

ANÁLISE DE FARINHAS DE TRIGO POR ESPECTROSCOPIA NO INFRAVERMELHO, ACOPLADA ÀS ANÁLISES ESTATÍSTICAS MULTIVARIADAS.

Ana Clara Moreno Fiduniv, Lucas Ferreira Lyra, Kumiko Koibuchi Sakane, Juliana Ferreira Strixino.

Fotobiologia Aplicada à Saúde (PhotoBioS) - Instituto de Pesquisa e Desenvolvimento - IP&D, Universidade do Vale do Paraíba, Univap. Avenida Shishima Hifumi, 2911, 12244-000, São José dos Campos - SP, Brasil. ana.moreno1264@gmail.com; lucasferreiralyra@gmail.com; kumiko.sakane@gmail.com, juferreira@univap.br.

Resumo

O presente trabalho teve como objetivo analisar e comparar os componentes bioquímicos de diferentes tipos de farinha de trigo, por meio de técnicas de espectroscopia vibracional no infravermelho com transformada de Fourier aliada à tecnologia de refletância total atenuada (FTIR-ATR), integradas às análises estatísticas multivariadas. Para isso, foram utilizadas amostras de farinha de trigo integral brasileira e de farinha refinada italiana e brasileira, a fim de demonstrar a sensibilidade e a eficácia das técnicas aplicadas. Em seguida, os espectros médios de FTIR-ATR foram obtidos, sobrepostos e analisados, revelando variações entre as amostras de farinhas comerciais, demonstrando que a técnica é eficiente para detectar diferenças na estrutura molecular das amostras. A aplicação da análise multivariada por agrupamento hierárquico (HCA) foi essencial para interpretar as alternâncias constatadas, evidenciando que os espectros das três farinhas são, de fato, distintos entre si. Por fim, os resultados demonstram que a combinação entre FTIR-ATR e HCA constitui uma ferramenta analítica eficaz para a caracterização e diferenciação de farinhas de trigo comerciais, com potencial de aplicação em estudos de controle de qualidade e desenvolvimento de novos produtos alimentícios.

Palavras-chave: Farinha de trigo. FTIR-ATR. Análises estatísticas multivariadas. HCA.

Área do Conhecimento: Química – Físico-Química - Espectroscopia.

Introdução

O trigo está presente na história da humanidade há cerca de 12 mil anos (Abitrigo, 2017) e desde os primórdios é consumido. A demanda desse cereal pode ser observada por meio dos dados da Secretaria de Comércio Exterior (Secex), onde, de janeiro a maio de 2024, foi registrado que o Brasil não só importou 2,766 milhões de toneladas de trigo, como também, consumiu entre 11 e 12 milhões de toneladas desta graminéa (Epagri, 2024).

A qualidade da farinha de trigo, o processamento e os seus componentes são fatores relevantes na sociedade atual. Para que chegue aos supermercados uma farinha de trigo de alta qualidade, há a necessidade da análise do grão antes da sua moagem. Para isso, cientistas da área do alimento classificam seus ensaios em relação ao trigo pelo seu teor de umidade, cinzas, glúten, viscosidade, extensografia e atividade de α -amilase. Estas análises são imprescindíveis para a qualidade do produto (Scheuer *et al.*, 2011), pois determinam suas propriedades físicas, químicas e reológicas. Além disso, esta graminéa é fonte de proteínas, carboidratos, lipídios, minerais, e muitos outros tipos de biomoléculas essenciais para a vida humana e, com isso, faz parte do dia a dia dos brasileiros e da população mundial (Oyeyinka, 2023). Atualmente há cerca de 30 tipos existentes e *geneticamente* diferenciados deste grão, onde somente metade é cultivada e a outra metade é disposta de forma silvestre (Khalid, 2023). A espécie mais consumida é o *Triticum aestivum*, também chamado de trigo comum.

