

# Schneller und selektiver Nachweis von Trigonellin, einem Marker für Kaffeequalität, mit einem tragbaren Raman-Spektrometer

Die Qualitätskontrolle in der Lebensmittelindustrie ist ein zentrales Thema und erfordert schnelle, effiziente und selektive Methoden, mit denen die Produkte unterschieden, betrügerische oder versehentliche Verfälschungen erkannt und der Gehalt bestimmter Biomarker unter bestimmten Lagerungsbedingungen ermittelt werden kann. In diesem Sinne ist die Raman-Spektroskopie in Verbindung mit den optischen Eigenschaften metallischer Nanostrukturen eine leistungsfähige Technik, die in der Lebensmittelanalyse eingesetzt werden kann.

Oberflächenverstärkte Raman-Spektroskopie (SERS) ist eine Technik, die die optischen Eigenschaften von Nanostrukturen aus Edelmetallen (z. B. Nanokügelchen aus Gold oder Silber) nutzt, um die Raman-Signale von Molekülen zu verstärken, die auf der Oberfläche des Metalls adsorbiert sind. Veränderungen des Materials, der Geometrie und der Größe der metallischen Strukturen ermöglichen die Modulation und Verbesserung dieser einzigartigen Nanoantennen. Dieser Fortschritt hat zu zahlreichen Anwendungen geführt, unter anderem zur Entwicklung neuer und selektiver Sensoren mit niedrigeren Nachweisgrenzen für Nahrungsmittelmetaboliten, um sie an die Anforderungen von Landwirtschaft und Industrie anzupassen. Darüber hinaus minimiert SERS die Erfassungszeit und verringert die benötigte Probenmenge.



In diesem Zusammenhang zeigt dieser Bericht, wie das tragbare Raman-Gerät i-Raman Plus 785 kann in Kombination mit modifizierten Gold-Nanodreiecken verwendet werden, um eine alternative Quantifizierungsmethode für Trigonellin zu entwickeln. Bei diesem Alkaloid handelt es sich um einen Biomarker, der in verschiedenen Lebensmitteln wie Kaffee und Quinoa vorkommt, einen potenziellen gesundheitlichen Nutzen bietet und dessen

thermischer Abbau (z. B. während des Röstvorgangs der grünen Kaffeebohnen) die Bildung verschiedener Geschmacks- und Aromastoffe ermöglicht. Beispielsweise könnte ein aufgebrühter Kaffee etwa 2,3 mM Trigonellin enthalten und in einem Gramm grüner Kaffeebohnen könnten etwa 30–65  $\mu\text{mol}$  Trigonellin vorhanden sein, was ein Qualitätsindikator wäre und mit dieser Technik getestet werden könnte.

## EINFÜHRUNG

Mit Mercaptopropionsäure modifizierte Goldnanodreiecke wurden als Nanoantennen verwendet, um die Konzentration von Trigonellinlösungen anhand des SERS-Signals zu quantifizieren. Die Nanostrukturen wurden optimiert, um Signale zwischen 700–800 nm Wellenlänge zu verstärken.

Die Kalibrierungskurven wurden mit dem  $1034\text{ cm}^{-1}$  Peakbereich und Vergleich mit herkömmlicher Raman-Spektroskopie. Die Ergebnisse zeigen die Vorteile der Technik, zu denen niedrigere Nachweisgrenzen gehören, und das Potenzial dieser Methode zur Quantifizierung von Trigonellin in Lebensmitteln.



