

ÁCIDOS ORGÂNICOS EM AGUARDENTES PRODUZIDAS EM ALAMBIQUE E EM COLUNA

Felipe Augusto Thobias Serafim, Silmara França Buchviser, Carlos Alexandre Galinaro e Douglas Wagner Franco*

Instituto de Química de São Carlos, Universidade de São Paulo, CP 780, 13560-970 São Carlos – SP, Brasil

Fernando Valadares Novaes

Escola Superior de Agricultura “Luiz de Queiroz”, Universidade de São Paulo, CP 9, 13418-900 Piracicaba – SP, Brasil

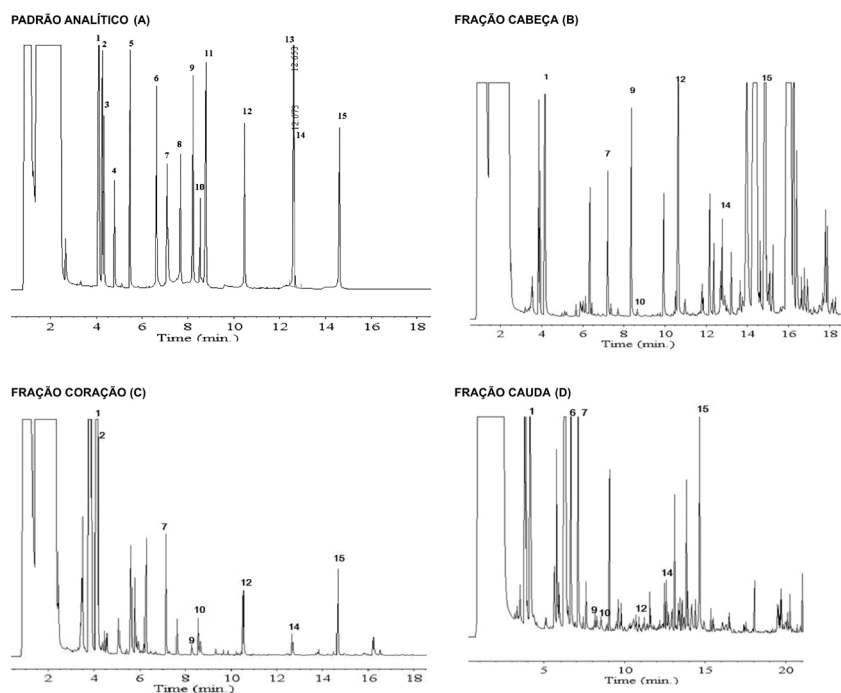


Figura 1S. Perfil cromatográfico dos 15 ácidos orgânicos derivatizados com MSTFA obtido através da análise em um CG-FID, utilizando-se uma coluna HP-5, para. A programação da rampa de temperatura foi: 60 °C (2 min) até 100 °C na razão de 25 °C min⁻¹ e, em seguida, para 300 °C à razão de 10 °C min⁻¹ (5 min). A = solução padrão; B = fração “cabeça”; C = fração “coração”; D = fração “cauda” do destilado de alambique. 1 = Ácido Lático (TMS)₁; 2 = Ácido Glicólico (TMS)₂; 3 = Ácido Pirúvico (TMS); 4 = Ácido Oxálico (TMS); 5 = Ácido Malônico (TMS)₂; 6 = Ácido Succínico (TMS)₂; 7 = Ácido Nonanoico (TMS) - Padrão interno; 8 = Ácido Glutárico (TMS)₂; 9 = Ácido Cáprico (TMS); 10 = Ácido Citramálico (TMS)₃; 11 = Ácido Málico (TMS)₃; 12 = Ácido Láurico (TMS); 13 = Ácido Cítrico (TMS)₄; 14 = Ácido Mirístico (TMS) e 15 = Ácido Palmítico (TMS)

Tabela 1S. Concentração dos ácidos orgânicos nas amostras de aguardentes da fração coração de alambiques e de colunas oriundas do mesmo vinho

