

## **FINGERPRINTING QUIMIOMÉTRICO DE VOLÁTEIS POR GC-MS PARA A IDENTIFICAÇÃO DE MARCADORES PRODUTIVOS ASSOCIADOS AO ALTO TEOR DE CARBAMATO DE ETILA EM CACHAÇAS**

**Camila M. M. Santos<sup>1\*</sup>, Alana C. O. Mafra<sup>1</sup>; Aline G. O. Paranhos<sup>2</sup>; Ananda L. Sanson<sup>2</sup>, Lucas G. M. Amorim<sup>1</sup>; Mariana C. M. Neves<sup>3</sup>, Diego G. Rocha<sup>1</sup>**

<sup>1</sup> Universidade Federal de Minas Gerais (UFMG), Departamento de Química/ICEx, Belo Horizonte, Minas Gerais, Brasil, 31270-010.

<sup>2</sup> Universidade Federal de Ouro Preto, Departamento de Química/ICEB, Ouro Preto, Minas Gerais, Brasil, 30140-081.

<sup>3</sup> Colégio Técnico da Universidade Federal de Minas Gerais (COLTEC), Belo Horizonte, Minas Gerais, 31280-901.

\*e-mail: cmms2024@ufmg.br

A denominação “cachaça” refere-se exclusivamente ao produto brasileiro, produzido a partir da destilação mosto fermentado da cana-de-açúcar, possuindo graduação alcoólica entre 38% a 48% (v/v)<sup>1</sup>. No ano de 2023 as exportações deste produto ultrapassaram US\$20 milhões, evidenciando sua consolidação no mercado global<sup>2</sup>. Diante desse cenário de crescimento, é crucial garantir sua integridade e segurança, visto que seu processo de fermentação, além de conferir características sensoriais únicas, pode gerar subprodutos indesejáveis como o carbamato de etila (CE), contaminante com potencial carcinogênico cujo limite máximo (210 ug/L) é fiscalizado pelo Ministério da Agricultura e Agropecuária (MAPA). O presente trabalho teve como objetivo identificar e relacionar compostos presentes nas cachaças com teores de CE acima desse limite por meio de análises multivariadas (PCA, HCA e PLS-DA). Foram analisadas 42 amostras por injeção direta em GC-MS, divididas em dois grupos: 22 conformes, atendendo todos os parâmetros da legislação e 20 não conformes, com teor de carbamato acima de 210 ug/L. O tratamento quimiométrico foi realizado na plataforma MetaboAnalyst 6.0 a partir das áreas cromatográficas dos compostos identificados. A PCA e a HCA demonstraram uma clara separação dos grupos, evidenciando sua distinção química. Tanto a PCA quanto a PLS-DA revelaram o ácido propanóico com forte correlação direta com o CE. Embora este ácido carboxílico não seja um precursor direto, sua presença indica más condições fermentativas, como contaminação microbiológica, altas temperaturas e pH inadequado. Tais condições podem estressar a levedura, ocasionando a produção e excreção de ureia e outros compostos nitrogenados, precursores do CE, ou mesmo impedir a degradação dos mesmos por esses microrganismos. Os compostos que apresentaram correlação inversa, isto é, presentes em menor concentração nas amostras não conformes, foram acetoína, octanoato de etila e 2-furanmethanol. A acetoína indica uma fermentação limpa e estável, refletindo leveduras saudáveis. O octanoato de etila em níveis moderados são desejáveis em cachaças contribuindo com aroma e sabor, embora a princípio não seja um indicador primário da qualidade do processo fermentativo, podendo refletir um corte inadequado das frações do destilado. Por fim, a baixa concentração de 2-furanmethanol no grupo não conforme reforça que o aumento do CE nas amostras estudadas não está ligado à degradação por aquecimento, confirmado o processo da fermentação como o mais crítico para a inadequação das amostras estudadas. Os resultados evidenciam a quimiometria como ferramenta potencial para o controle de qualidade e identificação de possíveis indicadores químicos capazes de predizer a não conformidade de carbamato de etila em cachaças.

**Agradecimentos:** à instituição FAPEMIG pelo suporte financeiro (APQ-00876-24).

[1]CARDOSO, Maria das Graças. Produção de aguardente de cana. Viçosa, MG: UFV, 2021.

[2]MINISTÉRIO DA AGRICULTURA E PECUÁRIA (MAPA). Secretaria de Defesa Agropecuária. Anuário da Cachaça 2024:ano de referência 2023. Brasília: MAPA/SDA, 2024. 42 p.