



ABORDAGEM METABOLÔMICA APLICADA AO CAFÉ: AVANÇOS E TENDÊNCIAS

Graziele Fernanda Bailona¹, Fabiana Aparecida Marques²

1 Estudante de Licenciatura em Química; IF Goiano Campus Ceres.
bailonagraziele@gmail.com

2 Doutora em Ciências/Química/Bioanalítica (USP); Mestre em Química Orgânica/Produtos Naturais (UFSCar); Docente no IF Goiano Campus Ceres.
fabiana.marques@ifgoiano.edu.br

Recebido em: 15/11/2025 – Aprovado em: 15/12/2025 – Publicado em: 30/12/2025
DOI: 10.18677/EnciBio_2025D1

RESUMO

O café é um dos produtos agrícolas de maior relevância mundial, possuindo expressivo impacto econômico, social e cultural, especialmente em países produtores como o Brasil. A busca pela qualidade, autenticidade e rastreabilidade da bebida tem impulsionado o uso de abordagens analíticas avançadas, entre as quais se destaca a metabolômica, abordagem analítica capaz de identificar e quantificar compostos químicos relacionados à origem geográfica, ao processamento de torra e o modo de preparo. Esta revisão sintetiza as principais contribuições de estudos publicados entre 2020 e 2025 que aplicaram estudos de perfis químicos do café e abordagens metabolômicas, tanto alvo (*targeted*), quanto global (*untargeted*), na investigação da qualidade sensorial, autenticidade geográfica, detecção de adulterações e caracterização de processos tecnológicos no café. Os estudos analisados apontam avanços significativos na diferenciação de espécies e origens, na identificação de marcadores químicos de qualidade e no monitoramento de modificações químicas durante o processamento. A abordagem ômica em destaque tem potencializado a precisão das análises e o reconhecimento de padrões químicos complexos de amostras de café. Além de consolidar-se como ferramenta essencial para o controle de qualidade e rastreabilidade, a metabolômica destaca-se por seu caráter interdisciplinar, integrando princípios de instrumentação química e estatística multivariada. Embora a área esteja avançada, ainda enfrenta desafios importantes, como falta de padronização de protocolos e limitações na consolidação de grandes bancos de dados. Contudo, é uma abordagem que tem ampliado o entendimento sobre a composição química do café e fortalecido sua aplicação em estudos de autenticidade, qualidade e valorização da bebida.

PALAVRAS-CHAVE: Café; metabolômica, qualidade

METABOLOMICS APPROACH APPLIED TO COFFEE: ADVANCES AND TRENDS

ABSTRACT

Coffee is one of the most important agricultural products worldwide, with a significant economic, social, and cultural impact, especially in producing countries like Brazil. The search for quality, authenticity, and traceability of drinking has driven the use of advanced analytical approaches, among which metabolomics stands out. This analytical approach can identify and quantify chemical compounds related to geographic origin, processing, and roasting. This review synthesizes the main contributions of studies published between 2020 and 2025 that applied metabolomics approaches, both targeted and untargeted, in the investigation of sensory quality, geographic authenticity, adulteration detection, and characterization of technological processes in coffee. The analyzed studies point to significant advances in the differentiation of species and origins, in the identification of chemical quality markers, and in the monitoring of chemical modifications during processing. The highlighted omics approach has enhanced the precision of analyses and the recognition of complex chemical patterns in coffee samples. In addition to establishing itself as an essential tool for quality control and traceability, metabolomics stands out for its interdisciplinary nature, integrating principles of chemical instrumentation and multivariate statistics. Although the field is advanced, it still faces significant challenges, such as a lack of standardized protocols and limitations in consolidating large databases. However, it is an approach that has broadened the understanding of the chemical composition of coffee and strengthened its application in authenticity, quality, and valorization studies of the drinking.

KEYWORDS: Coffee; metabolomics; quality

INTRODUÇÃO

O café é uma das bebidas mais consumidas no mundo e figura entre os principais produtos agrícolas de impacto econômico, social e cultural. No cenário global, o Brasil destaca-se como maior produtor e exportador, desempenhando papel estratégico na cadeia de abastecimento e no desenvolvimento de tecnologias aplicadas ao setor cafeeiro (PIMENTA *et al.*, 2025). Além de sua relevância econômica, o café possui um caráter simbólico e cultural significativo, influenciando hábitos de consumo, rituais sociais e práticas culinárias em diferentes regiões do mundo (ZAKIDOU *et al.*, 2021).

Este artigo é direcionado a pesquisadores, profissionais da indústria cafeeira, estudantes e agentes do setor produtivo que buscam compreender como a metabolômica tem sido aplicada para caracterizar qualidade, autenticidade e processamento do café.

A qualidade do café é definida pela interação de diversos fatores, como espécie botânica, predominantemente *Coffea arabica* (Arábica) e *Coffea canephora* (Robusta), condições edafoclimáticas, manejo agrícola, práticas pós-colheita, processamento e torra. Essas variáveis determinam a composição química dos grãos e, consequentemente, atributos sensoriais como aroma, acidez, doçura, corpo e amargor (MEONI *et al.*, 2021; RIBEIRO *et al.*, 2024). Compostos como cafeína, trigonelina, ácidos clorogênicos, lipídios, fenóis e voláteis aromáticos exercem papel central na formação dessas características (HEO *et al.*, 2020; LAPČÍKOVÁ *et al.*, 2023).

Avanços recentes em análises instrumentais têm permitido abordagens analíticas mais amplas e integradas no estudo da matriz química do café. Entre essas abordagens, destaca-se a metabolômica, área dedicada à detecção, identificação e quantificação de metabólitos presentes em sistemas biológicos ou alimentares (GARCÍA-PÉREZ *et al.*, 2024).

No contexto do café, a metabolômica possibilita a caracterização simultânea de centenas de compostos, permitindo estabelecer relações entre características químicas e fatores ambientais, genéticos ou tecnológicos. Essa capacidade amplia o potencial de rastreabilidade geográfica, certificação de origem e avaliação da qualidade final do produto (VIVO *et al.*, 2023; CARRÉRA *et al.*, 2025).

Entre as principais técnicas empregadas em estudos metabolômicos destacam-se a cromatografia líquida acoplada à espectrometria de massas (LC-MS – do inglês *Liquid Chromatography-Mass Spectrometry*), a cromatografia gasosa acoplada à espectrometria de massas (GC-MS – do inglês *Gas Chromatography-Mass Spectrometry*), a ressonância magnética nuclear (RMN) e cromatografia gasosa abrangente bidimensional acoplada à espectrometria de massas (GC×GC-MS – do inglês *Comprehensive Two-Dimensional Gas Chromatography-Mass Spectrometry*), que aumentam a sensibilidade para compostos voláteis e semivoláteis (VAYE *et al.*, 2022; MONTIS *et al.*, 2022).

A integração dessas plataformas com ferramentas estatísticas multivariadas, como Análise de Componentes Principais (PCA – do inglês *Principal Component Analysis*) e a Análise Discriminante por Mínimos Quadrados Parciais, (PLS-DA – do inglês *Partial Least Squares Discriminant Analysis*) e Análise Discriminante por Projeções Ortogonais às Estruturas Latentes (OPLS-DA, do inglês, *Orthogonal Partial Least Squares Discriminant Analysis*), tem sido essencial para interpretar os extensos conjuntos de dados gerados, permitindo a identificação de padrões químicos e biomarcadores relevantes para autenticidade, processamento e qualidade sensorial (ZHONG, 2022).

