ANÁLISE QUALITATIVA DA COMPOSIÇÃO NÃO-VOLÁTIL DOS SUCOS DE UVA INTEGRAIS BRASILEIROS UTILIZANDO QEXACTIVE™ (HYBRID QUADRUPOLE-ORBITRAP MASS SPECTROMETER) E ANÁLISE DE COMPONENTES PRINCIPAIS (PCA)

QUALITATIVE ANALYSIS OF THE COMPOSITION NON-VOLATILE BRAZILIAN WHOLE GRAPE JUICES USING QEXACTIVE™ (HYBRID QUADRUPOLE-ORBITRAP MASS SPECTROMETER) AND PRINCIPAL COMPONENT ANALYSIS (PCA)

ALVES, Andréa Aparecida Ribeiro^{1*}; BARBOSA, Elisabete dos Santos²

¹ Universidade Federal Fluminense, Instituto de Ciências Exatas, Departamento de Química, Rua Desembargador Ellis Hermydio Figueira, 783, Bairro Aterrado CEP 27213-145, Volta Redonda – RJ, Brasil (fone: +55 24 30768986)

² Instituto Federal de Educação, ciência e tecnologia do Rio de Janeiro, Campus Nilo Peçanha - Pinheiral, Rua José Breves, 550, Bairro Centro CEP 27197-000, Pinheiral – RJ, Brasil (fone: +55 24 33568200)

* Autor correspondente
e-mail: aaralves@id.uff.br

Received 18 August 2017; received in revised form 02 October 2017; accepted 03 October 2017

RESUMO

Os constituintes majoritários do suco de uva são os compostos não-voláteis e são responsáveis, na maioria das vezes, pelas características organolépticas do produto, em particular o sabor e a coloração, atributos associados a qualidade e aceitação do produto pelos consumidores. O objetivo deste artigo foi estudar, de forma qualitativa, os compostos não-voláteis dos sucos de uva integrais brasileiros utilizando o QExactive™ - Hybrid Quadrupole-Orbitrap Mass Spectrometer e análise de componentes principais (PCA). Com o QExactive™, equipamento de alta resolução e exatidão, foi possível identificar ácidos orgânicos, ácidos fenólicos e alguns aminoácidos nas amostras. A PCA mostrou-se uma ferramenta importante, pois através dela, foi possível obter informações quanto ao agrupamento dos sucos estudados correlacionando-os com os compostos identificados no QExactive™.

Palavras-chave: grupos químicos, bebida, cor e sabor

ABSTRACT

The main constituents of grape juice are non-volatile compounds and are responsible, in most cases, the organoleptic characteristics of the product, particularly flavor and color, attributes related to quality and acceptance product by consumers. The aim of this paper was to study, in a qualitative way, the non-volatile compounds of Brazilian whole grape juices using QExactive™ (Hybrid Quadrupole-Orbitrap Mass Spectrometer) and principal component analysis (PCA). With QExactive™, high resolution and precision equipment, it was possible to identify organic acids, phenolic acids and certain amino acids in the samples. The PCA proved to be an important tool, because through it, it was possible to obtain information about the group juices studied correlating them with the compounds identified in QExactive™.

Keywords: chemical groups, drink, color and flavour

INTRODUÇÃO

Os sucos de uva possuem compostos majoritários e não-voláteis que são açúcares, ácidos orgânicos, vitaminas, pectina, compostos fenólicos entre outros, e estes são responsáveis, na maioria das vezes, pela coloração e sabor da bebida (Catharino *et al.*, 2006), e estão diretamente vinculadas a critérios de qualidade e aceitação do produto pelos consumidores.

Na casca da uva encontram-se metabólitos secundários como antocianinas (cianidina, peonidina), flavonóis, estilbenos (resveratrol) e os ácidos orgânicos (tartárico, málico, cítrico), nas sementes estão os flavonóis (taninos, catequina, epicatequina) (Fuleki e Silva, 2003; Koyama *et al.*, 2007) e nelas também há grande quantidade de fibra e óleo, e na polpa, os compostos fenólicos são os mais abundantes (Cheynier, 2005).

Na produção dos sucos tintos a polpa é aquecida com a casca e a semente resultando em maior incorporação de compostos fenólicos – além da obtenção de cor intensa destes sucos - quando comparados aos sucos brancos (Fuleki e Silva, 2003; Dani *et al.*, 2007).

Algumas técnicas já foram utilizadas para analisar compostos não-voláteis em uvas, vinhos e sucos de uvas. Fenóis, flavonóides e açúcares foram identificados em amostras de mosto (uva em fermentação) provenientes de seis variedades de uvas cultivadas no Brasil *Vitis* (*V.*) *vinifera*: cultivar (cv.) *Pinot Noir*, *Cabernet Sauvignon*, *Malbec*, *Merlot*, e *V. Labrusca*: cv. Isabel, Bordô, de procedência do Rio Grande do Sul, utilizando a espectrometria de massas por ionização com *electrospray* e analisador tempo de voo (ESI-TOF/MS) (Catharino *et al.*, 2006).

Sucos de uva da cultivar italiana Falanghina (*Vitis vinifera*), foram analisados usando cromatografia líquida e espectrometria de massas com ionização por *electrospray* e analisador quadrupolo (CL/ESI-MS, em modo negativo) para detectar marcadores de tipicidade e autenticidade (Nasi *et al.*, 2008). Os autores realizaram extração em fase sólida (EFS) para reduzir interferentes, e detectaram terpenos glicosilados presentes em baixas concentrações nas uvas.

O uso de equipamentos com tecnologia avançada promovem um diferencial nas pesquisas e proporciona resultados mais precisos e confiáveis. O equipamento QExactive™ Hybrid Quadrupole-Orbitrap Mass Spectrometer) possui alto poder de resolução

(140.000) e excelente exatidão em massa (até a quinta casa decimal), reduzindo significativamente falsas identificações (Iglesias, 2015). O processamento dos dados é semelhante ao utilizado na Espectrometria de Massa com transformada de Fourier de íons de ressonância ciclônica (FT-ICR/MS), onde todos os íons são detectados simultaneamente durante um período de tempo determinado e a resolução pode ser melhorada pelo aumento da força do campo ou do aumento da duração de detecção (Makarov *et al.*, 2006a, (Makarov *et al.*, 2006b)

O objetivo deste artigo foi estudar, de forma qualitativa, a composição não-volátil dos sucos de uva integrais brasileiros, utilizando o QExactive™ e com o uso da análise de componentes principais (PCA) analisar e correlacionar os sucos estudados com os compostos identificados no QExactive™.