Amostras	Classes	Ac. Lático ^a	Ac. Glicólico ^a	Ac. Succínico	Ac. Cáprico ^a	Ac. Láurico	Ac. Mirístico	Ac. Palmítico	Ac. Citramálico ^a	Ac. Acético
A30	coração	3,24	4,00 x 10 ⁻²	1,00 x 10 ⁻²	< LD	< LD	0,07	2,30 x 10 ⁻¹	< LD	5,98
A31	coração	38,5	< LD	< LD	1,20 x 10 ⁻¹	6,00 x 10 ⁻²	9,00 x 10 ⁻²	3,00 x 10 ⁻¹	2,00 x 10 ⁻²	265
A32	coração	9,21	2,00 x 10 ⁻¹	4,00 x 10 ⁻²	2,60 x 10 ⁻¹	5,00 x 10 ⁻²	8,00 x 10 ⁻²	2,00 x 10 ⁻¹	4,00 x 10 ⁻²	24,0
A33	coração	18,9	< LD	1,00 x 10 ⁻²	< LD	5,00 x 10 ⁻²	< LD	5,40 x 10 ⁻¹	< LD	64,8
A34	coração	35,5	6,90 x 10 ⁻¹	2,00 x 10 ⁻²	< LD	6,00 x 10 ⁻²	4,00 x 10 ⁻²	3,90 x 10 ⁻¹	6,00 x 10 ⁻²	36,7
A30C	coluna	2,28	5,00 x 10 ⁻²	9,00 x 10 ⁻²	< LD	1,00 x 10 ⁻¹	1,00 x 10 ⁻²	1,10 x 10 ⁻¹	1,00 x 10 ⁻²	5,34
A31C	coluna	54,4	2,00 x 10 ⁻²	3,00 x 10 ⁻²	< LD	5,00 x 10 ⁻²	6,00 x 10 ⁻²	6,10 x 10 ⁻¹	4,00 x 10 ⁻²	281
A32C	coluna	6,36	< LD	2,00 x 10 ⁻²	2,30 x 10 ⁻¹	5,00 x 10 ⁻²	2,00 x 10 ⁻²	1,20 x 10 ⁻¹	< LD	17,3
A33C	coluna	2,77	6,00 x 10 ⁻²	2,00 x 10 ⁻²	8,90 x 10 ⁻¹	1,70 x 10 ⁻¹	1,00 x 10 ⁻²	1,10 x 10 ⁻¹	5,00 x 10 ⁻²	5,10
A34C	coluna	6,05	4,00 x 10 ⁻²	2,00 x 10 ⁻²	1,22	2,80 x 10 ⁻¹	3,00 x 10 ⁻²	1,40 x 10 ⁻¹	2,00 x 10 ⁻²	5,75

^a = As concentrações dos ácidos orgânicos foram calculadas e corrigidas, considerando-se os respectivos fatores de recuperação.

Tabela 2S. Concentração de ácidos orgânicos (mg/100 mL de AA) nas três frações do destilado de alambique