Estudos recentes ilustram o potencial dessa abordagem. Vivo *et al.* (2023) demonstraram que compostos voláteis podem discriminar cafês Arábica e Robusta de diferentes origens. Trabalhos de Pimenta *et al.* (2025) e Carréra *et al.* (2025) revelaram assinaturas químicas associadas a regiões produtoras, enquanto pesquisas de Andrade *et al.* (2023) e Ribeiro *et al.* (2024) ampliaram a aplicabilidade da metabolômica para o aproveitamento de resíduos e óleos de café, evidenciando novas possibilidades dentro da economia circular.

Diante desse cenário, esta revisão tem como objetivo sintetizar os principais avanços metodológicos e aplicações da metabolômica em estudos envolvendo o café entre 2020 e 2025. Busca-se integrar evidências sobre plataformas instrumentais, marcadores químicos, aplicações em qualidade e autenticidade, além de perspectivas futuras para o uso da metabolômica no setor cafeeiro. Ao reunir essas informações, espera-se oferecer uma visão abrangente e atualizada sobre o potencial dessa abordagem no entendimento químico e tecnológico de uma das bebidas mais emblemáticas do mundo.

DESENVOLVIMENTO

Método da Revisão

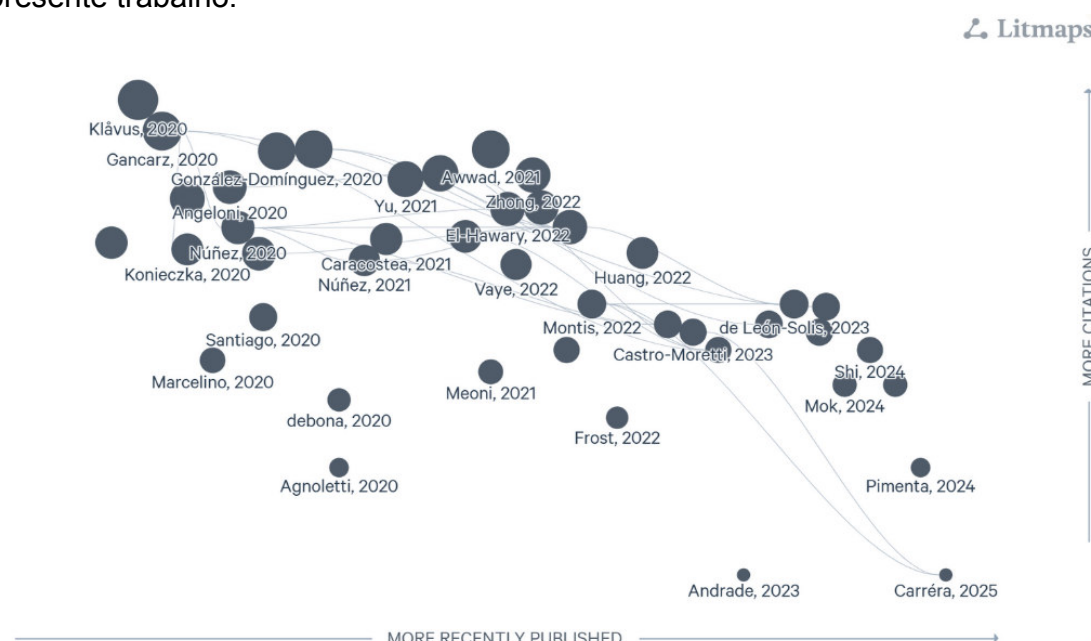
A presente pesquisa caracteriza-se como uma revisão bibliográfica narrativa, voltada à síntese e análise de estudos que aplicaram abordagens metabolômicas ao café. O propósito foi reunir evidências recentes, compreender tendências metodológicas e identificar lacunas de pesquisas na área.

O levantamento bibliográfico foi realizado entre junho e novembro de 2025, abrangendo publicações dos últimos cinco anos (2020–2025). As referências foram identificadas por meio da ferramenta de busca baseada em Inteligência Artificial, Elicit (<https://elicit.com/>), que agrega conteúdo de repositórios acadêmicos primários como *PubMed*, *Scopus*, *Web of Science*, *ScienceDirect*, *Google Scholar*, integrando os programas de busca *Semantic Scholar*, e *OpenAlex* (ELICIT HELP CENTER, 2025).

Os critérios de inclusão abrangeram artigos: (i) publicados entre 2020 e 2025, (ii) que aplicaram abordagens metabolômicas (GC-MS, LC-MS, RMN e espectroscopia) em amostras de café verde, torrado, bebidas ou cápsulas; e (iii) que apresentaram dados experimentais, estatísticos ou analíticos relacionados à qualidade, origem geográfica, adulteração ou processamento.

Foram excluídos: artigos sem dados experimentais (opiniões, resenhas e editoriais); estudos que não apresentaram aplicação direta de metabolômica ao café; publicações sem revisão por pares ou sem acesso ao texto completo. Após a triagem inicial por título e resumo, foram selecionados 40 artigos que atenderam aos critérios estabelecidos. O mapa de literatura construído no Litmaps® (Figura 1) evidencia os agrupamentos temáticos e os artigos centrais que fundamentaram esta revisão.

FIGURA 1. Mapa de literatura gerado na plataforma *Litmaps*®, evidenciando a rede de citações, os agrupamentos temáticos e os 40 artigos centrais que estruturaram o presente trabalho.



FONTE: Autoria própria, por meio do software *Litmaps*® (<https://www.litmaps.com/>).

Para organização, filtragem e síntese das informações extraídas dos artigos selecionados, foram utilizadas ferramentas complementares. Conforme feito por Santos *et al.* (2024), o Microsoft Excel foi empregado para tabulação, categorização e filtragem dos estudos (ano, autoria, técnicas analíticas e principais achados), enquanto o Microsoft Word foi utilizado para estruturar as sínteses e elaborar o texto final da revisão. As figuras foram diagramadas e padronizadas no próprio Word.

A análise dos estudos foi conduzida de forma qualitativa e comparativa, agrupando as evidências em eixos temáticos: (1) avanços metodológicos da metabolômica; (2) autenticidade e origem geográfica; (3) qualidade sensorial de cafés especiais; (4) efeitos da torra e dos métodos de preparo; (5) técnicas analíticas e tratamento multivariado de dados; e (6) sustentabilidade e reuso de resíduos.

Por fim, os resultados foram organizados e discutidos de forma integrada, considerando convergências, divergências e especificidades de cada pesquisa, com base nas informações apresentadas pelos próprios estudos presentes nos próprios artigos.

REVISÃO DE LITERATURA

As pesquisas reunidas nesta seção apresentam avanços significativos nas técnicas instrumentais de alta resolução e na aplicação de ferramentas quimiométricas, consolidando a metabolômica como abordagem robusta para a investigação de alimentos e bebidas de matrizes complexas.

Os artigos analisados foram organizados em quatro eixos principais: (i)

Metabolômica e foodômica: conceitos e aplicações (ii) Composição química e marcadores metabólicos do café (iii) aplicações práticas em qualidade, autenticidade e processamento e (iv) Tendências e perspectivas futuras.

Metabolômica e foodômica: conceitos e aplicações

A metabolômica tem sido amplamente empregada para investigar sistemas biológicos e alimentares devido à sua capacidade de detectar simultaneamente centenas de compostos com alta sensibilidade e reprodutibilidade (GARCÍA-PÉREZ *et al.*, 2024; ZHONG, 2022). Em alimentos complexos como o café, essa abordagem permite compreender como fatores genéticos, ambientais, pós-colheita e tecnológicos influenciam o perfil químico da matriz (MEONI *et al.*, 2021; RIBEIRO *et al.*, 2024).

