4-Metilpirrol[1,2-a]pirazina
28,94	28,94	28,94	803	35,51	819	30,66	811,0	33,09	564	524	544,0	3,4-Dihidroxyacetofenona
29,16	29,15	29,16	874	77,70	845	64,89	859,5	71,30	1663	1534	1598,5	Fenol,4-etil-2-metoxi-/P-etilguayacol
29,26	29,25	29,26	703	14,79	753	20,9	728,0	17,85	572	543	557,5	Pirazina,2,5-dimetil-3-(2-propenil)-
29,49	29,48	29,49	738	39,90	725	28,09	731,5	34,00	217	171	194,0	2H-Imidazol,[4,5-b]piridin-2-ona-1,3-dihydro
29,66	29,65	29,66	689	14,66	687	13,56	688,0	14,11	51	46	48,5	Benzaldeido,2,4,6-trimetil
29,80	29,79	29,80	867	14,06	848	15,62	857,5	14,84	233	187	210,0	1H-Indole
30,24	30,24	30,24	873	82,69	909	89,52	891,0	86,11	802	744	773,0	Furano,2,2'[oxybis (metilene) bis]
30,36	30,35	30,36	897	56,81	846	26,23	871,5	41,52	697	549	623,0	4-hydroxy-2-metilacetofenona
30,56	30,57	30,57	808	42,48	892	30,13	850,0	36,31	445	269	357,0	2-Butil,3,4,5,6-tetrahydropiridina
30,74	30,72	30,73	854	37,33	857	43,68	855,5	40,51	1594	1284	1439,0	2-Metoxi,4-vinilfenol
31,04	31,03	31,04	709	24,03	701	13,35	705,0	18,69	277	208	242,5	Pirazina,2-etil-3-metil-
31,24	31,24	31,24	879	52,11	829	31,73	854,0	41,92	231	183	207,0	4-Metilpirrol[1,2-a]pirazina
31,42	31,43	31,43	459	21,09	506	12,76	482,5	16,93	70	62	66,0	C13H20O3
31,61	31,61	31,61	891	89,09	912	97,29	901,5	93,19	244	236	240,0	Ciclopentasiloxano,decametil
32,09	32,08	32,09	848	37,33	872	53,5	860,0	45,42	817	615	716,0	2(1H) Quinolinona,4-metil
32,30	32,30	32,30	748	34,25	727	28,2	737,5	31,23	455	393	424,0	4-Hydroxy,7-metil,1,8 naftilidina
32,78	32,77	32,78	702	14,06	723	13,98	712,5	14,02	212	152	182,0	3-etil,5,6,7,8-tetrahydroquinoline
32,97	32,96	32,97	700	37,91	652	26,74	676,0	32,33	1259	1032	1145,5	4H-Pirido[1.2a]pirimidin-4-ona,3,6-dimetil

Apêndice J – Identificação dos compostos voláteis, fibra DVB /CAR/PDMS (Continuação)

Café Sadio 90 min												
Tempo de retenção			RSI 1	Probabilidade (%) 1	RSI 2	Probabilidade (%) 2	RSI (médio)	Probabilidade (%) (médio)	Sinal Ruído			Composto
Amostra 1	Amostra 2	Média							Amostra 1	Amostra 2	Média	
33,09	33,08	33,09	851	87,67	850	82,74	850,5	85,21	340	255	297,5	Benzeno,4-etenil,1,2-dimetoxy
33,27	33,27	33,27	835	13,07	845	12,09	840,0	12,58	52	37	44,5	Silane,trimetil fenoxo
33,38	33,37	33,38	868	53,39	862	32,33	865,0	42,86	108	74	91,0	2,5' Dihydroxypropiofenona
33,73	33,73	33,73	700	28,36	700	27,25	700,0	27,81	472	343	407,5	Benzeno,1-metil-3-[(1-metiletil)tio]-
33,91	33,90	33,91	817	29,70	800	29,61	808,5	29,66	374	270	322,0	2,4-Ácido pentadienóico,1-ciclopenten,3-on-1yl-éster
34,00	34,00	34,00	833	51,03	853	75,04	843,0	63,04	286	165	225,5	5-Metoxy-2,3-dimetilindole
34,31	34,31	34,31	744	37,77	752	28,48	748,0	33,13	78	63	70,5	2-Naftalenol,3-metoxy
34,44	34,44	34,44	690	12,90	750	10,38	720,0	11,64	128	54	91,0	1-Decanol,2-hexyl
34,60	34,58	34,59	759	19,90	670	13,67	714,5	16,79	97	74	85,5	1H-Benzaimidazole,2,5-dimetil
34,76	34,78	34,77	830	18,92	881	56,25	855,5	37,59	68	50	59,0	Naftaleno,1,2-dihydro1,1,6-trimetil
34,97	34,97	34,97	790	84,89	811	85,92	800,5	85,41	376	264	320,0	à Furfuriliden-à-furilmetilamina
35,20	35,21	35,21	706	21,09	756	19,9	731,0	20,50	92	68	80,0	1-Benzaimidazole,1-etil
35,41	35,41	35,41	631	7,74	539	12,57	585,0	10,16	77	55	66,0	Benzeno,1-(1,1-dimetietil)-4-etoxy
35,55	35,55	35,55	723	23,07	654	17,72	688,5	20,40	67	49	58,0	C24H20CIN30
35,71	35,71	35,71	753	36,49	659	24	706,0	30,25	150	111	130,5	Benzeno,2,4-diisocianato-1-metil
36,03	36,03	36,03	791	29,49	800	47,18	795,5	38,34	683	475	579,0	2(1H) Quinolinona,3,4-dimetil
36,29	36,29	36,29	755	9,63	609	8,9	682,0	9,27	87	56	71,5	Ácido isoftalico,4-metil
36,46	36,47	36,47	745	33,27	786	14,49	765,5	23,88	114	80	97,0	1H-Benzaimidazole,2,(1,1-dimetietil)
36,80	36,80	36,80	708	30,09	781	22,99	744,5	26,54	211	135	173,0	3-Amino,4-metil-6-metoxyquinolina
37,01	37,01	37,01	569	8,46	628	7,96	598,5	8,21	66	43	54,5	C13H18N2O2S

Apêndice J – Identificação dos compostos voláteis, fibra DVB /CAR/PDMS (Continuação)

Café Sadio 90 min												
Tempo de retenção			RSI 1	Probabilidade (%) 1	RSI 2	Probabilidade (%) 2	RSI (médio)	Probabilidade (%) (médio)	Sinal Ruído			Composto
Amostra 1	Amostra 2	Média							Amostra 1	Amostra 2	Média	
37,07	37,08	37,08	732	26,80	724	28,9	728,0	27,85	278	192	235,0	Benzaimidazol,2-etil,1-propil
37,20	37,21	37,21	626	12,53	590	13,45	608,0	12,99	63	37	50,0	Ácido,3-furancarboxilico,2,5 di-metil,metil éster
37,51	37,52	37,52	530	6,70	698	13,33	614,0	10,02	258	224	241,0	C14H18O
37,68	37,67	37,68	715	31,62	732	22,52	723,5	27,07	123	84	103,5	Naftaleno,1,2,3,4,tetrahydro-5-metil-1-(1metiletil)-
38,78	38,79	38,79	819	91,52	835	98,34	827,0	94,93	191	187	189,0	Ciclopentasiloxano,decametil
38,87	38,88	38,88	509	13,90	609	12,22	559,0	13,06	106	68	87,0	4-Bromo,3,5-dimetilpirazol
39,04	39,04	39,04	823	57,65	824	55,53	823,5	56,59	282	244	263,0	Butilato hydroxytolueno
39,69	39,69	39,69	686	32,71	609	26,39	647,5	29,55	113	70	91,5	Naftaleno,1,2,3,4,tetrahydro-1,6-di-metil-4-(1metiletil)-
40,55	40,55	40,55	708	33,52	731	28,9	719,5	31,21	580	360	470,0	[1,1'Bifenil]-4-ol-acetato
40,64	40,64	40,64	818	30,28	816	32,94	817,0	31,61	71	43	57,0	1-Naftalenamina,N,N-dimetil
41,26	41,26	41,26	644	8,90	830	9,84	737,0	9,37	67	36	51,5	Benzeno,1,4-dimetoxy
42,37	42,40	42,39	638	14,80	535	10,45	586,5	12,63	51	36	43,5	Docosano
45,23	45,24	45,24	808	87,55	816	92,94	812,0	90,25	125	141	133,0	Ciclodexasiloxano, eicosametil
45,39	45,39	45,39	797	84,82	779	87,67	788,0	86,25	72	71	71,5	Bis(2-furfuril)disulfide
46,27	46,27	46,27	799	21,27	850	22,43	824,5	21,85	48	58	53,0	Hexestrol
46,59	46,60	46,60	766	56,01	823	71,94	794,5	63,98	60	70	65,0	n-Nonylfenol
51,23	51,15	51,19	879	94,96	879	95,98	879,0	95,47	2146	1678	1912,0	Cafeina
53,40	53,41	53,41	753	63,67	735	45,22	744,0	54,45	496	338	417,0	Ácido hexadecanóico,metil éster
54,34	54,35	54,35	631	30,73	625	28,73	628,0	29,73	67	30	48,5	1,7,7-trimetil-3-fenetilidenebiciclo[2.2.1]heptan-2-ona