PARTE EXPERIMENTAL

2.1. Material

Foram adquiridos para este trabalho, 33 sucos de uva comerciais e experimentais, que estão listados na Tabela 1 com suas especificações (procedência do suco, tipo, natureza, cultivar e espécie da uva), todos da safra 2012, sendo os comerciais obtidos em supermercados de Niterói – RJ (Brasil) e os experimentais foram obtidos de empresas parceiras, EMBRAPA Semiárido e EPAMIG.

Os solventes utilizados foram: acetona, metanol e solução de NH₄OH (concentração 1 mg L⁻¹), adquiridos da Tedia Brasil.

Para o *cleanup* dos sucos foi utilizado cartucho EFS Florisil (marca J. T. Baker®, USA), contendo 100 mg de adsorvente/cartucho. Filtros Millipore® (Membrana Fluoropore em PTFE, 0,2 µm de Poro, 25 mm, Corpo em PE).

2.2. Condições de análise

Foi utilizado um espectrômetro de massas de alta resolução QExactive™ (Thermo Scientific, Bremen, Alemanha) como ionização por *electrospray* (ESI) com modo de aquisição negativo e positivo concomitantemente (um diferencial deste equipamento). A aquisição foi realizada no modo *Full MS* em resolução de 140.000, AGC *target* de 10⁶, tempo máximo de injeção de 200 ms e intervalo de *m/z* de 50 a 750. A amostra foi injetada em um sistema

Accela 1250 Pump acoplado a um injetor automático Accela Open (*Thermo Scientific*, San Jose, EUA).

As amostras foram injetados em coluna C18 *Thermo Scientific* (2.1x 50mm, 1.9 μm), em corrida cromatográfica com fluxo constante de 50 $\mu\text{L min}^{-1}$, em um sistema isocrático com 100% de acetonitrila, num tempo total de corrida de 5 min. A sequência de corridas e configurações foram controladas pelo *software* Xcalibur^{TM}, o tratamento dos dados também foi realizado neste *software*.

2.3. Preparo dos extratos dos sucos para injeção no QExactive^{TM}

Para o preparo dos extratos dos sucos utilizou-se 2 mL de suco de uva. O cartucho de EFS Florisil foi acondicionado com 1 mL de acetona, e em seguida foi adicionado o suco de uva, que foi eluído com 2 mL de metanol. O eluato foi levado à secar sob fluxo de N_2 , e então ressuspendido com 2 mL de metanol. Desse extrato de suco, retirou-se uma alíquota de 50 μL , ao qual se adicionou 950 μL da solução de $\text{CH}_3\text{OH} / \text{H}_2\text{O} / \text{NH}_4\text{OH}$ (solução 1%). Esta solução final foi colocada em filtro de 0,2 μm da Millipore®, e então foi recolhido em um *vial* apropriado para injeção no QExactive^{TM} e assim foram injetados 20 μL desta solução final, em fluxo de 50 $\mu\text{L min}^{-1}$ e injeção automática. Procedeu-se os procedimentos supracitados para os 33 sucos em triplicata de extração.

Para o tratamento dos dados fez-se uma busca na literatura e montou-se uma tabela-referência com informações dos compostos não-voláteis, como massa/carga (m/z), tipo de equipamento e principais fragmentos para uvas e seus derivados. Logo após, realizou-se a análise de cada suco utilizando o *software* Xcalibur^{TM} que forneceu o espectros ESI-MS, com valores de m/z experimental ($m/z_{\text{exp.}}$) com cinco casas decimais, obtendo-se a abundância da área relativa desses íons. Em seguida, foram realizadas comparações das informações da tabela-referência com os valores obtidos pelo *software* Xcalibur^{TM}. A verificação da razão massa/carga teórica ($m/z_{\text{teor.}}$) foi obtida no próprio *software* através da fórmula molecular da substância identificada, e assim foi realizado o cálculo do erro, em ppm, segundo a equação 1 (Eq. 1) retirada de Iglesias (2015):

$$E(\text{ppm}) = |(m/z_{\text{exp.}} - m/z_{\text{teor.}})/(m/z_{\text{exp.}})| \times 10^6 \text{ (Eq. 1)}$$

Com os valores de área obtidos no tratamento dos dados das injeções no QExactive^{TM} foi possível fazer a PCA dos compostos não-voláteis dos sucos de uva e tentar agrupá-los utilizando o programa *SPSS_17 Statistics*.

RESULTADOS E DISCUSSÃO:

Neste trabalho, fez-se inicialmente um *cleanup* da amostra utilizando EFS Florisil, pois esta técnica apresentou resultados eficientes tanto para *cleanup* quanto para pré-concentração de analitos em matrizes alimentares (Alves *et al.*, 2012; Alves *et al.*, 2014). As soluções finais, obtidas dos extratos de suco de uva integral, utilizando a EFS Florisil, foram filtrados em filtro Millipore®, para a retirada de possíveis resíduos insolúveis presentes na solução final, uma vez que estes podem entupir a seringa de injeção e prejudicar o funcionamento do QExactive^{TM} (Makarov, 2006a).

Os dados foram tratados utilizando do *software* Xcalibur^{TM}, obtendo-se um perfil dos compostos não-voláteis dos sucos, como observa-se na Tabela 2, onde estão o nome das substâncias, suas respectivas fórmulas moleculares e os valores de massa/carga (m/z) experimental ($m/z_{\text{exp.}}$) e teórico ($m/z_{\text{teor.}}$), além do erro E(ppm) relativo às $m/z_{\text{exp.}}$ e $m/z_{\text{teor.}}$, para verificação da confiabilidade da identificação dos mesmos. O erro indica o quanto os valores obtidos se destoaram dos "verdadeiros" valores de m/z , logo para este tipo de equipamento, que possui alta resolução em massa exata, o erro deve ser inferior a 10 ppm (Iglesias, 2015), logo observa-se que os valores de E (ppm) obtidos variaram de 0,42 a 8,06 ppm, sendo assim considerados satisfatórios.

Na Tabela 3 encontram-se os valores da abundância (média das áreas da triplicata de cada suco) das substâncias mencionadas na Tabela 2, presentes nos sucos de uva trabalhados. Foram calculados com base nestas áreas, os coeficientes de variação (CV %), os quais variaram de 0,8 a 6,8 %, apresentando baixa dispersão dos valores, uma vez que valores de CV % até 15 % é considerado aceitável quando se trata de matrizes complexas (Miller e Miller, 1988; EMEA, 2015).