Os estudos metabolômicos seguem etapas padronizadas que incluem: delineamento experimental, preparo das amostras, aquisição instrumental, pré-processamento dos dados, análises estatísticas multivariadas e univariadas, identificação dos metabólitos e interpretação biológica (GARCÍA-PÉREZ *et al.*, 2024). O preparo das amostras varia conforme a técnica analítica. Em GC-MS, por exemplo, compostos polares e termicamente instáveis precisam passar por derivatização para se tornarem voláteis e compatíveis com a análise (FROST *et al.*, 2022).

Já LC-MS e RMN permitem analisar metabólitos polares, fenólicos, lipídios e compostos bioativos sem necessidade de modificação química prévia (CAPOZZI *et al.*, 2013; ZHONG, 2022).

As técnicas analíticas mais empregadas incluem GC-MS, LC-MS, GC×GC-MS, RMN e espectroscopia (ZHONG, 2022). A GC-MS é especialmente útil para compostos voláteis relacionados ao aroma do café, enquanto a LC-MS oferece ampla cobertura de

compostos polares e fenólicos relevantes para autenticidade e diferenciação geográfica (GARCÍA-PÉREZ *et al.*, 2024). A RMN, embora menos sensível, fornece dados altamente reprodutíveis e quantitativos, sendo ideal para comparações diretas entre amostras (ZHONG, 2022).

Uma abordagem metabolômica normalmente segue um protocolo de delineamento experimental, o qual envolve etapas como: seleção de metabólitos (no caso da metabolômica alvo), obtenção e preparo de amostra, análise instrumental, processamento dos dados, análise estatística, identificação dos metabólitos e interpretação biológica (Figura 2).

FIGURA 2. Fluxograma de trabalho envolvido em abordagens metabolômicas.



FONTE: Autoria própria, utilizando o software Canva®.

Após a aquisição instrumental, inicia-se o pré-processamento utilizando *softwares* como *XCMS*, *MZmine*, *CAMERA* e *MetaboAnalyst*, responsáveis pela detecção, alinhamento, normalização e filtragem de ruídos (ESHAWU *et al.*, 2024). As análises estatísticas subsequentes incluem métodos não supervisionados, como PCA, para explorar padrões gerais, e métodos supervisionados como PLS-DA e OPLS-DA que permitem discriminar grupos e identificar potenciais biomarcadores (GARCÍA-PÉREZ *et al.*, 2024). As análises univariadas complementam esse processo ao avaliar individualmente cada metabólito por meio de testes como ANOVA, teste t de *Student* ou *Mann-Whitney U*, conforme o tipo e distribuição dos dados (ANTUNES *et al.*, 2022; MARKOS *et al.*, 2023).

A identificação de metabólitos ocorre por comparação dos espectros com bibliotecas comerciais e bancos de dados especializados, como NIST, HMDB, *MassBank*, *Metlin* e *LipidMaps*, garantindo maior confiabilidade no processo (FARAG *et al.*, 2022; HUANG *et al.*, 2022; ESHAWU *et al.*, 2024; AWU *et al.*, 2024). A etapa final, de interpretação biológica, relaciona os metabólitos diferencialmente expressos às vias metabólicas e aos fenótipos de interesse, utilizando bases como *KEGG*, *MetaCyc*, *MetaboAnalyst* e *MetaboLights* (MARKOS *et al.*, 2023).

Nesse contexto, surge a *foodômica* (*foodomics*), uma abordagem interdisciplinar que integra metabolômica, proteômica, transcriptômica e genômica para investigar alimentos de forma global, incluindo composição química, autenticidade, valor nutricional e efeitos do processamento (SHI *et al.*, 2024). No âmbito metabolômico, a *foodômica* permite traçar *fingerprints* que refletem origem geográfica, variedade botânica, condições de cultivo, processamento e características sensoriais (CAPOZZI *et al.*, 2013).

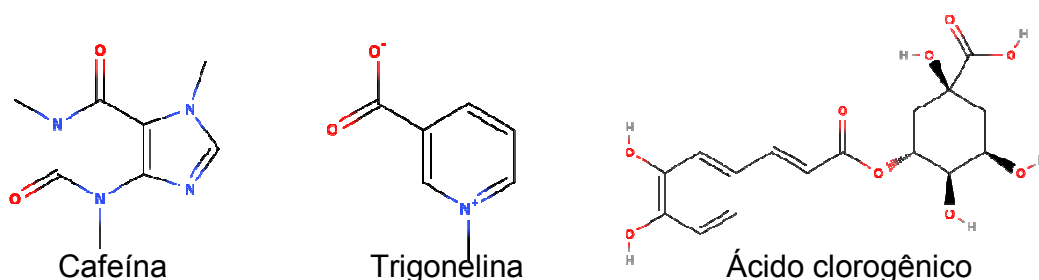
A integração de dados obtidos por LC-MS, GC-MS e RMN com ferramentas quimiométricas tem sido especialmente relevante para alimentos como o café, permitindo a diferenciação de origens, a avaliação de qualidade, a certificação e o monitoramento de adulterações (CAPOZZI *et al.*, 2013; VIVO *et al.*, 2023). Essa perspectiva confirma a metabolômica e a foodômica como pilares para compreender matrizes químicas complexas e avançar na ciência dos alimentos.

Composição química e marcadores metabólicos do café

O café apresenta uma matriz química extremamente complexa, composta por centenas de metabólitos que variam conforme a espécie botânica (*Coffea arabica* ou *Coffea canephora*), condições edafoclimáticas, processamento pós-colheita e métodos de torra (MEONI *et al.*, 2021; RIBEIRO *et al.*, 2024). Entre as classes mais relevantes destacam-se alcaloides, ácidos clorogênicos (CGA), fenóis, açúcares, lipídios, terpenoides e compostos voláteis, todos determinantes para aroma, sabor, bioatividade e qualidade sensorial (HEO *et al.*, 2020; LAPČÍKOVÁ *et al.*, 2023) (Figura 3).

Dentre esses metabólitos, a cafeína, a trigonelina e os CGA são amplamente reconhecidos como marcadores centrais. Os CGA, especialmente 5-CQA, 3-CQA e 4-CQA, estão associados à acidez, adstringência e propriedades antioxidantes (HEO *et al.*, 2020). A trigonelina atua como precursora de compostos aromáticos gerados durante a torra, enquanto a cafeína é frequentemente utilizada como marcador taxonômico pela maior concentração típica em *C. canephora* (CARACOSTEA *et al.*, 2021).

FIGURA 3. Estruturas dos principais alcaloides e ácido clorogênico encontrados no café.



Fonte: Autoria própria, utilizando o software MolView®.

Masek *et al.* (2020) aprofundaram a compreensão da matriz química do café verde ao analisar extratos por espectroscopia no infravermelho por transformada de Fourier (FTIR), espectroscopia ultravioleta-visível (UV-Vis) e GC-MS, identificando compostos fenólicos como ácido ferúlico e ácido vanílico. O estudo evidenciou

correlações entre esses compostos e a capacidade antioxidante, reforçando o potencial funcional do café antes da torra.

A metabolômica baseada em LC-MS tem se destacado na caracterização de compostos bioativos, como mostrado por Castro-Moretti *et al.* (2023), que identificaram polifenóis, flavonoides e CGA minoritários capazes de diferenciar espécies, híbridos e linhagens de café. Os autores demonstraram que variações metabólicas estão diretamente associadas às condições ambientais e ao manejo agrícola, revelando vias bioquímicas influenciadas por estresse, maturação e pós-colheita.

Estudos globais (*untargeted*) utilizando UHPLC-HRMS permitiram investigações ainda mais abrangentes. Carréra *et al.* (2025) identificaram 463 metabólitos em cultivares brasileiras de *C. arábica*, dos quais 41 apresentaram alto poder discriminante entre regiões produtoras. Entre esses marcadores destacam-se CGA, terpenóides, lipídios oxidativos e alcaloides minoritários. A análise por PLS-DA evidenciou separação clara entre *terroirs*, indicando que diferenças ambientais moldam vias metabólicas relacionadas a fenóis, ácidos orgânicos e terpenos.