Diversas técnicas têm sido amplamente utilizadas para identificar as diferenças entre farinhas provenientes de variedades de trigo. Entre essas técnicas, destacam-se as análises espectroscópicas por FTIR (Fanari, 2022; Gunarathne *et al.*, 2022; Mills *et al.*, 2005), eletroforese em gel de poliácridamida com dodecilsulfato de sódio (SDS-PAGE), espectroscopia de absorção atômica e outros métodos padrões (Idowu *et al.*, 2025; Zhu *et al.*, 2022). Dentre essas abordagens, o mapeamento químico utilizando espectroscopia vibracional no infravermelho com transformada de Fourier com tecnologia de refletância atenuada (FTIR-ATR), acoplada às análises estatísticas multivariadas, têm demonstrado

sucesso em sua aplicação a uma ampla gama de produtos agrícolas, como o trigo (Fanari, 2022; Gunarathne et al, 2022). Com isso, é possível aprimorar a qualidade desses produtos de uma maneira eficiente e com baixo custo, o que gera, respectivamente, benefícios para o consumidor e para o produtor. Sendo assim este trabalho tem como objetivo demonstrar que as técnicas de FTIR-ATR, acopladas às análises estatísticas multivariadas, constituem uma abordagem robusta para a caracterização e diferenciação de farinhas comerciais, que possui um significativo potencial em estudos de autenticidade e desenvolvimento de produtos alimentícios.

Metodologia

As amostras de farinha de trigo que foram analisadas são produtos industrializados e comercializados no mercado, e foram obtidas em vários supermercados de São José do Campos, na data de 14 de fevereiro de 2025. São mercadorias de origem brasileira e Italiana de regiões e produtores diferentes.

As amostras foram divididas em 3 grupos, sendo o grupo um: farinha do tipo 1 enriquecidas com ferro e ácido fólico (comumente conhecidas como farinha branca), de origem brasileira; o grupo dois: farinha integral, de origem brasileira; e o grupo três: farinha tipo 00, de origem italiana (conhecida também como farinha refinada italiana). Os Grupos 1 e 2 são farinhas de origem brasileira. Os três diferentes grupos foram criados para a verificação da diferença entre as farinhas do tipo 1, integral e 00 italiana.

Neste trabalho, todas as amostras foram analisadas utilizando técnicas de FTIR-ATR acopladas à análise estatística multivariada. Todos os espectros de absorção no infravermelho das amostras foram obtidos na região de 4000 a 450 cm^{-1} , com resolução de 4 cm^{-1} , no modo reflexão, com 32 varreduras e a uma temperatura controlada de 20°C, sendo que cada amostra analisada teve seu espectro obtido cinco vezes. O espectrofotômetro utilizado foi o Spectrum Two com Transformada de Fourier (FTIR) combinado à tecnologia de refletância total atenuada (ATR), sendo ambos da fabricante PerkinElmer.

Todos os espectros infravermelhos, no modo reflexão, foram obtidos e processados com Software Spectrum 10.6.0 da PerkinElmer, onde foram feitas as correções de linha de base, a suavização espectral utilizando nove pontos do algoritmo Savitzky Golay e a normalização dos espectros infravermelhos.

