

# Fast and Selective Detection of Trigonelline, a Coffee Quality Marker, Using a Portable Raman Spectrometer

Quality control in the food industry is a key issue that requires rapid, efficient and selective methods that could discriminate the products, detect fraudulent or accidental adulterations, and identify the content of some biomarkers within a particular process of storage conditions. Along these lines, Raman spectroscopy in conjunction with the optical properties of metallic nanostructures is a powerful technique that can be implemented in food analysis.

Surface-Enhanced Raman Spectroscopy (SERS) is a technique that takes advantage of the optical properties of noble metal nanostructures (e.g., gold or silver nanospheres) to enhance the Raman signals of molecules adsorbed on the surface of the metal. Changes in the material, geometry and size of the metallic structures enable the modulation in enhancement of these unique nanoantennas. This advance has led to many applications, including the design of new and selective sensors with lower limits of detection for food metabolites in order to adapt to agriculture and industry needs. In addition, SERS minimizes acquisition time and reduces the amount of sample needed.



## INTRODUCTION

In this regard, this report shows how the portable Raman device i-Raman Plus 785 can be used in combination with modified gold nanotriangles to develop an alternative quantification method for trigonelline. This alkaloid is a biomarker present in different food items, such as coffee and quinoa, that provides potential health benefits and whose thermal degradation (e.g., during the roasting process of

Gold nanotriangles modified with mercaptopropionic acid have been used as nanoantennas to quantify the concentration of trigonelline solutions from the SERS signal. The nanostructures have been optimized to enhance signals between 700-800 nm wavelength.

Calibration curves have been prepared using the  $1034\text{ cm}^{-1}$  peak area and compared with traditional Raman spectroscopy. The results show the advantages of the technique, which include lower limits of detection, and the potential of this method for quantifying trigonelline in food.

Find more information in the video:

## EXPERIMENTAL

Instrumentation: i-Raman Plus portable spectrometer with 785 nm laser excitation, Raman shift range  $150\text{-}2800\text{ cm}^{-1}$ , 50 sec integration time, 10 scans, and liquid cuvette holder with 10 mm optical path.

## RESULTS AND DISCUSSION

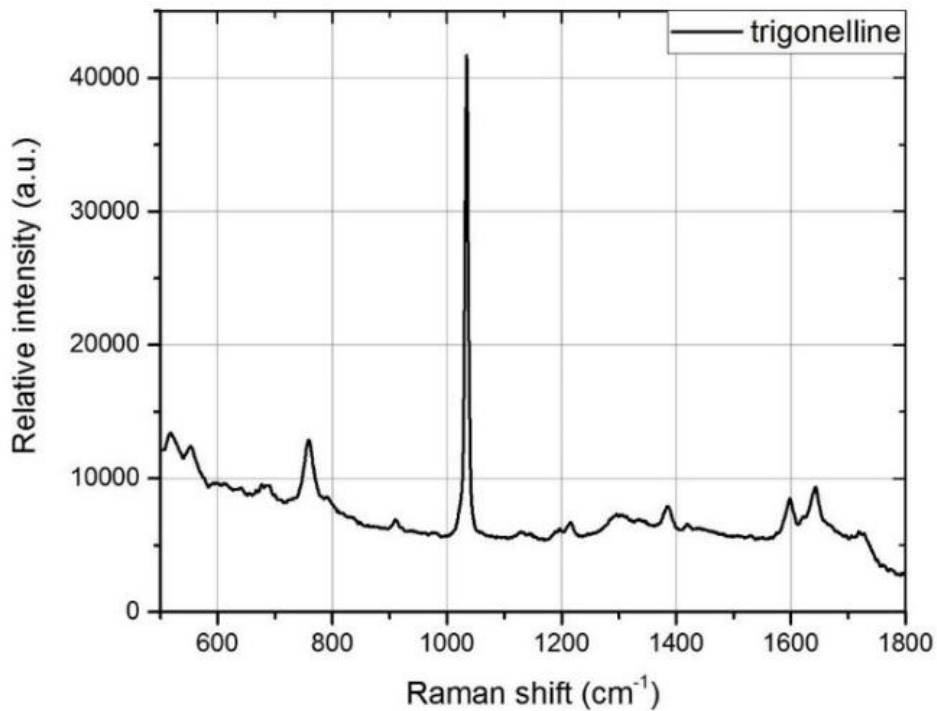
A 250 mM solution of trigonelline was analyzed using conventional Raman spectroscopy. The spectrum in **Figure 1** shows an intense signal at