Apêndice J – Identificação dos compostos voláteis, fibra DVB /CAR/PDMS (Continuação)

Café Sadio 90 min												
Tempo de retenção			RSI 1	Probabilidade (%) 1	RSI 2	Probabilidade (%) 2	RSI (médio)	Probabilidade (%) (médio)	Sinal Ruído			Composto
Amostra 1	Amostra 2	Média							Amostra 1	Amostra 2	Média	
54,65	54,65	54,65	769	84,76	773	84,09	771,0	84,43	98	100	99,0	Ciclopentasiloxano,decametil
55,64	55,65	55,65	773	27,56	765	20,98	769,0	24,27	194	121	157,5	Benzilamina,4-(1-metiletil)-N,adifenil
56,26	56,27	56,27	786	15,30	800	11,65	793,0	13,48	149	75	112,0	Ácido,8,11-octadecanóico, metil éster
56,85	56,86	56,86	743	68,79	709	76,98	726,0	72,89	84	80	82,0	Ciclopentasiloxano,decametil
58,50	58,50	58,50	824	71,30	819	64,03	821,5	67,67	77	72	74,5	Ciclopentasiloxano,decametil
59,76	59,77	59,77	809	40,90	819	36,85	814,0	38,88	43	79	61,0	Ácido hexanodióico,mono,(2-etilhexil) éster
60,09	60,09	60,09	765	79,09	768	76,49	766,5	77,79	51	47	49,0	Ciclopentasiloxano,decametil

Amostras 1 e 2: se referem às réplicas de um dado ensaio; media: valor médio referente a análises em duplicata; Sinal Ruído: Sinal de intensidade (S) dividido pelo ruído(N) da linha; RSI: parâmetro de compatibilidade entre o espectro desconhecido e o espectro da biblioteca.

Apêndice K – Identificação dos compostos voláteis, fibra DVB /CAR/PDMS

Café Sadio 120 min

Tempo de retenção			RSI 1	Probabilidade (%) 1	RSI 2	Probabilidade (%) 2	RSI (médio)	Probabilidade (%) (médio)	Sinal do Ruído			Composto
Amostra 1	Amostra 2	Média							Amostra 1	Amostra 2	Média	
2,22	2,22	2,22	814	56,78	825	48,17	819,5	52,48	554	434	494,0	Furano,2-metil-
3,45	3,44	3,45	842	76,72	848	73,13	845,0	74,93	93	73	83,0	Furano, 2,5-dimetil
3,95	3,95	3,95	868	75,23	891	79,69	879,5	77,46	135	114	124,5	Pirazina
4,24	4,20	4,22	745	15,88	736	20,90	740,5	18,39	8183	6027	7105,0	2,3-Dicianopropionamida
4,31	4,29	4,30	877	73,12	855	61,60	866,0	67,36	14497	12670	13583,5	Piridina
4,81	4,79	4,80	825	23,27	802	22,31	813,5	22,79	426	335	380,5	1-Metil-2piperidinametanol
5,62	5,63	5,63	700	14,51	726	20,89	713,0	17,70	108	74	91,0	8-Azabiciclo[3.2.1]-octan-3-ona-8-metil
6,87	6,85	6,86	846	27,42	854	29,90	850,0	28,66	997	797	897,0	4-Piridinamina
7,24	7,24	7,24	809	79,47	795	72,06	802,0	75,77	166	133	149,5	Furano,2-(metoxymetil)
7,36	7,36	7,36	834	42,82	833	46,15	833,5	44,49	151	133	142,0	Furfural
7,52	7,51	7,52	827	42,48	694	28,23	760,5	35,36	136	97	116,5	Piridinium,1-(carboxymetil), hidroxydo, inert salt
8,31	8,30	8,31	791	55,92	807	25,14	799,0	40,53	106	84	95,0	Furano,2-(2-propenil)-
8,63	8,57	8,60	824	43,85	839	49,02	831,5	46,44	448	416	432,0	3-Furanmetanol
8,72	8,73	8,73	812	39,03	817	55,30	814,5	47,17	271	54	162,5	Piridina,4-metil
9,93	9,93	9,93	873	48,02	888	40,57	880,5	44,30	71	57	64,0	1,3,5,7-Ciclooctatetraeno
10,94	10,91	10,93	875	58,32	792	34,67	833,5	46,50	4654	3445	4049,5	Pirazina,2,5-dimetil
11,01	11,02	11,02	800	19,92	873	17,54	836,5	18,73	4654	845	2749,5	Pirimidina,4,6-dimetil
11,05	11,09	11,07	887	65,66	902	67,97	894,5	66,82	1055	2724	1889,5	Etanona,1-(2-furanil)
11,18	11,17	11,18	687	59,17	676	31,86	681,5	45,52	2490	1768	2129,0	(1H)Imidazole,4-acetonitrilo

Apêndice K – Identificação dos compostos voláteis, fibra DVB /CAR/PDMS (Continuação)

Café Sadio 120 min												
Tempo de retenção			RSI 1	Probabilidade (%) 1	RSI 2	Probabilidade (%) 2	RSI (médio)	Probabilidade (%) (médio)	Sinal do Ruído			Composto
Amostra 1	Amostra 2	Média							Amostra 1	Amostra 2	Média	
11,33	11,26	11,30	747	12,59	781	26,16	764,0	19,38	290	1097	693,5	Acaetilcolina clorídeo
11,93	11,92	11,93	824	24,35	823	22,57	823,5	23,46	56	43	49,5	1H-Pirrol,2,4-dimetil
13,23	13,25	13,24	888	62,69	868	71,23	878,0	66,96	323	278	300,5	Furano,2-metil-
13,28	13,30	13,29	821	33,59	862	35,42	841,5	34,51	398	215	306,5	Piridina,4-etil
13,54	13,54	13,54	825	18,32	796	19,68	810,5	19,00	165	132	148,5	Fenol,2,5-dimetil
13,71	13,70	13,71	880	89,33	844	72,21	862,0	80,77	235	189	212,0	2-Furancarboxaldeído,5-metil-
14,39	14,39	14,39	971	72,15	960	56,91	965,5	64,53	70	54	62,0	Metil,2-furoato
15,09	15,01	15,05	825	34,58	833	34,06	829,0	34,32	276	205	240,5	Ácido bensenosulfônico,4-hydroxy ou fenol
15,45	15,44	15,45	805	60,95	833	50,98	819,0	55,97	4753	3248	4000,5	Pirazina,2-etil,6-metil
15,56	15,53	15,55	850	64,32	837	73,80	843,5	69,06	2136	1452	1794,0	2-Furanmetanol,acetato
15,66	15,64	15,65	817	51,78	806	61,37	811,5	56,58	1797	1209	1503,0	Pirazina trimetil
15,81	15,79	15,80	827	61,60	838	66,01	832,5	63,81	458	358	408,0	1H-Pirrol-2-carboxaldeído,1-metil
16,04	16,02	16,03	856	68,34	847	68,18	851,5	68,26	246	176	211,0	1-Propanona,1-(2-furanil)
16,20	16,21	16,21	782	41,09	775	22,34	778,5	31,72	190	183	186,5	Pirimidina,5-metil
16,34	16,34	16,34	719	12,70	705	10,04	712,0	11,37	76	32	54,0	1H-Pirrol-2-acetonitrilo,1-metil
16,49	16,48	16,49	805	60,51	741	25,72	773,0	43,12	377	256	316,5	Isopropenilpirazina
16,61	16,60	16,61	677	19,70	660	19,58	668,5	19,64	200	149	174,5	2(H)-Piridinone,3-6-dimetil
16,96	16,94	16,95	673	23,62	660	31,22	666,5	27,42	85	71	78,0	2-Ciclohexen-1-ol,-3-metil-6-(1-metiletil),-cis-
17,19	17,19	17,19	783	72,30	776	72,48	779,5	72,39	115	77	96,0	Etanona,1-(2-piridinil)

Apêndice K – Identificação dos compostos voláteis, fibra DVB /CAR/PDMS (Continuação)