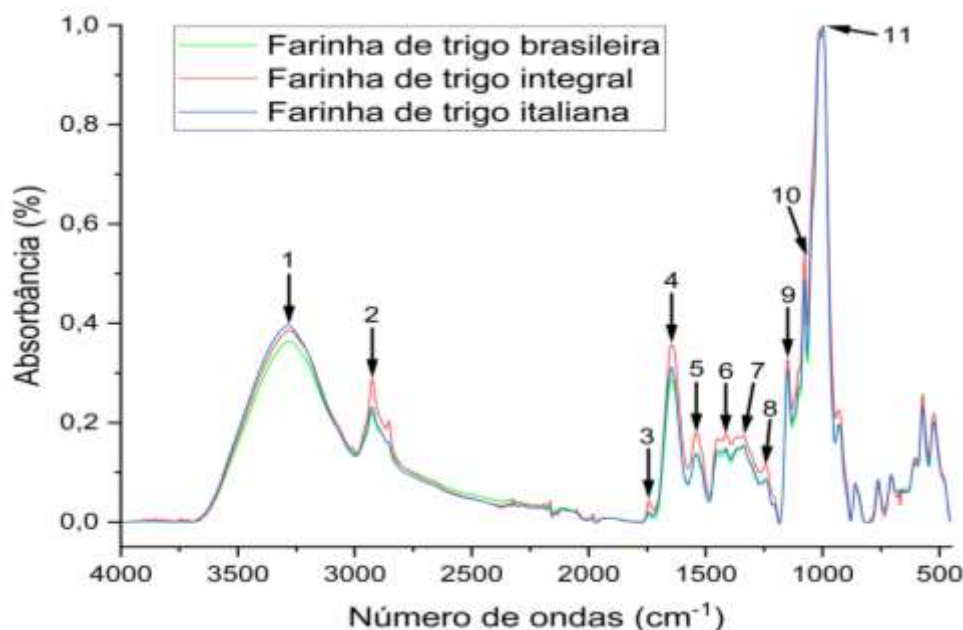
Para a análise qualitativa dos espectros foi feita por meio de inspeção visual direta dos espectros médios das amostras separados e depois sobrepostos, com o intuito de avaliar se é possível detectar visualmente alguma diferença significativa nos espectros das amostras.

Para o estudo quantitativo dos espectros, os softwares OriginPro (versão 8.5) e Minitab (versão 17) foram utilizados para realizar as técnicas de análises de estatística multivariadas, como a análise de componentes principais, para reduzir o número de variáveis e, em seguida, agrupar as novas variáveis de acordo com sua semelhança e, por fim, a análise por agrupamento hierárquico (HCA), para determinar os níveis de similaridade entre os espectros infravermelhos obtidos.

Resultados

Os espectros infravermelhos médios das amostras in natura de farinhas de trigo brasileira, brasileira integral e italiana foram obtidos na região de 4000 a 450 cm^{-1} e estão representados na Figura 1

Figura 1- Espectros infravermelhos médios das farinhas de trigo, na região de 4000 a 450 cm^{-1}



Fonte: Os autores.

As principais bandas observadas e numeradas, na Figura 1, dos espectros médios obtidos, tiveram as atribuições aproximadas de seus respectivos modos vibracionais demonstradas no Quadro 1.

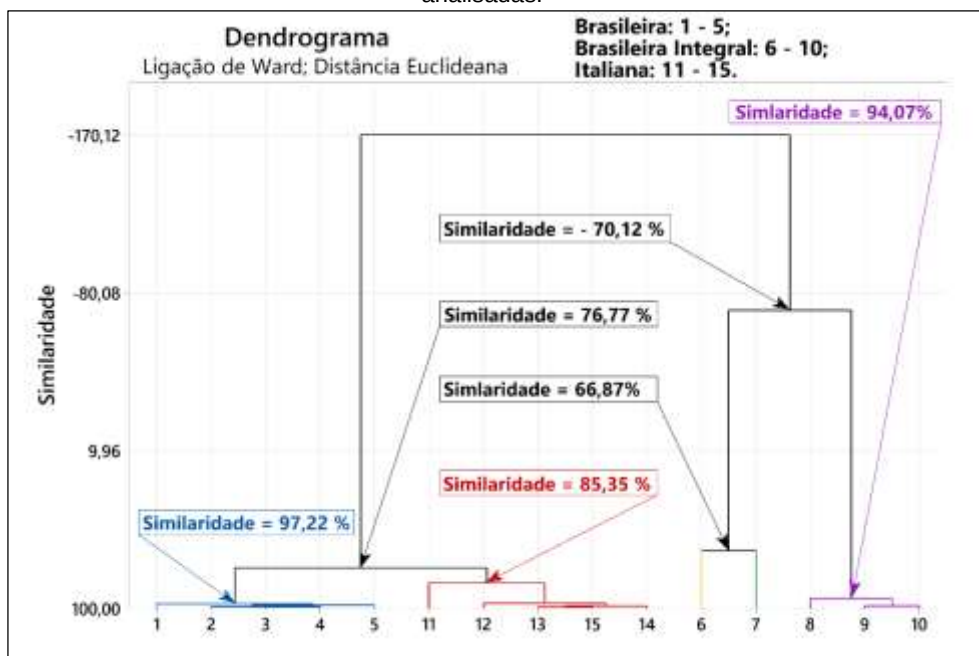
Quadro 1- Número de onda e suas atribuições aproximadas de modos vibracionais.

