

Nachweis von Verfälschungen mittels NMR

Kernspin-Resonanzspektroskopie (engl. Nuclear Magnetic Resonance, NMR):

Die Kernresonanzspektroskopie ist eine der vielseitigsten Analysetechniken unserer Zeit. Die Bandbreite ihrer Anwendungen reicht von der Identifikation und Strukturaufklärung organischer und biochemischer Moleküle über die quantitative Erfassung einzelner Analyten und auch Multi-Analyt-Analysen bis hin zur „non target Analyse“ in Kombination mit chemometrischen Verfahren. Damit ist einerseits eine Quantifizierung von Inhaltsstoffen, die Echtheitsbewertung von Lebensmitteln und die Bestimmung der Herkunft und Sortencharakterisierung für bestimmte Produkte möglich. Die „non target Analyse“ ist ein schnelles und sehr selektives Probenscreening mit sehr hohem Informationsgewinn, das durch keine andere bisher eingesetzte Analysetechnik in diesem Ausmaß gegeben ist. Kennzeichnend für die NMR Technik ist eine meist sehr geringe Probenvorbereitung verbunden mit einer kurzen Messzeit, die im Vergleich zu chromatographischen Messtechniken einen höheren Probendurchsatz erlaubt.

Speiseöle

Neues Verfahren zur Sortencharakterisierung

Für die Analyse mittels NMR werden Speiseöle eingewogen und in CDCl_3 gelöst. Die Protonen der Triglyceride lassen sich den ^1H -NMR-Signalen im Spektrum eindeutig zuordnen. Mit dieser sehr einfachen Aufarbeitung können in kürzester Zeit sehr viele Speiseölproben dem NMR-Screening zugeführt werden. Die mit dieser Methode in den letzten beiden Jahren erhaltenen Daten wurden mit der Amix-Software ausgewertet und in ein „Modell“ eingearbeitet, um die Sorten von Speiseölen identifizieren zu können [siehe Abb].

Die Software gleicht die Daten der neu gemessenen Probe mit dem Modell ab. Wie in dem in der Abbildung dargestellten Fall kann ausgesagt werden, dass es sich bei der zu untersuchenden „neuen Olivenölprobe“ höchstwahrscheinlich auch um ein Olivenöl handelt, da dieses im gleichen „Cluster“ zu finden ist wie die bisher gemessenen Olivenöle.

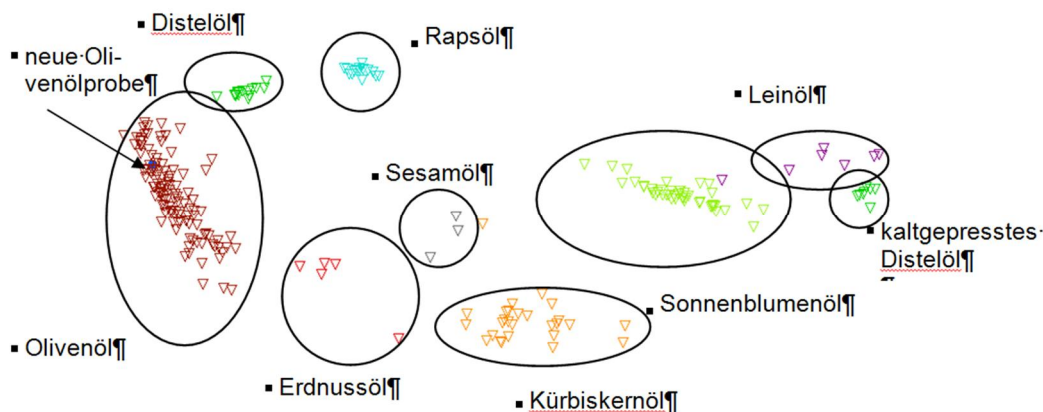


Bild: Modell für die Klassifizierung der Speiseöle

Bestimmung von Hydroperoxiden in Speiseölen und -fetten

Eine neue - im Rahmen einer Promotionsarbeit entwickelte Methode zur Bestimmung von Hydroperoxiden in Speiseölen wurde mit dem klassischen Verfahren, der sog. Peroxidzahl nach Wheeler (POZ) verglichen. Dazu wurden 300 Speiseöle verschiedener Ölartern mit beiden Methoden vermessen und die Ergebnisse graphisch gegeneinander aufgetragen (siehe Abb.). Zusätzlich ist in der Abbildung die „ideale Gerade“, die durch Mischungen zweier unterschiedlich stark oxidiertes künstlicher Öle (ohne Fettbegleitstoffe) ermittelt wurde, dargestellt. Diese Gerade stimmt grundsätzlich gut mit den erhaltenen Daten überein. Lediglich für einige Ölartern wurden größere systematische Abweichungen beobachtet. Während für Kürbiskernöle und Olivenöle die POZ-Werte geringer waren, als man es aufgrund der NMR-Ergebnisse erwarten würde, waren die POZ-Werte für Schwarzkümmelöle im Vergleich zu den NMR-Ergebnissen deutlich zu hoch.

Mit dieser Studie konnte gezeigt werden, dass die Peroxidzahl nach Wheeler nicht nur Oxidationsprodukte erfasst sondern auch andere Komponenten, die nichts mit Fettverderb zu tun haben. Damit ist die neu entwickelte $^1\text{H-NMR}$ -Methode der konventionellen Methode hinsichtlich der Selektivität deutlich überlegen.

