

See discussions, stats, and author profiles for this publication at: <https://www.researchgate.net/publication/316283726>

LC-MS/MS als Methode zur Detektion und Quantifizierung der Inhaltsstoffe in Kaffee

Article · January 2017

CITATIONS

0

READS

12

6 authors, including:



[Oliver Broedel](#)

Technische Hochschule Wildau

24 PUBLICATIONS 389 CITATIONS

[SEE PROFILE](#)



[Jane Beatrice Mugendi](#)

Dedan Kimathi University of Technology

13 PUBLICATIONS 109 CITATIONS

[SEE PROFILE](#)



[Marcus Frohme](#)

Technische Hochschule Wildau

122 PUBLICATIONS 1,416 CITATIONS

[SEE PROFILE](#)

All content following this page was uploaded by [Oliver Broedel](#) on 29 May 2017.

The user has requested enhancement of the downloaded file. All in-text references [underlined in blue](#) are added to the original document and are linked to publications on ResearchGate, letting you access and read them immediately.

LC-MS/MS als Methode zur Detektion und Quantifizierung der Inhaltsstoffe in Kaffee

Vanessa Gering, Liane Kober, Oliver Brödel, Richard Koskei, Beatrice Mugendi und Marcus Frohme*

Zusammenfassung

Kaffee ist das wohl populärste Heißgetränk weltweit. Zwei botanische Arten sind für den Weltmarkt von Bedeutung und unterscheiden sich bezüglich ihres Anbaugesbietes und der Inhaltsstoffe. Kaffee enthält über 850 bisher identifizierte Aromastoffe, welche den Geschmack bilden. Außerdem haben die Prozessierung der geernteten Kirsche bis zur Bohne, das Röstprofil und das Aufbrühen einen großen Einfluss darauf. In dieser Arbeit wurde die Auswirkung der Prozessierungsmethode auf ausgewählte Inhaltsstoffe mit Hilfe der Flüssig-Chromatographie-Tandem-Massenspektroskopie (LC-MS/MS) untersucht. Dafür wurden drei Prozessierungsmethoden, die unterschiedlich viel Wasser für das Ablösen des Fruchtfleisches von den Kaffeebohnen benötigen, und zwei Kultursorten miteinander verglichen. Die Ergebnisse zeigten einen geringfügig höheren Gehalt der zwei wichtigsten Inhaltsstoffe Koffein und Chlorogensäure in den Bohnen, bei deren Prozessierung im Eco-Pulper-Verfahren weniger Wasser eingesetzt wurde. Bis auf einen verringerten Gehalt an Saccharose wurde für weitere wichtige Inhaltsstoffe (Acrylamid, Niacin, Zitronensäure und Vanillin) kein signifikanter Unterschied bei höherem Wassereinsatz gefunden. Insofern man die untersuchten Inhaltsstoffe als Qualitätsmarker betrachtet, ist im Vergleich zu den anderen Prozessierungsmethoden das Eco-Pulper-Verfahren die beste Wahl, insbesondere da es als wassersparende Methode einen entscheidenden Beitrag zur Nachhaltigkeit des Kaffeeanbaus leistet.

Abstract

Coffee is the most popular soft drink in the world. Two botanical species of coffee are important for the world market and differ not only in their area of cultivation but also their components. Coffee contains more than 850 aromatic compounds which constitute its taste and flavour. Also, the method selected for the processing from the harvested cherry to the bean, the roasting profile, and the method of brewing are relevant. In this work, liquid chromatography tandem-mass-spectroscopy (LC-MS/MS) is used to investigate how the processing method influences selected aromatic compounds. Thus, three different processing methods differing in the amount of water needed for separating the coffee beans from the cherries, and two cultivars were compared. The results showed slightly higher concentrations of the caffeine and chlorogenic acid components in coffee processed with less water (the eco-pulper method). Apart from a reduced sucrose concentration, we found no significant difference in other important compounds (acrylamide, niacin, citric acid and vanillin) when plenty of water was used. Taking the investigated compounds as quality markers, the eco-pulper method is the best choice among the processing methods, especially since it conserves water, which could therefore significantly contribute to a sustainable cultivation of coffee.

1. Einleitung

„Ob Filterkaffee am Morgen, Espresso in der Mittagspause oder ein Latte Macchiato mit Freunden: Kaffee ist beliebt wie nie zuvor!“ (Moldvaer 2014). Kaffee ist nach Mineralwasser und Fruchtsäften das am häufigsten konsumierte Getränk in Deutschland. Nicht nur wegen seiner anregenden und konzentrationsfördernden Wirkung lieben die Deutschen ihren Kaffee,

sondern auch zahlreiche Aromastoffe und vielfältige Variationen machen Kaffee bei mehr als 2/3 der deutschen Bevölkerung zum festen Bestandteil des täglichen Lebens. Im Durchschnitt konsumiert jeder Deutsche etwa 4,8 kg Kaffee im Jahr, das entspricht circa 2–3 Tassen täglich.