Picos	Número de onda (cm^{-1})	Biomoléculas e atribuições aproximadas de modos vibracionais
1	3270	Estiramento da ligação O-H
2	2924	Lipídeos: Estiramento assimétrico da ligação C-H
3	1743	Lipídeos: Estiramento do C=O
4	1646	Amida I: Estiramento do C=O de amida I dos grupos peptídicos das proteínas
5	1541	Amida II: Deformação angular da ligação N-H e estiramento da ligação C-N, presentes em proteínas
6	1411	Proteínas e Lipídios: Deformação assimétrica da ligação C-H em $-\text{CH}_2$ e $-\text{CH}_3$
7	1332	Proteínas e Lipídeos: Deformação simétrica da ligação C-H em $-\text{CH}_3$
8	1242	Amida III: Estiramento das ligações C=N e N-H, presentes em proteínas
9	1148	Carboidratos: Estiramentos das ligações C-O e C-C e estiramento assimétrico em C-O-C
10	1077	Carboidratos (Amido): Estiramento da ligação C-O
11	998	Carboidratos: Estiramento da ligação O-H e C-OH

Fonte: Arslan *et al.*, 2020; Fanari *et al.*, 2022; Gunarathne *et al.*, 2022; Xiong *et al.*, 2017.

Os resultados alcançados pela análise de agrupamentos hierárquico (HCA) estão apresentados na forma de um dendrograma na Figura 2, onde os espectros das três farinhas separados nos seguintes grupos: farinha branca, de origem brasileira (Brasileira); farinha integral, de origem brasileira (Brasileira Integral); farinha refinada italiana (Italiana). Por fim, para a elaboração do dendrograma (Figura 2), foi selecionada a região 4000 a 450 cm^{-1} dos espectros obtidos, com o objetivo de observar a similaridade entre todos os espectros.

Figura 2- Dendrograma da região de 4000 a 450 cm^{-1} dos espectros infravermelhos das farinhas de trigo analisadas.



Fonte: Os autores.

Em um dendrograma, como o da Figura 2, as linhas mais próximas ao eixo horizontal possuem maior similaridade entre os espectros, sendo assim, quanto mais distantes as linhas horizontais estiverem do eixo horizontal, menor será a similaridade entre os espectros ou grupos conectados pela linha.

Discussão

Por meio da Figura 1, é possível observar os espectros infravermelhos dos diferentes tipos de farinha de trigo, assim como, que a principal alteração bioquímica entre estas farinhas, é a intensidade das bandas de suas respectivas biomoléculas, sendo que, a farinha integral tem bandas mais intensas, sugerindo assim, possíveis diferenças nas composições de cada farinha avaliada. Além disso, na Figura 1, também foi possível observar as bandas relacionadas aos lipídios (os picos 2, 3, 6 e 7), as proteínas (os picos de 4 a 8) e aos carboidratos (os picos de 9 a 11), que constituem os principais componentes biomoleculares observados nos espectros infravermelhos, sendo que, o pico 1 está associado à presença de água e à formação de ligações de hidrogênio, comumente observadas em farinhas com um relativo maior teor de umidade. Por fim, é importante notar que as frações do gérmen do trigo, presentes somente nas farinhas de trigo integral, são ricos em proteínas e lipídeos e podem ter sido contribuidores significativos para as bandas mais intensas observadas nas farinhas integrais (Geng, Harnly & Chen, 2015; Craveiro, 2023).