Resultados semelhantes foram observados por Pimenta *et al.* (2025), que identificaram mais de 700 *features* usando UHPLC-HRMS. Um subconjunto desses sinais, composto por derivados de CGA, lipídios oxidados e alcaloides, apresentou forte capacidade discriminante entre cafés de quatro regiões brasileiras, reforçando a relevância da quimiometria para autenticação geográfica e controle de qualidade.

Além dos grãos, subprodutos do café têm recebido crescente atenção devido ao seu potencial químico e nutricional. A película prateada (*coffee silverskin*), fina camada que cobre o grão e se desprende durante a torra, apresenta uma assinatura química própria. Angeloni *et al.* (2020) caracterizaram compostos odoríferos, polifenóis e ácidos graxos presentes na película, demonstrando que esse subproduto contém elevados teores de fenóis bioativos, aldeídos, ácidos orgânicos e lipídios funcionais. Esses achados evidenciam que a película prateada não é um simples resíduo industrial, mas uma matriz rica em compostos bioativos com potencial para aplicações funcionais e desenvolvimento de produtos sustentáveis.

Esse potencial também foi reforçado por Andrade *et al.* (2023), que demonstraram que subprodutos como casca e película prateada apresentam elevada capacidade antioxidante quando submetidos à extração assistida por ultrassom (UAE). A incorporação desses resíduos em estudos metabolômicos amplia a compreensão do perfil químico global do café e contribui para estratégias de economia circular.

Assim, as evidências mostram que o café é composto por uma diversidade metabólica que desempenha papéis essenciais na qualidade, autenticidade e funcionalidade da bebida. A metabolômica, ao integrar técnicas como LC-MS, GC-MS e UHPLC-HRMS com análises multivariadas, tem se consolidado como ferramenta estratégica para identificar biomarcadores, diferenciar *terroirs*, monitorar processos tecnológicos e valorizar subprodutos da cadeia cafeeira. Na Tabela 1 estão sintetizados alguns trabalhos aplicando abordagem metabolômica para determinação de marcadores de qualidade do café.

TABELA 1. Trabalhos envolvendo abordagens metabolômicas com destaque para análise de biomarcadores de qualidade em café.

TIPO DE AMOSTRA	PREPARO DE AMOSTRA	INSTRUMENTAÇÃO	OBJETIVO DO ESTUDO	REFERÊNCIA
Café Arábica classificado como especial e não especial	Microextração em fase sólida usando modo headspace	GC-MS	Identificar os principais compostos voláteis que influenciam a qualidade do café	Agnoletti <i>et al.</i> (2020).
52 amostras de café moído (<i>Coffea Arabica</i>): café verde, torra clara, torra média e torra escura de várias origens geográficas	Extração com água ultra-pura quente (75-85°C). Ultrassonicação, centrifugação e filtração	LC-DAD	Determinar os níveis de cafeína e ácido clorogênico (CGA) em várias amostras de café de diferentes origens e graus de torra, e avaliar o efeito da torra em seus níveis	Awwad <i>et al.</i> (2021).
Amostras de café verde (de origem única) e café torrado (torra média e escura)	Microextração em fase sólida usando modo headspace	GC-MS e GCxGC-MS	Caracterizar detalhadamente a química e o perfil de compostos voláteis do café verde e torrado, comparando a eficácia da GC 1D e 2D na separação e identificação de metabólitos	Frost <i>et al.</i> (2022).
Café Cold Brew (CB), café de cafeteria (CS), café pronto-a-beber (RTD) e café coado/filtrado (CM)	Cold Brew – extração com água fria; Café Coado extração com água quente	HPLC-DAD GC-MS	Comparar os níveis de cafeína, ácido clorogênico e trigonelina, bem como o perfil de compostos voláteis, em café <i>cold brew</i> versus outros métodos de preparo de café	Heo <i>et al.</i> (2020).
Grãos de Café Verde Arábica	Preparo de extratos aquosos (infusão) e etanólicos	GC-MS/FTIR/UV-Vis	Determinar a composição e a atividade antioxidante de extratos de café verde e correlacionar métodos	Masek <i>et al.</i> (2020)
36 lotes de café Arábica (verde e torrado), 7 variedades da Nicarágua	Extração com água ultra-pura seguida de centrifugação	RMN	Fenotipar e diferenciar variedades e fazendas com base no perfil metabolômico e avaliar o efeito de diferentes práticas pós-colheita	Meoni <i>et al.</i> (2021)
Grãos de Café Arábica Typica de 3 origens (Honduras, Guatemala, Etiópia) em 4 graus de torra	Extração com solvente metanol/água	HPLC-UV	Analisar o conteúdo de ácido clorogênico e cafeína e sua correlação com a cor do grão sob diferentes graus de torra e origens	Tsai <i>et al.</i> (2021).

FONTE: Autores (2025)

Aplicações práticas em qualidade, autenticidade e processamento

A metabolômica tem se consolidado como uma ferramenta estratégica para aplicações práticas na cadeia produtiva do café, especialmente na avaliação da qualidade, autenticidade e dos efeitos de diferentes etapas de processamento. Ao integrar dados químicos obtidos por técnicas como LC-MS, GC-MS, UHPLC-HRMS e RMN com métodos estatísticos multivariados, torna-se possível estabelecer *fingerprints* metabólicos associados à espécie, origem geográfica, processamento e condições de torra (ZHONG, 2022; GARCÍA-PÉREZ *et al.*, 2024).

Qualidade sensorial e perfil químico

A qualidade sensorial do café está diretamente relacionada ao seu perfil químico, composto por voláteis, ácidos clorogênicos (CGA), açúcares, lipídios, alcaloides e produtos de reações de Maillard. Estudos que utilizam GC-MS e técnicas espectroscópicas mostram que aldeídos, cetonas, álcoois, pirazinas e furanos estão entre os principais contribuintes para o aroma e o sabor da bebida (MAREK *et al.*, 2020; YU *et al.*, 2021).

Lapčíková *et al.* (2023) investigaram o impacto de diferentes métodos de extração sobre o aroma, a atividade antioxidante e a aceitação sensorial de cafés especiais, demonstrando que mudanças nas condições de preparo alteram significativamente o perfil de compostos voláteis e fenólicos, com reflexos na percepção sensorial e na estabilidade oxidativa.

Em complemento, Meoni *et al.* (2021) observaram que práticas pós-colheita distintas resultam em perfis metabólicos específicos entre amostras de café verde e torrado, com variações marcantes em CGA, açúcares e lipídios, reforçando a estreita relação entre composição química, processamento e qualidade sensorial percebida.

Autenticidade e rastreabilidade geográfica

A autenticidade e a rastreabilidade geográfica são desafios centrais na cadeia de cafés especiais, pois a origem está diretamente associada à identidade do produto e ao seu valor de mercado. Estudos baseados em abordagens metabolômicas demonstraram que perfis químicos complexos podem ser utilizados para diferenciar regiões produtoras, espécies e cultivares.

De León-Solis *et al.* (2023) mostraram que dados metabolômicos obtidos de grãos verdes e torrados permitem discriminar a origem geográfica de amostras de café, evidenciando que assinaturas químicas específicas podem ser utilizadas para fins de certificação.

Markos *et al.* (2023) aplicaram uma abordagem *foodômica* para rastreabilidade de cafés especiais etíopes, identificando conjuntos de metabólitos associados a diferentes áreas de produção e reforçando o uso da metabolômica como ferramenta de autenticação de origem.