Amostras	Classes	Lático ^a	Glicólico ^a	Pirúvico ^a	Succinico	Cáprico ^a	Láurico	Mirístico	Palmitico	Citramálico ^a	Acético
A11	cauda	9,70	< LD	< LD	5,50 x 10 ⁻¹	< LD	< LD	< LD	2,60 x 10 ⁻¹	< LD	34,2
A12	coração	1,27	< LD	< LD	< LD	1,20 x 10 ⁻¹	6,00 x 10 ⁻²	9,00 x 10 ⁻²	3,00 x 10 ⁻¹	2,00 x 10 ⁻²	30,9
A13	cabeça	3,97	< LD	< LD	< LD	9,90 x 10 ⁻¹	1,70 x 10 ⁻¹	7,00 x 10 ⁻²	1,70 x 10 ⁻¹	< LD	20,2
A81	cauda	11,1	1,00 x 10 ⁻¹	2,40 x 10 ⁻¹	2,00 x 10 ⁻²	1,70 x 10 ⁻¹	4,00 x 10 ⁻²	8,00 x 10 ⁻²	1,20 x 10 ⁻¹	1,40 x 10 ⁻¹	50,6
A82	coração	8,20	9,00 x 10 ⁻²	< LD	2,00 x 10 ⁻²	2,20 x 10 ⁻¹	6,00 x 10 ⁻²	7,00 x 10 ⁻²	1,80 x 10 ⁻¹	1,50 x 10 ⁻¹	64,8
A83	cabeça	6,45	< LD	< LD	2,00 x 10 ⁻²	1,40 x 10 ⁻¹	5,00 x 10 ⁻²	6,00 x 10 ⁻²	2,00 x 10 ⁻¹	8,00 x 10 ⁻²	51,1
A201	cauda	46,5	2,70 x 10 ⁻¹	6,80 x 10 ⁻¹	8,00 x 10 ⁻¹	1,70 x 10 ⁻¹	3,00 x 10 ⁻²	5,00 x 10 ⁻²	2,00 x 10 ⁻¹	5,00 x 10 ⁻²	127
A202	coração	8,85	< LD	< LD	1,50 x 10 ⁻¹	< LD	< LD	< LD	1,60 x 10 ⁻¹	< LD	42,4
A203	cabeça	1,41	< LD	< LD	5,00 x 10 ⁻²	1,96	1,80 x 10 ⁻¹	3,00 x 10 ⁻²	1,90 x 10 ⁻¹	< LD	15,9
A221	cauda	14,5	2,00 x 10 ⁻²	< LD	6,40 x 10 ⁻²	< LD	< LD	6,00 x 10 ⁻²	3,40 x 10 ⁻¹	< LD	6,73
A222	coração	8,66	< LD	< LD	1,10 x 10 ⁻¹	< LD	< LD	< LD	1,50 x 10 ⁻¹	< LD	8,26
A223	cabeça	2,75	2,30 x 10 ⁻¹	< LD	3,00 x 10 ⁻²	1,40 x 10 ⁻¹	3,00 x 10 ⁻²	2,00 x 10 ⁻²	6,00 x 10 ⁻²	< LD	3,27
A251	cauda	78,4	< LD	< LD	4,40 x 10 ⁻¹	< LD	< LD	< LD	4,00 x 10 ⁻²	1,00 x 10 ⁻¹	147
A252	coração	21,9	< LD	2,00 x 10 ⁻¹	5,00 x 10 ⁻²	< LD	4,00 x 10 ⁻²	6,00 x 10 ⁻²	3,10 x 10 ⁻¹	< LD	55,6
A253	cabeça	13,5	< LD	< LD	2,00 x 10 ⁻²	2,00 x 10 ⁻¹	6,00 x 10 ⁻²	5,00 x 10 ⁻²	2,80 x 10 ⁻¹	< LD	27,9
A26	cauda	203	< LD	< LD	4,00 x 10 ⁻²	2,10 x 10 ⁻¹	3,30 x 10 ⁻¹	< LD	1,70 x 10 ⁻¹	< LD	156
A262	coração	18,9	< LD	< LD	1,00 x 10 ⁻²	< LD	5,00 x 10 ⁻²	< LD	5,40 x 10 ⁻¹	< LD	48,0
A263	cabeça	8,63	< LD	< LD	< LD	2,35	2,80 x 10 ⁻¹	1,10 x 10 ⁻¹	1,05	3,00 x 10 ⁻²	25,1
A301	cauda	32,5	< LD	1,30	3,00 x 10 ⁻²	< LD	< LD	< LD	2,70 x 10 ⁻¹	< LD	43,5
A302	coração	3,24	4,00 x 10 ⁻²	4,00 x 10 ⁻¹	2,00 x 10 ⁻²	< LD	< LD	7,00 x 10 ⁻²	2,30 x 10 ⁻¹	< LD	5,98
A303	cabeça	2,16	7,00 x 10 ⁻²	< LD	2,00 x 10 ⁻²	7,40 x 10 ⁻¹	6,00 x 10 ⁻²	1,20 x 10 ⁻¹	4,10 x 10 ⁻¹	< LD	4,43
A311	cauda	54,6	8,00	4,98	5,00 x 10 ⁻²	1,00 x 10 ⁻¹	6,00 x 10 ⁻²	6,00 x 10 ⁻²	2,00 x 10 ⁻²	2,00 x 10 ⁻²	782