the green coffee beans) makes the formation of different flavor and aroma compounds possible. For example, a coffee brew could contain around 2.3 mM of trigonelline, and there could be around 30-65  $\mu\text{mol}$  of trigonelline in one gram of green coffee beans, which would be an indicator of quality and could be tested using this technique.



Samples: Standard trigonelline aqueous solutions ranging from 10.0 mM to 0.5 mM. Gold nanotriangles modified with mercaptopropionic acid and suspended in deionized water (AuNTs).

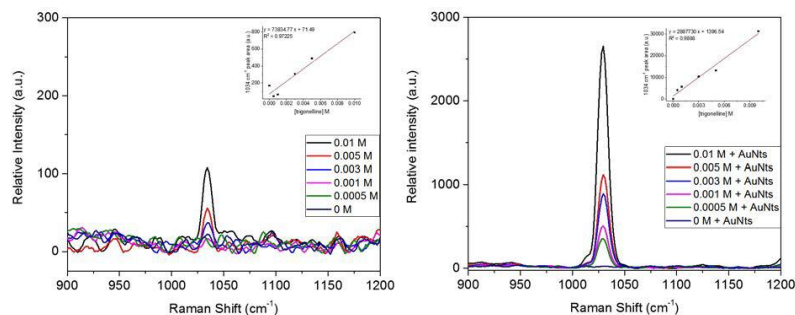
$1034\text{ cm}^{-1}$ , corresponding to the pyridine ring breathing mode, that could be used to monitor the concentration of this compound in water.



**Figure 1.** Raman spectrum of trigonelline solution at 250 mM

Four independent sets at five different concentrations were analyzed within the 0.5 mM and 10 mM range by conventional Raman spectroscopy and by SERS. The latter one requires an extra step where the modified gold nanotriangles are mixed with the trigonelline solutions (trigonelline: gold nanotriangles = 15:2) before samples are scanned. In all cases, the strong signal observed at  $1034\text{ cm}^{-1}$  was monitored and the peak area within  $1010\text{-}1045$

$\text{cm}^{-1}$  spectral window was used to determine the concentration of the alkaloid. Based on the results and the calibration curves (**Figure 2**) it was possible to observe an improvement on the signal to noise ratio of SERS over the conventional Raman spectra under the same experimental conditions. The results show it is possible to detect concentrations below 0.5 mM using this method.



**Figure 2.** Raman spectra of trigonelline solutions without gold nanotriangles (left) and with gold nanotriangles (right). Inserts show the calibration curves of trigonelline solutions using the 1034 cm<sup>-1</sup> peak area within a 1010-1045 cm<sup>-1</sup> spectral window.

In summary, we describe a simple method to quantify the presence of diluted trigonelline in solutions using surface enhanced Raman

spectroscopy as a tool could potentially improve the quality control process of food items such as coffee and quinoa.

## FURTHER READING

### Related application notes

[Portable Raman instrumentation for SERS applications](#)

[Choosing the most suitable laser wavelength](#)

[Analysis of Edible Oils by a Portable Raman Spectrometer](#)

### Other related documents

[Raman vs SERS... What's the Difference?](#)

## ACKNOWLEDGEMENTS

We would like to thank Angeline Saldana Ramos, Yulán Hernandez, and Prof. Betty C. Galarreta of the Departamento de Ciencias –

Sección Química, Pontificia Universidad Católica del Perú for sharing their research results.