Observa-se que em todos os sucos foram identificados o ácido fosfórico, e os ácidos tartárico, málico, cítrico e ascórbico (exceção do suco AL), já mencionados em uvas híbridas (V.

vinifera com *V. labrusca*) para elaboração de vinhos (Biasoto *et al.*, 2010). O pterostilbeno, encontrado nos sucos comerciais CB, CM, DC, EP, MV, PG e SP, e nos experimentais SA_chard_B e SA_mosc_B, é um estilbeno, e assim como o resveratrol é produzido pelas uvas para o combate a fungos e vírus; e possui propriedades antiinflamatórias e antioxidantes quando ingeridas por animais (Langcake e Pryce, 1977).

O ácido clorogênico (ACG), aqui representado pelo ácido 4-*O*-cafeoilquinico foi identificado apenas no suco experimental SA_coraB e trata-se de um éster polifenólico encontrado em vegetais e frutas, principalmente no café. O ACG 5-*O*-cafeoilquinico, no entanto foi observado em dezoito tipos de sucos, sendo encontrado principalmente em frutas. Estudo mostra que o ácido cafeoilquinico já foi identificado em sucos de uva da cv. Concord (*V. labrusca*) produzidos em Farroupilha, RS (Oliveira *et al.*, 2013). O ACG atua em diversos sistemas biológicos, nas atividades anti-mutagênica, antitumoral, no controle da obesidade, analgésica, antipirética, ansiolítica, anti-microbica, antifúngica, antiviral, antioxidante e anti-inflamatória (Clifford, 2000).

O ácido sinápico é derivado do ácido cinâmico e possui atividade antioxidante, assim como o ácido vanílico, que é derivado do ácido benzóico (Ramalho e Jorge, 2006), sendo encontrados respectivamente nos sucos SA_coraFM, GA, GB, SA_isaB, SA_isaM, SA_mosc_B, PZ, SP). O manitol, por sua vez, é um açúcar obtido da frutose, possui atividade diurética e é utilizado em alimentos dietéticos (Cruz *et al.*, 2004). Pode ser utilizado como adoçante, e foi identificado apenas no suco SB, um suco orgânico e comercial.

O *L*-triptofano é um aminoácido que auxilia na síntese da serotonina e está associado ao bem-estar, sendo importante no tratamento e prevenção da depressão e ansiedade, e pode ser encontrado em alguns alimentos (Correia *et al.*, 2014), sendo observado nos sucos GD, GD_B, SA_isaM, CB, SA_coraFM, SA_coraM e UV. Outro aminoácido, a *L*-arginina, foi identificada nos sucos PZ e SA_chard_B, sendo responsável pela cicatrização de feridas, antitumoral, e combinada com a lisina, reduzem a ansiedade; a *L*-tirosina, ajuda na produção de outros hormônios, que melhoram o estado de alerta e a alegria (Correia *et al.*, 2014), observada nos sucos AL, AM, AU, SA_chard_B, CL e CM.

Na Tabela 4 encontram-se os códigos dos compostos para a análise dos componentes principais (PCA), cujas áreas se encontram descritas na Tabela 3. Alguns compostos da Tabela 3 estão ausentes na Tabela 4, pois seus valores não foram significativos para auxiliar na separação dos sucos na PCA.

Na Figura 1 encontra-se a análise de componentes principais (PCA) para os sucos de uva tintos (vide códigos na Tabela 1), onde se observa o gráfico de *scores* (A) dos sucos de uva e o gráfico de *loadings* (B) com os compostos químicos identificados (vide códigos na Tabela 4). As duas componentes principais descrevem 73,7 %, promovendo boa separação e/ou agrupamento das amostras.

Os sucos SI e UV estão relacionados com os compostos C34 (*L*-tirosina), C35 (galato de metila), C40 (*L*-leucina), C48 (*L*-triptofano) e C50 (pterostilbeno), o que mostra que há maior quantidade destes compostos nestes sucos, conseguindo separá-los, mesmo que pouco dos demais sucos. O galato de metila é um composto fenólico encontrado no vinho e no gerânio (*Geranium niveum*) (Calzada *et al.*, 1999).

Pode-se observar no gráfico de *scores*, Figura 1A, que há um grupo de sucos à esquerda, sendo 3 sucos experimentais (SA) e 8 sucos comerciais. Nota-se que, no gráfico de *loadings*, Figura 1B, não há correlação direta com nenhuma substância. Esse fato informa que nenhuma substância da Tabela 4 foi eficaz para isolá-los.

Os sucos AL e AU apresentam correlação com os compostos C8 (ácido ascórbico), C23 (*L*-valina), C25 (malonato de dietila), C28 (*cis*-coumárico), C36 (ácido propiônico) e C37 (5-*O*-cafeoilquinico). Vale ressaltar que o ácido ascórbico (vitamina C) é uma furanolactona muito importante na dieta humana, é um poderoso antioxidante, sendo usado para transformar os radicais livres de oxigênio em formas inertes, e pode ser encontrado em várias frutas e legumes (Nelson e Cox, 2012).

Já os sucos PZ e GB possuem 11 compostos propostos que ajudam a separá-los do grupo maior. Os compostos C31 (ácido sirínico), C44 (resveratrol), C56 (manitol), C58 (4-*O*-cafeoilquinico) e C59 (ácido sinápico), correlaciona-se a 8 sucos, deixando-os agrupados entre si e separados dos demais grupos. O ácido sirínico é derivado do ácido gálico e está presente no vinho tinto e nas cascas das uvas vermelhas possui atividade antioxidante (Gálvez *et al.*, 1994).

Os compostos sem marcação são aqueles que podem estar relacionados com os sucos PZ e GB, na região inferior do gráfico de *loadings* e com os sucos AL e AU na parte superior.

A PCA foi utilizada para caracterização de vinhos elaborados com uvas híbridas (*V. vinifera* com *V. labrusca*) e observaram, de maneira geral, que a PCA estaria correlacionando o parâmetros de acidez de uma amostra com a presença do ácido succínico, e em outra amostra, correlacionava com o ácido ascórbico que conferiria caráter amargo. Os autores propuseram um potencial uso destas informações para auxiliar as vinícolas no controle de qualidade (Biasoto *et al.*, 2010).

Na Figura 2 encontra-se a PCA para os sucos brancos, onde se observa o gráfico de *scores* (A) dos sucos de uva e o gráfico de *loadings* (B) com os compostos químicos propostos, sendo que as componentes principais descreveram 66,0 %, conferindo separação das amostras.

