

Vergleich massenspektrometrischer Verfahren zur Direktanalyse in der Lebensmittelchemie

R. Dorfner¹, R. Zimmermann¹, A. Kettrup¹, C. Yerezian², A. Jordan³, W. Lindinger³

¹ Institut für Ökologische Chemie, GSF-Forschungszentrum für Umwelt und Gesundheit, D-85764 Neuherberg, Deutschland

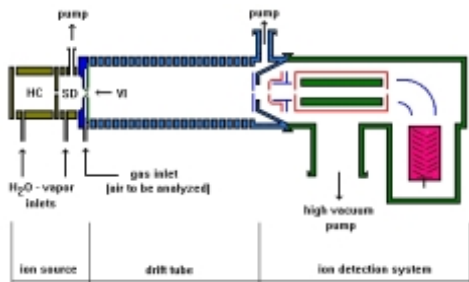
² Nestlé Research Center, Nestec Ltd., Vers-chez-les-Blanc, P.O. Box 44, CH-1000 Lausanne 26, Schweiz

³ Institut für Ionenoptik, Universität Innsbruck, A-6020 Innsbruck, Österreich

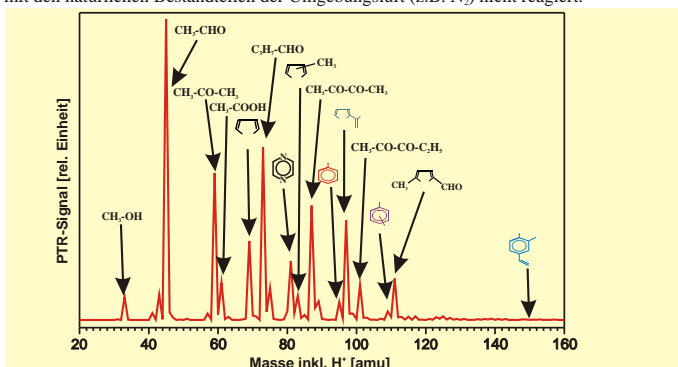
Einführung: Neue Entwicklungen in der Lebensmitteltechnologie verlangen verstärkt nach Direktanalyseverfahren, um komplexe Herstellungsprozesse online überwachen und nach ausgewählten Parametern steuern zu können. Dazu werden hier zwei massenspektrometrische Verfahren zur Direktanalyse von Lebensmittelinhaltsstoffen am Beispiel der Online-Analyse von Kaffeeröstgasen vorgestellt.

PTR-MS

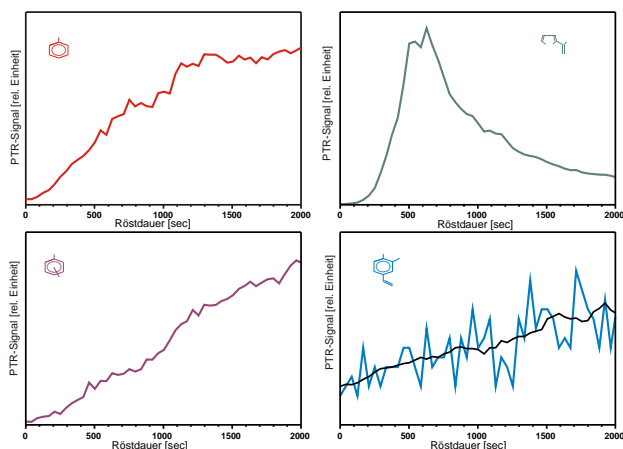
Proton-Transfer-Reaktions-Massenspektrometrie



- * Selektive Erzeugung von H_3O^+ -Ionen in einer Elektronenstoß-Ionenquelle
- * H_3O^+ -Ionen stoßen in der Driftrohre, die gleichzeitig als Reaktionsraum dient, mit Trägergas und Analytgas.
- * Analytgas (A) und H_3O^+ -Ionen gehen folgende Reaktion ein: $H_3O^+ + A \rightarrow AH^+ + H_2O$
- * Die entstehenden Analytgasionen AH^+ und die H_3O^+ -Ionen werden massenspektrometrisch nachgewiesen.
- * H_3O^+ PTR-MS mit Umgebungsluft als Trägergas eignet sich hervorragend, um selektiv nahezu alle flüchtigen organischen Verbindungen (VOC's) nachzuweisen, da H_3O^+ mit den natürlichen Bestandteilen der Umgebungsluft (z.B. N_2) nicht reagiert.



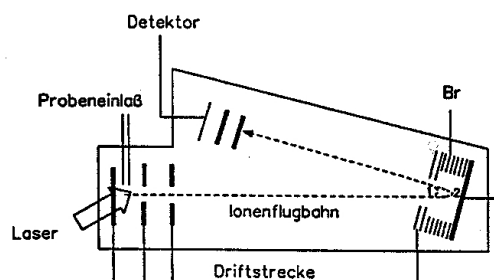
PTR-MS Headspace-Massenspektrum von frisch aufgebrihtem Arabica-Kaffee. Nahezu alle organischen Verbindungen (z.B. Aldehyde, Alkohole, Ketone, Heterozyklen) werden entsprechend ihrer Konzentration nachgewiesen.