## DURCHFÜHRUNG

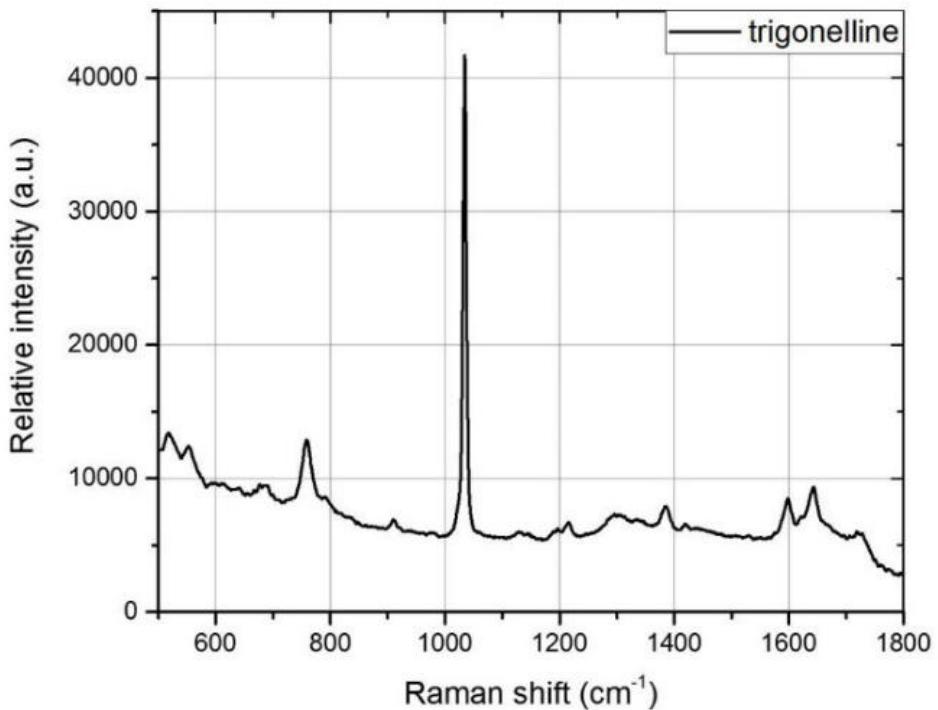
Ausrüstung: tragbares i-Raman Plus-Spektrometer mit 785 nm Laseranregung, Raman-Verschiebungsbereich 150–2800  $\text{cm}^{-1}$ , 50 Sekunden Integrationszeit, 10 Scans und Flüssigkeitsküvettenhalter mit 10 mm optischem Pfad.

Proben: Standardmäßige wässrige Trigonellinlösungen im Bereich von 10,0 mM bis 0,5 mM. Mit Mercaptopropionsäure modifizierte und in deionisiertem Wasser suspendierte Goldnanodreiecke (AuNTs).

## ERGEBNISSE UND BEWERTUNG

Eine 250 mM Trigonellin-Lösung wurde mittels konventioneller Raman-Spektroskopie analysiert. Das Spektrum in **Abbildung 1** zeigt ein intensives Signal bei  $1034\text{ cm}^{-1}$ , entsprechend dem Pyridinring-

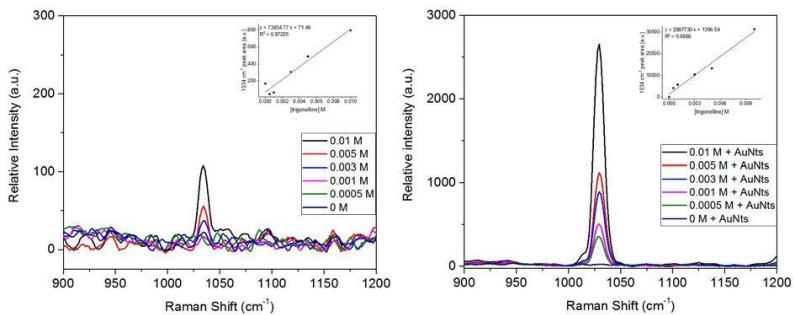
Atmungsmodus, der zur Überwachung der Konzentration dieser Verbindung in Wasser verwendet werden könnte.