Kaffee wird aus gerösteten, gemahlene Kaffeebohnen hergestellt. Obwohl es über 100 verschiedene botanische Arten der Gattung *Coffea* gibt, zählen

Sorten der beiden Arten *C. arabica* (Arabica) und *C. canephora* (Robusta) zu den beliebtesten weltweit. Sie unterscheiden sich nicht nur durch ihr Anbaugebiet, sondern auch in den Inhaltsstoffen. Kaffee enthält über 850 bisher bekannte Aromastoffe, welche maßgeblich den Geschmack beeinflussen, und fast jährlich werden weitere identifiziert (Kienreich & Schwarz 2008). Jeder einzelne Schritt, vom Anbau über die Ernte bis zum Aufbrühen,

* korrespondierender Autor

kann einen entscheidenden Einfluss auf das Aroma haben. Nach der Ernte werden verschiedene Prozessierungsmethoden eingesetzt, die sich auf die spätere Aromaentwicklung des Kaffees auswirken. Die am häufigsten verwendete Methode ist das sogenannte Wet-Pulper-Verfahren („to pulp“, engl. für „einstampfen; entfleischen“). Daneben gibt es auch noch das Hand-Pulper- und das Eco-Pulper-Verfahren. Alle drei Methoden unterscheiden sich in der Bauart des Pulpers und in der Menge des verwendeten Wassers (Koskei 2015) – siehe unten. Der Einfluss der Prozessierungsmethoden auf ausgesuchte Inhaltsstoffe im Kaffee wurde mit dieser Arbeit untersucht. Hierzu wurde die LC-MS/MS (liquid chromatography tandem mass spectrometry) verwendet, die vielfach in der Lebensmittelanalytik für den sensitiven und quantitativen Nachweis von Inhaltsstoffen eingesetzt wird. Mit dieser Methode werden zwei Analyseverfahren verbunden.

Zunächst werden die verschiedenen Inhaltsstoffe in der Probe anhand der molekularen Eigenschaften, insbesondere der Polarität, in einer chromatographischen Säule aufgetrennt (LC). Je nach Stärke der Wechselwirkungen mit der unpolaren stationären Phase verlassen die Inhaltsstoffe die Säule in der polaren mobilen Phase zu unterschiedlichen Zeitpunkten und können über einen UV-Detektor nachgewiesen werden. Mit Hilfe von Standardsubstanzen können diese Zeitpunkte im Vorhinein bestimmt werden. Die Sensitivität dieses Detektionsverfahrens wird durch die nachgeschaltete Analyse im Tandem-Massenspektrometer (MS/MS) noch deutlich verbessert. Die aufgetrennten Substanzen werden über eine angelegte Hochspannung und einen Stickstoffgasstrom ionisiert (ESI, electrospray ionisation) und ihre Masse im Hochvakuum des Massenanalysators für die Quantifizierung selektiert. Die Selektion erfolgt über vier parallele Stabelektroden, die durch die angelegte Gleich- und Wechselspannung Ionen mit einem bestimmten Masse-Ladungs-Verhältnis (m/z) passieren lassen, während andere Ionen aussortiert werden (Quadrupol). Im Tandem-Massenspektrometer werden zwei dieser Quadrupole mit einer zwischengeschalteten Kollisionszelle ver-

bunden, die die im ersten Quadrupol selektierten Ionen über die Kollision mit Gas-Molekülen fragmentiert (Triple-Quadrupol). Damit kann nicht nur die Masse der gesuchten Substanz selektiert werden, sondern auch spezifisch gebildete Fragmente, was eine sehr sensitive Quantifizierung ermöglicht. Diese Methode zeichnet sich durch ihre große Selektivität, Sensitivität und Genauigkeit aus (Agilent Technologies 2001).

Die Prozessierungsmethoden stellen nur einen Schritt auf dem langen Weg der Kaffeeproduktion dar, können aber durch die Reduktion des Wasserverbrauchs durch neuere Methoden wie das Eco-Pulper-Verfahren einen entscheidenden Beitrag zur Nachhaltigkeit des Kaffeeanbaus beitragen. Aus diesem Grund wird unterschiedlich prozessierter Kaffee anhand wichtiger Inhaltsstoffe (Koffein, Chlorogensäure, Saccharose, Niacin, Vanillin, Acrylamid) mittels LC-MS/MS analysiert, so dass Aussagen über eventuelle Auswirkungen auf Qualität und Aroma getroffen werden können.