Embora pequeno o número de amostras, observa-se que os sucos estão bem separados, com exceção dos sucos SA_mosc_B e GD_B, que se agruparam por influência dos compostos C40 (*L-leucina*), C48 (*L-triptofano*) e C50 (pterostilbeno), compostos que foram igualmente observados nos sucos tintos SI e UV.

O suco experimental SA_chard_B do gráfico de *scores*, Figura 2A, correlaciona-se no gráfico de *loadings* (Figura 2B) com os compostos C5 (ácido succínico) e C54 (arginina), e o suco CM_B não possui nenhuma substância correlacionada a ele. No entanto, no gráfico de *loadings* observa-se grande número de compostos sem correlação com nenhum suco estudado, o que pode estar relacionado ao baixo número de amostras.

O ácido *trans*-caftárico (C30) é um composto fenólico não-flavonoídico encontrado na uva, sendo responsável pelo tom amarelado dos vinhos e sucos brancos (Lee e Jaworski, 1987). O tirosol (41) é um antioxidante fenólico natural presente em uma variedade de matérias primas naturais, dentre elas a uva, o chá e óleo de oliva, é um derivado do álcool fenetílico (Giovannini *et al.*, 1999). Os sucos SA_ita_B e PE_B possuem, respectivamente 7 e 10 substâncias que os separam dos demais sucos brancos.

A PCA se mostrou uma ferramenta importante na análise da composição do perfil não-volátil dos sucos, pois através dela foi possível correlacionar o agrupamento de alguns

sucos com compostos específicos (identificados pelo QExactive^{TM}), o que leva a crer que estes compostos podem ser potenciais marcadores químicos destes sucos.

CONCLUSÕES:

Conclui-se que foi possível estudar, de forma qualitativa, a composição não-volátil dos sucos de uva integrais brasileiros utilizando o equipamento QExactive^{TM} (Hybrid Quadrupole-Orbitrap Mass Spectrometer) que com sua alta resolução e exatidão, identificou nas amostras ácidos orgânicos, ácidos fenólicos, alguns aminoácidos, entre outros. Com esta identificação, foi possível utilizar a análise dos componentes principais (PCA), que se mostrou eficiente, pois foi possível agrupar alguns sucos de uva correlacionando-os com compostos não-voláteis comum entre eles.

AGRADECIMENTOS:

As autoras agradecem a Claudia M. de Rezende do IQ/UFRJ, Giuliano E. Pereira da EMBRAPA Semiárido, Rafael Garrett do IQ/UFRJ pelo apoio; à Capes, CNPq e à FAPERJ pelo apoio financeiro; à EMBRAPA Semiárido e à EPAMIG pelas amostras; ao Henrique Marcelo G. Pereira e Vinícius F. Sardela do LBCD-LADETEC/IQ-UFRJ pela utilização do equipamento Q Exactive^{TM}.

REFERÊNCIAS:

1. Alves, A.A.R.; Rezende, M.J.C.; Hovell, A.M.C.; Bizzo, H.R.; Oliveira, A.C.L.; Rodrigues, S.V.; Rezende, C.M. Journal of the Brazilian Chemical Society. 2012, 23, 306.
2. Alves, A.A.R.; Rodrigues, A.S.; Paula Barros, E.B.; Uekane, T.M.; Bizzo, H.R.; Rezende, C.M. Food Analytical Methods. 2014, 7, 1834.

3. Biasoto, A.C.T.; Catharino, R.R.; Sanvido, G.B.; Eberlin, M.N.; Silva, M.A.A.P. Food Quality and Preference 2010, 21, 755.
4. Calzada, F.; Cerda-García-Rojas, C.M.; Meckes, M.; Cedillo-Rivera, R.; Bye, R.; Mata, R. Journal of Natural Products. 1999, 62, 705.
5. Catharino, R.R.; Cunha, I.B.S.; Fogaça, A.O.; Facco, E.M.P.; Godoy, H.T.; Daudt, C.E.; Eberlin, M.N.; Sawaya, A.C.H.F. Journal of Mass Spectrometry. 2006, 41, 185.
6. Cheynier, V. American Journal of Clinical Nutrition. 2005, 81S, 223S.
7. Clifford, M.N. Journal of the Science of Food and Agriculture. 2000, 80, 1033.
8. Correia, M.I.T.D.; Quirino, I.E.P. Nutrição e vida. 2014, 1.
9. Cruz, J.; Minoja, G.; Okuchi, K.; Facco, E. Journal of Neurosurgery. 2004, 100, 376.
10. Dani, C.; Oliboni, L.S.; Vanderlinde, R.; Bonatto, D.; Salvador, M.; Henriques, J. A. P. Food and Chemical Toxicology. 2007, 45, 2574.
11. EMEA - European Medicines Agency. http://www.ema.europa.eu/docs/en_GB/document_library/Scientific_guideline/2009/09/WC500002662.pdf. Acessada em: novembro 2016.
12. Fuleki, T.; SILVA, J.M. Journal of Agricultural and Food Chemistry. 2003, 51, 640.
13. Gálvez, M.C.; Barroso, C.G.; Pérez-Bustamante, J.A. Zeitschrift für Lebensmitteluntersuchung und -Forschung A. 1994, 199, 29.
14. Giovannini, C.; Straface, E.; Modesti, D.; Coni, E.; Cantafora, A.; De Vincenzi, M.; Malorni, W.; Masella, R. Journal of Nutrition. 1999, 129, 1269.
15. Iglesias, A.H. <http://www.cnpsa.embrapa.br/met/images/arquivos/17MET/minicursoamadeu-iglesias.pdf>. Acessada em novembro 2015.
16. Koyama, K.; Goto-Yamamoto, N.; Hashizume, K. Bioscience Biotechnology and Biochemistry. 2007, 71, 958.
17. Langcake, P.; Pryce, R. J.. Experientia. 1977, 33, 151.
18. Lee, C. Y.; Jaworski, A. American Journal of Enology and Viticulture. 1987, 38, 277.
19. Makarov, A.; Denisov, E.; Kholomeev, A.; Balschun, W.; Lange, O.; Strupat, K.; Horning, S. Analytical Chemistry. 2006a, 78, 2113.
20. Makarov, A.; Denisov, E.; Lange, O.; Strupat, K.; Horning, S. Journal of the American Society for Mass Spectrometry 2006b, 17, 977.
21. Miller, J. C.; Miller, J. N. Statistics for Analytical Chemistry, 2^a ed., Ellis Horwood: Chichester, 1988.
22. Nasi, A.; Ferranti, P.; Amato, S.; Chianese, L. Food Chemistry. 2008, 110, 762.
23. Nelson, D.L.; Cox, M.M. Lehninger Principles of Biochemistry, 6^a ed., W. H. Freeman, 2012.
24. Oliveira, D.N.; Sartor, S.B.; Damário, N.; Göllucke, A.P.B.; Catharino, R.R. Journal of Food Measurement and Characterization. 2013, 8, 9.
25. Ramalho, V.C.; Jorge, N. Química Nova. 2006, 29, 755.

