

RESUMO SIMPLES - ENSINO EM CAFÉ

METABOLÔMICA APLICADA AO CAFÉ: ESTRATÉGIAS PARA QUALIDADE, CONSISTÊNCIA E RASTREABILIDADE

Marcelo Antônio Duarte Da Cruz (marcelo.antonio@ufu.br)

Luiza Manuela Alves Braga Cardoso (luiza.cardoso@ufu.br)

Parafino Alberto Luís (parafinoluis@gmail.com)

Livia Carneiro Fidélis Silva (livia.fidelis@ufu.br)

Líbia Diniz Santos (libia@ufu.br)

Matheus Gomes (matheusgomes@ufu.br)

A matriz química do café apresenta elevada complexidade exercendo impacto direto sobre seus atributos sensoriais, as quais constituem os principais determinantes de seu valor comercial. Esta complexidade resulta da interação de inúmeros fatores, como a espécie botânica, terroir, condições edafoclimáticas e os métodos empregados no processamento pós-colheita (Lyrio et al., 2025). A elucidação de como esses elementos modulam o perfil químico da bebida é fundamental para o desenvolvimento de estratégias e tecnologias capazes de aprimorar a qualidade e assegurar maior uniformidade do produto (Lyrio et al., 2025). A metabolômica do café investiga o conjunto de metabólitos voláteis e não voláteis originados da interação entre fatores genéticos, ambientais, de manejo pós-colheita e de torra. Essa abordagem permite elucidar mecanismos bioquímicos, autenticar a origem geográfica, diferenciar espécies e variedades, além de relacionar perfis químicos à

qualidade sensorial (de León-Solis et al., 2023; Shen et al., 2023). Abordagens de metabolômica targeted e untargeted utilizam LC-MS/HRMS, GC-MS (incluindo SPME para voláteis) e RMN de ¹H, integradas a quimiometria (PCA, PLS-DA) e aprendizagem de máquina (machine learning) para seleção de marcadores e construção de modelos preditivos robustos. Revisões recentes sintetizam plataformas analíticas, desenho experimental, controle de qualidade (amostras QC, padrões internos, correção de “batch effects”) e fluxos de processamento de dados (picoamento, alinhamento, normalização, anotações de nível MSI), consolidando boas práticas para estudos comparáveis e reproduzíveis. (Cajka and Fiehn, 2016; Farag et al., 2022; Viant et al., 2019). No escopo de autenticação e rastreabilidade, a metabolômica mostrou alta capacidade de discriminar origens e regiões produtoras, combinando painéis de compostos fenólicos, alcaloides, ácidos orgânicos e açúcares com modelos multivariados e validação cruzada/preditiva. Essa abordagem metodológica tem sido aplicada à verificação de denominações de origem e à detecção de fraudes (Calderon et al., 2023; Núñez et al., 2024). Para o fracionamento volátil (aroma), abordagens untargeted baseadas em SPME-GC-MS acopladas a quimiometria têm identificado VOCs discriminantes (ésteres, aldeídos, terpenos, pirazinas) ao longo de processamento/torra, refinando a ligação química-sensorial e sugerindo candidatos a marcadores de qualidade (Couto et al., 2024). A metabolômica também tem avançado na modelagem da qualidade ao longo da cadeia desde o grão verde, passando pelo café torrado, até a bebida final, identificando marcadores em diferentes estágios e associando-os à pontuação sensorial e a atributos como acidez e corpo; tais estudos reforçam o papel de CGAs, cafeína, trigonelina, açúcares e ácidos orgânicos na construção do perfil sensorial (Amalia et al., 2023). Em fermentações (espontâneas/controladas), abordagens LC-QTOF-MS/MS untargeted demonstram reconfiguração de metabólitos (variações de lactato, succinato, glicerol e fenólicos), com implicações diretas para previsibilidade e consistência entre lotes (Chan et al., 2021). Em síntese, a integração de plataformas (LC-MS/HRMS, GC-MS, RMN), desenho experimental rigoroso, controles analíticos e quimiometria/ML tem transformado a metabolômica do café em ferramenta central para qualidade, autenticidade e inovação em pós-colheita, oferecendo bases químicas sólidas para padronização sensorial e agregação de valor.

Palavras-chave: metabolômica; lc-ms/hrms; gc-ms; rmn de ¹h; cafés especiais; quimiometria.