A312	coração	38,5	7,00 x 10 ⁻²	5,70	< LD	4,00 x 10 ⁻²	7,00 x 10 ⁻²	7,00 x 10 ⁻²	4,40 x 10 ⁻¹	1,40 x 10 ⁻¹	665
A313	cabeça	3,05 x 10 ⁻¹	< LD	< LD	< LD	5,00 x 10 ⁻¹	3,40 x 10 ⁻¹	1,60 x 10 ⁻¹	7,70 x 10 ⁻¹	< LD	265
A321	cauda	11,9	< LD	< LD	< LD	3,50 x 10 ⁻¹	9,00 x 10 ⁻²	1,40 x 10 ⁻¹	1,60 x 10 ⁻¹	6,00 x 10 ⁻²	45,1
A322	coração	9,21	2,00 x 10 ⁻¹	< LD	4,00 x 10 ⁻²	2,60 x 10 ⁻¹	5,00 x 10 ⁻²	1,80 x 10 ⁻²	2,00 x 10 ⁻¹	4,00 x 10 ⁻²	24,0
A323	cabeça	2,33	1,00 x 10 ⁻¹	< LD	< LD	1,15	1,30 x 10 ⁻¹	1,90 x 10 ⁻¹	6,40 x 10 ⁻¹	< LD	17,1
A331	cauda	64,2	1,09	< LD	5,00 x 10 ⁻²	6,70 x 10 ⁻¹	1,00 x 10 ⁻¹	1,80 x 10 ⁻¹	3,60 x 10 ⁻¹	3,30 x 10 ⁻¹	53,0
A332	coração	13,0	2,30 x 10 ⁻¹	< LD	2,00 x 10 ⁻²	4,60 x 10 ⁻¹	1,30 x 10 ⁻¹	7,00 x 10 ⁻²	3,40 x 10 ⁻¹	8,00 x 10 ⁻²	15,5
A333	cabeça	2,98	1,70 x 10 ⁻¹	2,00 x 10 ⁻²	2,00 x 10 ⁻²	3,49	2,80 x 10 ⁻¹	1,20 x 10 ⁻¹	3,80 x 10 ⁻¹	2,00 x 10 ⁻²	9,22
A341	cauda	97,5	1,51	< LD	5,00 x 10 ⁻²	< LD	1,10 x 10 ⁻¹	1,80 x 10 ⁻¹	1,30 x 10 ⁻¹	1,80 x 10 ⁻¹	74,7
A342	coração	35,5	7,00 x 10 ⁻¹	< LD	2,00 x 10 ⁻²	< LD	6,00 x 10 ⁻²	4,00 x 10 ⁻²	4,00 x 10 ⁻¹	6,00 x 10 ⁻²	36,7
A343	cabeça	12,0	< LD	< LD	3,00 x 10 ⁻²	10,4	1,62	4,10 x 10 ⁻¹	1,60	5,00 x 10 ⁻²	8,02
A371	cauda	62,25	< LD	< LD	< LD	< LD	3,00 x 10 ⁻²	8,00 x 10 ⁻¹	3,40 x 10 ⁻¹	6,00 x 10 ⁻²	69,7
A372	coração	16,19	7,00 x 10 ⁻²	< LD	< LD	< LD	1,20 x 10 ⁻¹	8,00 x 10 ⁻¹	8,10 x 10 ⁻¹	2,00 x 10 ⁻²	43,5
A373	cabeça	7,10	1,80 x 10 ⁻¹	< LD	1,00 x 10 ⁻²	2,37	7,30 x 10 ⁻¹	2,80 x 10 ⁻²	2,02	< LD	58,31
D051	cauda	3,61	1,20 x 10 ⁻¹	< LD	4,00 x 10 ⁻²	3,03	3,30 x 10 ⁻¹	< LD	4,00 x 10 ⁻²	1,70 x 10 ⁻¹	< LD
D052	coração	7,20 x 10 ⁻¹	< LD	3,61	2,00 x 10 ⁻²	1,19	1,80 x 10 ⁻¹	5,00 x 10 ⁻²	3,30 x 10 ⁻¹	4,00 x 10 ⁻²	21,88
D053	cabeça	2,81 x 10 ⁻¹	< LD	< LD	2,00 x 10 ⁻²	4,10 x 10 ⁻¹	9,10 x 10 ⁻¹	1,80 x 10 ⁻¹	6,40 x 10 ⁻¹	3,00 x 10 ⁻²	616
D061	cauda	3,03	< LD	0,27	3,00 x 10 ⁻²	2,51	2,78 x 10 ⁻¹	< LD	2,00 x 10 ⁻²	9,00 x 10 ⁻²	< LD
D062	coração	6,83 x 10 ⁻¹	2,00 x 10 ⁻²	< LD	2,00 x 10 ⁻²	2,89	2,78 x 10 ⁻¹	7,00 x 10 ⁻²	2,50 x 10 ⁻¹	1,00 x 10 ⁻¹	28,49
D063	cabeça	4,11 x 10 ⁻¹	< LD	< LD	2,00 x 10 ⁻²	10,1	1,05	2,30 x 10 ⁻¹	1,02	3,00 x 10 ⁻²	52,66
ACLO1	cauda	15,2	< LD	< LD	< LD	< LD	1,20 x 10 ⁻²	8,00 x 10 ⁻²	7,00 x 10 ⁻²	5,00 x 10 ⁻²	< LD
ACLO2	coração	6,12	< LD	< LD	< LD	4,30 x 10 ⁻¹	1,20 x 10 ⁻¹	1,00 x 10 ⁻¹	6,70 x 10 ⁻¹	2,00 x 10 ⁻²	300
ACLO3	cabeça	2,68	< LD	< LD	< LD	5,52	1,51	4,10 x 10 ⁻¹	2,58	2,00 x 10 ⁻²	53,0