Café Sadio 120 min												
Tempo de retenção			RSI 1	Probabilidade (%) 1	RSI 2	Probabilidade (%) 2	RSI (médio)	Probabilidade (%) (médio)	Sinal do Ruído			Composto
Amostra 1	Amostra 2	Média							Amostra 1	Amostra 2	Média	
17,45	17,44	17,45	962	78,90	974	90,14	968,0	84,52	739	525	632,0	2-Acetil,5-metilfurano
17,49	17,49	17,49	848	12,54	738	11,00	793,0	11,77	193	134	163,5	2,2' Bifurano
17,60	17,60	17,60	824	15,69	882	40,65	853,0	28,17	171	120	145,5	2,5-Furandiona
17,89	17,88	17,89	590	25,17	646	44,63	618,0	34,90	50	34	42,0	Spiro[oxirane-2,1'(2H)-pentalene-3,4,5,6-tetrahydro-
18,09	18,09	18,09	739	16,32	803	35,57	771,0	25,95	115	73	94,0	Ciclohexeno,-1-metil-3-(1-metiletil)-
18,19	18,21	18,20	815	88,86	812	90,43	813,5	89,65	224	113	168,5	Piridina,3-propil
18,46	18,35	18,41	675	12,05	692	11,23	683,5	11,64	94	53	73,5	4-Ácido petanóico,4-metil,3-metilene,isopropil éster
18,76	18,76	18,76	755	17,89	755	24,82	755,0	21,36	150	86	118,0	2-Ciclopenten-1-ona,2,3,4-trimetil
19,06	18,99	19,03	881	95,31	839	93,04	860,0	94,18	245	225	235,0	Etanona,1-(1H-Pirrol,2-yl)
19,14	19,13	19,14	770	19,51	852	50,60	811,0	35,06	97	74	85,5	[1,2,4] Triazol [1,5a]piridina
19,32	19,32	19,32	858	74,90	829	73,59	843,5	74,25	337	243	290,0	Etanona,1-(1-metil, 1H-Pirrol,2yl)
19,58	19,58	19,58	805	33,13	842	49,38	823,5	41,26	799	507	653,0	Pirazina,2,6-dietil
19,88	19,87	19,88	881	54,70	886	57,14	883,5	55,92	1226	747	986,5	Furano,2,2'-metilenebis-
19,98	19,97	19,98	836	54,56	791	52,52	813,5	53,54	933	554	743,5	2,3-Dimetil,5-etilpirazina
20,11	20,10	20,11	814	26,13	813	24,66	813,5	25,40	855	645	750,0	Fenol,4-metoxo
20,78	20,76	20,77	719	18,33	753	20,99	736,0	19,66	459	402	430,5	2-Ciclohexen-1-ona,4,4-dimetil
20,87	20,87	20,87	731	28,11	737	25,19	734,0	26,65	1114	67	590,5	Isopropenilpirazina
20,98	20,98	20,98	719	70,75	723	48,89	721,0	59,82	227	179	203,0	1-Ciclopenten,1-ácido carboxílico
21,07	21,06	21,07	732	6,28	609	9,78	670,5	8,03	83	231	157,0	Aziridina,,2-fenil

Apêndice K – Identificação dos compostos voláteis, fibra DVB /CAR/PDMS (Continuação)

Café Sadio 120 min												
Tempo de retenção			RSI 1	Probabilidade (%) 1	RSI 2	Probabilidade (%) 2	RSI (médio)	Probabilidade (%) (médio)	Sinal do Ruído			Composto
Amostra 1	Amostra 2	Média							Amostra 1	Amostra 2	Média	
21,35	21,31	21,33	852	63,90	862	67,23	857,0	65,57	738	557	647,5	Maltol
21,54	21,53	21,54	721	21,96	739	21,22	730,0	21,59	314	243	278,5	2-Acetil-3-metilpirazina
22,16	22,16	22,16	814	68,38	786	40,89	800,0	54,64	224	214	219,0	1-Propanona,1-(5-metil, 2-furanil)
22,51	22,51	22,51	715	25,19	715	25,89	715,0	25,54	432	358	395,0	Etanona,1-(2-piridinil),- oxime
22,68	22,67	22,68	612	7,13	776	7,53	694,0	7,33	189	180	184,5	O-Bromoatropina
22,94	22,93	22,94	618	12,56	733	12,28	675,5	12,42	98	77	87,5	1-Adamantol
23,23	23,23	23,23	881	30,40	776	15,31	828,5	22,86	564	395	479,5	1-Piperidino-1-etenil,ciclopropano
23,42	23,40	23,41	773	31,97	768	27,76	770,5	29,87	322	254	288,0	3,4-Dimetil,1H-Pirrol-2-carboxaldeido
23,49	23,49	23,49	752	31,43	766	35,99	759,0	33,71	1067	698	882,5	Pirazina,3,5-dietil,2-metil
23,73	23,73	23,73	813	86,44	854	79,87	833,5	83,16	214	177	195,5	Ciclopentasiloxano,decametil
23,93	23,91	23,92	459	6,73	427	9,02	443,0	7,88	116	79	97,5	C18H25ClN2
24,11	24,11	24,11	685	25,20	620	12,20	652,5	18,70	289	190	239,5	Dihydronopol
24,31	24,31	24,31	665	8,90	658	9,37	661,5	9,14	141	152	146,5	1-(2-Metoxi-3-pirazinil)-1-etanona
24,47	24,46	24,47	772	57,16	721	35,44	746,5	46,30	87	267	177,0	Ácido benzenoacético, metiléster
24,66	24,66	24,66	905	60,47	912	70,87	908,5	65,67	1329	907	1118,0	Furano,2-(2-furanilmetil)-5-metil
24,85	24,85	24,85	809	14,52	795	16,85	802,0	15,69	217	181	199,0	2-Ácido furancarboxílico,3-metil,metiléster
25,11	25,10	25,11	798	20,29	777	15,42	787,5	17,86	348	270	309,0	Pirazina,2-metil-5-(1-propenil)-(Z)
25,25	25,27	25,26	543	7,89	550	8,00	546,5	7,95	216	100	158,0	3,4-Dimetil,1H-Pirrol-2-carboxaldeido
25,41	25,41	25,41	746	11,56	728	11,09	737,0	11,33	76	66	71,0	3(2H) Benzofuranona,4,6-dimetil.

Apêndice K – Identificação dos compostos voláteis, fibra DVB /CAR/PDMS (Continuação)

Café Sadio 120 min												
Tempo de retenção			RSI 1	Probabilidade (%) 1	RSI 2	Probabilidade (%) 2	RSI (médio)	Probabilidade (%) (médio)	Sinal do Ruído			Composto
Amostra 1	Amostra 2	Média							Amostra 1	Amostra 2	Média	
25,58	25,57	25,58	817	12,39	822	14,40	819,5	13,40	167	159	163,0	1H-Indazol
25,72	25,71	25,72	710	24,43	719	18,90	714,5	21,67	190	140	165,0	5,6,7,8-Tetrahydroquinoxaline
25,88	25,89	25,89	576	6,75	566	4,41	571,0	5,58	168	143	155,5	C13H22O2
26,02	26,02	26,02	675	21,41	762	16,63	718,5	19,02	100	114	107,0	1,4-Benzenodiol
26,41	26,39	26,40	881	42,70	867	29,16	874,0	35,93	524	473	498,5	2-Naftalenol
26,46	26,42	26,44	674	19,15	588	13,09	631,0	16,12	194	215	204,5	Pirazina,2,5-dimetil-3-(1-propenil)-, (Z)
26,56	26,57	26,57	818	51,30	769	48,25	793,5	49,78	203	159	181,0	Furfuril pentanoato
26,72	26,72	26,72	609	9,89	604	11,27	606,5	10,58	65	64	64,5	C15H24O
26,92	26,93	26,93	549	8,30	562	7,89	555,5	8,10	128	114	121,0	Ácido benzóico,4-(dimetilamino)
27,14	27,14	27,14	686	15,20	667	9,35	676,5	12,28	72	71	71,5	1H-Indeno,2,3-dihydro-5,6-dimetil
27,57	27,58	27,58	636	21,50	629	20,10	632,5	20,80	162	149	155,5	5-Allyl-2-amino-4-hydroxy-6-metilpirimidina
27,74	27,74	27,74	529	7,74	509	11,32	519,0	9,53	171	168	169,5	Naftaleno,1,1'etilidenebis[decahydro]
28,03	28,03	28,03	493	5,20	514	7,90	503,5	6,55	66	57	61,5	Borano,metildifenil
28,17	28,17	28,17	850	30,80	844	22,87	847,0	26,84	320	338	329,0	2-Hydroxy,1,7-naftiridina
28,60	28,64	28,62	863	33,67	802	20,75	832,5	27,21	154	161	157,5	4-Metilpirrolo[1.2a]pirazina
28,93	28,92	28,93	798	33,58	770	31,04	784,0	32,31	613	625	619,0	3,4-Dihydroxyacatofenona
29,14	29,15	29,15	861	73,04	860	75,44	860,5	74,24	1511	1589	1550,0	Fenol,4-etil,2-metoxyp-Etilguayacol
29,66	29,66	29,66	744	13,59	739	12,77	741,5	13,18	176	152	164,0	2-Isopropenil-3,6-dimetilpirazina
29,78	29,80	29,79	877	12,51	863	17,28	870,0	14,90	161	182	171,5	1H-Indol