2. Material und Methoden

Die grünen (ungerösteten) Kaffeebohnen wurden von der Dedan Kimathi University of Technology (Nyeri, Kenia) in zwei Sorten bereitgestellt: Ruiru 11 und SL28. Ruiru 11 stammte von der Hill Farm, Nyeri (0° 25' 0" S / 36° 57' 0" E); SL28 von der Plantage der Dedan Kimathi University of Technology, Nyeri (0° 24' 0,5" S / 36° 57'48,6" E).

Bei den Kaffeeproben wurde außerdem zwischen den unterschiedlichen Prozessierungsmethoden zur Entfernung des Fruchtfleisches – dem Pulping – unterschieden. Der Wassereinsatz ist je nach Methode unterschiedlich: Durchschnittlich 40 Liter pro Kilogramm Kaffeebohnen werden beim Wet-Pulper-Verfahren eingesetzt. Das Eco-Pulper-Verfahren kann demgegenüber 80–90 % einsparen und erscheint deswegen ökologisch vorteilhaft (Roa et al. 1996).

Die Wet-Pulper-Aufbereitung ist eine kontinuierliche Prozessierungsmethode, bei der viel Wasser während des Pulpings, der Reinigungsschritte und des Transports der Kirschen verwendet wird. Der Pulper ist eine Maschine,

die das Fruchtfleisch von den Kaffeebohnen durch „spezielle“ Walzen entfernt; die Prozessierungsmethode wird im Handel häufig als „fully washed“ bezeichnet.

Das Hand-Pulper-Verfahren ist eine manuelle Methode, bei der mit einem kleineren Pulper das Fruchtfleisch entfernt wird. Dies benötigt während der Aufbereitungs- und Waschschriffe im Vergleich zur „Fully Washed“ Methode bereits deutlich weniger Wasser. Bei der Eco-Pulper-Methode wird eine spezielle Maschine zum Entfernen des Fruchtfleisches verwendet, wobei fast kein Wasser benötigt wird. Lediglich im letzten Arbeitsschritt wird eine geringe Menge eingesetzt, wodurch sie zur Methode mit dem geringsten Wasserverbrauch wird.

2.1 Optimierung der Methoden mit Standards

Bevor die Kaffeeproben mit der LC-MS/MS (LCMS-8040, Shimadzu) gemessen werden konnten, musste das Gerät auf die jeweilige zu untersuchende Substanz kalibriert werden.

Dafür wurde für jede Substanz eine eigene Methode entwickelt, wobei für die Erstellung der Kalibriergeraden Standardchemikalien unterschiedlicher Konzentrationen (5–20 ng/μl) eingesetzt wurden. Der zu untersuchende Massenbereich musste eingestellt und das Zeitprogramm für die Flüssigchromatografie, die Fließgeschwindigkeit der mobilen Phasen und das Anfangsverhältnis des Lösungsmittelgemischs mussten optimiert werden (Tab. 1). Diese Parameter beeinflussen, ebenso wie die Wahl der mobilen Phasen, das spätere Ergebnis.

Nachdem eine gute chromatografische Trennung für die Substanzen erreicht wurde, wurde eine Geräte-interne Optimierung durchgeführt, wobei die Massen der Moleküle und die spezifischen Fragmente am MS bestimmt wurden. Von diesen Fragmenten konnte dann das häufigste zur Erstellung der Kalibration und spezifischen Quantifizierung der Substanz in Kaffeeproben genutzt werden. Dafür wurde dieses Fragment ausgewählt und die Fläche unter dem Massenpeak bestimmt. Diese Fläche wurde dann gegen die Konzentration aufgetragen. Dies wurde mit verschiedenen Konzentrationen

Tab. 1: Überblick über die ausgewählten Parameter und Lösungsmittel für die einzelnen Substanzen und deren Methoden. (In allen Fällen war das Injektionsvolumen 1 µl und die Säulentemperatur 40 °C.)