**Abbildung 1.** Raman-Spektrum einer Trigonellin-Lösung bei 250 mM

Vier unabhängige Sätze mit fünf verschiedenen Konzentrationen im Bereich von 0,5 mM und 10 mM wurden mittels konventioneller Raman-Spektroskopie und SERS analysiert. Letzteres erfordert einen zusätzlichen Schritt, bei dem die modifizierten Gold-Nanodreiecke mit den Trigonellin-Lösungen (Trigonellin: Gold-Nanodreiecke = 15:2) gemischt werden, bevor die Proben gescannt werden. In allen Fällen wurde das starke Signal bei  $1034\text{ cm}^{-1}$  überwacht und der Peakbereich lag zwischen 1010

und  $1045\text{ cm}^{-1}$ . Zur Bestimmung der Alkaloidkonzentration wurde das Spektralfenster verwendet. Basierend auf den Ergebnissen und den Kalibrierungskurven (Abbildung 2) konnte eine Verbesserung des Signal-Rausch-Verhältnisses von SERS gegenüber den konventionellen Raman-Spektren unter gleichen Versuchsbedingungen erzielt werden. Die Ergebnisse zeigen, dass es mit dieser Methode möglich ist, Konzentrationen unter 0,5 mM zu erkennen.



**Abbildung 2.** Raman-Spektren von Trigonellin-Lösungen ohne Gold-Nanodreiecke (links) und mit Gold-Nanodreiecken (rechts). Die Einfügungen zeigen die Kalibrierungskurven von Trigonellin-Lösungen unter Verwendung der Peakfläche von 1034 cm-1 innerhalb eines Spektralfensters von 1010-1045 cm-1.

Zusammenfassend beschreiben wir eine einfache Methode zur Quantifizierung des Vorhandenseins von verdünntem Trigonellin in Lösungen unter Verwendung der oberflächenverstärkten Raman-

Spektroskopie als ein Werkzeug, das möglicherweise den Qualitätskontrollprozess von Lebensmitteln wie Kaffee und Quinoa verbessern könnte.

## WEITERE LITERATUR

### Verwandte Application Notes

[Tragbare Raman-Geräte für SERS-Anwendungen](#)  
[Auswahl der am besten geeigneten Laser-Wellenlänge für Ihre Raman-Anwendung](#)

[Schnelle Analyse der Inhaltsstoffe von Speiseölen mit einem tragbaren Raman-Spektrometer](#)

### Andere verwandte Dokumente

[Raman vs. SERS ... Was ist der Unterschied?](#)

## DANKSAGUNG

Wir möchten Angeline Saldana Ramos, Yulán Hernandez und Prof. Betty C. Galarreta vom Departamento de Ciencias - Sección Química,

Pontificia Universidad Católica del Perú für die Bereitstellung ihrer Forschungsergebnisse danken.

## REFERENZEN

1. Galarreta, B.C.; Hernandez, Y.; Saldana Ramos, A. "Sintesis y aplicacion de nanotriangulos de oro en el desarrollo de un metodo de cuantificacion de un potencial alcaloide terapeutico: la trigonelina" Direccion de Gestión de la Investigacion (DGI-2016-352) PUCP.
2. Galarreta, B.C.; Maruenda, H. "Espectroscopia vibracional y de resonancia magnetica nuclear en el control de calidad de cafe organico peruano y cafe instantaneo" Direccion de Gestión de la Investigacion (DGI-2014-078) PUCP.
3. Aroca, R. "Surface-enhanced vibrational spectroscopy" John Wiley & Sons, 2016.
4. Jaworska, A.; Malek, K.; Marzec, K.M.; Baranska, M. "Nicotinamide and trigonelline studied with surface-enhanced FT-Raman spectroscopy" Vibrational Spectroscopy (2012) 63,469-476.