Zur Aufklärung dieser Diskrepanzen wurden weitere Forschungsarbeiten durchgeführt. Dabei konnten einzelne Substanzen identifiziert werden, die für die Abweichungen verantwortlich sind. Schwarzkümmelöle enthalten 0,5-1,5% ätherisches Öl, dessen Hauptkomponente Thymochinon bei der POZ-Bestimmung miterfasst wird und so deutlich zu hohe POZ-Werte vortäuscht. Olivenöle zeichnen sich durch recht hohe Gehalte an phenolischen Verbindungen aus, darunter auch das Hydrochinon Hydroxytyrosol. Es wurde der Nachweis erbracht, dass Hydroxytyrosol bei der POZ-Bestimmung zu geringen POZ-Werten führt.

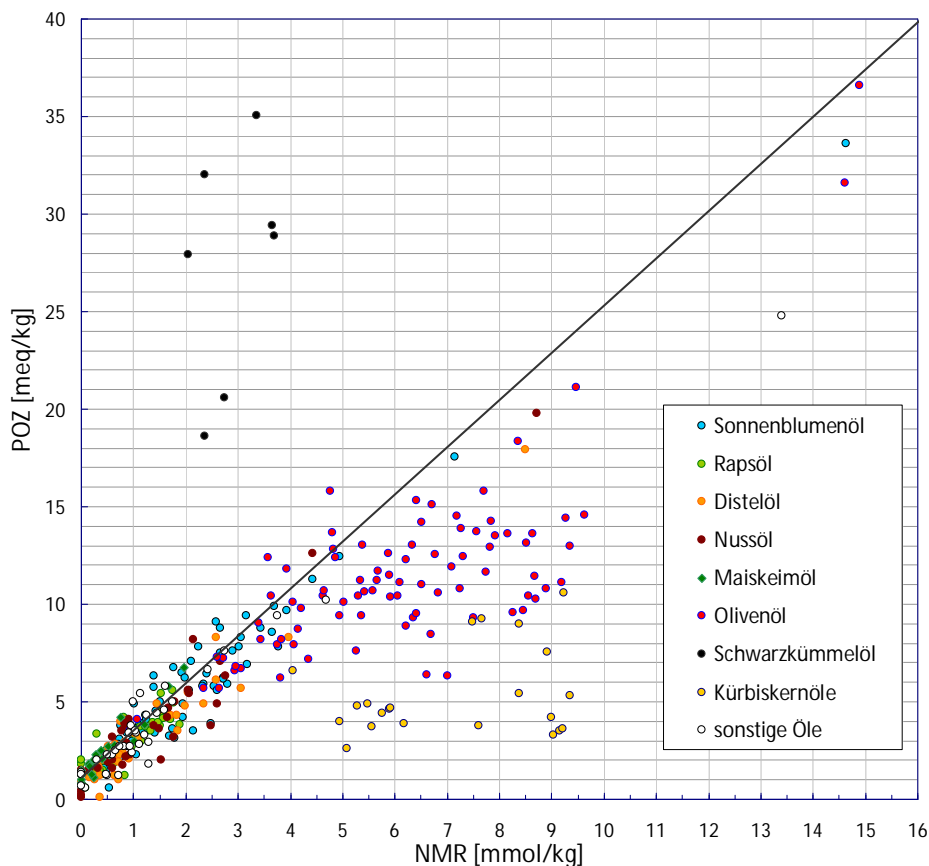


Abbildung: Vergleich der POZ nach Wheeler mit $^1\text{H-NMR}$

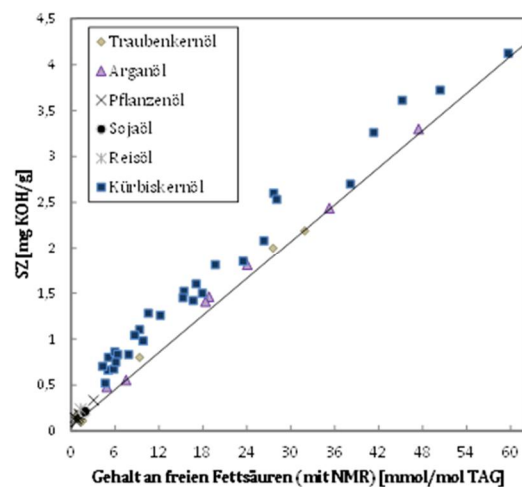
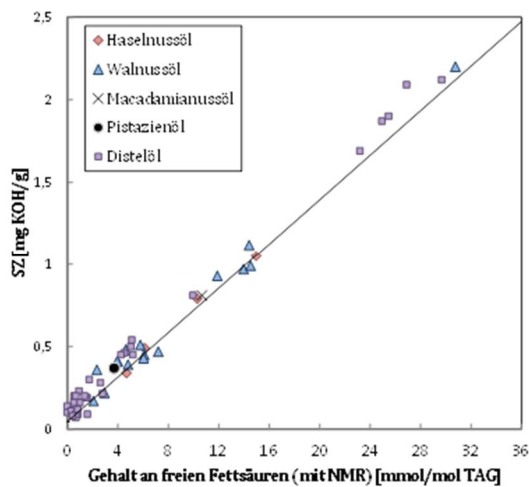
Bestimmung der Säurezahl in Speiseölen mittels $^1\text{H-NMR}$

Die Säurezahl ist eine gängige Fettkennzahl, die zur Beurteilung der Qualität von Speiseölen herangezogen wird. Sie ist ein Maß für die in der Probe vorhandenen freien Fettsäuren. Freie Fettsäuren entstehen durch hydrolytische Prozesse im Öl oder in dem entsprechenden Ausgangsmaterial, aber auch während des oxidativen Verderbs von Ölen.