	Koffein	Chlorogen-säure	Acrylamid	Vanillin	Zitronen-säure	Saccharose	Niacin
Säule	EC 125/4 NUCLEODUR 100-5 C18 ec					Luna 3µm NH2 100 Å 150x2.0 mm KJO-4282, 3 µm, 2 mm ID	
Mobile Phase(n)	A: H2O + 0,1 % Formic Acid (FA) B: Acetonitril	A: H2O + 0,1 % FA B: Acetonitril	A: H2O + 0,1 % FA B: Acetonitril	A: H2O + 0,1 % FA B: Acetonitril + 0,1 % FA	A: H2O + 0,1 % FA B: Methanol	A: H2O + 0,1 % FA B: Acetonitril	A: H2O + 0,1 % FA + 1mM Ammonium- umacetat
HPLC Zeit-programm	5 % B (0 min) → 100 % B (5 min) → 100 % B (7 min) → 5 % B (7.50 min) → 5 % B (10 min)	5 % B (0 min) → 100 % B (5 min) → 100 % B (7 min) → 5 % B (7.50 min) → 5 % B (12 min)	Isokratisch, 10 min	5 % B (0 min) → 90 % B (10 min) → 5 % B (12 min)	10 % B (0 min) → 30 % B (10 min) → 10 % B (11 min) → 10 % B (15 min)	Isokratisch, 5 min	Isokratisch, 15 min
Fließge-schwindig-keit [ml/min]	0,4	0,3	0,5	0,8	0,5	A: 0,1 B: 0,3	0,45
Konzentration für Scan	5 ng/µl	10 ng/µl	10 ng/µl	10 ng/µl	20 ng/µl	10ng/µl	10ng/µl
Peak erscheint nach x min y sek	5 min 10 sek	6 min 15 sek	4 min	5 min 20 sek	3 min 12 sek	1 min 58 sek	7 min 50 sek

wiederholt, so dass eine Kalibriergera-
de erstellt werden konnte.

2.2 Probenvorbereitung

50 g grüne Kaffeebohnen wurden bei
245 °C für 12 min geröstet (Gene Café
CBR-101 Röster) und auf Sieben für 24 h
zum Ausgasen gelagert.

10–15 g geröstete Kaffeebohnen wur-
den mit einer Kaffeemühle (Clatronic
KSW3306-WH) fein gemahlen und 6
g Kaffeepulver in ein vorher befeuch-
tetes Filterpapier gegeben. Leitungswasser (Härtegrad „hart“) wurde im
Wasserkocher zum Sieden gebracht,
150 ml wurden abgenommen und bei
einer Temperatur von ca. 90 °C in das
Becherglas mit dem Kaffee gegeben
und für 6,5 min aufgebriht, bevor
der Kaffeefilter entfernt und der fertige
Kaffee abgekühlt wurde.

2.3 Messung der Proben an der LC-MS/MS

Vor der Messung wurden mit einem
Spritzenfilter (Porendurchmesser 0,22
µm) partikuläre Bestandteile entfernt.
Anschließend wurden die Proben (zur
Dreifachbestimmung) jeweils 1 : 100
verdünnt, damit die Konzentrationen

der einzelnen Analyte im messbaren
Bereich lagen.

Die Messung der Proben wurde an-
schließend im Multiple-Reaction-Mo-
nitoring-(MRM)-Modus durchgeführt.
Hierbei wurden die gewünschten
Analyt-Ionen selektiert und anschlie-
ßend detektiert.

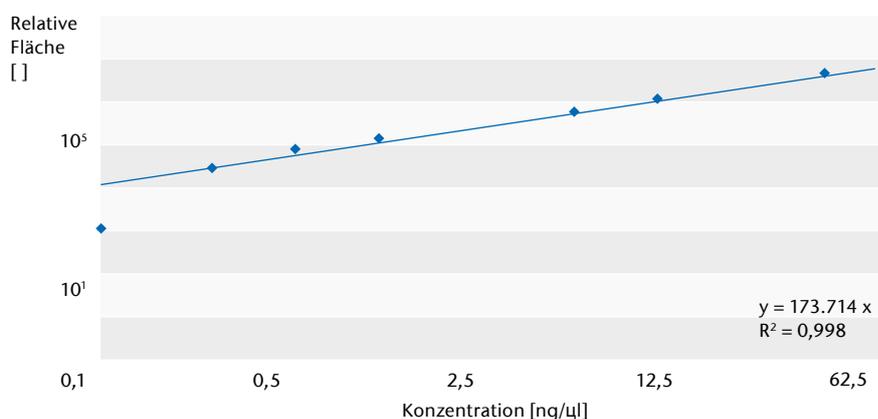


Abb. 1) Kalibrationsgerade zur Quantifizierung von Chlorogensäure. Eingesetzte Konzentration gegen relative Fläche (dimensionslos) unter den gemessenen Peaks; beide Achsen sind logarithmiert.

3. Ergebnisse

Vorderspäteren Konzentrationsbestimmung musste zunächst eine Kalibrationsgerade für jede Substanz erstellt werden. In Abb. 1 ist exemplarisch die Kalibrationsgerade für Chlorogensäure dargestellt. Der lineare Messbereich lag – wie bei den meisten Substanzen – zwischen 0,25 und 50 ng/µL (bzw. 100 ng/µl). Das Bestimmtheitsmaß R^2 war für alle Substanzen nahe 1 und bestätigt den direkten Zusammenhang zwischen Konzentration und Messwerten.

