

# TRANSFER

## 2/18

### **News aus Forschung und Dienstleistung, Studium und Weiterbildung**

**Lebensmittel- und Getränkeinnovation**

**Facility Management**

**Chemie und Biotechnologie**

**Umwelt und Natürliche Ressourcen**

**Angewandte Simulation**

# Online-Analyse der Kaffeeröstung mittels Ionenmobilitäts-Spektrometrie

Fachgruppe für Analytische Technologien / Coffee Excellence Center



**Prof. Dr. Chahan Yeretzian**  
Leiter Coffee Excellence Center & Leiter Fachgruppe Analytical Technologies, yere@zhaw.ch



**Dr. Alexia N. Glöss**  
alexia.gloess@gmx.ch

**Dr. Richard Knochenmuss;**  
**Dr. Michael Grössl;**  
TOFWERK, Switzerland

**W**er kennt ihn nicht, wer liebt ihn nicht, den herrlichen Duft einer frisch zubereiteten Tasse Kaffee? Doch aus was besteht Kaffee-Aroma, wie entsteht es, und wie lässt es sich variieren? Diese Fragen sind leicht gestellt, doch die Antwort ist umso schwieriger: Kaffee-Aroma setzt sich aus bis zu 30 verschiedenen Substanzen zusammen, welche während der Röstung der noch grünen Kaffeebohnen in vielen chemischen Reaktionen gebildet werden. Je nach Kaffeesorte und Röstvorgang, vor allem Dauer und Temperatur, verlaufen diese Reaktionen unterschiedlich und führen somit zu unterschiedlichen Kaffee-Aromen.

Um das Zusammenspiel von Röstparametern und chemischen Reaktionen zu verstehen, wurde die Aromabildung während des Röstprozesses zum ersten Mal mittels Online-Ionenmobilitäts-Spektrometrie-Massenspektrometrie (IMS-MS) untersucht. Hierzu wurde das IMS-MS (TOFWERK IMS-TOF, Thun, Switzerland) direkt an den Kaffeeröster (Trommelröster, Gene Café) gekoppelt (Abbildung 1). Vor der Injektion in die Ionisierungskammer (Koronaentladung) wurde das Gas verdünnt und mittels eines elektrischen Feldes durch die mit Stickstoff gefüllte Driftrohre geführt. Ionen gleicher Masse wurden anhand ihres unterschiedlichen Kollisionsquerschnitts aufgetrennt und mittels Flugzeitmassenspektrometrie nachgewiesen. Pro Röstcharge wurden 120 g Brasilianischen Yellow Bourbons während 17.5 min geröstet (Endtemperatur 230 °C, Gewichtsverlust 18% ± 3%).

Die Online-Analyse der Kaffeeröstung mittels IMS-MS lieferte eine Fülle an Informationen über die Zusammensetzung des Gasgemisches im Röstprozess. Pro Messpunkt wurde ein Massenspektrum, pro Peak im Massenspektrum ein IMS-Spektrum aufgezeichnet. Die Aufzeichnung der Intensität eines Peaks im Massenspektrum oder im IMS-Spektrum gegen die Röstzeit lieferte den Intensitäts-Zeitverlauf einer Komponente, wie in Abbildung 2 für die Alkylpyrazine dargestellt ist.

Die Online IMS-MS-Analyse der Kaffeeröstung erlaubte jedoch nicht nur erstmals die Auftrennung unterschiedlicher Alkyl-Pyrazin-Isomere. Im negativen Ionisierungsmodus konnte die Bildung organischer Säuren verfolgt werden, welche zur angenehm fruchtigen Säure eines Kaffees beitragen. Erstmals wurden auch Fettsäuren beobachtet, welche während der Röstung zunächst oxidativ abgebaut werden, bevor sie in weiteren chemischen Reaktionen zur Aromabildung beitragen.

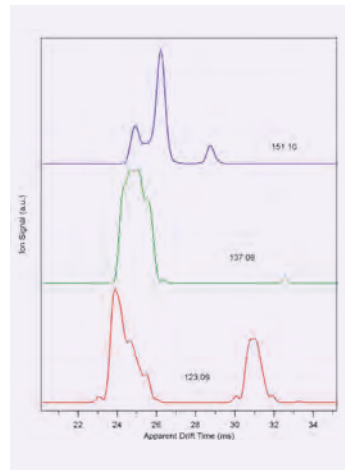


Abb. 2a: IMS-Spektren der Alkylpyrazine

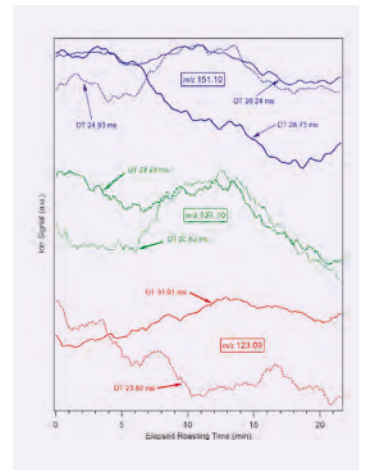


Abb. 2b: zeitlicher Intensitäts-Verlauf der entsprechenden IMS-MS Peaks

Im IMS-Spektrum (Abbildung 2a) zeigt sich, dass ein Peak im Massenspektrum mehr als eine Substanz und somit mehr als ein Peak im IMS-Spektrum umfasst. Im Vergleich mit Referenzsubstanzen konnten die Peaks bei  $m/z$  151, DT 24.9 ms und 26.2 ms den Konformeren von 2,3-Diethyl-5-methylpyrazin zugeordnet werden. Die IMS Peaks verhalten sich nun ihrerseits unterschiedlich als Funktion der Röstdauer (Abbildung 2b).

Abschliessend kann die erstmalige Anwendung der Online-Analyse der Kaffeeröstung mittel IMS-MS als voller Erfolg betrachtet werden, welcher die Erforschung der Aromabildung als Funktion der Röstparameter einen grossen Schritt vorantreiben wird. ■

Original-Publikation, open access:  
<https://doi.org/10.1016/j.ijms.2017.11.017>

Abb. 1: Schematischer Aufbau der Kopplung von Kaffeeröster und IMS-MS