Tabela 1. Relação dos sucos de uva integrais com suas especificações: procedência do suco, tipo, natureza, cultivar e espécie da uva.

Código do suco	Procedência ^a	Tipo	Natureza	Cultivar da uva	Espécie da uva
AM	Rio Grande do Sul	tinto	Comercial	Isabel/bordô	<i>Vitis labrusca</i>
AL	Rio Grande do Sul	tinto	Comercial	Isabel/bordô	<i>Vitis labrusca</i>
AU	Rio Grande do Sul	tinto	Comercial	Isabel/bordô	<i>Vitis labrusca</i>
CB	Rio Grande do Sul	tinto	Comercial	Isabel/bordô	<i>Vitis labrusca</i>
CL	Rio Grande do Sul	tinto	Comercial	Isabel/bordô	<i>Vitis labrusca</i>
CM	Rio Grande do Sul	tinto	Comercial	Isabel/bordô	<i>Vitis labrusca</i>
DC*	Rio Grande do Sul	tinto	Comercial	Isabel/bordô	<i>Vitis labrusca</i>
DG	Rio Grande do Sul	tinto	Comercial	Isabel/bordô	<i>Vitis labrusca</i>
GA	Rio Grande do Sul	tinto	Comercial	Isabel/bordô	<i>Vitis labrusca</i>
GB	Rio Grande do Sul	tinto	Comercial	Isabel/bordô	<i>Vitis labrusca</i>
GD*	Rio Grande do Sul	tinto	Comercial	Isabel/bordô	<i>Vitis labrusca</i>
MT	Rio Grande do Sul	tinto	Comercial	Isabel/bordô	<i>Vitis labrusca</i>
MV	Rio Grande do Sul	tinto	Comercial	Isabel/bordô	<i>Vitis labrusca</i>
PE	Rio Grande do Sul	tinto	Comercial	Isabel/bordô	<i>Vitis labrusca</i>
PG	Rio Grande do Sul	tinto	Comercial	Isabel/bordô	<i>Vitis labrusca</i>
PZ	Rio Grande do Sul	tinto	Comercial	Isabel/bordô	<i>Vitis labrusca</i>
SB*	São Paulo	tinto	Comercial	Isabel/bordô	<i>Vitis labrusca</i>
SI	Rio Grande do Sul	tinto	Comercial	Isabel/bordô	<i>Vitis labrusca</i>
SN	Rio Grande do Sul	tinto	Comercial	Isabel/bordô	<i>Vitis labrusca</i>
SP*	Rio Grande do Sul	tinto	Comercial	Isabel/bordô	<i>Vitis labrusca</i>
US	Rio Grande do Sul	tinto	Comercial	Isabel/bordô	<i>Vitis labrusca</i>
EP*	Minas Gerais	tinto	Experimental	Isabel/bordô	<i>Vitis labrusca</i>
SA_isaM	Pernambuco	tinto	Experimental	Isabel	<i>Vitis labrusca</i>
SA_isaB	Pernambuco	tinto	Experimental	Isabel	<i>Vitis labrusca</i>
SA_coraB	Pernambuco	tinto	Experimental	BRS cora	<i>Vitis labrusca</i>
SA_coraM	Pernambuco	tinto	Experimental	BRS cora	<i>Vitis labrusca</i>
SA_coraFM	Pernambuco	tinto	Experimental	BRS cora	<i>Vitis labrusca</i>
CM_B	Rio Grande do Sul	branco	Comercial	Italia	<i>Vitis vinífera</i>
GD_B*	Rio Grande do Sul	branco	Comercial	Italia	<i>Vitis vinífera</i>
PE_B	Rio Grande do Sul	branco	Comercial	Italia	<i>Vitis vinífera</i>
SA_chard_B	Pernambuco	branco	Experimental	Chardonnay	<i>Vitis vinífera</i>
SA_mosc_B	Pernambuco	branco	Experimental	Moscato	<i>Vitis vinífera</i>
SA_ita_B	Pernambuco	branco	Experimental	Itália	<i>Vitis vinífera</i>

* Sucos de uva integrais orgânicos, (a) Procedência dos sucos por Estados brasileiros

Tabela 2. Compostos não-voláteis presentes nos sucos de uva, fórmula molecular, m/z_{exp} (experimental) e $m/z_{teor.}$ (teórico), erro E (ppm) obtidos na análise por QExactive™