Das Ergebnis der gemessenen Probe wurde im MRM-Massenspektrum abgebildet, dabei lief für jede Substanz ein definiertes Zeitprogramm, und nach einem bestimmten Zeitpunkt erschien ein scharfer Peak; je nach Substanz waren es auch mehrere, die unterschiedliche Fragmente repräsentieren.

3.1 Gehalt verschiedener Substanzen in unterschiedlich prozessierten Kaffeebohnen

Für die Messungen wurde zwischen den Prozessierungsmethoden (Wet, Hand und Eco Pulper) und den Kultursorten (Ruiru 11 und SL28) unterschieden. Koffein und Chlorogensäure zeigen geringe Konzentrationsunterschiede bei den Prozessierungsmethoden (Abb. 2). Durchschnittlich die geringsten Konzentrationen wurden in den Wet-Pulper prozessierten Kaffeebohnen gemessen. Die größten Konzentrationen wurden in Kaffee gemessen, welcher nach dem Eco-Pulper-Verfahren aufbereitet worden war. Diese Tendenz ist für beide Kultursorten erkennbar. In Bezug auf den Kof-

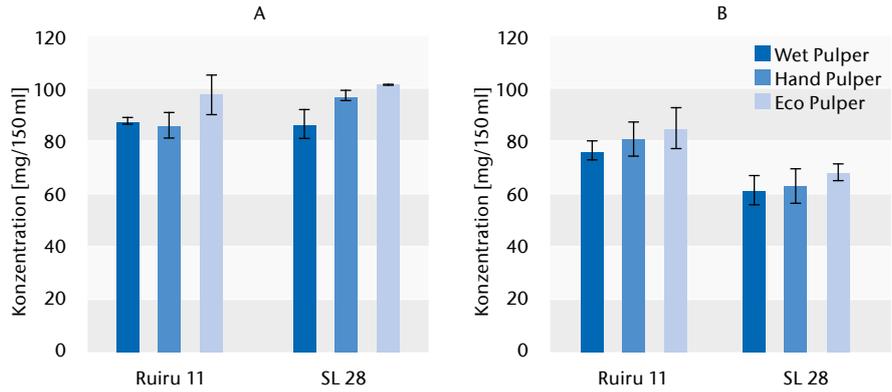


Abb. 2) Koffein- (A) und Chlorogensäurekonzentrationen (B) in Bohnen aus unterschiedlichen Prozessierungsmethoden (Wet, Hand und Eco Pulper) und von unterschiedlichen Kultursorten (Ruiru 11 und SL28).

feingehalt gibt es keine signifikanten Unterschiede zwischen beiden Kultursorten, wohingegen geringfügig weniger Chlorogensäure in Bohnen der Kultursorte SL28 nachweisbar war.

Bei den gemittelten Saccharosekonzentrationen sind Unterschiede zwischen den Prozessierungsmethoden erkennbar (Abb. 3), allerdings ist die Saccharosekonzentration durchschnittlich am höchsten bei Kaffeebohnen, welche mit dem Wet Pulper aufbereitet wurden. Geringere Konzentrationen wurden in Kaffee gefunden, welcher mit dem Hand-Pulper-Verfahren prozessiert worden war, gefolgt vom Eco-Pulper-Verfahren. Diese Tendenz ist für beide Kultursorten erkennbar; die Konzentration der Saccharose war bei Kaffeebohnen der Kultursorte SL28 geringfügig niedriger.

Bezüglich des Gehalts an Niacin und Zitronensäure zeigen Bohnen aus unterschiedlichen Prozessierungsverfahren oder von verschiedenen Kultursorten keine signifikanten Unterschiede (Abb. 4).

Die Acrylamid- und Vanillinkonzentrationen lagen unterhalb der Nachweisgrenze und konnten in keiner Probe nachgewiesen werden.

4. Diskussion

Koffein und Chlorogensäure

Es gibt erkennbare, wenn auch geringe Unterschiede im Koffein- und Chlorogensäuregehalt, wenn die Kaffeebohnen bzw. Bohnen unterschiedlich prozessiert wurden. Je mehr Wasser bei der Aufbereitung eingesetzt wurde, desto niedriger ist später der Gehalt der Substanz im fertigen Kaffeegetränk. Koffein und Chlorogensäure sind polare, gut wasserlösliche Substanzen. Wenn bei der Aufbereitung der grünen Kaffeebohnen viel Wasser eingesetzt wird, kann offenbar ein Teil dieser Substanzen ausgeschwemmt werden.