Im Rahmen einer Promotionsarbeit am CVUA Karlsruhe wurde eine $^1\text{H-NMR}$ Methode zur Bestimmung des Gehalts an freien Fettsäuren in Speiseölen und pharmazeutischen Ölen entwickelt und mit dem klassischen Verfahren verglichen.

Es konnte gezeigt werden, dass beide Methoden eine vergleichbare Leistungsfähigkeit besitzen. 425 Ölproben wurden mit beiden Methoden vermessen und die Untersuchungsergebnisse graphisch gegeneinander aufgetragen. Anhand von Mischungen von Palmitinsäure und einem "künstlichen Lipid", d.h. einem Lipidstandard, der keine Fettbegleitstoffe enthält, wurde der mathematische Zusammenhang, der die Analysengrößen beider Methoden in Beziehung setzt, ermittelt.

Die Daten für alle untersuchten Ölarten stimmen gut mit dieser „idealen“ Geraden überein. Lediglich für Kürbiskernöle liegen die Säurezahlen etwas höher als man es aufgrund der NMR-Ergebnisse erwarten würde. Es ist davon auszugehen, dass diese Abweichungen auf die starke Färbung der Kürbiskernöle zurückzuführen sind. Für stark gefärbte Öle ist das verwendete nasschemische Verfahren nicht geeignet, da eine exakte Erkennung des Umschlagpunktes bei der Titration nicht möglich ist.



Pine mouth Syndrom in Pinienkernen aus „China“

In den Jahren 2000 bis 2010 häuften sich weltweit Beschwerden, dass jeweils nach dem Verzehr von bestimmten Pinienkernsorten eine Veränderung des Geschmacks auftritt: Unabhängig vom anschließend verzehrten Lebensmittel schmeckt alles bitter. Dieses Phänomen kann in Abhängigkeit von der verzehrten Menge bis zu zwei Wochen anhalten.

In einem gezielten Projekt wurden bislang 73 Proben mittel NMR untersucht, wobei jeweils eine Kontrollgruppe aus drei Personen einen sensorischen Begleittest durchführte. 13 dieser Proben waren dabei mit PNS behaftet, wobei hierbei von acht Proben bekannt ist, dass sie aus China stammen. Die Herkunft der übrigen fünf Proben ist unbekannt.

Mit Hilfe eines statistischen Auswerteverfahrens, der sog. Hauptkomponentenanalyse (HKA, engl. principal component analysis „PCA“), kann die Vielzahl von NMR-Messdaten einer Probe übersichtlich dargestellt werden und gleichzeitig eine schnelle Klassifizierung erfolgen, ob die Probe gänzlich unauffällig oder mit hoher Wahrscheinlichkeit mit PNS behaftet ist. Eine aufwändige sensorische Kontrolle wird damit in vielen Fällen überflüssig.

Inzwischen ist bekannt, dass durch eine steigende Nachfrage am Markt der Import auch auf Pinienkernsorten wie *Pinus armandii* aus China ausgeweitet wurde, die sich erst im Nachhinein als nicht verzehrsfähig herausstellte. Auf EU-Ebene wurde daraufhin Anfang 2011 beschlossen, diese Pinienkernart als nicht für den menschlichen Verzehr geeignet zu beurteilen und den Import zu stoppen, sofern sich die Sorte bestimmen lässt. Die Europäische Kommission hat zusammen mit der chinesischen Handelskammer für den Im- und Export von Lebensmitteln, einheimischen Produkten und Nebenerzeugnissen (CCCFNA) ein neues Zertifizierungssystem für Erzeuger und Exporteure von Pinienkernen beschlossen, um dem Problem des bitteren Geschmacks entgegenzutreten.

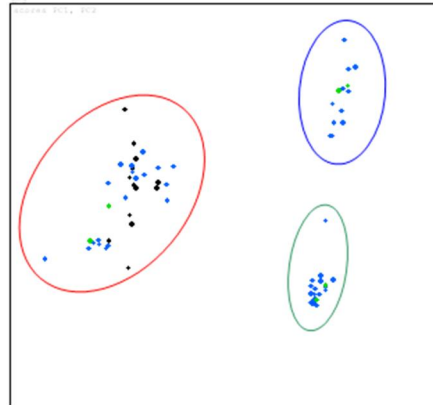


Abbildung: Statistische Auswertung (Hauptkomponentenanalyse) aus ^1H -NMR-Messdaten von 73 untersuchten Pinienkernproben:

Blaue Punkte = kein PNS, schwarze Punkte = PNS, grüne Punkte = PNS nicht eindeutig. Im roten Kreis befinden sich Proben chinesischer, im blauen mediterraner, im grünen pakistanischer Herkunft.

Käse und Speiseeis – schneller Nachweis von Imitat bzw. Pflanzenfett

Pflanzliche Öle und Fette können als billiger Ersatz für Milchfett verwendet werden, um Imitat-Käse oder Imitat-Eis herzustellen. Der Verbraucher kann getäuscht werden, wenn solche Produkte ohne ausreichende Kenntlichmachung in den Verkehr gebracht werden.