Substância	Fórmula	$m/z_{exp.}$	$m/z_{teor.}$	E (ppm)
ácido fosfórico	H ₃ PO ₄	96,95871	96,95915	4,53
ácido tartárico	C ₄ H ₆ O ₆	149,00797	149,00789	0,54
ácido málico	C ₄ H ₆ O ₅	133,01296	133,01251	3,38
ácido cítrico	C ₆ H ₈ O ₇	191,01890	191,01795	4,97
ácido succínico	C ₄ H ₆ O ₄	117,01805	117,01756	4,18
ácido acético	C ₂ H ₄ O ₂	59,01251	59,01258	1,18
ácido ascórbico	C ₆ H ₈ O ₆	176,13380	176,13456	4,31
ácido <i>p</i> -coumarico	C ₉ H ₈ O ₃	165,09284	165,09277	0,42
ácido cafeico	C ₉ H ₈ O ₄	180,05851	180,05871	1,11
ácido quinico	C ₇ H ₁₂ O ₆	191,01890	191,01834	2,93
ácido <i>trans</i> -fartárico	C ₁₄ H ₁₄ O ₉	325,09284	325,09272	0,37
ácido ferúlico	C ₁₀ H ₁₀ O ₄	193,03455	193,03536	4,19
ácido aspártico	C ₄ H ₇ NO ₄	134,01636	134,01696	4,47
ácido malônico	C ₃ H ₄ O ₄	102,97443	102,97391	5,05
ácido siringico	C ₉ H ₁₀ O ₅	199,80428	199,80370	2,90
ácido propionico	C ₃ H ₆ O ₂	72,99172	72,99201	3,97
ácido galico	C ₇ H ₆ O ₅	170,09014	170,09097	4,87
ácido cinâmico	C ₉ H ₈ O ₂	149,04439	149,04508	4,62
ácido carbônico	H ₂ CO ₃	59,91258	59,91296	6,34
ácido sinápico	C ₁₁ H ₁₂ O ₅	225,00701	225,00786	3,78
ácido vanílico	C ₈ H ₈ O ₄	168,98842	168,98855	0,77
ácido coutárico	C ₁₃ H ₁₂ O ₈	295,06708	295,06781	2,47
ácido <i>trans</i> -caftárico	C ₁₃ H ₁₂ O ₉	311,16867	311,16758	3,50
ácido <i>cis</i> -4-coumarico	C ₉ H ₈ O ₃	165,06708	165,06782	4,48
<i>L</i> - asparagina	C ₄ H ₈ N ₂ O ₃	133,04936	133,04961	1,88
<i>L</i> - glutamina	C ₅ H ₁₀ N ₂ O ₃	147,02875	147,02833	2,85
<i>L</i> - lisina	C ₆ H ₁₄ N ₂ O ₂	147,02875	147,02909	2,31
<i>L</i> – valina	C ₅ H ₁₁ NO ₂	118,04082	118,04140	4,91
<i>D</i> - glucose	C ₆ H ₁₂ O ₆	179,05515	179,05484	1,73
<i>L</i> - prolina	C ₅ H ₉ NO ₂	115,91945	115,91891	4,65
<i>L</i> - metionina	C ₅ H ₁₁ NO ₂ S	150,01137	150,01150	1,13
<i>L</i> - tirosina	C ₉ H ₁₁ NO ₃	182,08775	182,08694	4,45
<i>L</i> – leucina	C ₆ H ₁₃ NO ₂	132,36670	132,36605	4,91
<i>L</i> -triptofano	C ₁₁ H ₁₂ N ₂ O ₂	205,03484	205,03498	0,68
<i>L</i> - arginina	C ₆ H ₁₄ N ₄ O ₂	175,06026	175,06101	4,28
4- <i>O</i> -cafeoilquinico	C ₁₆ H ₁₈ O ₉	353,08800	353,08825	0,71
5- <i>O</i> -cafeoilquinico	C ₂₄ H ₃₂ O ₈	447,03959	447,03920	0,87
resveratrol	C ₁₄ H ₁₂ O ₃	228,99380	228,99310	3,06
pteroestilbeno	C ₁₆ H ₁₆ O ₃	254,91680	254,91555	5,45
Apigenina	C ₁₅ H ₁₀ O ₅	269,08773	269,08827	2,01
catequina	C ₁₅ H ₁₄ O ₆	290,08415	290,08491	2,62
coniferina	C ₁₆ H ₂₂ O ₈	341,10898	341,10876	0,65
<i>p</i> -coumarato de etila	C ₁₁ H ₁₂ O ₃	191,01890	191,01736	8,06
galato de metila	C ₈ H ₈ O ₅	182,98779	182,98662	6,39
malonato de dietila	C ₇ H ₁₂ O ₄	160,07445	160,07533	5,49
Tirosol	C ₈ H ₁₀ O ₂	136,99571	136,99503	4,96
manitol	C ₆ H ₁₄ O ₆	181,07084	181,07147	3,48

Tabela 3. Valores da abundância (média das áreas da triplicata, $n = 3$) de cada substância identificada nos sucos de uva

Substâncias	Abundância										
	AL	AM	AU	CB	SA_chard_B	CL	CM	CM_B	SA_coraB	SA_coraFM	SA_coraM
ácido fosforico	230813813	430221206	40943917	138344603	167531059	11464848	18067475	419484011	26673168	107387797	82846949
ácido tartárico	74812156	358513087	13752693	45103386	21757269	1691592	3291786	15448307	5345973	8838098	24886112
ácido acético	8053655	11369508	2974453	7006471	5937977	120083	217508	22947987	538784	5475400	4509861
ácido carbônico	0	0	0	372419	9321	991014	0	0	0	0	0
ácido cítrico	32252173	35373422	11051592	5715724	8002452	571626	688940	98314206	447482	3855189	3637326
ácido succínico	5685627	4105379	3433648	6531138	225957467	47951	55231	26371164	0	4523560	8079073
ácido propiônico	3090387	8207062	1838140	5434553	23530050	38046	47170	17028964	253032	4527367	0
ácido ascórbico	0	5401970	4807276	8569936	26191359	311271	336749	32331536	647841	7381285	6645177
ácido málico	305883547	369590109	80808147	66425671	322354471	3810513	5395816	1,104E+09	4316080	472534144	423808939
ácido <i>p</i> -coumárico	28965278	14968433	1506449	8118461	3345956	301648	387093	60584192	210990	7958317	8784069
ácido caféico	57260023	32773630	23420764	31022858	11248693	1568970	1757069	9734591	3340108	2544323	36019515
ácido quínico	10035752	13491333	1634567	5257515	3627675	114120	141520	11448911	517482	3855187	3637326
ácido <i>trans</i> -ferrárico	41033746	18841558	18187104	13500739	34874363	1306089	3291786	97261560	231273	7958317	7993997
ácido ferúlico	32611524	199617065	1189199	10021397	35054535	1306089	3291786	97261560	259270	5239462	6769441
ácido aspártico	11041352	15516039	3398724	15603690	18321619	583737	811925	47283544	0	20248509	18094089
ácido malônico	2919926	4746021	1497327	4134408	66103	516548	620494	9856977	0	0	0
ácido síngico	61815	0	0	0	14591	0	20968	0	0	0	0
ácido cinâmico	0	0	666345	34283176	6151864	623810	3291786	15448307	5345974	2842512	24896427
ácido sinápico	0	0	0	0	0	0	0	0	0	3775766	0
ácido galico	0	0	3204145	158949	0	0	0	10690618	0	2556781	3952286
ácido coutárico	29891027	5103748	1481624	7179726	34879869	1691592	3291786	21722682	5192633	8838098	0
ácido <i>trans</i> -caftárico	35131	1456627	21082	7527804	15839	0	28614	152536715	0	0	0
ácido <i>cis</i> -4-coumárico	35620398	9329658	1509930	6194974	12742164	331047	378117	21722682	669940	4908936	4514726
L - asparagina	266874926	369590109	82367300	5790391	148987665	2872764	3531311	9084208	4316080	3359228	3012906
L - glutamina	17548954	0	0	8227130	4876680	179648	471633	42437395	944657	9862785	10449571
L - lisina	3292216	0	0	2987561	4876680	0	0	0	0	0	0
L - valina	6888608	10689065	2591850	1602490	9749920	746626	95665	14967783	858060	4856160	3765114
D - glucose	50577076	64195411	23420765	31022858	19588487	1568970	1757069	152536715	3340108	4053166	34250005
L - prolina	161924	1555375	1853505	2511353	3485933	764326	950483	9084208	0	3359228	3012906
L - metionina	217990300	6774985	23941	177999	4896906	1416833	2594007	12203662	226453	0	0
L - tirosina	75590	137678	93105,33	0	29145	618761	260206	0	0	0	0
L - arginina	0	0	0	0	7124987	0	0	0	0	0	0
L - leucina	0	0	32010,67	180864	0	243887	123615	0	0	0	6084275
L - triptofano	0	0	0	2450051	0	0	0	0	0	3330285	2892451
4-O - cafeoilquinico	0	0	0	0	0	0	0	0	1327427	0	0
5-O - cafeoilquinico	1867594	0	1684792	2594656	10563927	141327	0	11127292	0	0	24886112
resveratrol	0	0	9781,333	0	0	230230	347036	0	269733	0	0
pterostilbeno	0	0	0	772337	29253	0	131885	0	0	0	0
Apigenina	0	0	5282,667	0	0	47951	55232	26371164	432953	4523560	0
catequina	0	0	6275	2450051	0	1568970	1431070	152536715	3340108	40531371	0
malonato de dietila	15716076	18375607	6259354	11908245	38713279	813377	1130448	40465699	1339151	9101858	9316329
<i>p</i> -coumarato de etila	6589016	4154444	1683249	5715724	3494877	114120	141521	9581838	447482	3855233	3637326
galato de metila	75590	1827184	101775,7	0	29145	766634	652375	0	0	0	3848466
Tirosol	0	0	0	0	2029118	238748	191790	28578511	669940	7196871	0