A análise hierárquica de agrupamento (HCA) foi utilizada com a finalidade de avaliar a similaridade entre os espectros das amostras de farinha de trigo de diferentes tipos e origens, assim como, se resultados obtidos possibilitavam a diferenciação entre os espectros infravermelhos das três farinhas analisadas.

No dendrograma da Figura 2, foi possível observar que houve uma separação perfeita dos grupos de espectros de todas as amostras das farinhas de trigo analisadas. Os espectros das farinhas italiana e brasileira (Figura 2) encontram-se todos com uma similaridade maior do que os espectros da farinha brasileira integral, na qual é possível observar que dois espectros (os espectros 6 e 7) tiveram uma similaridade de apenas 66,87% entre si, sendo importante notar que o agrupamento com todos os cinco espectros obtidos da farinha integral, apresentou uma similaridade menor que zero (-70,12%). A baixa homogeneidade entre os espectros da farinha integral brasileira (em comparação com as demais farinhas) pode estar associada à presença de componentes do farelo e do gérmen e, consequentemente, à possível influência desses componentes nos espectros infravermelhos das amostras de farinha de trigo integral brasileira (Geng, Harnly & Chen, 2015).

Por fim, os resultados apurados pela HCA também sugerem a possibilidade de que os espectros das farinhas refinadas brasileiras e italianas se agruparam relativamente mais próximos (com nível de similaridade de 76,77%), em comparação com a farinha integral (similaridade de -170,12%), devido a uma composição mais homogênea, provavelmente decorrente de padrões industriais de refino semelhantes e de uma menor complexidade composicional, em relação a farinhas de trigo integrais (Fernández-Canto *et al.*, 2022; Gao, Wang G. & Wang Z., 2021).

Conclusão

A obtenção dos espectros infravermelhos das amostras de farinha de trigo foi realizada de forma rápida, eficiente e sem geração de resíduos, graças à utilização de técnicas FTIR-ATR. Essa abordagem permitiu a análise direta das amostras, sem necessidade de preparo. Foi possível atribuir aos picos que foram selecionados e numerados suas respectivas biomoléculas, com base em regiões espectrais características.

A HCA demonstrou-se eficaz na diferenciação entre os espectros das amostras de farinha de trigo de origens diferentes (brasileira e italiana) e de tipos distintos (refinada e integral), uma vez que essa técnica evidenciou uma separação perfeita entre os espectros das três farinhas estudadas. Os resultados obtidos e apresentados neste trabalho demonstram que as técnicas de FTIR-ATR, aliadas às análises estatísticas multivariadas, constituem uma abordagem robusta para a caracterização e diferenciação de farinhas comerciais, apresentando um significativo potencial em estudos de autenticidade e desenvolvimento de produtos alimentícios.

Referências

ABITRIGO. **O trigo na história**. Disponível em: <https://www.abitrigo.com.br/conhecimento/historia-do-trigo/>. Acesso em: 13 Jan. 2025

ARSLAN, F. N. *et al.* FT-IR spectroscopy with chemometrics for rapid detection of wheat flour adulteration with barley flour. **Journal fur Verbraucherschutz und Lebensmittelsicherheit**, v. 15, n. 3, p. 245–261, 1 set. 2020. <https://doi.org/10.1007/S00003-019-01267-9/TABLES/3>

CRAVEIRO, R. M. S. **Avaliação do desempenho tecnológico de misturas de farinhas de trigo**. 2023. Tese de Doutorado. Instituto Superior de Agronomia, Universidade de Lisboa.