Além das plataformas cromatográficas tradicionais, tecnologias instrumentais emergentes também têm contribuído para a autenticação. A espectrometria de mobilidade iônica (IMS), por exemplo, é capaz de gerar *fingerprints* químicos rápidos e altamente discriminativos. Konieczka *et al.* (2020) demonstraram que a IMS diferencia com eficiência cafés *Arábica* e *Robusta*, destacando seu potencial como método complementar para autenticação varietal e monitoramento de fraudes.

No contexto brasileiro, Carréra *et al.* (2025) identificaram 463 metabólitos em cultivares de *Coffea arabica*, dos quais 41 apresentaram forte capacidade discriminante entre diferentes regiões produtoras, evidenciando que fatores edafoclimáticos influenciam vias metabólicas relacionadas a fenóis, ácidos orgânicos e terpenóides. Pimenta *et al.* (2025) também relataram a identificação de centenas de features em cafés de quatro estados brasileiros, sendo que um subconjunto de derivados de CGA, lipídios oxidados e alcaloides foi suficiente para distinguir as regiões estudadas, demonstrando o potencial da abordagem para rastreabilidade geográfica e agregação de valor.

Deteccção de adulterações

A adulteração do café, envolvendo a adição de matérias-primas como cevada, chicória, cereais e farinhas, representa um problema recorrente de fraude econômica e perda de qualidade. Abordagens baseadas em espectroscopia e quimiometria têm se mostrado eficazes na deteção dessas adulterações.

Flores-Valdez *et al.* (2022) utilizaram espectroscopia no infravermelho médio com transformada de Fourier (FT-MIR) associada a métodos quimiométricos para identificar e quantificar adulterantes em cafés *C. arábica*, mostrando que perfis espectrais permitem distinguir amostras puras e adulteradas com elevada precisão.

De forma complementar, Núñez *et al.* (2021) aplicaram *fingerprinting* por HPLC-UV-FLD associado à quimiometria para avaliar adulteração de café com chicória, cevada e farinhas, conseguindo tanto detectar a fraude quanto estimar a proporção de adulterante presente nas amostras. Esses resultados evidenciam que estratégias metabolômicas e *foodômicas* são ferramentas importantes para o controle de autenticidade e proteção do consumidor.

Impacto do processamento e da torra

O processamento pós-colheita como via seca, via úmida e *honey*, que diferem principalmente na quantidade de mucilagem removida após o despulpamento, o grau de torra e o método de preparo da bebida exercem influência direta sobre a composição química e, consequentemente, sobre as características sensoriais e funcionais do café (SOUZA *et al.*, 2024).

Debona (2020) analisou cafés submetidos a diferentes perfis de torra e observou alterações significativas nos teores de CGA, cafeína e compostos voláteis, mostrando que torras mais intensas tendem a reduzir a concentração de fenóis antioxidantes, ao mesmo tempo em que favorecem a formação de compostos derivados de reações térmicas. Tsai *et al.* (2021) investigaram a correlação entre conteúdo de CGA e cafeína e a coloração de grãos submetidos a diferentes graus de torra, mostrando relação consistente entre parâmetros de cor, composição química e processamento térmico.

Yu *et al.* (2021) e Lapčíková *et al.* (2023) também reportaram que variações no método de extração e preparo da bebida modificam o perfil de voláteis e a atividade antioxidante, indicando que decisões tecnológicas ao longo da cadeia, desde o tipo de torra até o modo de preparo, impactam diretamente a qualidade final percebida pelo consumidor.

Valorização de subprodutos e sustentabilidade

No contexto da sustentabilidade, a metabolômica tem sido aplicada à valorização de subprodutos da cadeia cafeeira, como casca, polpa e película prateada (*coffee silverskin*).

Angeloni *et al.* (2020), caracterizaram compostos odorativos, polifenóis e ácidos graxos na película prateada, demonstrando que esse subproduto apresenta teores relevantes de fenóis bioativos e lipídios funcionais, evidenciando potencial para uso em formulações alimentícias e ingredientes funcionais. Andrade *et al.* (2023) avaliaram a otimização da extração de compostos bioativos da casca de café por técnicas assistidas por ultrassom, observando elevada capacidade antioxidante e sugerindo a aplicação desses extratos como fontes alternativas de antioxidantes naturais.

Esses resultados indicam que a metabolômica contribui não apenas para a caracterização de grãos verdes e torrados, mas também para a ampliação do uso de subprodutos, alinhando a cadeia cafeeira aos princípios da economia circular e da agregação de valor a resíduos agroindustriais (GARCÍA-PÉREZ *et al.*, 2024).

TENDÊNCIAS E PERSPECTIVAS FUTURAS

As tendências futuras da metabolômica aplicada ao café indicam um avanço contínuo na integração de plataformas analíticas, ampliação da capacidade de detecção de compostos minoritários e crescente incorporação de ferramentas computacionais avançadas. O aprimoramento de técnicas de alta resolução tem permitido análises mais profundas e abrangentes, fornecendo perfis químicos cada vez mais detalhados e úteis para compreender características sensoriais, autenticidade e impactos do processamento (ZHONG, 2022; GARCÍA-PÉREZ *et al.*, 2024).

A aplicação de Inteligência Artificial (IA) desponta como uma das frentes mais promissoras na análise química. Modelos como *Random Forest* e *Support Vector Machine* já demonstraram alta eficiência na classificação de amostras quando associados a dados gerados por GC×GC-MS, como evidenciado no estudo de Zou *et al.* (2022), que distinguiu cafés regulares de descafeinados com elevado desempenho.

A tendência é que, futuramente, essas abordagens possam estimar atributos sensoriais, origem geográfica e parâmetros de processamento com maior precisão, a partir de *fingerprints* químicos (PIMENTA *et al.*, 2025).

Contudo, essa integração, embora promissora, é atualmente limitada pela escassez de grandes bases de dados, o que restringe o treinamento de modelos preditivos robustos (MOTA *et al.*, 2023; SANTANA *et al.*, 2024; SANTOS *et al.*, 2024).

A sustentabilidade também tem se tornado um eixo fundamental nas pesquisas mais recentes. Métodos de extração mais limpos, substituição de solventes agressivos e valorização de subprodutos (como casca e película prateada) demonstram potencial para reduzir impactos ambientais e diversificar aplicações industriais, já que esses materiais apresentam perfis metabólicos ricos e funcionalmente relevantes (ANDRADE *et al.*, 2023).

No campo instrumental, técnicas como LC-MS permanecem essenciais na identificação de metabólitos polares e fenólicos, enquanto GC-MS se destaca na caracterização de compostos voláteis associados ao aroma, sendo amplamente utilizada para diferenciar níveis de torra e origens produtoras (SANTIAGO *et al.*, 2020; ZAKIDOU *et al.*, 2021; VIVO *et al.*, 2023; CARRÉRA *et al.*, 2025). Abordagens como

GC×GC-MS devem ampliar ainda mais a capacidade de detecção, aprofundando a investigação de marcadores minoritários e compostos chave de qualidade (VAYE *et al.*, 2022).

As pesquisas também avançam no campo da autenticação e segurança do consumidor. *Fingerprints* metabolômicos associados a modelos preditivos têm se mostrado eficientes na diferenciação entre regiões produtoras e na identificação de adulterações, reforçando a utilidade da metabolômica em contextos de rastreabilidade e certificação (ZHONG, 2022; VIVO *et al.*, 2023; PIMENTA *et al.*, 2025).