Continuação. Tabela 3.

Substâncias	Abundância										
	DC	DG	EP	GA	GB	GD	GD_B	SA_isaB	SA_isaM	SA_ita_B	SA_mosc_B
ácido fosforico	2377009	131323179	152994635	807372	92878325	114270976	76364384	455333	455333	151544928	112767179
ácido tartárico	662411	1987336	64257531	10723560	17649921	26465027	1671565	67926	67926	56183579	47190107
ácido málico	769705	413738923	3975763	6217445	5087845	396927616	42687773	263769	263769	340287616	174503872
ácido carbônico	0	0	405857	192165	0	1992992	0	610473	606356	0	0
ácido propiônico	0	3999014	4063460	291200	5050650	4485868	1499551	0	0	4090787	0
ácido cítrico	235023	4838529	3258470	302300	5908676	4904763	7525249	1319176	1319176	2764987	1916775
ácido succínico	0	6572141	2693475	259896	13085773	5123049	2118760	48891	48891	2024844	1982805
ácido acético	68518	4380021	6831575	472906	7526071	6171544	2514884	0	0	5679775	3869384
ácido ascórbico	124952	5859413	8414148	493221	10429829	9288212	3245652	11863	11863	7283019	5224982
ácido <i>p</i> -coumárico	106480	5599480	10408506	489542	14609703	6047141	1976003	9378	9378	6322637	1566968
ácido caféico	144647	27208619	2739072	2277777	3161246	2722423	1051898	63336	63336	2421675	1640284
ácido quínico	0	4838529	3258470	302300	6198166	4904763	7525249	12771	12771	8062391	1916775
ácido <i>trans</i> -ferrárico	662411	21750016	2692126	543098	61124549	9940201	9695183	9378	9378	3229249	47190107
ácido fêrúlico	0	21750016	2692126	10723560	61124549	24203533	9695183	67926	67926	3229249	47190107
ácido malônico	141283	2278608	0	266756	5210837	0	1006829	92136	92136	0	0
ácido aspártico	244485	17296912	10194731	261360	8950100	17092620	1823244	10971	10971	14669603	7360421
ácido gálico	0	2919176	2431022	406049	6794092	3743760	1195370	10357	0	1916834	0
ácido cinâmico	376942	4085792	64257531	10723560	17649921	5207389	1671565	32555	203779	3820513	0
ácido coutárico	0	4183995	2712553	10723560	4831524	5431589	790443	67926	67926	2034055	2509734
ácido sinápico	0	0	0	200523	3990226	0	0	250070	27742	0	1388068
ácido vanílico	0	0	0	0	0	0	0	11896	0	0	0
ácido <i>trans</i> -caftárico	0	2314819	0	0	0	0	0	9157	9157	0	0
ácido <i>cis</i> -4-coumárico	0	4790289	2712553	489542	9000172	6648357	3288353	14854	14854	2034055	2845111
<i>L</i> -asparagina	769705	3029160	3975763	419970	5087845	2878338	42687773	263769	263769	2433561	1246847
<i>L</i> -glutamina	217945	1987336	11090287	914980	4024860	12036597	4694900	15681	15681	10507706	7259035
<i>L</i> -lisina	0	1987336	0	3185544	4024860	0	0	0	0	0	0
<i>L</i> -valina	343308	5689325	0	0	3820176	7565829	0	0	0	0	0
<i>D</i> -glucose	608718	27208619	42661813	2277777	48718539	42728064	1600628	63336	63336	37539107	25517859
<i>L</i> -prolina	244485	3029160	0	419970	0	2878338	0	81212	81212	2433561	1246847
<i>L</i> -metionina	769705	2407480	2639389	453839	4024860	0	1408591	263769	263769	2360311	1972543
<i>L</i> -triptofano	0	0	0	0	0	2551931	837470	0	3159971	0	0
5-O-cafeoilquinico	68484	2848294	0	0	6352601	2826798	793790	0	0	0	0
resveratrol	125638	0	0	0	0	0	0	10774	77575	106996	4743540
pteroestilbeno	222480	0	513627	0	0	0	0	0	0	0	2270503
Apigenina	0	6572141	0	0	0	0	910535	10905	0	2024844	0
Catequina	0	27208619	42661813	0	0	0	0	13935	0	0	1342361
galato de metila	258839	0	0	0	0	0	0	86438	86438	0	0
<i>p</i> -coumarato de etila	0	4838529	3258470	302300	7200135	4904763	7525249	12771	12771	2764987	1916775
malonato de dietila	528738	8207656	11532785	1811111	13559384	13798979	4564038	18298	18298	9937167	7361931
Tirosol	80596	5689325	7541499	3219157	9000172	1992992	3288353	22289	74730	7038343	47190107

Continuação. Tabela 3.