Beide Kultursorten wurden in Nyeri, Kenia in der Saison 2013/2014 geerntet, jedoch von unterschiedlichen Farmen. Ruiru 11 stammt von der Hill Farm, während SL 28 nur wenige Kilometer entfernt auf der Plantage der Dedan Kimathi University of Technology kultiviert wurde. Es gibt jedoch keine Informationen, ob dieselben Maschinen bei der Aufbereitung verwendet wurden oder ob das verwendete Wasser aus unterschiedlichen Quellen stammte. Auch zu anderen Einflussfaktoren wie Trocknung der Bohnen oder Lagerzeiten gibt es keine präzisen Angaben. Alle Faktoren können Auswirkungen auf die Inhaltsstoffe haben. Insofern kann nicht mit Sicherheit festgestellt werden, ob es hier tatsächlich Unterschiede zwischen den beiden Kultursorten gibt.

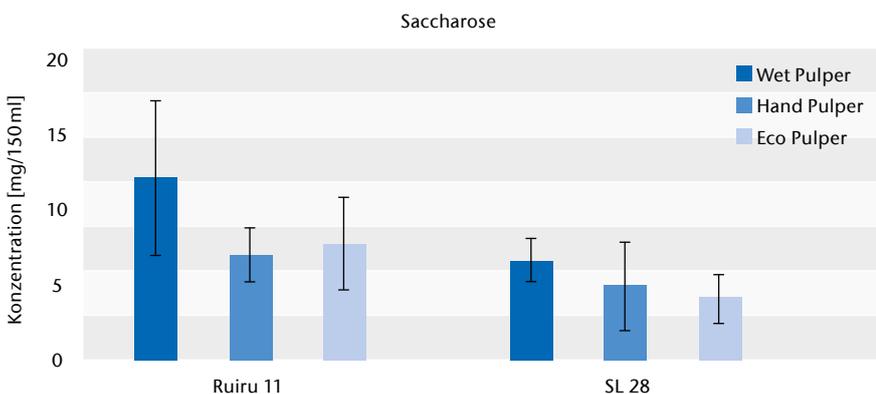


Abb. 3) Saccharosekonzentrationen in Bohnen aus unterschiedlichen Prozessierungsmethoden (Wet, Hand und Eco Pulper) und von unterschiedlichen Kultursorten (Ruiru 11 und SL28).

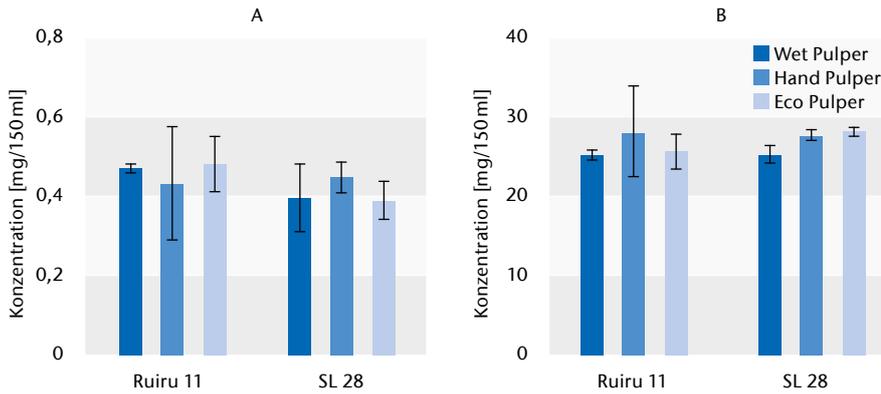


Abb. 4 Niacin- (A) und Zitronensäurekonzentrationen (B) in Bohnen aus unterschiedlichen Prozessierungsmethoden (Wet, Hand und Eco Pulper) und von unterschiedlichen Kultursorten (Ruiru 11 und SL28).

Acrylamid

Die Bildung von Acrylamid in Lebensmitteln ist bis heute noch nicht vollständig verstanden, dennoch konnten einige Studien zeigen, dass die Bildung während der frühen Maillard-Reaktion stattfinden muss (Farah 2012). Abhängig von der Mischung und dem verwendeten Röstprofil schwanken die Acrylamidkonzentrationen im Kaffee. In den untersuchten Proben konnte kein Acrylamid nachgewiesen werden. Entweder wurde durch die Filtrationschritte das Acrylamid entfernt bzw. zu gering konzentriert oder der Röstprozess war hinreichend schonend.