Im vorliegenden Fall wurde 400 MHz ^1H - und ^{13}C -NMR verwendet, um den Fettanteil der Produkte zu charakterisieren und um die Kennzeichnung von

Erzeugnissen auf Milchbasis zu überprüfen. Mit dem chemometrischen Verfahren Principal Component Analysis (PCA) können Imitat-Produkte sehr leicht erkannt werden. In den Produktgruppen Speiseeis und Käse ist eine Einteilung nach der Art des Rohmaterials (Milchfett, pflanzliches Fett) möglich, eine Zugabe pflanzlicher Fette kann festgestellt werden (s. Abbildungen 1 und 2).

Darüber hinaus ist auch eine Klassifizierung nach Käsesorte (Edamer, Gouda, Emmentaler, Feta) möglich.

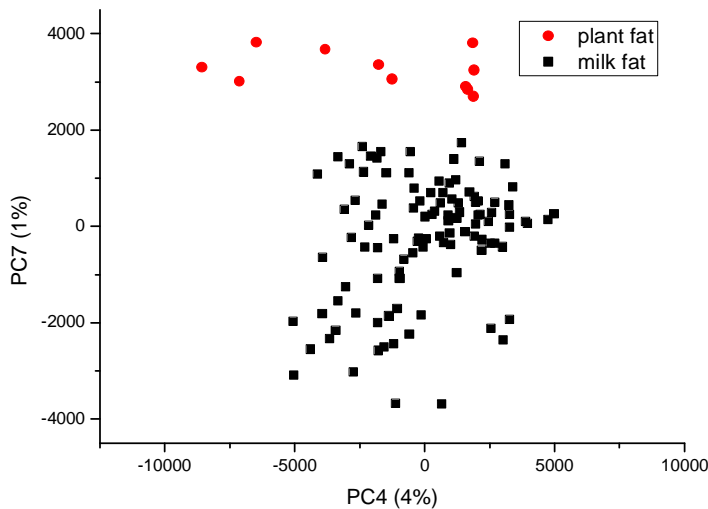


Abbildung 1: Unterscheidung von Eiskrem, hergestellt aus Pflanzenfett und Milchfett

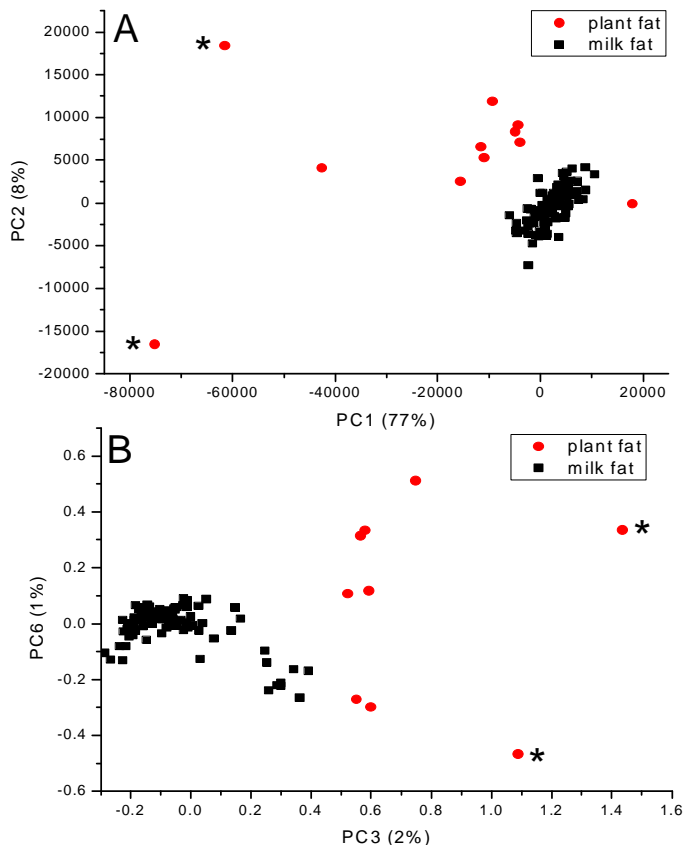


Abbildung 2: Unterscheidung von Analogkäse (rote Punkte) von normalem Käse (Sterne markieren Proben, die sowohl Pflanzen- als auch Milchfett enthalten). A: ^1H -NMR; B: ^{13}C -NMR

Wein

„Deutschlandstudie“ zur Authentizitätsprüfung bei Wein

Bei ausreichender Referenzdatenlage können auch die in der Etikettierung angegebenen, bei Wein besonders wertgebenden Merkmale Jahrgang und Herkunft auf ihren Wahrheitsgehalt hin überprüft werden. Im Jahr 2013 wurde eine sogenannte **Deutschlandstudie von ca. 1400 Weinen aus sämtlichen deutschen Anbaugebieten** ausgewertet. Die Weine wurden zuvor über die SNIF NMR Messstellen (LGL Bayern, BfR Berlin, ILC Speyer) und anderen authentischen Quellen bezogen und nach Bruker-Protokoll bei 400 MHz mittels ^1H NMR gemessen. Der Studie lagen 1383 Weine aus allen 13 deutschen Anbaugebieten zugrunde: Baden BAD, Württemberg WT, Pfalz PFL, Rheinhessen RHH, Mosel-Saar-Ruwer MSR, Franken, Nahe (NAH), Sachsen, Saale-Unstrut, Mittelrhein (MRH), Rheingau, Ahr, Hessische Bergstraße. Sechs Jahrgänge (2005-2010) mit insgesamt 37 Rebsorten wurden gemessen, von denen jeweils Gruppen von mehr als 10 Weine pro Rebsorte in die Auswertung einbezogen worden sind: sieben Rotweine (Pinot noir (116), Dornfelder (86), Lemberger (26), Portugieser (23), Trollinger (18), Regent (14), und Pinot Meunier (12)) sowie acht Weißweine (Riesling (342), Müller Thurgau (121), Pinot blanc (81), Kerner (63), Pinot gris (43), Silvaner (81), Chardonnay (16), und Gutedel (11)).