## CONTACT

Metrohm Schweiz AG  
Industriestrasse 13  
4800 Zofingen

info@metrohm.ch

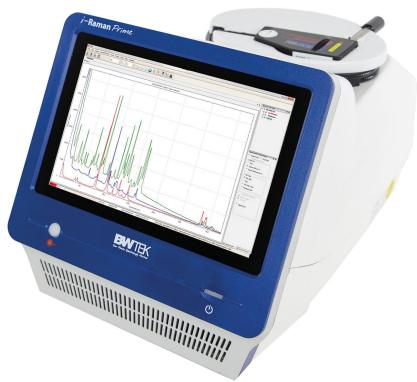
## KONFIGURATION



### i-Raman Plus 785S Tragbares Raman-Spektrometer

Das i-Raman® Plus 785S ist Bestandteil unserer preisgekrönten Serie der i-Raman tragbaren Raman-Spektrometer mit unserer innovativen intelligenten Spektrometertechnologie. Dieses tragbare Raman-Spektrometer nutzt einen CCD-Array-Detektor mit hoher Quanteneffizienz, TE-Kühlung sowie hohem Dynamikbereich und liefert so eine hervorragende Leistung mit geringem Rauschen, selbst bei Integrationszeiten von bis zu 30 Minuten. Somit können auch schwache Raman-Signale gemessen werden.

Das i-Raman Plus 785S verfügt über die einzigartige Kombination aus einem breiten Spektralbereich und einer hohen Auflösung mit Konfigurationen, die Messungen von  $65\text{ cm}^{-1}$  bis  $3350\text{ cm}^{-1}$  ermöglichen. Die kleine Grundfläche des Systems, die leichte Bauweise und der geringe Energieverbrauch sorgen überall für die Möglichkeit, Raman-Analysen auf Forschungsniveau durchzuführen. Das i-Raman Plus ist mit einer faseroptischen Sonde zur leichten Probennahme ausgestattet und kann mit einem Küvettenhalter, einem Videomikroskop, einem XYZ-Verschiebetisch mit Sondenhalter sowie unserer unternehmenseigenen multivariaten Analysesoftware BWIQ® und der Identifikationssoftware BWID® verwendet werden. Mit dem i-Raman Plus haben Sie immer eine hochpräzise Raman-Lösung für qualitative und quantitative Analysen zur Hand.



#### i-Raman Prime 785S Tragbares Raman-Spektrometer

Das i-Raman® Prime 785S ist ein rauscharmes und vollständig integriertes Raman-System mit hohem Durchsatz, eingebautem Tablet-PC und einer Lichtleiter-Probensonde. Dieses tragbare Raman-Spektrometer nutzt einen CCD-Array-Detektor mit hoher Quanteneffizienz, TE-Tiefkühlung (-25 °C) sowie hohem Dynamikbereich und bietet so die Möglichkeit für Raman-Analysen auf Forschungsniveau, einschliesslich Quantifizierung und Identifikation in Echtzeit. Der hohe Durchsatz liefert Raman-Spektren mit hervorragendem Signal-Rausch-Verhältnis und ermöglicht damit die Messung schneller Prozesse sowie selbst schwächster Raman-Signale, sodass feine Probenunterschiede erkannt werden.

Das i-Raman Prime 785S verfügt neben seiner mobilen Bauweise über die einzigartige Kombination aus einem breiten Spektralbereich (150 cm<sup>-1</sup> bis 3350 cm<sup>-1</sup>) und einer hohen Auflösung (< 8 cm<sup>-1</sup>). Das i-Raman Prime kann mit einem Akku betrieben werden und ist dadurch einfach zu transportieren. So können egal an welchem Ort hochpräzise sowie qualitativ und quantitativ hochwertige Raman-Analysen auf Forschungsniveau durchgeführt werden. Das System ist für den Einsatz mit unserer STRaman®-Technologie für Analysen durch nicht-transparente Verpackungen optimiert.



#### Raman-Probennahmesystem mit Videomikroskop (785 nm)

Probennahmesystem mit Videomikroskop zur Verwendung mit den Raman-Sonden von B&W Tek für Labor und Industrie. Inklusive eines Objektivs mit 20-facher Vergrösserung bei einem Arbeitsabstand von 16 mm. Bietet manuelle Grob- und Feineinstellung auf den X-, Y- und Z-Achsen, koaxiale LED-Beleuchtung für die Zielausrichtung, Videokamera für die Probenbetrachtung und ist kompatibel mit Standard-Mikroskopobjektiven. Sonde ist nicht enthalten und separat erhältlich. 785 nm-Konfiguration.

BAC151C-785