Por fim, considera-se que tecnologias portáteis, métodos rápidos de espectroscopia e sistemas inteligentes aplicados à automação industrial tendem a ganhar espaço na cadeia produtiva do café. Tais ferramentas poderão futuramente permitir análises ágeis de torra, triagem de lotes, avaliação de frescor, perfil aromático e autenticidade, ampliando a aplicabilidade da metabolômica fora do ambiente laboratorial.

Assim, estima-se que a metabolômica se consolidará não apenas como ferramenta de pesquisa, mas também como um recurso estratégico para inovação, certificação, controle de qualidade e sustentabilidade na cadeia produtiva do café.

CONSIDERAÇÕES FINAIS

A presente revisão evidenciou que a metabolômica tem se consolidado como uma abordagem essencial para compreender a complexa composição química do café e suas relações com qualidade, origem geográfica e processamento. Os estudos analisados demonstram que técnicas como GC-MS, LC-MS, GC×GC-MS e RMN têm permitido a identificação de marcadores robustos associados a atributos sensoriais e à diferenciação de espécies e regiões produtoras. Trabalhos como os de Zakidou *et al.* (2021) e Vivo *et al.* (2023) reforçam que variações nos perfis de voláteis e compostos bioativos são decisivas para distinguir torra clara, média e escura, assim como cafés de diferentes altitudes e *terroirs*.

A síntese dos artigos também mostra que determinados grupos químicos, como ácidos clorogênicos, cafeína, trigonelina, terpenoides e lactonas, aparecem de maneira recorrente como biomarcadores de qualidade e autenticidade. Por exemplo, García-Pérez *et al.* (2024) demonstraram que a presença diferenciada de terpenoides auxilia na separação de cafés Arábica e Robusta, enquanto Santiago *et al.* (2020) apontaram que variações nos derivados de ácido clorogênico estão diretamente ligadas ao impacto térmico da torra.

Outra contribuição relevante dos estudos diz respeito ao potencial de valorização de subprodutos. A casca e a película prateada, frequentemente descartadas, apresentam perfis metabólicos ricos em compostos antioxidantes e especialmente derivados dos ácidos clorogênicos, como demonstrado nos trabalhos de Andrade *et al.* (2023). Esses achados reforçam que a metabolômica contribui não apenas para a qualidade da bebida, mas também para práticas sustentáveis, economia circular e reaproveitamento de resíduos agroindustriais.

No conjunto, os estudos mostram que a metabolômica não se limita a caracterizar o café, mas possibilita aplicações estratégicas: autenticação de origem, detecção de adulterações, monitoramento de etapas de processamento e compreensão das transformações químicas durante secagem, fermentação e torra. Abordagens como

GC×GC-MS e LC-MS/MS permitem mapear modificações sutis, ampliando a precisão da análise e fortalecendo metodologias de certificação de qualidade.

Assim, conclui-se que a metabolômica se firmou como ferramenta indispensável para o setor cafeeiro contemporâneo. Ao integrar conhecimento químico, instrumental e estatístico, ela amplia a capacidade de compreender o café em múltiplas dimensões, sensorial, tecnológica, geográfica e ambiental, tornando-se um suporte científico robusto para inovação, rastreabilidade e valorização da cadeia produtiva.

REFERÊNCIAS

AGNOLETTI, B. Z.; PINHEIRO, P. F.; PEREIRA, L. L.; OLIVEIRA, E. C. Da S.; FILGUEIRAS P. R. Discriminação de café Arábica quanto à qualidade sensorial utilizando cromatografia gasosa e PLS-DA. **Ifesciência**, v. 6, n. 3, p. 147-158, 2020. Disponível em: <<https://doi.org/10.36524/ric.v6i3.848>> doi:10.36524/ric.v6i3.848

ANDRADE, S. F.; SANDES, R. D. D.; SOARES, L. A.; NARAIN, N.; SANTANA, L. C. L. de A. Optimization of the extraction of bioactive compounds from Arabica coffee husk using ultrasound-assisted techniques and their potential as antioxidant sources. **Scientia Plena**, v. 19, n. 5 p. 051502, 2023. Disponível em: <<https://doi.org/10.14808/sci.plena.2023.051502>>. doi:10.14808/sci.plena.2023.051502

ANGELONI, S.; SCORTICHINI, S.; FIORINI, D.; SAGRATINI, G.; VITTORI, S.; et al.; Characterization of Odor-Active Compounds, Polyphenols, and Fatty Acids in Coffee Silverskin. **Molecules**, v. 25, n. 13, 2993, 2020. Disponível em:<<https://doi.org/10.3390/molecules25132993>>. doi:10.3390/molecules25132993

ANTUNES, B. M.; JORDAN, R. A.; MOTOMIYA, A. V. A.; SANTOS, R. C.; MOREIRA JÚNIOR, M.; Electrical performance of a Water-Cooled PVT System with forced and natural circulation. **Engenharia Agrícola**, v. 42, e20220108. Disponível em: <<https://doi.org/10.1590/1809-4430-Eng.Agric.v42nepe20220108/2022>>. doi:doi.org/10.1590/1809-4430-Eng.Agric.v42nepe20220108/2022

AWWAD, S; ISSA, R.; ALNSOUR, L.; ALBALS, D.; AL-MOMANI, I. Quantification of Caffeine and Chlorogenic Acid in Green and Roasted Coffee Samples Using HPLC-DAD and Evaluation of the Effect of Degree of Roasting on Their Levels. **Molecules**, v. 26, n. 24, 7502, 2021. Disponível em: <<https://doi.org/10.3390/molecules26247502>>. doi:10.3390/molecules26247502

CAPOZZI, F.; BORDONI, A. Foodomics: a new comprehensive approach to food and nutrition. **Genes & Nutrition**, v. 8, n. 1, p. 1-4, 2013. Disponível em: <<https://doi.org/10.1007/s12263-012-0310-x>> doi: 10.1007/s12263-012-0310-x.

CARACOSTEA, L.-M.; SÎRBU, R.; BUȘURICU, F. Determination of Caffeine Content in Arabica and Robusta Green Coffee of Indian Origin. **European Journal of Natural Sciences and Medicine**, Constanta, v. 4, n. 1, p. 74-79, jan.-jun. 2021. Disponível em: <<https://doi.org/10.26417/425qba31z>>. doi:10.26417/425qba31z

CARRÉRA, A.; GUERRA-GUIMARÃES, L.; D'AURIA, J.C.; SARTORI, L. J.; PINHEIRO, C.; et al.; non-targeted metabolomic analysis of field-grown *Coffea arabica* cultivars reveals distinct metabolic signatures. **Theoretical and Experimental Plant Physiology**, v. 37, n. 27, p., 2025. Disponível em: <<https://doi.org/10.1007/s40626-025-00373-4>>. doi:10.1007/s40626-025-00373-4

CASTRO-MORETTI, F. R.; COCURON, J-C.; CASTILLO-GONZALEZ, H.; ESCUDERO-LEYVA, E.; CHAVERRI, P.; et al.; Metabolomic platform to identify and quantify polyphenols in coffee and related species using liquid chromatography mass spectrometry. **Frontiers in Plant Science**, v. 13, n. 1057645, 2023. Disponível em: <<https://doi.org/10.3389/fpls.2022.1057645>>. doi:10.3389/fpls.2022.1057645

DEBONA, D.; PINHEIRO, P. F.; PINHEIRO, C. A.; GOMES, W. S. S.; ABREU, R. O.; et al.; Avaliação da composição química de café Arabica submetido a diferentes perfis de torra. **Revista do Instituto de Laticínios Cândido Tostes**, v. 75, n. 2, p. 102– 112, 2020. Disponível em: <<https://10.36524/ric.v6i3.864>>. doi:10.36524/ric.v6i3.864

DE LEÓN-SOLIS, C.; CASASOLA, V.; MONTERROSO, T. Metabolomics as a tool for geographic origin assessment of roasted and green coffee beans. **Heliyon**, Amsterdam, v. 9, n. 11, e21402, 2023. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/j.heliyon.2023.e21402>>. doi:10.1016/j.heliyon.2023.e21402

EL-HAWARY, E. A.; ZAYED, A.; WESSJOHANN, L.; LAUB, A.; MODULO, L. V.; FARAG, M. A. How does LC–MS compare to UV in coffee authentication and determination of antioxidant effects: Brazilian and Middle Eastern blends. **antioxidants**, v. 11, n. 131 p., 2022. Disponível em: <<https://doi.org/10.3390/antiox11010131>>. doi:10.3390/antiox11010131

ELICIT'S SOURCE FOR PAPERS. In: ELICIT HELP CENTER.: **Ought**, 2025. [online]. Disponível em: <https://support.elicit.com/en/articles/553025>. Acesso em: 08 out. 2025.