Apêndice K – Identificação dos compostos voláteis, fibra DVB /CAR/PDMS (Continuação)

Café Sadio 120 min												
Tempo de retenção			RSI 1	Probabilidade (%) 1	RSI 2	Probabilidade (%) 2	RSI (médio)	Probabilidade (%) (médio)	Sinal do Ruído			Composto
Amostra 1	Amostra 2	Média							Amostra 1	Amostra 2	Média	
30,23	30,24	30,24	887	77,65	872	80,22	879,5	78,94	671	688	679,5	Furano,2,2'-[oxibis(metilene)]bis-
30,35	30,35	30,35	864	37,27	876	40,79	870,0	39,03	606	687	646,5	4-Hydroxy,2-metilacetofenona
30,57	30,57	30,57	808	29,41	845	16,92	826,5	23,17	319	367	343,0	2-Butil,3,4,5,6-tetrahydropiridina
30,72	30,73	30,73	841	35,07	820	16,20	830,5	25,64	1503	1724	1613,5	2-Metoxo,4-vinilfenol
31,05	31,05	31,05	617	24,13	606	24,95	611,5	24,54	205	252	228,5	4-Metoxymetil,-4-fenil,1-buteno
31,25	31,25	31,25	848	40,80	857	44,81	852,5	42,81	175	209	192,0	4-Metilpirrolo[1.2a]pirazina
31,39	31,40	31,40	615	36,35	615	16,90	615,0	26,63	71	82	76,5	Tiofeno,3-fenil
31,63	31,64	31,64	896	97,83	789	89,67	842,5	93,75	267	286	276,5	Ciclohexaciloxanoldodecametil
32,09	32,10	32,10	852	37,48	896	43,67	874,0	40,58	700	808	754,0	2(1H)-Quinolinona,4-metil
32,31	32,31	32,31	778	29,90	775	26,20	776,5	28,05	483	565	524,0	2-Amino,4-hydroxyquinolina
32,77	32,78	32,78	748	14,74	720	8,79	734,0	11,77	166	207	186,5	3-Etil,5,6,7,8-tetrahydroquinolina
32,98	32,98	32,98	717	28,48	713	28,10	715,0	28,29	950	1123	1036,5	4H-pirido[1,2-a]pirimidin-4-ona,3,6-dimetil
33,09	33,09	33,09	853	85,75	852	82,84	852,5	84,30	304	381	342,5	Benzeno,4-etenil,1,2-dimetoxo
33,38	33,39	33,39	835	31,38	851	55,92	843,0	43,65	117	136	126,5	2,5-Dihydroxypropiofenona
33,75	33,75	33,75	692	22,31	709	23,31	700,5	22,81	358	419	388,5	Benzeno,1-metil-3-[(metiletil)tio]
33,81	33,82	33,82	750	15,94	715	9,81	732,5	12,88	911	994	952,5	Naftaleno,,1,2,3,4-tetrahydro,6-propil
34,33	34,32	34,33	737	13,24	747	24,33	742,0	18,79	56	69	62,5	2-Naftalenol,3-metoxo
34,60	34,61	34,61	778	42,63	782	17,73	780,0	30,18	62	76	69,0	1H-Benzaimidazol,2,5-dimetil
34,78	34,79	34,79	815	27,36	901	31,28	858,0	29,32	45	57	51,0	Benzeno,2-(1,3-Butadienil)-1,3,5-trimetil

Apêndice K – Identificação dos compostos voláteis, fibra DVB /CAR/PDMS (Continuação)

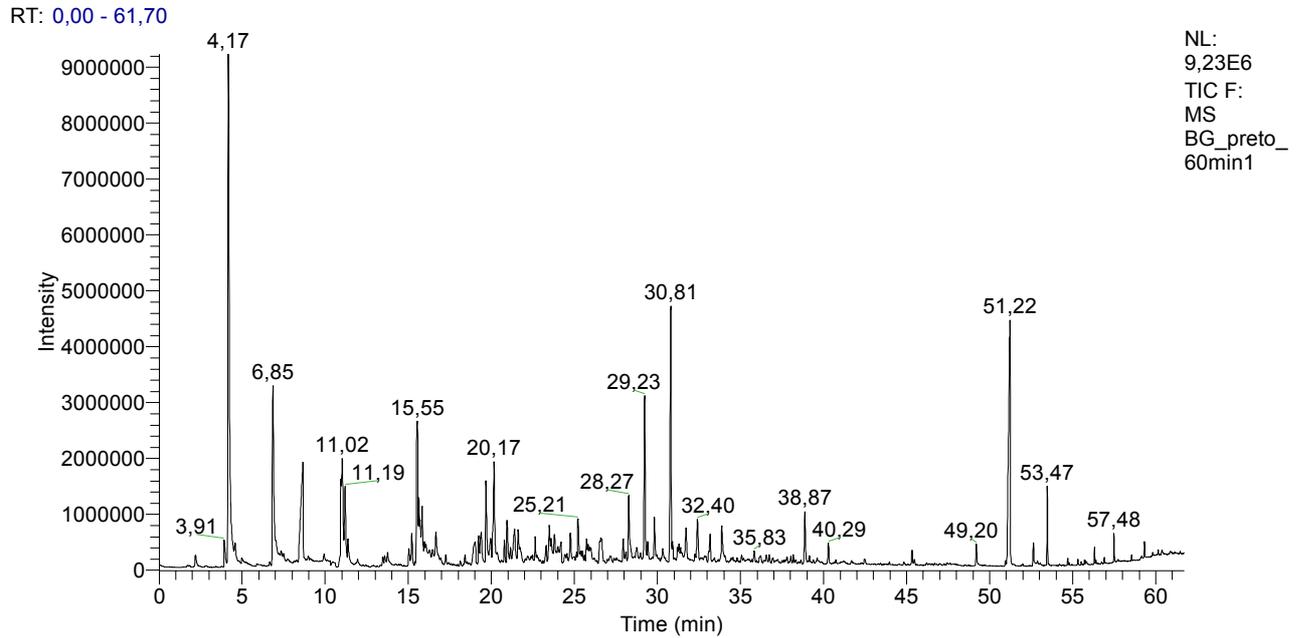
Café Sadio 120 min												
Tempo de retenção			RSI 1	Probabilidade (%) 1	RSI 2	Probabilidade (%) 2	RSI (médio)	Probabilidade (%) (médio)	Sinal do Ruído			Composto
Amostra 1	Amostra 2	Média							Amostra 1	Amostra 2	Média	
34,97	34,99	34,98	788	81,54	782	79,66	785,0	80,60	323	394	358,5	à furfuralideno-à-furilmetilamina
35,22	35,23	35,23	823	13,08	801	39,03	812,0	26,06	66	74	70,0	1H-Benzimidazol,1-etil
35,42	35,42	35,42	587	7,56	545	7,34	566,0	7,45	58	74	66,0	3-Carene,4-acetil
35,56	35,57	35,57	738	12,05	681	9,89	709,5	10,97	57	62	59,5	C ₂₄ H ₂₀ CIN ₃₀
35,72	35,73	35,73	758	19,79	760	23,32	759,0	21,56	122	153	137,5	Benzaldeido,2,5-difluoro-3,4-dihydroxy
36,04	36,05	36,05	806	37,89	804	38,15	805,0	38,02	566	728	647,0	2(1H)-Quinolinona,4-metil
36,30	36,30	36,30	700	10,53	609	9,78	654,5	10,16	56	97	76,5	Quinoxaline,2-etil,4-oxide
36,47	36,48	36,48	644	6,87	592	5,89	618,0	6,38	96	135	115,5	Naftaleno,1,2,3,4-tetrahydro-1,1,6-trimetil
36,81	36,81	36,81	706	16,24	704	18,10	705,0	17,17	170	121	145,5	3-Amino,4-metil,6-metoxiquinolona
37,01	37,01	37,01	600	24,20	622	21,51	611,0	22,86	51	69	60,0	1,2-Dihydro-1-demetil-harmol
37,22	37,22	37,22	684	9,23	691	8,32	687,5	8,78	55	70	62,5	Acetonitrilo(3-metil-4-oxo-2-tiazolidinileno)
37,53	37,53	37,53	502	12,26	544	10,01	523,0	11,14	213	204	208,5	C ₁₄ H ₁₈ O ₅
37,69	37,69	37,69	640	17,12	634	27,44	637,0	22,28	97	130	113,5	3-Amino,4-metil,6-metoxiquinolona
38,79	38,80	38,80	832	93,95	811	92,92	821,5	93,44	218	247	232,5	Cicloheptasoloxano,decametil
39,06	39,05	39,06	823	52,18	738	38,20	780,5	45,19	269	60	164,5	Butilato hydroxytolueno
39,70	39,71	39,71	680	5,06	696	6,89	688,0	5,98	103	124	113,5	Benzoacetaldeido,4-metil-à-(2-propeniloxy)oxime
40,55	40,56	40,56	833	35,74	825	16,17	829,0	25,96	669	530	599,5	3-Piridinol,2-fenil
40,65	40,66	40,66	831	36,29	805	22,03	818,0	29,16	66	86	76,0	1H-Pirrole,3,5-dimetil-2-fenil
45,25	45,25	45,25	826	92,32	820	90,73	823,0	91,53	138	131	134,5	Ciclooctasoloxano,hexadecametil