^a = As concentrações dos ácidos foram calculadas e corrigidas, considerando-se os respectivos fatores de recuperação.

Tabela 3S. Valores médios e de mediana dos quatro descritores das amostras correspondentes a cada fração do destilado de alambique e dos seus *outliers*

Ácidos Orgânicos				
Fração “Cabeça”	Lático	Láurico	Mirístico	Pamfítico
A203	1,41	1,80 x 10 ⁻¹	3,00 x 10 ⁻²	1,90 x 10 ⁻¹
A253	8,63	6,00 x 10 ⁻²	5,00 x 10 ⁻²	2,80 x 10 ⁻¹
A263	4,57	2,80 x 10 ⁻¹	1,10 x 10 ⁻¹	1,05
A303	2,16	6,00 x 10 ⁻²	1,20 x 10 ⁻¹	4,10 x 10 ⁻¹
A313	2,33	3,40 x 10 ⁻¹	1,60 x 10 ⁻¹	7,70 x 10 ⁻¹
A323	12,0	1,30 x 10 ⁻¹	1,90 x 10 ⁻¹	6,40 x 10 ⁻¹
A343	7,10	1,62	4,10 x 10 ⁻¹	1,60
A373	8,63	7,30 x 10 ⁻¹	2,80 x 10 ⁻¹	2,02
Média	5,85	4,30 x 10 ⁻¹	1,70 x 10 ⁻¹	8,70 x 10 ⁻¹
Mediana	5,84	2,30 x 10 ⁻¹	1,40 x 10 ⁻¹	7,10 x 10 ⁻¹
Fração “Coração”				
A12	1,27	6,00 x 10 ⁻²	9,00 x 10 ⁻²	3,00 x 10 ⁻¹
A82	8,18	6,00 x 10 ⁻²	1,80 x 10 ⁻¹	1,80 x 10 ⁻¹
A202	8,85	4,00 x 10 ⁻²	1,60 x 10 ⁻¹	1,60 x 10 ⁻¹
A222	8,65	5,00 x 10 ⁻²	<LD	3,10 x 10 ⁻¹
A252	21,9	1,30 x 10 ⁻¹	6,00 x 10 ⁻²	5,40 x 10 ⁻¹
A262	18,9	1,20 x 10 ⁻¹	<LD	2,30 x 10 ⁻¹
A302	3,24	1,80 x 10 ⁻¹	7,00 x 10 ⁻²	3,40 x 10 ⁻¹
A332	9,21	2,80 x 10 ⁻¹	7,00 x 10 ⁻²	8,10 x 10 ⁻¹
A372	13,0	1,20 x 10 ⁻¹	8,00 x 10 ⁻²	3,30 x 10 ⁻¹
D052	16,1	6,00 x 10 ⁻²	5,00 x 10 ⁻²	2,50 x 10 ⁻¹
D062	7,20 x 10 ⁻¹	6,00 x 10 ⁻²	7,00 x 10 ⁻²	6,70 x 10 ⁻¹
ACLO2	6,80 x 10 ⁻¹	4,00 x 10 ⁻²	1,00 x 10 ⁻¹	3,00 x 10 ⁻¹
Média	9,24	1,00 x 10 ⁻¹	8,00 x 10 ⁻²	3,30 x 10 ⁻¹
Mediana	8,75	6,00 x 10 ⁻²	7,00 x 10 ⁻²	3,00 x 10 ⁻¹
Fração “Cauda”				
A201	46,5	3,00 x 10 ⁻²	5,00 x 10 ⁻²	2,00 x 10 ⁻¹
A251	78,4	<LD	<LD	4,00 x 10 ⁻¹
A261	203	3,30 x 10 ⁻¹	<LD	1,70 x 10 ⁻¹
A301	32,5	<LD	<LD	2,70 x 10 ⁻¹
A311	54,6	6,00 x 10 ⁻²	1,80 x 10 ⁻¹	2,00 x 10 ⁻²
A331	64,2	1,00 x 10 ⁻¹	1,80 x 10 ⁻¹	3,60 x 10 ⁻¹
A341	46,5	1,10 x 10 ⁻¹	8,00 x 10 ⁻²	1,30 x 10 ⁻¹
A371	78,4	3,00 x 10 ⁻²	5,00 x 10 ⁻²	3,40 x 10 ⁻¹
Média	75,0	8,00 x 10 ⁻²	7,00 x 10 ⁻²	1,90 x 10 ⁻¹
Mediana	54,6	4,00 x 10 ⁻²	5,00 x 10 ⁻²	1,90 x 10 ⁻¹