Vanillin

Vanillin ist ein wichtiger Aromastoff, welcher vielen Lebensmitteln zugefügt wird, um deren Geschmack zu beeinflussen. Im Kaffee kommt diese Substanz auch in geringen Mengen natürlich vor.

In den untersuchten Proben lagen die Vanillinkonzentrationen unter der Detektionsgrenze. Um die erstellte Methode auch für die Probenmatrix Kaffee zu validieren, wurden zu jeder Probe 20 ng/µl Vanillinstandard hinzugefügt. Nach der Zugabe konnte eine Konzentration reproduzierbar gemessen werden, die geringfügig über der des zugegebenen Standards lag. Insofern wurde gezeigt, dass Vanillin enthalten war. Da jedoch eine direkte Messung nicht möglich war, geben wir den Gehalt von Vanillin nicht an.

Saccharose

Der Gehalt an Saccharose schwankt für die untersuchten Kaffeeproben zwischen 3,99 und 11,95 mg/Tasse Kaffee (150 ml), wobei eine gegenläufige

Tendenz bei den verschiedenen Prozessierungsmethoden beobachtet werden konnte. Je mehr Wasser verwendet wurde, desto höher ist die Saccharosekonzentration. Dies widerspricht jedoch Literaturangaben, nach denen der Saccharosegehalt bei Wet-Pulperprozessierten Bohnen niedrig ist (Kienreich & Schwarz 2008). Saccharose ist sehr polar und löst sich hervorragend in Wasser. Insofern müsste eigentlich zumindest ein Teil der Saccharose ausgewaschen werden und es müsste sich ein ähnliches Konzentrationsprofil wie bei Koffein und Chlorogensäure zeigen. Diese Beobachtung erfordert gegebenenfalls eine weitere Untersuchung.

Zitronensäure

Der Zitronensäuregehalt in den hier untersuchten Kaffeeproben lag zwischen 25,2 mg und 28,15 mg je Tasse (150 ml), also zwischen 166,67 mg/l und 186,67 mg/l. Diese geringen Konzentrationsunterschiede schwankten geringfügig zwischen den Prozessierungsmethoden und Kultursorten. Ein Einfluss dieser Faktoren ist nicht erkennbar.

Niacin

Der Niacingehalt in den untersuchten Kaffeeproben lag zwischen 0,389 mg und 0,487 mg je Tasse (150 ml) und ist damit etwas niedriger als in der Literatur angegeben (0,41 mg je 175 ml und 2,85 mg je 150 ml) (Bressani & Navarrete 1959).

Auch zwischen den beiden Kultursorten zeigen sich keine signifikanten Unterschiede. Die unterschiedlichen Anbaugelände und mögliche Unterschiede im verwendeten Wasser oder den Maschinen scheinen insofern keinen Einfluss zu haben.

Messmethodik

Aufgrund der hohen Sensitivität und Selektivität eignet sich LC-MS/MS sehr gut zur Quantifizierung. Allerdings können nur nicht flüchtige Substanzen detektiert werden, da sie in der mobilen Phase löslich sein müssen. Außerdem müssen die Moleküle ionisierbar sein und einen polaren Charakter haben, damit sie mit den zur Verfügung stehenden Säulen von anderen Substanzen getrennt und im Massenspektrometer nachgewiesen werden können. Ein Großteil der im Kaffee vorkommenden Aromastoffe ist jedoch flüchtig und damit für eine Messung mit dieser Methode nicht geeignet. Um den Einfluss der verwendeten Wassermenge bei den Prozessierungsmethoden besser einschätzen zu können, sollten noch weitere Untersuchungen insbesondere für die flüchtigen Aromastoffe durchgeführt werden. Dafür bietet sich die Gaschromatografie-Massenspektrometrie (GC-MS) an.

5. Schlussfolgerung und Ausblick

Durch eine Vielzahl vorheriger Studien konnte gezeigt werden, dass die Inhaltsstoffe durch verschiedene Faktoren, angefangen vom Anbaugelände der Kaffeepflanze bis hin zur Röstung, nachhaltig beeinflusst werden. Gleichzeitig wird dabei deutlich, wie auch in unserer Untersuchung, dass eine präzise Beschreibung bzw. Kontrolle aller Parameter einer landwirtschaftlichen Produktion, insbesondere unter nicht experimentellen Realbedingungen respektive in Schwellenländern, schwierig ist.

In Bezug auf die Prozessierungsmethoden konnten in dieser Arbeit folgende Schlussfolgerungen gezogen werden:

- Der Koffein- und Chlorogensäuregehalt ist von der verwendeten Prozessierungsmethode abhängig. Je mehr Wasser bei der Aufbereitung der Kaffeekirschen verwendet wurde, desto geringer war die Konzentration dieser beiden Komponenten im Kaffee.
- In keiner Probe war Acrylamid zu finden, unabhängig davon, wie die Kaffeebohnen vorher aufbereitet

wurden. Dies könnte ein Hinweis auf ein schonendes Röstverfahren sein.