Apêndice K – Identificação dos compostos voláteis, fibra DVB /CAR/PDMS (Continuação)

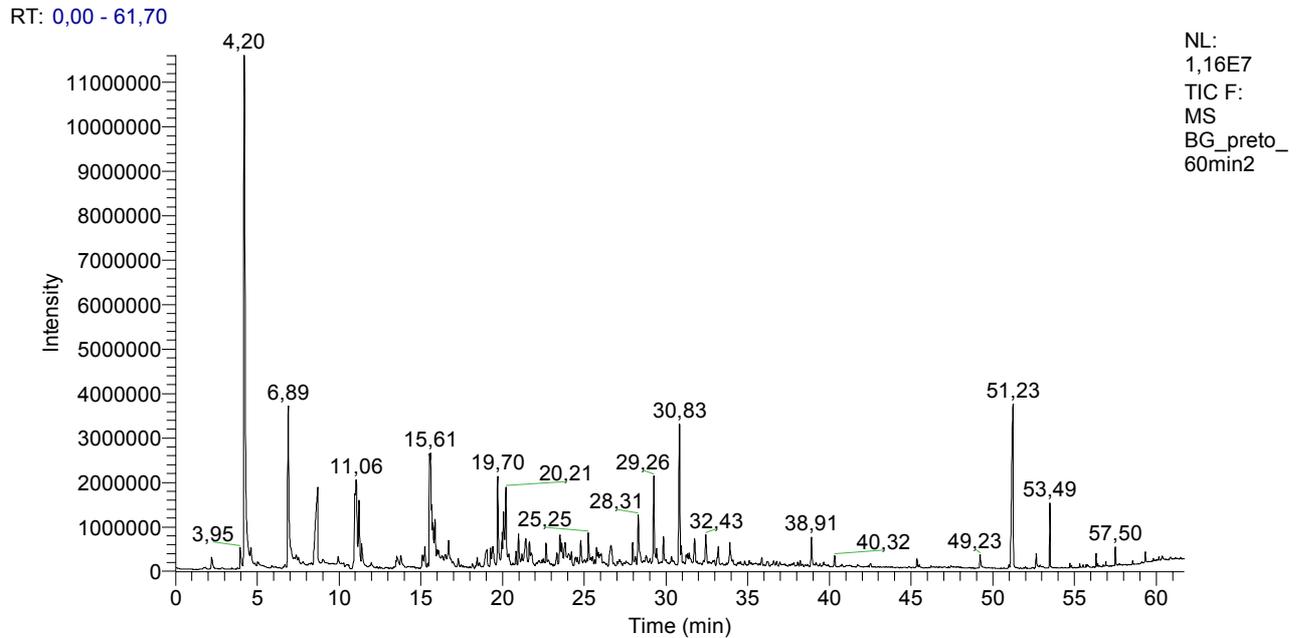
Café Sadio 120 min												
Tempo de retenção			RSI 1	Probabilidade (%) 1	RSI 2	Probabilidade (%) 2	RSI (médio)	Probabilidade (%) (médio)	Sinal do Ruído			Composto
Amostra 1	Amostra 2	Média							Amostra 1	Amostra 2	Média	
45,40	45,41	45,41	778	80,73	750	76,17	764,0	78,45	51	107	79,0	Bis(2-furfuril)disulfide(fibra)
46,61	46,61	46,61	741	42,66	752	34,67	746,5	38,67	50	52	51,0	n-Nonylfenol
51,19	51,25	51,22	871	94,01	861	92,34	866,0	93,18	2601	3072	2836,5	Cafeína
53,41	53,41	53,41	745	43,77	743	61,66	744,0	52,72	594	867	730,5	Ácido hexadecanóico,metil éster
54,36	54,36	54,36	628	31,77	620	29,28	624,0	30,53	62	94	78,0	1,7,7-trimetil-3-fenetilidene biciclo[2.2.1]heptan-2-ona
54,66	54,66	54,66	786	89,39	809	79,90	797,5	84,65	124	125	124,5	Ciclooctasiloxano,hexadecametil
55,65	55,65	55,65	764	20,98	755	23,52	759,5	22,25	210	301	255,5	1,5,6,7-tetrametil-3-fenilbiciclo[3.2.0]hepta,2,6-diene
56,27	56,27	56,27	777	15,04	779	13,21	778,0	14,13	114	205	159,5	Ácido,8,11 octadecadienóico,metil éster
56,87	56,86	56,87	740	73,66	709	79,45	724,5	76,56	119	112	115,5	Ciclooctasiloxano,hexadecametil
58,50	58,51	58,51	813	70,35	800	69,89	806,5	70,12	103	103	103,0	Ciclooctasiloxano,hexadecametil
59,76	59,77	59,77	820	52,32	817	57,80	818,5	55,06	98	130	114,0	Ácido hexadecanóico,mono,(2-etilhexyl)éster
60,09	60,10	60,10	767	76,32	789	76,52	778,0	76,42	73	71	72,0	Ciclooctasiloxano,hexadecametil

Amostras 1 e 2: se referem às réplicas de um dado ensaio; media: valor médio referente a análises em duplicata; Sinal Ruído: Sinal de intensidade (S) dividido pelo ruído(N) da linha; RSI: parâmetro de compatibilidade entre o espectro desconhecido e o espectro da biblioteca.

Apêndice L – Cromatogramas dos cafés defeituosos e suas respectivas duplicatas



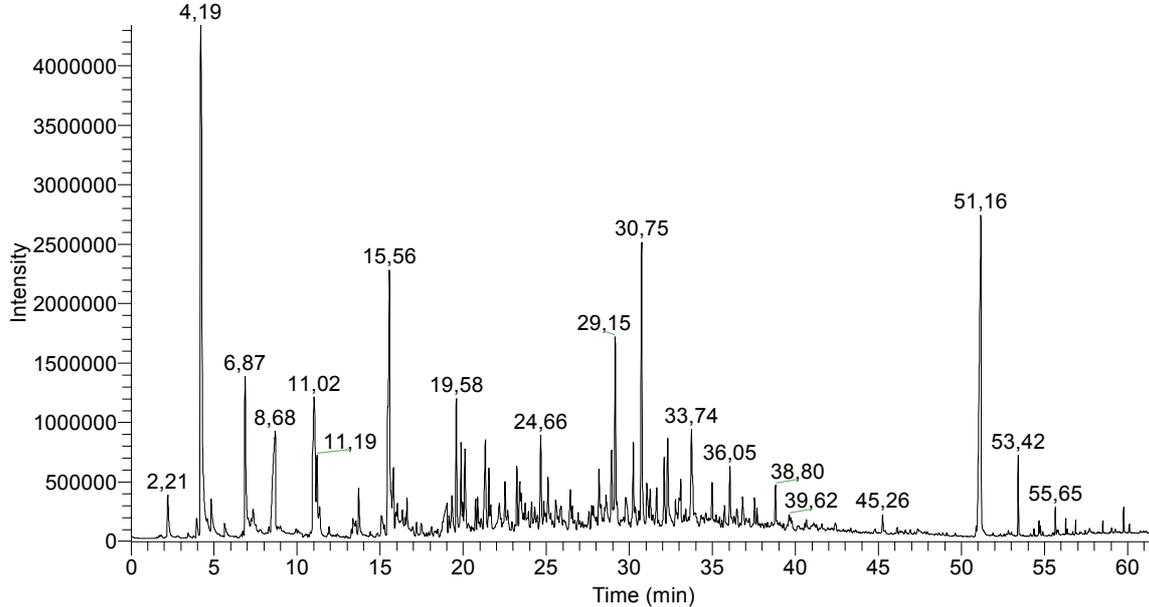
Cromatograma obtido para análises do perfil de voláteis de café defeituoso preto, torrado a 200°C por 60 minutos, fibra DVB/CAR/PDMS.