Die chemometrischen Auswertungen nach Rebsorten, Herkunft und Jahrgang wurden unabhängig von dem kommerziellen WineScreener (Bruker) mit multivariaten statistischen Verfahren durchgeführt. Die Hauptkomponentenanalyse (PCA) führte alleine aufgrund der großen Probenzahl zunächst bei der Gesamtheit aller Proben zu keinem aussagefähigen Ergebnis

Daher wurde im Weiteren ein Studiendesign verfolgt bei dem ein oder zwei Parameter konstant gehalten wurden und nach den anderen ausgewertet wurde.



| Nummer | Rebsorte | Jahrgang | Herkunft | Beispiel |
|--------|----------|----------|----------|-------------------------|
| 1 | X | X | - | Riesling 2006 |
| 2 | X | - | X | Riesling MSR |
| 3 | - | X | X | Württemberg 2010 |
| 4 | X | - | - | Riesling, Spätburgunder |
| 5 | - | X | - | 2009 |
| 6 | - | - | X | Franken |

Tabelle: Studiendesign zur Auswertung der Deutschlandstudie mittels multivariater Datenanalyse, X Parameter konstant, Auswertung nach dem dritten Parameter.

Hierbei lassen sich z.B. Weine der Rebsorte Riesling nach Jahrgängen und zusätzlich nach bestimmten Herkünften differenzieren oder Weine der Sorte Spätburgunder nach Herkunft und teilweise auch nach Jahrgang sortieren (s. nachfolgende Abbildungen):

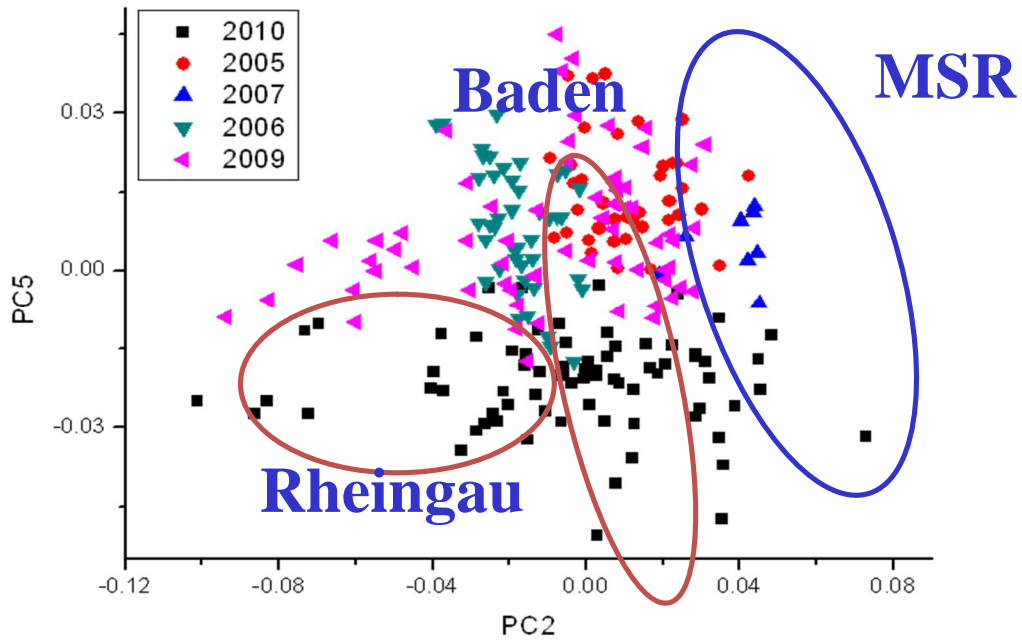


Abbildung: Differenzierung von Riesling (n=343) nach Jahrgang und z.T. nach Herkunft mittels PCA