Tabela 3S. Continuação

<i>Outliers</i> na fração coração referente a:	Lático	Láurico	Mirístico	Pamfítico
Fração “Cabeça”				
A13	3,97	1,70 x 10 ⁻¹	7,00 x 10 ⁻²	1,70 x 10 ⁻¹
A83	6,45	5,00 x 10 ⁻²	6,00 x 10 ⁻²	2,00 x 10 ⁻¹
A203	2,75	1,80 x 10 ⁻¹	3,00 x 10 ⁻²	1,90 x 10 ⁻¹
A223	13,5	3,00 x 10 ⁻²	2,00 x 10 ⁻²	6,00 x 10 ⁻²
A253	2,16	6,00 x 10 ⁻²	5,00 x 10 ⁻²	2,80 x 10 ⁻¹
A303	2,98	2,80 x 10 ⁻¹	1,20 x 10 ⁻¹	4,10 x 10 ⁻¹
A333	3,97	1,70 x 10 ⁻¹	1,20 x 10 ⁻¹	3,80 x 10 ⁻¹
Média	5,10	1,30 x 10 ⁻¹	7,00 x 10 ⁻²	2,40 x 10 ⁻¹
Mediana	3,97	1,70 x 10 ⁻¹	6,00 x 10 ⁻²	2,20 x 10 ⁻¹
Fração “Cauda”				
A11	9,70	<LD	<LD	2,60 x 10 ⁻¹
A81	11,1	4,00 x 10 ⁻²	8,00 x 10 ⁻²	1,20 x 10 ⁻¹
A221	14,5	<LD	6,00 x 10 ⁻²	3,40 x 10 ⁻¹
A321	11,8	9,00 x 10 ⁻²	1,40 x 10 ⁻¹	1,60 x 10 ⁻¹
D051	3,61	3,30 x 10 ⁻¹	<LD	4,00 x 10 ⁻²
D061	3,03	2,30 x 10 ⁻¹	<LD	2,00 x 10 ⁻²
ACLO1	15,2	1,00 v	8,00 x 10 ⁻²	7,00 x 10 ⁻²
Média	9,84	1,50 x 10 ⁻¹	5,00 x 10 ⁻²	1,40 x 10 ⁻¹
Mediana	11,1	1,00 x 10 ⁻¹	6,00 x 10 ⁻²	1,20 x 10 ⁻¹
Fração “Coração”				
A312	38,5	6,00 x 10 ⁻²	7,00 x 10 ⁻²	4,40 x 10 ⁻¹
A342	35,5	6,00 x 10 ⁻²	4,00 x 10 ⁻²	4,00 x 10 ⁻¹
Média	37,0	6,00 x 10 ⁻²	5,50 x 10 ⁻²	4,2 x 10 ⁻¹
Mediana	37,0	6,00 x 10 ⁻²	6,50 x 10 ⁻²	4,2 x 10 ⁻¹