Duplicata do cromatograma obtido para análises do perfil de voláteis de café defeituoso preto, torrado a 200°C por 60 minutos, fibra DVB/CAR/PDMS.

Apêndice L – Cromatogramas dos cafés defeituosos e suas respectivas duplicatas (Continuação)

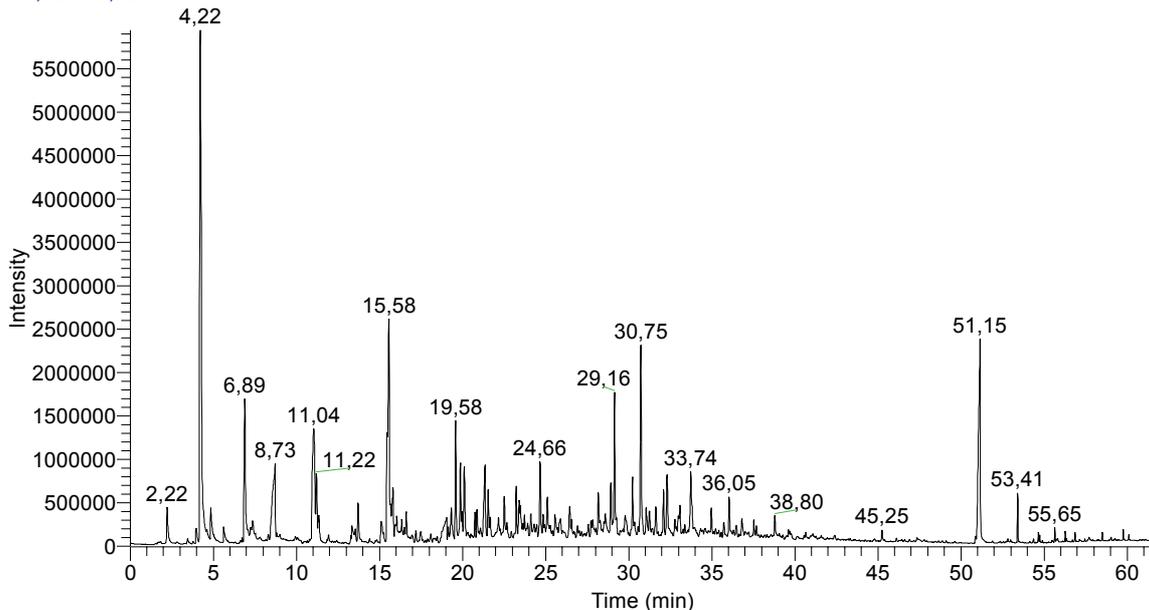
RT: 0,00 - 61,70



NL:
4,34E6
TIC F:
MS
BG_cafe_v
erde_60min

Cromatograma obtido para análises do perfil de voláteis de café defeituoso verde, torrado a 200°C por 60 minutos, fibra DVB/CAR/PDMS.

RT: 0,00 - 61,68

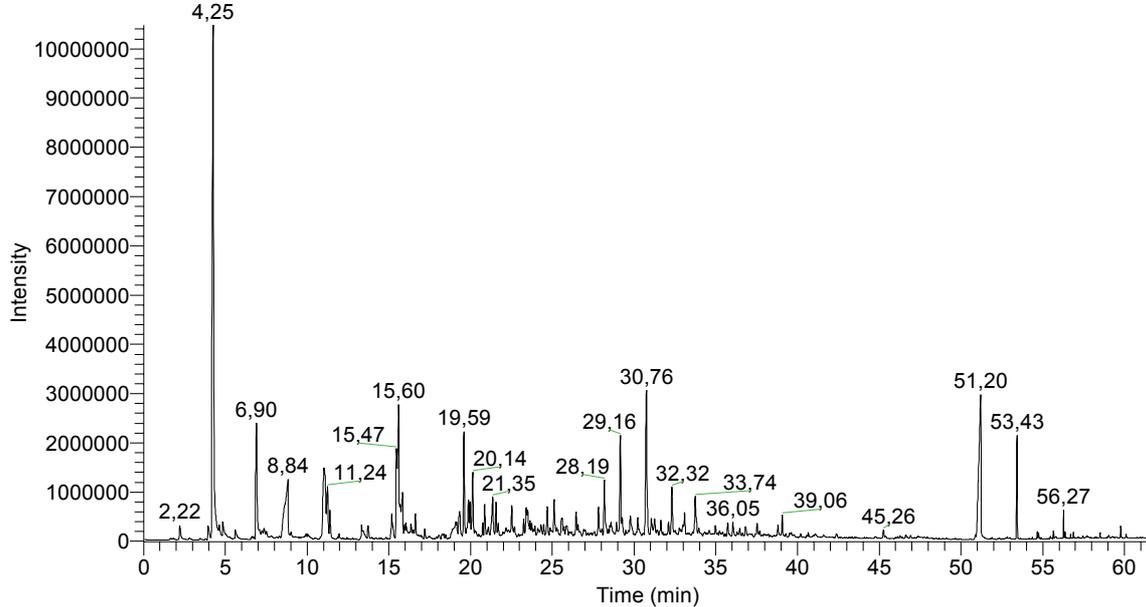


NL:
5,94E6
TIC F:
MS
BG_cafe_v
erde_60min
_2

Duplicata do cromatograma obtido para análises do perfil de voláteis de café defeituoso verde, torrado a 200°C por 60 minutos, fibra DVB/CAR/PDMS.

Apêndice L – Cromatogramas dos cafés defeituosos e suas respectivas duplicatas (Continuação)

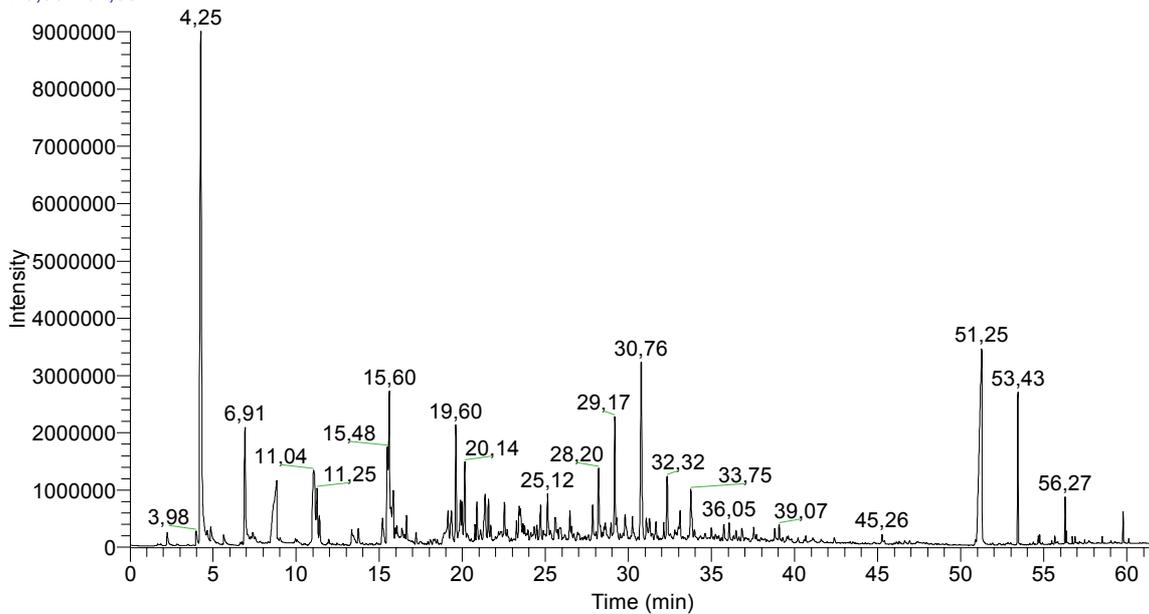
RT: 0,00 - 61,68



NL:
1,05E7
TIC F:
MS
BG_cafe_a
rdido_60mi
n_1

Cromatograma obtido para análises do perfil de voláteis de café defeituoso ardido, torrado a 200°C por 60 minutos, fibra DVB/CAR/PDMS.