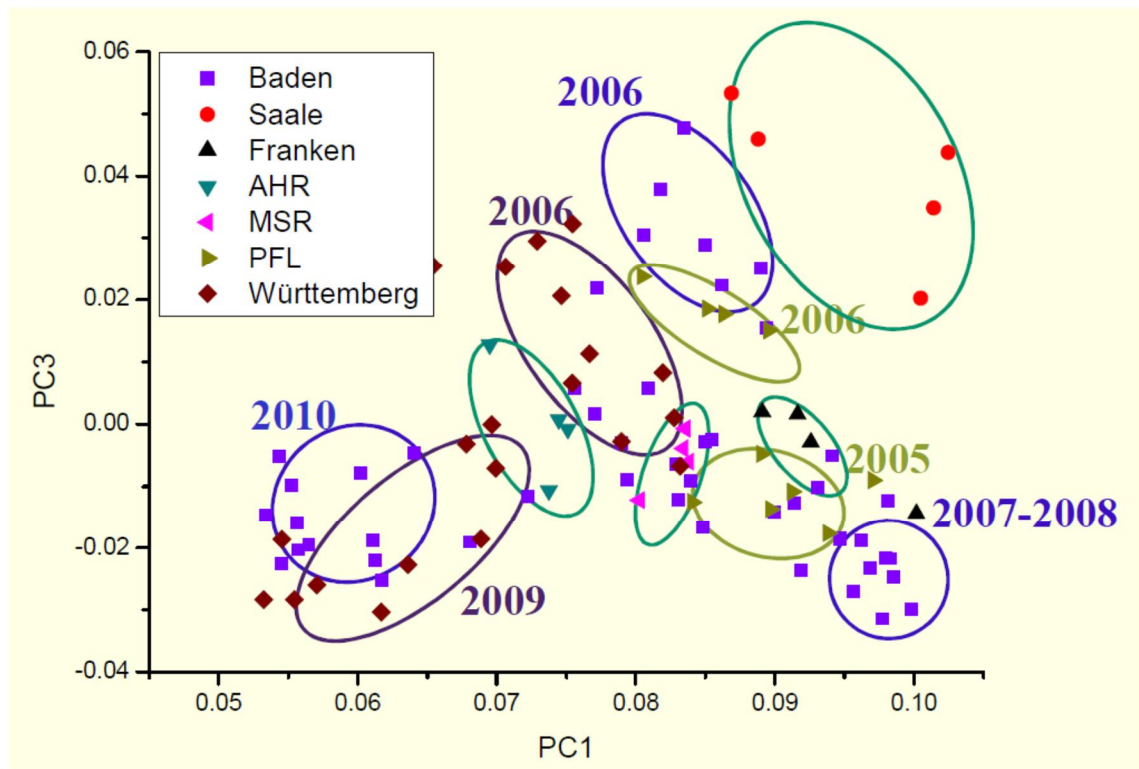


Abbildung: Differenzierung von Spätburgunder (n=121) nach Herkunft und Jahrgang

Durch Anwendung verschiedener anderer multivariater Datenanalysen zusätzlich zur Principal Component Analysis (PCA), wie Linear Discrimination Analysis (LDA), Factorial Discriminant Analysis (FDA), Independent Component Analysis (ICA) konnte die Klassifizierung der Parameter teilweise deutlich gesteigert werden, insbesondere bei LDA und ICA in einigen Fällen bis zu 100 % (s. Tabelle).

Tabelle: Klassifizierung der Parameter Rebsorte, Herkunft und Jahrgang mittels verschiedener chemometrischer Verfahren

| Matrix | Parameter | | LDA | PLS-DA | FDA | ICA |
|------------------|----------------------|---------------------|------------|-----------|-----|------------|
| Riesling (n=334) | Jahrgang, 5 Gruppen | Kalibration (n=278) | 90 | 94 | 74 | 85 |
| | | Validierung (n=56) | 84 | 82 | 70 | 83 |
| Riesling (n=217) | Herkunft, 5 Gruppen | Kalibration (n=181) | 90 | 94 | 72 | 90 |
| | | Validierung (n=36) | 89 | 92 | 69 | 89 |
| 2009 (n=224) | Herkunft, 7 Gruppen | Kalibration (n=187) | 93 | 93 | 88 | 92 |
| | | Validierung (n=37) | 89 | 84 | 76 | 90 |
| Franken (n=107) | Jahrgang, 2 Gruppen | Kalibration (n=80) | 100 | 100 | 99 | 100 |
| | | Validierung (n=27) | 100 | 85 | 96 | 100 |
| Rotwein (n=303) | Rebsorten, 7 Gruppen | Kalibration (n=242) | 89 | 84 | 64 | 91 |
| | | Validierung (n=61) | 79 | 61 | 43 | 83 |
| Weißwein (n=386) | Rebsorten, 8 Gruppen | Kalibration (n=309) | 90 | 81 | 66 | 88 |
| | | Validierung (n=77) | 73 | 71 | 52 | 72 |

Bei Weißweinen konnte mittels LDA die Rebsorten in hohem Grad richtig zugeordnet werden, bei Müller-Thurgau und Riesling zu 100 % korrekt.

Kombination von NMR- und Stabilisotopendaten

Eine weitere Verbesserung der Klassifizierungen erbrachte die gemeinsame Auswertung von **NMR-Daten und Stabilisotopen-Daten**. Hierzu wurden die Daten der SNIF-NMR ((D/H)1, (D/H)2, R-Wert, ^{18}O , ^{13}C) mit ^1H NMR Daten kombiniert und mittels verschiedener multivariater statistischer Verfahren ausgewertet. Diese Daten (n= 783 Weine) wurden vom Institut für Lebensmittelchemie, Speyer zu Verfügung gestellt.

Die Klassifizierung nach **Herkunft** (PFL, NAH, MSR, RHH) erbrachte bei allen Rebsorten des untersuchten Jahrgangs 2009 (n=111) mittels PLS-DA und MBPLS-DA in der Kombination von NMR mit Stabilisotopendaten eine 100 % richtige Zuordnung.

| Methode | LDA | PLS-DA | FDA | ICA | MB-PLSDA |
|---------------|-----------|------------|-----------|-----------|------------|
| NMR | 89 | 83 | 82 | 88 | - |
| SI | 61 | 60 | 61 | 70 | - |
| NMR+SI | 99 | 100 | 96 | 92 | 100 |

Auch bei der Klassifizierung von Riesling nach **Jahrgang** (2005, 2006, 2007, 2009, 2010) lag die korrekte Zuordnungsrate mittels LDA, PLS-DA und MBPLS-DA in der Kombination von NMR mit Stabilisotopendaten in Höhe von jeweils 99 %.

| Methode | LDA | PLS-DA | FDA | ICA | MB-PLSDA |
|---------------|-----------|-----------|-----------|-----------|-----------|
| NMR | 97 | 97 | 88 | 95 | - |
| SI | 62 | 62 | 62 | 61 | - |
| NMR+SI | 99 | 99 | 92 | 95 | 99 |

Bei der Klassifizierung der **Rebsorten** erbrachte die Kombination von Stabilisotopendaten **keine verbesserte Vorhersagewahrscheinlichkeit** als die NMR Daten alleine. Dies war zu erwarten, da Stabilisotope auf die Rebengenetik nur einen geringen Einfluss haben.