Substâncias	Abundância										
	MT	MV	PE	PE_B	PG	PZ	SB	SI	SN	SP	UV
ácido fosforico	3033854	1138737	184025749	177958869	177748256	63297973	67071515	57296629	116386389	10019937	115049611
ácido tartárico	914456	298125	96171787	72375936	37895027	5399938	27625355	18412580	41240088	3096804	64839659
ácido carbônico	932515	944128	0	0	0	0	0	0	0	0	0
ácido málico	991862	422803	198159253	285889365	277166144	368019627	186771563	184048917	291749376	341605	528537771
ácido cítrico	3805974	4074804	3124237	3763986	3891735	7953394	4681777	3894881	2252231	135117	8546573
ácido propiônico	0	0	3951093	4672309	4285667	4231042	3317781	2960383	3838674	0	1370489
ácido succínico	0	0	1998265	6114095	2973377	9452278	6046972	6812175	4604826	0	2504162
ácido acético	83581	0	6241681	6642979	6458445	4638100	5295985	4647222	5037321	1878154	2888867
ácido ascorbico	162695	79457	7402505	8925659	8501401	6955626	7708847	7690043	6195705	328672	3702139
ácido p-coumarico	129163	88675	7586214	4632301	8831130	7397462	10350829	6318167	8242679	197307	4098121
ácido cafeico	777609	370371	2356799	2672777	2683612	32593789	2497447	2488608	28262064	1663706	16481816
ácido quínico	0	0	3124237	3763986	3891735	7953394	4681777	3894881	2252231	135117	8546573
ácido trans-fertárico	914456	298125	12428217	17069745	13505741	52561109	27625355	8172225	34349021	0	3259906
ácido ferúlico	914456	298125	10676113	17069745	13505741	52561109	29604307	22462179	34349021	368695	3259906
ácido aspártico	295022	191065	8346379	12058475	11947383	15514704	7876605	7873202	12450143	145060	22370472
ácido malônico	139379	168071	0	2341647	0	4571289	2736668	2642827	2833114	0	1643435
ácido sinápico	0	0	0	0	0	25139100	0	0	0	132293	0
ácido gálico	0	0	2630850	8162487	7339621	1282100	3439912	3956927	3694896	0	1533940
ácido cinâmico	914456	894376	96171787	217127808	113685080	72178744	27625355	4795871	41240088	3096804	1839578
ácido siringico	0	0	0	3465944	0	0	0	0	0	0	0
ácido coumarico	914457	298125	2389681	3607901	4946112	8262047	5004696	5332045	4458329	3096804	3640168
ácido cis-4-coumarico	169189	74759	3557768	3607901	2061028	8262047	5004696	2247115	5414800	341605	3640168
ácido trans-caftárico	0	0	0	0	2418178	4806616	0	2602746	0	0	2239860
L-asparagina	295022	422803	2301950	3141138	6929336	5615338	4788938	4722295	2142257	860431	3968917
L-glutamina	284130	137225	9990540	12073644	11437400	9308720	1899780	2155490	3198546	539905	1421170
L-lisina	0	0	0	0	0	0	1899780	2155490	3198546	0	1421170
L-valina	0	0	0	11383625	0	0	0	0	0	0	0
D-glucose	777609	370371	2050079	41352685	42376832	32593789	38809773	38307792	28262064	1663706	16481816
L-prolina	295022	191065	0	3141138	0	0	0	0	2142257	0	3968917
L-metionina	991862	422803	3983560	3046702	0	0	1899780	2155490	3198546	128440	2714894
L-arginina	0	0	0	0	0	17626078	0	0	0	0	0
L-leucina	0	142741	0	0	0	0	0	0	0	0	0
L-triptofano	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	2548352
5-O-cafeoilquinico	0	62800	0	0	0	6353685	1993212	3907728	2457629	0	1450526
resveratrol	116529	279984	0	0	0	0	0	0	0	0	0
pteroestilbeno	0	219638	0	0	227972	0	0	0	0	188156	0
Apigenina	0	0	1998265	18342284	8920131	28356834	0	12425655	4604826	138856	0
Catequina	777609	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
malonato de dietila	635731	362862	10445617	11192249	11133893	9980141	10151768	11189041	8639457	1023376	5722007
p-coumarato de etila	0	0	3124237	3763986	3891735	7953394	4681777	3894881	2252231	135117	8546573
galato de metila	242031	270660	0	0	0	0	0	0	0	229748	0
manitol	0	0	0	0	0	0	2107657	0	0	0	0
Tirosol	557983	224279	6422621	22898894	23153564	17300734	7193702	6634847	5414800	0	0

Os termos AL, AU etc. são os códigos referentes aos sucos de uva (vide Tabela 1). Os valores de abundância referem-se às médias das áreas relativas das triplicatas de extração.

Tabela 4. Substâncias com seus respectivos códigos para análise dos componentes principais (PCA)

Substância	Código para PCA	Substância	Código para PCA
ácido fosfórico	C1	L – valina	C23
ácido tartárico	C2	D- glucose	C24
ácido málico	C3	L - prolina	C32
ácido cítrico	C4	L - metionina	C33
ácido succínico	C5	L - tirosina	C34
ácido acético	C7	L – leucina	C40
ácido ascórbico	C8	L-triptofano	C48
ácido <i>p</i> -coumarico	C9	L - arginina	C54
ácido cafeico	C12	L - glutamina	C21
ácido quinico	C13	L- asparagina	C19
ácido <i>trans</i> -ferrico	C16	resveratrol	C44
ácido ferúlico	C17	pteroestilbeno	C50
ácido aspártico	C20	Apigenina	C42
ácido malônico	C27	catequina	C47
ácido siringico	C31	coniferina	C53
ácido propionico	C36	Tirosol	C41
ácido galico	C45	manitol	C56
ácido cinâmico	C46	5- <i>O</i> -cafeoilquinico	C37
ácido sinápico	C59	4- <i>O</i> -cafeoilquinico	C58
ácido coumarico	C39	galato de metila	C35
ácido <i>trans</i> -caftárico	C30	malonato de dietila	C25
ácido <i>cis</i> -4-coumarico	C28	<i>p</i> -coumarato de etila	C18
L - lisina	C22		

Figura 1. (A) Gráfico de scores dos sucos de uva tintos, (B) Gráfico de loadings com os compostos não-voláteis identificados, com formação de agrupamentos conforme as cores observadas nos gráficos (A) e (B).

Figura 2. (A) Gráfico de scores dos sucos de uva brancos, (B) Gráfico de loadings com os compostos não-voláteis identificados, com formação de agrupamentos conforme as cores observadas nos gráficos (A) e (B).