ESHAWU, A. B.; GHALSASI, V. V. Metabolomics of natural samples: a tutorial review on the latest technologies. **Journal of Separation Science**, v. 47, n. 1, p. e2300588, 2024. Disponível em: <<https://doi.org/10.1002/jssc.202300588>>. doi:10.1002/jssc.202300588

FARAG, M. A.; ZAYED, A.; SALLAM, I. E.; ABDELWARETH, A.; WESSJOHANN, L. A. Metabolomics-Based Approach for Coffee Beverage Improvement in the Context of Processing, Brewing Methods, and Quality Attributes. **Foods**, v. 11, n. 6, p. 864, 18 mar. 2022. Disponível em: <<https://doi.org/10.3390/foods11060864>>. doi:10.3390/foods11060864

FLORES-VALDEZ, M.; MEZA-MÁRQUEZ, O. G.; OSORIO-REVILLA, G.; GALLARDO-VELÁZQUEZ, T. Identification and Quantification of Adulterants in Coffee (*Coffea arabica* L.) Using FT-MIR Spectroscopy Coupled with Chemometrics, **Foods**. v. 9, n. 7, p. 851, 2022. Disponível em: <<https://doi.org/10.3390/foods9070851>>.doi:10.3390/foods9070851

FROST, S. C.; WALKER, P.; ORIAN, C. M.; ROBBAT JUNIOR, A.; The Chemistry of Green and Roasted Coffee by Selectable 1D/2D Gas Chromatography Mass Spectrometry with Spectral Deconvolution. **Molecules**, v. 27, n. 16, 5328, 2022. Disponível em: <<https://doi.org/10.3390/molecules27165328>>. doi:10.3390/molecules27165328

GARCÍA-PÉREZ, P.; BECHI, P. P.; ZHANG, L.; ROCCHETTI, G.; LUCINI, L. Metabolomics and chemometrics: The next-generation analytical toolkit for food quality assessment. **Trends in Food Science & Technology**, v. 147, p. 104481, 2024. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/j.tifs.2024.104481>>. doi:10.1016/j.tifs.2024.104481

HEO, J. A.; ADHIKARI, K.; CHOI, K. S.; LEE, J. Analysis of caffeine, chlorogenic acid, trigonelline, and volatile compounds in cold brew coffee using high-performance liquid chromatography and gas chromatography–mass spectrometry. **Foods**, v. 276, p. 83–90, 2020. Disponível em: <<https://doi.org/10.3390/foods9121746>>. doi:10.3390/foods9121746

HUANG, K.; THOMAS, N.; GOOLEY, P. R.; ARMSTRONG, C. W. Systematic review of NMR-based metabolomics practices in human disease research. **Metabolites**, v. 12, n. 10, p. 963, 2022. Disponível em: <<https://doi.org/10.3390/metabo12100963>>. doi: 10.3390/metabo12100963

KLIKAROVÁ, J.; CESLOVÁ, L. Targeted and Non-Targeted HPLC Analysis of Coffee-Based Products as Effective Tools for Evaluating the Coffee Authenticity. **Molecules**, v. 27, n. 21, p. 7419, 2022. Disponível em: <<https://doi.org/10.3390/molecules27217419>>. doi:10.3390/molecules27217419

KLÁVUS, A.; KOKLA, M.; NOERMAN, S.; KOISTINEN, V. M.; TUOMAINEN, M.; et al.; “Notame” workflow for non-targeted LC–MS metabolic profiling. **metabolites**, v. 10, n. 4, p. 135, 2020. Disponível em: <<https://doi.org/10.3390/metabo10040135>>. doi:10.3390/metabo10040135

PIOTR KONIECZKA, P.; ALIAÑO-GONZÁLEZ, M. J.; FERREIRO-GONZÁLEZ, M.; BARBERO, G. F.; PALMA, M. Characterization of Arabica and Robusta Coffees by Ion Mobility Sum Spectrum. **Sensors**, v. 20, n. 11, 3123, 2020. Disponível em: <<https://doi.org/10.3390/s20113123>>. doi:10.3390/s20113123

LAPČÍKOVÁ, B.; LAPČÍK, L.; BARTÁK, P.; VALENTA, T.; DOKLÁDALOVÁ, K. Effect of Extraction Methods on Aroma Profile, Antioxidant Activity and Sensory Acceptability of Specialty Coffee Brews. **Foods**, v. 12, n. 22, p. 4125, 2023. Disponível em: <<https://doi.org/10.3390/foods12224125>>. doi:10.3390/foods12224125

MAREK, G.; DOBRZAŃSKI, B. JR.; ONISZCZUK, T.; COMBRZYŃSKI, M.; ĆWIKŁA, D.; RUSINEK, R. Detection and differentiation of volatile compound profiles in roasted coffee arabica beans from different countries using an electronic nose and GC-MS. **Sensors**, v. 20, n. 7, p. 2124, 2020. Disponível em: <<https://doi.org/10.3390/s20072124>>. doi: 10.3390/s20072124

MARKOS, M. U.; TOLA, Y.; KEBEDE, B. T.; OGAH, O. Metabolomics: A suitable foodomics approach to the geographical origin traceability of Ethiopian Arabica specialty coffees. **Food Science & Nutrition**, v. 11, n., p. 4419–4431, 2023. Disponível em: <<https://doi.org/10.1002/fsn3.3434>>. doi: 10.1002/fsn3.3434

MASEK, A.; LATOS-BROZIO, M.; KAŁUŻNA-CZAPLIŃSKA, J.; ROSIAK, A.; CHRZESCJANSKA, E. Antioxidant Properties of Green Coffee Extract. **Forests**, v. 11, n. 5, 557, 2020. Disponível em: <<https://doi.org/10.3390/f11050557>>. doi:10.3390/f11050557

MEONI, G.; LUCHINAT, C.; GOTTI, E.; CADENA, A.; TENORI, L. Phenotyping Green and Roasted Beans of Nicaraguan Coffea Arabica Varieties Processed with Different Post-Harvest Practices. **Applied Sciences**, v. 11, n. 24, p. 11779, 2021. Disponível em: <<https://doi.org/10.3390/app112411779>>. doi:10.3390/app112411779

MONTIS, A.; SOUARD, F.; DELPORTE, C.; STOFFELEN, P.; STÉVIGNY, C.; et al.; Targeted and untargeted mass spectrometry-based metabolomics for chemical profiling of three coffee species. **Molecules**, v. 27, n. 10, p. 3152, 2022. Disponível em: <<https://doi.org/10.3390/molecules27103152>>. doi:10.3390/molecules27103152

MOTA, G. A.; SANTOS, R. C.; SANTOS, J. A.; LOVATTO, J.; GEISENHOF, L. O.; et al.; Smart sensors and Internet of Things (IoT) for sustainable environmental and agricultural management. **Caderno Pedagógico**, v.20, n.7, 2692-2714, 2023. <<https://doi.org/10.54033/cadpedv20n7-014>> doi: 10.54033/cadpedv20n7-014