Mit der Studie ließ sich zeigen, dass die ^1H -NMR Daten auch unabhängig von der kommerziellen Entwicklung des Wine Screeners ausgewertet werden können. Die Kombination von ^1H NMR Daten mit Stabilisotopendaten ((D/H)1, (D/H)2, R-Wert, ^{18}O , ^{13}C) verbessern die Modelle zum Nachweis von geographischer Herkunft und Jahrgang.

Herkunftsnachweis bei Apfelsäften

Für eine Echtheitsbewertung von Fruchtsäften sind oftmals eine Vielzahl von Kenndaten notwendig. Gerade mit der NMR-Technik lassen sich mit wenig Aufwand für die Probenvorbereitung sehr viele Inhaltsstoffe gleichzeitig bestimmen. Das Verfahren, bei dem mehr als 20 Analyten gleichzeitig bestimmt werden, wurde nach DIN ISO 17025 validiert.

Kommerziell verfügbare Analyse- und Auswerteverfahren zeigen, dass mit Hilfe von NMR-Daten die Zuordnung von Fruchtsäften zu den Herkunftsländern zum großen Teil zuverlässig gelingt. Aus den Ergebnissen von Studien bei Apfelsäften kann auch geschlossen werden, dass auch die kleinteiligere Bestimmung von Herkunftsregionen auf nationaler Ebene mittels NMR-Spektroskopie möglich ist. Die Kombination mit Stabilisotopen-Daten kann hierbei die Belastbarkeit von Klassifizierungen noch entscheidend verbessern.

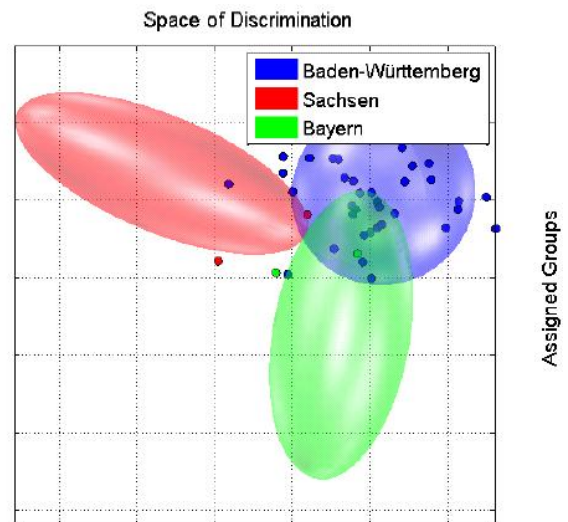


Abb.: Modell zur Differenzierung der Apfelsäfte mit Herkunft Baden-Württemberg, Sachsen und Bayern

Alkoholfreie Erfrischungsgetränke – Echtheitsbewertung

Im Getränkebereich wurde eine 400 MHz ^1H NMR-Methode zur Bestimmung von koffeinhaltigen Erfrischungsgetränken etabliert.

Fragestellung war hier v.a. die Unterscheidung von Markenprodukten (insb. im offenen Ausschank) sowie die Grenzwertkontrolle von Zusatzstoffen wie Süß- oder Konservierungsstoffe.

Ziel war auch hier, eine möglichst einfache Probenvorbereitung anzuwenden. Wie bei der Probenvorbereitung von Wein für NMR-Messungen genügte eine Pufferzugabe mit nachfolgender pH-Wert-Einstellung auf pH 4.5.

Bei der Auswertung mittels multivariater Datenanalyse (Hauptkomponentenanalyse) konnten Colageetränke von Markenherstellern von denen aus dem Discount-Bereich unterschieden werden. Innerhalb einer Marke war bei den Light-Produkten auch die Unterscheidung der Herkunft zwischen Deutschland und Frankreich möglich, da sich diese in den Gehalten der künstlichen Süßungsmittel unterschieden.

Eine quantitative Bestimmung kann aus ein und demselben Spektrum durch einfache Peakintegration erfolgen. Dies ist möglich für Koffein, Acesulfam-K, Aspartam, Cyclamat, Benzoat, Hydroxymethylfurfural und Vanillin. Die Nachweisgrenzen des Verfahrens liegen zwischen 1 und 4 mg/L. Die entwickelte NMR-Methode erlaubt eine sichere Kontrolle der Höchstmengen der genannten Stoffe. Verglichen mit konventionellen Techniken ist die NMR-Methode deutlich schneller und einfacher.