- Vanillin ist im fertigen Kaffee nur in sehr geringen Konzentrationen vorhanden.
- Der Saccharosegehalt ist ebenfalls von der verwendeten Prozessierungsmethode abhängig. Im Gegensatz zu Koffein und Chlorogensäure zeigte Saccharose eine entgegengesetzte Abhängigkeit von der Prozessierungsmethode. Je mehr Wasser bei der Prozessierungsmethode eingesetzt wurde, desto höher war der Saccharosegehalt im Kaffee.
- Die Konzentrationen an Zitronensäure und Niacin waren nach den einzelnen Prozessierungsmethoden annähernd gleich. Die verwendete Wassermenge bei der Aufbereitung der Kaffeekirschen scheint hier keinen Einfluss zu haben.
- Ein signifikanter Unterschied zwischen den beiden Kultursorten Ruiru 11 und SL28 konnte für Chlorogensäure und Saccharose festgestellt werden. Dies könnte durch die unterschiedlichen Anbaugebiete, Unterschiede im Wasser, die verwendeten Maschinen oder insbesondere die Charakteristika der Pflanzensorten bedingt sein (Gering 2015).

Aus ökologischer Sicht ist es sinnvoll, zur Prozessierung auf das Eco-Pulper-Verfahren umzusteigen, da der Kaffee qualitativ-analytisch nicht schlechter erscheint als Kaffee, der mit einer anderen Methode aufbereitet wurde. Teilweise wurden sogar höhere Konzentrationen einzelner Inhaltsstoffe gemessen, was den Geschmack des Kaffees ggf. positiv beeinflusst. Hierfür ist eine gustatorische Prüfung erforderlich, bei der Kaffee von geschultem Personal getestet und hinsichtlich verschiedener Parameter, bspw. Säuregrad, Aroma oder Süße des Kaffees, untersucht wird. Laut Auskunft der kenianischen Partner schneidet Eco-Pulper-Kaffee hierbei nicht schlechter ab als anders prozessierte Kaffees.

LITERATUR

Agilent Technologies (2001) Basics of LC/MS Primer. <http://ccc.chem.pitt.edu/wipf/Agilent%20LC-MS%20primer.pdf>. Accessed 12 Jan 2017

Bressani R, Navarrete DA (1959) Niacin content of coffee in Central America. *Journal of Food Science* 24(4):344–351

Farah A (2012) Coffee Constituents. In: Chu Y-F (ed) Coffee. Emerging Health Effects and Disease Prevention, 1., Auflage. Institute of Food Technologists Series. John Wiley & Sons, New York, NY, ISBN: 978-0-470-95878-0, pp 21–58

Gering V (2015) LC-MS/MS als Detektions- und Quantifizierungsmethode für Kaffee Komponenten. Masterarbeit, Technische Hochschule Wildau

Kienreich M, Schwarz S (2008) "FAQ Kaffee" - Fragen, Antworten, Quintessenzen. Ein Handbuch über Kaffeewelten, 1., Aufl. coffee, media & events, Mannheim. ISBN: 9783200013186

Koskei RK (2015) Effects of different processing technologies on quality characteristics of kenya coffee. Dissertation, Dedan Kimathi University of Technology

Lindsay S (1996) Einführung in die HPLC. Vieweg, Braunschweig. ISBN: 3-528-06759-4

Moldvaer A (2014) Das Kaffee-Buch. Sorten, Anbaugelände, Barista-Wissen und Rezepte aus der ganzen Welt. Dorling Kindersley, München. ISBN: 3831026815

Roa G, Oliveros CE, Alvarez J, Sanz JR, Ramirez CA, Dávila MT, Alvarez JR, Zambrano DA, Puerta GI, Rodriguez N (1996) Ecological Processing of Coffee at Farm Level. Hrsg.: Cenicafé Colombia

AUTOREN

Vanessa Gering, M.Sc.

Liane Kober, M.Sc.

Dr. Oliver Brödel

Prof. Dr. Marcus Frohme

Molekulare Biotechnologie und Funktionelle Genomik
Institut für Angewandte Biowissenschaften
Technische Hochschule Wildau

Dr. Richard Kipkorir Koskei

Prof. Dr. Jane Beatrice W. Mugendi

Coffee Technology

Dedan Kimathi University of Technology, Kenya

E-Mail für Korrespondenz:

marcus.frohme@th-wildau.de