RT: 0,00 - 61,68

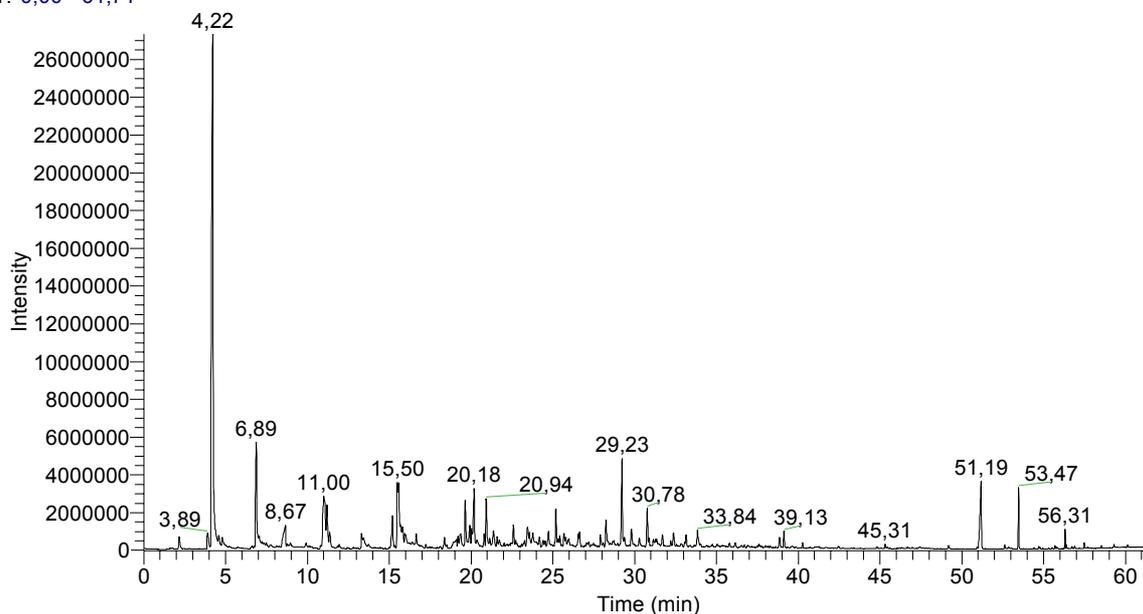


NL:
9,01E6
TIC F:
MS
BG_cafe_a
rdido_60mi
n_2

Duplicata do cromatograma obtido para análises do perfil de voláteis de café defeituoso ardido, torrado a 200°C por 60 minutos, fibra DVB/CAR/PDMS.

Apêndice L – Cromatogramas dos cafés defeituosos e suas respectivas duplicatas (Continuação)

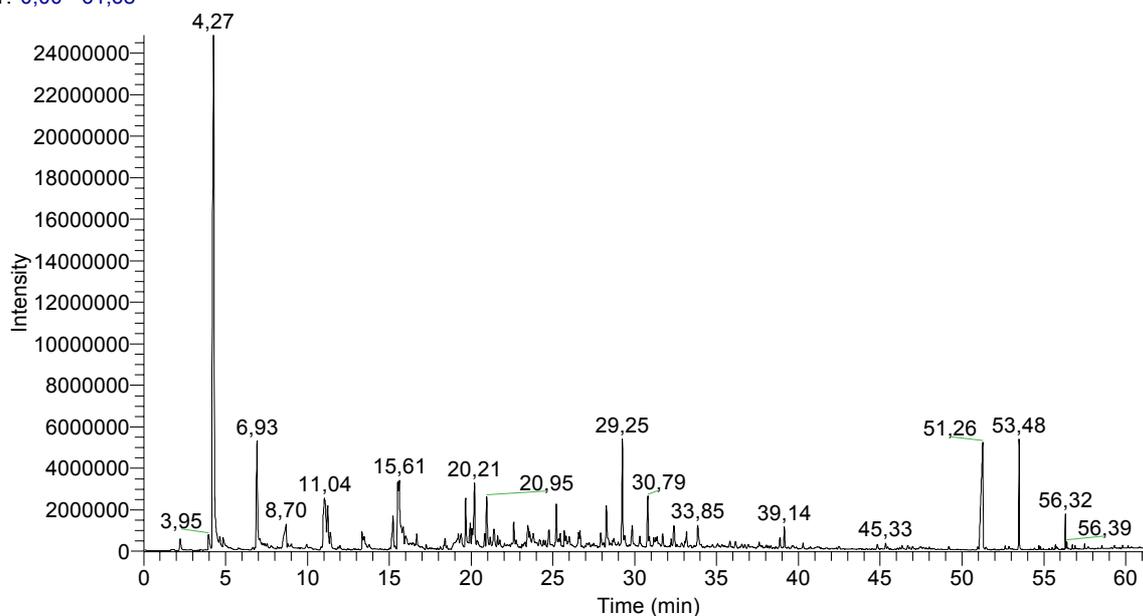
RT: 0,00 - 61,71



NL:
2,73E7
TIC F:
MS
BG_café_p
reto120min
1

Cromatograma obtido para análises do perfil de voláteis de café defeituoso preto, torrado a 200°C por 120 minutos, fibra DVB/CAR/PDMS.

RT: 0,00 - 61,68

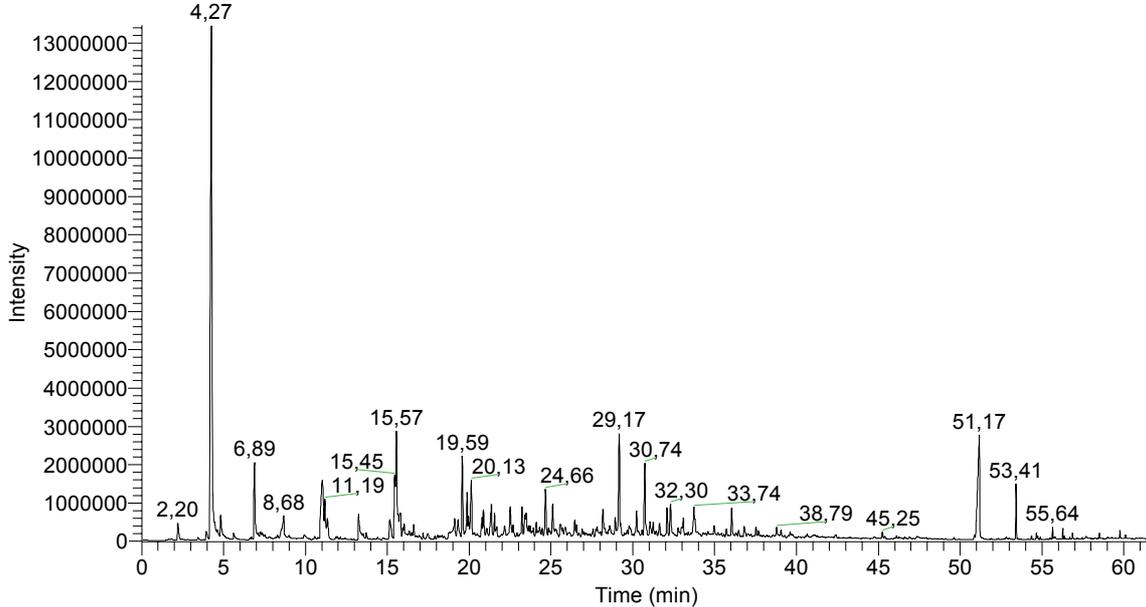


NL:
2,49E7
TIC F:
MS
BG_café_p
reto120min
2

Duplicata do cromatograma obtido para análises do perfil de voláteis de café defeituoso preto, torrado a 200°C por 120 minutos, fibra DVB/CAR/PDMS.

Apêndice L – Cromatogramas dos cafés defeituosos e suas respectivas duplicatas (Continuação)

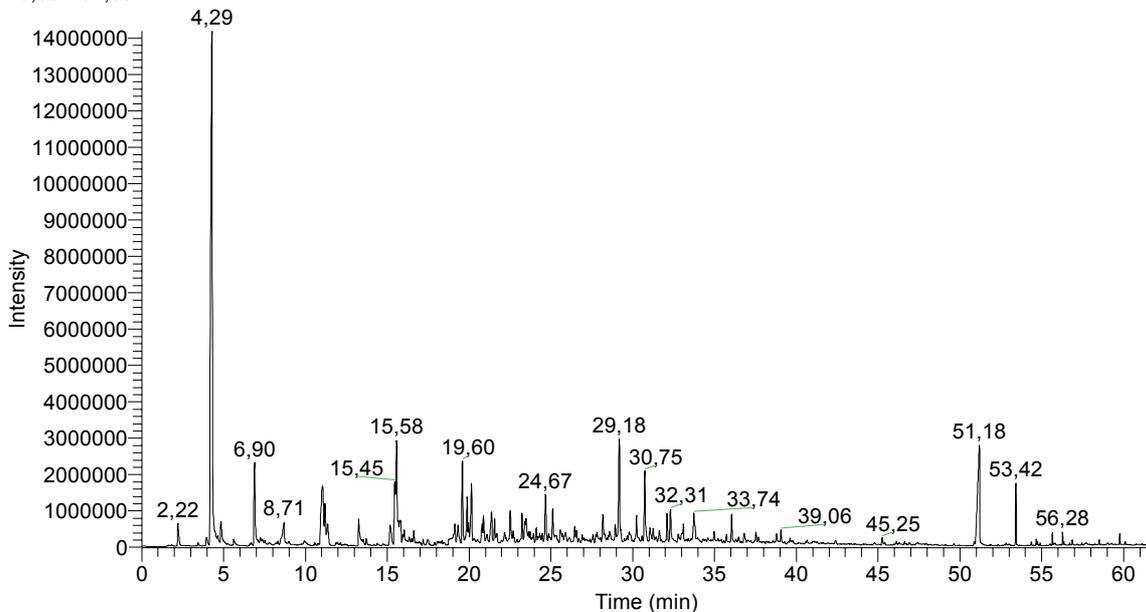
RT: 0,00 - 61,68



NL:
1,35E7
TIC F:
MS
BG_cafe_v
erde_120mi
n_1

Cromatograma obtido para análises do perfil de voláteis de café defeituoso verde, torrado a 200°C por 120 minutos, fibra DVB/CAR/PDMS.