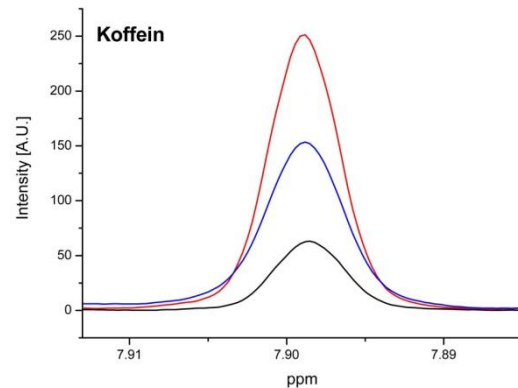
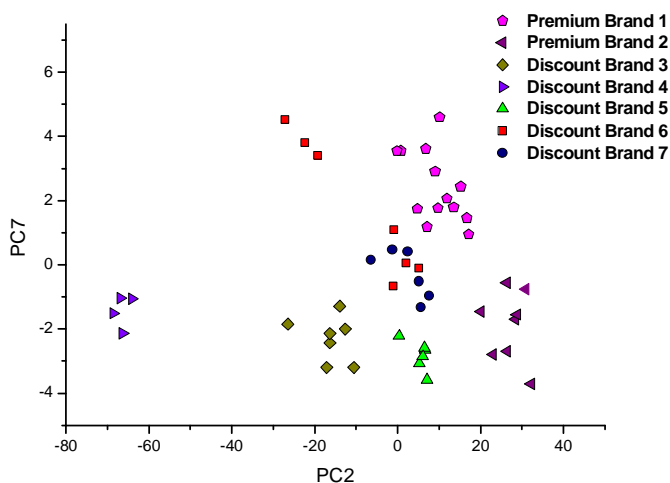


Abbildung: Beispiel für die Coffein-Bestimmung in Cola mit einfacher Spektrenintegration

Tabelle: Quantitative Bestimmung von Inhaltsstoffen

| Analyt | NMR Bereich | Konzentrationsbereich (mg/L) | NG-Bereich (mg/L) |
|--------------|---|------------------------------|-------------------|
| Koffein | 7.93-7.87 ppm (singlet) | 1-200 | 1-16 |
| Aspartame | 3.11-3.03 ppm (multiplet): with citric acid | 3-350 | 3-10 |
| | 2.76-2.73 ppm (doublet): without or few citric acid | 4-350 | 4-100 |
| Acesulfame-K | 5.70-5.65 ppm (quadruplet) | 1-300 | 1-10 |
| Cyclamate | 2.01-1.92 ppm (multiplet) | 2-244 | 2-9 |
| Benzoate | 7.62-7.56 ppm (multiplet) | 2-210 | 1-42 |
| HMF | 9.46-9.45 ppm (singlet) | 1-10 | 1-5 |
| Vanillin | 9.73-9.72 ppm (singlet) | 1-20 | 1-10 |

Abbildung: Beispiel für die Unterscheidung verschiedener Cola-Marken



Honige

Vielversprechendes Potenzial bei der Untersuchung der Authentizität von Honigen hat die NMR-Untersuchung. Dies zeigte ein Untersuchungsprojekt, dessen Ergebnisse in einem [wissenschaftlichen Artikel](#) veröffentlicht wurden. Die Ergebnisse deuten darauf hin, dass eine Überprüfung von Angaben zur Herkunft oder botanischen Zusammensetzung (Tracht) ebenso wie bei wichtigen Inhaltsstoffen (wie z.B. Zucker, organische Säuren, HMF) möglich ist.



Granatapfelkernöl

wird in Nahrungsergänzungsmitteln aber auch diätetischen Lebensmitteln verwendet und wird u.a. oft wegen des hohen Gehalts Punicinsäure, „die sie zur konjugierten Fettsäure mit spezieller Wirkung auf den menschlichen Organismus macht“ ausgelobt. Eine Überprüfung der Echtheit kann sowohl mit Gaschromatographie als auch mit NMR durchgeführt werden.

Lesen Sie hierzu [ausführliche Informationen](#)

Laktosefrei

Für laktoseintolerante Verbraucher werden laktosefreie Milch und Milchersatzprodukte auf Soja-, Hafer- oder Reisbasis in einer großen Vielfalt angeboten. Mittels einer ^1H -NMR-Methode können die Angaben "laktosefrei" und andere nährwertbezogene Angaben sehr einfach und schnell kontrolliert werden. Mit der sogenannten SIMCA-Methode (Soft Independent Modelling of Class Analogy) können die NMR-Spektren nach den genannten Produkttypen klassifiziert werden.

Kaffee – robusta oder arabica?

Für Kaffee, dem in Deutschland beliebtesten Getränk, werden die fast ausschließlich die beiden Kaffeearten *Coffea arabica* (Arabica) und *Coffea canephora* (Robusta) verwendet. Der Trend reine Arabicas auszuloben nimmt zu (100% Arabica, Hochlandkaffee). Mit der NMR-Technik wurde eine einfache und schnelle Methode entwickelt, mit der Robusta in geröstetem und rohem Arabica nachgewiesen werden kann. Das entwickelte Verfahren ist eine schnelle und direkte Methode zur Bestimmung des Robustamarkers 16-O-Methylcafestol (16-OMC), die im Vergleich zur amtlichen Methode ohne zeitintensive Probenvorbereitung auskommt und nur ca. 20 Minuten Messzeit je Probe benötigt. Die Methode wird routinemäßig für die Analyse von als reine Arabicas ausgelobten Röstkaffeeproben angewandt.

Mit der Hauptkomponentenanalyse (PCA) wurden differente Cluster der beiden Hauptkaffeearten (Arabica und Robusta) bei zwanzig authentischen Proben beobachtet.