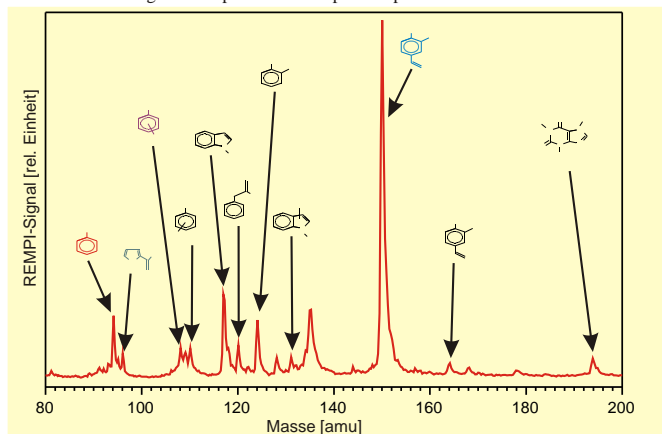
PTR-MS Röstzeitverläufe von Phenol, Furfural, Kresol und 4-Vinylguaiaacol bei der Röstung von 1,03 g Arabica-Bohnen bei einer Rösttemperatur von 195 °C. Phenol und Furfural zeigen bei PTR-MS und REMPI-TOFMS gleiche Zeitverläufe. Aufgrund der niedrigeren Rösttemperatur bei den PTR-MS Messungen werden die Intensitätsmaxima erst bei einer längeren Röstdauer erreicht.

REMPI-TOFMS

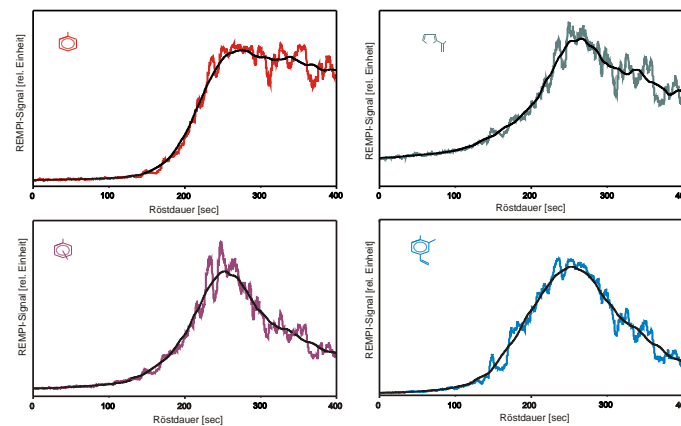
Resonanzverstärkte Mehrphotonenionisations-Flugzeit (Time of Flight) Massenspektrometrie



- * Analytgas wird mit einem Laser in einer Ionenquelle resonant ionisiert.
- * Analytgasionen trennen sich entlang der Driftstrecke entsprechend ihrer Masse auf.
- * hohe Selektivität wird zum einen durch die Verwendung UV-spektroskopischer Eigenschaften der Zielverbindungen im Ionisationsprozess und zum anderen durch die massenspektrometrische Auftrennung vor der Detektion erreicht.
- * hohe Zeitauflösung: 10 komplette Massenspektren pro Sekunde



Online REMPI@266nm-TOF Headspace-Massenspektrum von frisch aufgebrihtem Arabica-Kaffee. Verschiedene phenolische, stickstoffhaltige und sauerstoffhaltige heterozyklische Verbindungen (Phenol, Furfural, Kresol, Dihydroxyphenol, Indol, Guaiacol, Methylindol, 4-Vinylguaiaacol, Dimethoxystyrol, Koffein) werden mit der Laserwellenlänge 266 nm selektiv nachgewiesen. Andere Verbindungen werden effektiv unterdrückt. Diese können jedoch mit anderen Laserwellenlängen detektiert werden.



REMPI@266-TOFMS Röstzeitverläufe von Phenol, Furfural, Kresol und 4-Vinylguaiaacol bei der Röstung einer Arabica-Bohne bei einer Rösttemperatur von 250°C. Das unterschiedliche Zeit-Intensitäts-Verhalten dieser Verbindungen legt es nahe, diese als Röstgradindikatoren für eine Direktanalysen-Methode zur Überwachung von z.B. Röstprozessen zu verwenden. Aus dem Signalverhältnissen der Röstgradindikatoren ist es möglich, z.B. den idealen Röstzeitpunkt zu bestimmen.

Zusammenfassung: PTR-MS und REMPI-TOFMS eignen sich hervorragend zur Direktanalyse von Lebensmittelinhaltsstoffen. Ein großes Potential beider Techniken liegt in der Möglichkeit zur Online-Überwachung komplexer Herstellungsprozesse. So könnte es in Zukunft möglich werden, Prozessparameter in der industriellen Lebensmittelproduktion nicht nur zu überwachen, sondern auch zu steuern um so gleichbleibende sensorische Qualität und Nährwerte zu erreichen.

Kontakt: PTR-MS: W. Lindinger, Institut für Ionenoptik, Universität Innsbruck

REMPI-TOFMS: R. Zimmermann, Institut für Ökologische Chemie, GSF-Forschungszentrum

Literatur: a) R. Zimmermann, H.J. Heger, C. Yerezian, H. Nagel, U. Boesl, Rapic Communic. Mass Spectrom. 10 (1996) 1980b) R. Zimmermann, H.J. Heger, R. Dorfner, U. Boesl, A. Kettrup, Lebensmittelchemie (1997) 51
 c) W. Lindinger, A. Hansel, A. Jordan, Int. J. Mass Spectrom. Ion Processes 173 (1998)