RT: 0,00 - 61,69

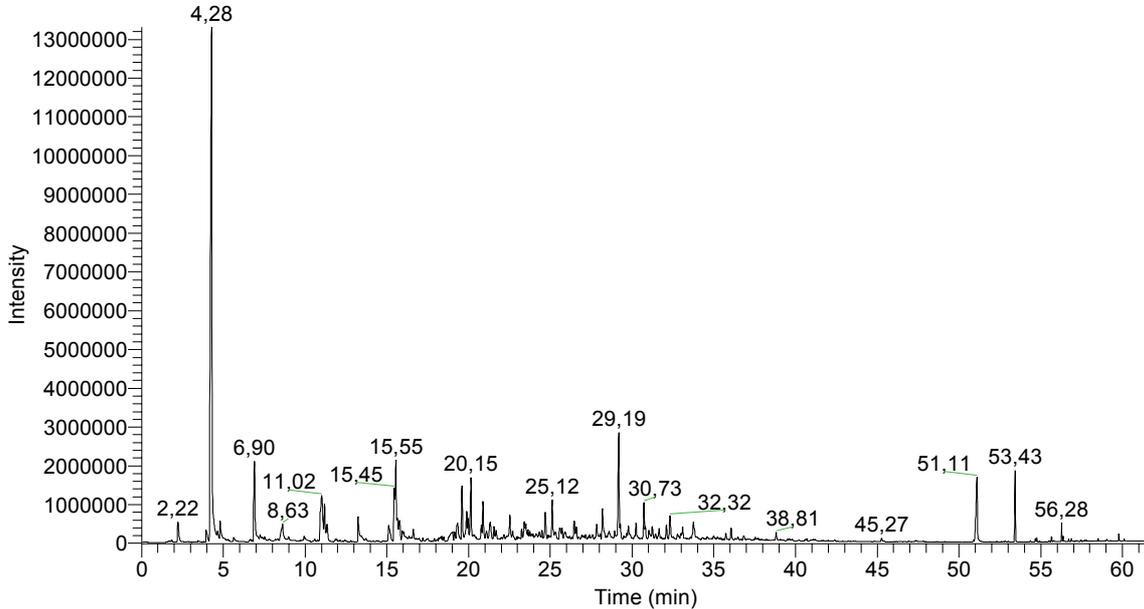


NL:
1,42E7
TIC F:
MS
BG_cafe_v
erde_120mi
n_2

Duplicata do cromatograma obtido para análises do perfil de voláteis de café defeituoso verde, torrado a 200°C por 120 minutos, fibra DVB/CAR/PDMS.

Apêndice L – Cromatogramas dos cafés defeituosos e suas respectivas duplicatas (Continuação)

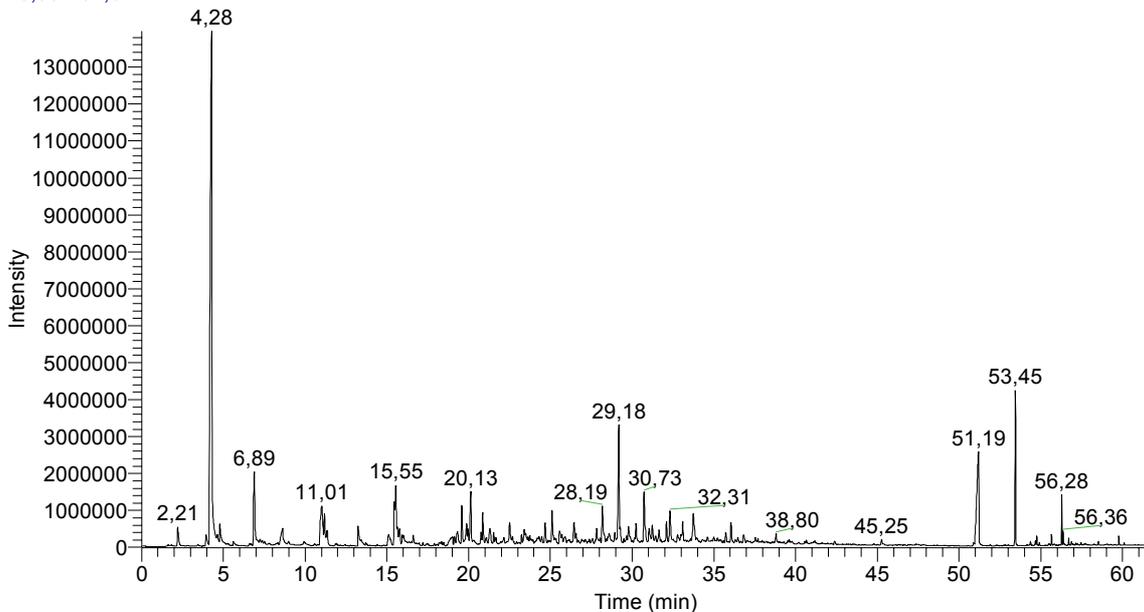
RT: 0,00 - 61,68



NL:
1,33E7
TIC F:
MS
BG_cafe_a
rdido_120m
in_1

Cromatograma obtido para análises do perfil de voláteis de café defeituoso, ardido, torrado a 200°C por 120 minutos, fibra DVB/CAR/PDMS.

RT: 0,00 - 61,67



NL:
1,40E7
TIC F:
MS
BG_cafe_a
rdido_120m
in_2

Duplicata do cromatograma obtido para análises do perfil de voláteis de café defeituoso ardido torrado a 200°C por 120 minutos, fibra DVB/CAR/PDMS.

Livros Grátis

(<http://www.livrosgratis.com.br>)

Milhares de Livros para Download:

[Baixar livros de Administração](#)

[Baixar livros de Agronomia](#)

[Baixar livros de Arquitetura](#)

[Baixar livros de Artes](#)

[Baixar livros de Astronomia](#)

[Baixar livros de Biologia Geral](#)

[Baixar livros de Ciência da Computação](#)

[Baixar livros de Ciência da Informação](#)

[Baixar livros de Ciência Política](#)

[Baixar livros de Ciências da Saúde](#)

[Baixar livros de Comunicação](#)

[Baixar livros do Conselho Nacional de Educação - CNE](#)

[Baixar livros de Defesa civil](#)

[Baixar livros de Direito](#)

[Baixar livros de Direitos humanos](#)

[Baixar livros de Economia](#)

[Baixar livros de Economia Doméstica](#)

[Baixar livros de Educação](#)

[Baixar livros de Educação - Trânsito](#)

[Baixar livros de Educação Física](#)

[Baixar livros de Engenharia Aeroespacial](#)

[Baixar livros de Farmácia](#)

[Baixar livros de Filosofia](#)

[Baixar livros de Física](#)

[Baixar livros de Geociências](#)

[Baixar livros de Geografia](#)

[Baixar livros de História](#)

[Baixar livros de Línguas](#)

[Baixar livros de Literatura](#)
[Baixar livros de Literatura de Cordel](#)
[Baixar livros de Literatura Infantil](#)
[Baixar livros de Matemática](#)
[Baixar livros de Medicina](#)
[Baixar livros de Medicina Veterinária](#)
[Baixar livros de Meio Ambiente](#)
[Baixar livros de Meteorologia](#)
[Baixar Monografias e TCC](#)
[Baixar livros Multidisciplinar](#)
[Baixar livros de Música](#)
[Baixar livros de Psicologia](#)
[Baixar livros de Química](#)
[Baixar livros de Saúde Coletiva](#)
[Baixar livros de Serviço Social](#)
[Baixar livros de Sociologia](#)
[Baixar livros de Teologia](#)
[Baixar livros de Trabalho](#)
[Baixar livros de Turismo](#)