EPAGRI. **Resultados da safra de trigo**. Disponível em: <https://www.epagri.sc.gov.br/index.php/2024/06/17/safra-de-inverno-2024-2025-deve-ter-mel>. Acesso em: 13 Jan. 2025

FANARI, F *et al.* A Chemometric Approach to Assess the Rheological Properties of Durum Wheat Dough by Indirect FTIR Measurements. **Food and Bioprocess Technology**, v. 15, p. 1040-1054 2022. <https://doi.org/10.1007/s11947-022-02799-z>

FERNÁNDEZ-CANTO, M. N. *et al.* Element Content in Different Wheat Flours and Bread Varieties. **Foods**, v. 11, n. 20, p. 3176, 12 out. 2022. <https://doi.org/10.3390/FOODS11203176>

GAO H., WANG G., WANG Z. Fast determination of mineral elements in wheat flour by near-infrared spectroscopy. **Wei Sheng Yan Jiu**, v. 50, n. 3, p. 495-500, Maio 2021. <https://doi.org/10.19813/j.cnki.weishengyanjiu.2021.03.025>.

GENG P, HARNLY J. M, CHEN P. Differentiation of Whole Grain from Refined Wheat (*T. aestivum*) Flour Using Lipid Profile of Wheat Bran, Germ, and Endosperm with UHPLC-HRAM Mass Spectrometry. **J Agric Food Chem**, v. 15, n. 63, p. 6189-6211, jul. 2. 2015. <https://doi.org/10.1021/acs.jafc.5b01599>.

GUNARATHNE, R. *et al.* FTIR spectral analysis combined with chemometrics in evaluation of composite mixtures of coconut testa flour and wheat flour. **Journal of Food Measurement and Characterization**, v. 16, n. 3, p. 1796–1806, 1 jun. 2022. <https://doi.org/10.1007/S11694-022-01287-4/TABLES/5>

IDOWU, Omogbolahan Samson *et al.* Optimizing SDS-PAGE for Accurate Protein Characterization in Nutritional Research and Food Quality Assessment. **International Journal of Innovative Science and Research Technology (IJISRT)**, v. 10, p. 1008–1045, 2025. <https://doi.org/10.5281/zenodo.14744562>

KHALID, A.; HAMEED, A.; TAHIR, M. F. Wheat quality: A review on chemical composition, nutritional attributes, grain anatomy, types, classification, and function of seed storage proteins in bread making quality. **Frontiers in Nutrition** v. 10, 2023.

MILLS, E. N. C. *et al.* Imagem química: a distribuição de íons e moléculas em grãos de trigo maduros e em desenvolvimento. **J Cereal Sci**, v. 41, p. 193–201, 2005.

OYEYINKA, S. A., INI-ABASY V. B. Composição, funcionalidade e qualidade de panificação da farinha de quatro marcas de farinha de trigo. **Journal of Culinary Science & Technology**, v. 1, p. 87–107, 2023.

SCHEUER, P. M. *et al.* Trigo: características e utilização na panificação. **Revista Brasileira de Produtos Agroindustriais**, v. 13, n. 2, p. 211–222, 2011.

XIONG, J *et al.* Interactions between wheat starch and cellulose derivatives in short-term retrogradation: Rheology and FTIR study. **Food Research International**, v. 100, p. 858–863, 1 out. 2017. <https://doi.org/10.1016/J.FOODRES.2017.07.061>

ZHU, L. *et al.* Characterization of prolamin recycled from the byproduct of the Baijiu brewing industry (Jiuzao) by SDS-PAGE, multispectral analysis, and morphological analysis. **Food Bioscience**, v. 49, p. 101854, 1 out. 2022. <https://doi.org/10.1016/J.FBIO.2022.101854>

Agradecimentos

Os autores agradecem à FAPESP pela aquisição de espectrofotômetro Spectrum Two da PerkinElmer por processo 2017/04013-0.

O presente trabalho também foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) - Código de Financiamento 001.