NÚÑEZ, N.; SAURINA, J.; NÚÑEZ, O. Authenticity Assessment and Fraud Quantitation of Coffee Adulterated with Chicory, Barley, and Flours by Untargeted HPLC-UV-FLD Fingerprinting and Chemometrics. **Foods**, v. 10, n. 4, 840, 2021. Disponível em: <<https://doi.org/10.3390/foods10040840>>. doi:10.3390/foods10040840

NÚÑEZ, N.; MARTÍNEZ, C.; SAURINA, J.; NÚÑEZ, O. High-Performance Liquid Chromatography with Fluorescence Detection (HPLC-FLD) Fingerprints as Chemical Descriptors to Authenticate the Origin, Variety and Roasting Degree of Coffee by Multivariate Chemometric Methods. **Journal of the science of food and agriculture**, v. 101, n. 1, p. 65-73, 2021. Disponível em: < <https://doi.org/10.1002/jsfa.10615>>. doi:10.1002/jsfa.10615

PIMENTA, J. V. C.; SANTOS, L. B.; ALMEIDA, M. R.; AUGUSTI, R.; MACEDO, A. N. Geographic origin characterization of Brazilian green coffee beans via untargeted metabolomics. **Food Chemistry**, v. 464, p. 141683, 2025. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2024.141683>>. doi:10.1016/j.foodchem.2024.141683

RIBEIRO, R. C.; MOTA, M. F. S.; SILVA, R. M. V.; SILVA, D. C.; NOVAES, F. J. M.; et al.; Coffee Oil Extraction Methods: A Review. **Foods**, v. 13, n. 16, p. 2601, 2024. Disponível em: <<https://doi.org/10.3390/foods13162601>>. doi:10.3390/foods13162601

SANTANA, C. S., SANTOS, R. C., CARVALHO, T. I. ; JORDAN, R. A., SANCHES, A. C., et al.; Artificial neural network for assessment of impacts of rural anthropization in a tropical climate region. **Revista Brasileira de Geografia Física**, v. 17, n.2, 1071-1085,

2024. <<https://doi.org/10.26848/rbgf.v17.2.p1071-1085>> doi:
10.26848/rbgf.v17.2.p1071-1085

SANTANATOGLIA, A.; ALESSANDRONI, L.; FIORETTI, L.; SAGRATINI, G.; VITTORI, S.; et al.; Discrimination of Filter Coffee Extraction Methods of a Medium Roasted Specialty Coffee Based on Volatile Profiles and Sensorial Traits. **Foods**, v. 12, n. 17, p. 3199, 2023. Disponível em: <<https://doi.org/10.3390/foods12173199>>. doi:10.3390/foods12173199

SANTIAGO, W. D.; TEIXEIRA, A. R.; SANTIAGO, J. A.; LOPES, A. C. A.; BRANDÃO, R. M.; et al.; Development and validation of chromatographic methods to quantify organic compounds in green coffee (*Coffea arabica*) beans. Australian **Journal of Crop Science**, Australia, v. 14, n. 8, p. 1275-1282, 2020. Disponível em: <<https://doi.org/10.21475/ajcs.20.14.08.p2433>>. doi:10.21475/ajcs.20.14.08.p2433

SANTOS, L. E. R.; MEILI, L.; SOLETTI, J. I.; CARVALHO, S. H. V.; RIBEIRO, L. M. O.; et al.; Impact of temperature on vacuum pyrolysis of *Syagrus coronata* for biochar production. **Journal of Material Cycles and Waste Management**, v.22, p. 878–886, 2020. <<https://doi.org/10.1007/s10163-020-00978-8>> doi: 10.1007/s10163-020-00978-8

SANTOS, R. C.; BARÉA, R.; SANCHES, A. C.; GOMES FILHO, R. R.; MACHADO, S. T.; et al.; Fuzzy inference algorithm for quantifying thermal comfort in peri-urban environments. **Environment, Development and Sustainability**, p. 1-25. 2024. <<https://doi.org/10.1007/s10668-024-05831-8>> doi: 10.1007/s10668-024-05831-8

SHI, J.; LIU, Y.; XU, Y.-J. based foodomics: an edge tool integrated metabolomics and proteomics for food science. **Food Chemistry**, v. 446, p. 138852, 2024. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2024.138852>>. doi: 10.1016/j.foodchem.2024.138852

SOUZA, M. N.; SIMÃO, J. B. P. Tópicos em cafeicultura: cafés especiais. Volume IV. Canoas: Mérida Publishers, 2024. Disponível em: <https://www.meridapublishers.com/ce4/>. Acesso em: 4 de dezembro de 2025

TSAI, C.-F.; JIOE, I. P. J. The Analysis of Chlorogenic Acid and Caffeine Content and Its Correlation with Coffee Bean Color under Different Roasting Degree and Sources of Coffee (*Coffea arabica* Typica). **Processes**, v. 9, n. 11, p. 2040, 2021. Disponível em: <<https://doi.org/10.3390/pr9112040>>. doi:10.3390/pr9112040

VAYE, O.; NGUMBU, R. S.; XIA, D. A review of the application of comprehensive two-dimensional gas chromatography MS-based techniques for the analysis of persistent organic pollutants and ultra-trace level of organic pollutants in environmental samples. **Reviews in Analytical Chemistry**, v. 41, n., p. 63-73, 2022. Disponível em: <<https://doi.org/10.1515/revac-2022-0034>>. doi:10.1515/revac-2022-0034

VIVO, A.; BALIVO, A.; SARGHINI, F. Volatile compound analysis to authenticate the geographical origin of Arabica and Robusta espresso coffee. **Applied Sciences**, v. 13, n. 9, p. 5615, 2023. Disponível em: <<https://doi.org/10.3390/app13095615>>.

doi:10.3390/app13095615

YU, J.-M.; CHU, M.; PARK, H.; PARK, J.; LEE, K.-G. Analysis of Volatile Compounds in Coffee Prepared by Various Brewing and Roasting Methods. **Foods**, v. 10, n. 6, p. 1347, 2021. Disponível em: <<https://doi.org/10.3390/foods10061347>>. doi:10.3390/foods10061347

ZAKIDOU, P.; PLATI, F.; MATSAKIDOU, A.; VARKA, E.-M.; BLEKAS, G.; PARASKEVOPOULOU, A. Single Origin Coffee Aroma: From Optimized Flavor Protocols and Coffee Customization to Instrumental Volatile Characterization and Chemometrics. **Foods**, v. 26, n. 15, p. 4609, 2021. Disponível em: <<https://doi.org/10.3390/molecules26154609>>. doi:10.3390/molecules26154609

ZHONG, P.; WEI, X.; LI, X.; WEI, X.; WU, S.; et al.; Untargeted Metabolomics By Liquid

Chromatography-Mass Spectrometry For Food Authentication: A Review.

Comprehensive Reviews In Food Science And Food Safety, v. 4337, n., p. 12938, 2022. Disponível Em: <<https://doi.org/10.1111/1541-4337.12938>>. Doi: 10.1111/1541-4337.12938

ZOU, Y.; GAIDA, M.; FRANCHINA, F. A.; STEFANUTO, P.-H.; FOCANT, J.F. Distinguishing between Decaffeinated and Regular Coffee by HS-SPME- GC×GC-TOFMS, Chemometrics, and Machine Learning. **Molecules**, v. 27, n. 6, p. 1806, 2022. Disponível em: <<https://doi.org/10.3390/molecules27061806>>. doi:10.3390/molecules27061806