## REFERENCES

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 Gestion 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 Gestion 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

メトロームジャパン株式会社  
143-0006 東京都大田区平  
和島6-1-1  
null 東京流通センター アネ  
ックス9階

[metrohm.jp@metrohm.jp](mailto:metrohm.jp@metrohm.jp)

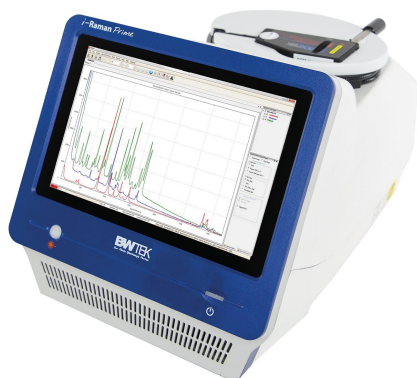
## CONFIGURATION



### i-Raman Plus 785S

i-Raman® Plus 785S は、弊社の革新的かつインテリジェントなスペクトロメーターテクノロジーを備えた i-Raman ホータフル型ラマンスペクトロメーターの受賞歴のあるシリーズの構成要素です。このホータフル型ラマンスペクトロメーターは、高い量子効率、TE 冷却、ならびに高いダイナミックレンジを備えた CCD アレイ検出器を用い、積分時間でさえ最長30分、低ノイズの傑出した性能を提供します。こうして、弱いラマン信号も測定することかてきます。

i-Raman Plus 785S は、 $65\text{ cm}^{-1}$  から  $3350\text{ cm}^{-1}$  までの測定を可能にするコンフィグレーションを有する幅広いスペクトル範囲と高分解能のユニークな組み合わせを特徴としています。システムの小さな底面、軽量構造、そして低消費電力により、とこてもラマン分析を研究レベルで実施することかてきます。i-Raman Plus には、サンプル採取を簡単にする光ファイバーフローが装備されており、キューベットホルター、ヒテオマイクروسコーフ、フローホルター付き XYZ スライドテーブル、ならびに弊社独自の多変量解析ソフトウェア BWIQ® および同定ソフトウェア BWID® と共に使用することかてきます。i-Raman Plus により、品質分析および定量分析のための高精度のラマンソリューションを常に使用することかてきます。



### i-Raman Prime 785S

i-Raman<sup>®</sup> Prime 785S は、タブレット PC およびファイバーサンプルフロー内蔵の、低ノイズかつ高スループットの完全一体型のラマンシステムです。このポータブル型ラマン spektrometer は、高い量子効率、TE 冷却 (-25 ° C)、ならびに高いダイナミックレンジを備えた CCD アレイ検出器を使用し、リアルタイムでの定量化と同定を含む研究レベルでのラマン分析を提供します。高スループットにより、傑出した信号対雑音比のラマンスペクトルを得ることのできるため、速いプロセスの測定、および最も弱いラマン信号でさえも検出可能となり、サンプルの微細な相違も検出できます。

i-Raman Prime 785S には、そのポータブル式の構造に加え、幅広いスペクトル領域と高い分解能というユニークな組み合わせが装備されているため、150 cm<sup>-1</sup> から 3350 cm<sup>-1</sup> までの測定が可能です。i-Raman Prime はバッテリーでの稼働が可能なので、容易に持ち運ぶことができます。そのため、場所を選ばず、高精度かつ質的、量的に価値の高いラマン分析を研究レベルで実施することができます。システムは、不透明なサンプルの分析用の、弊社 STRaman<sup>®</sup> テクノロジーの使用向けに最適化されました。



### (785 nm)

ラボおよび産業用の B&W Tek 社製 ラマンフローを用いた使用のためのヒテオマイクロスコープ付きサンプル採取システム。作動距離 16 mm で 20 倍拡大の対物レンズ付き。X、Y、および Z 軸方向の粗調整ならびに微調整、ターケティンク用同軸 LED 照明、サンプル観察のためのヒテオカメラが使用可能であり、標準マイクロスコープ対物レンズと互換性があります。フローは含まれておらず、個別にご購入いただけます。785 nm コンフィグレーション。

BAC151C-785