

# FOOD PROFILING

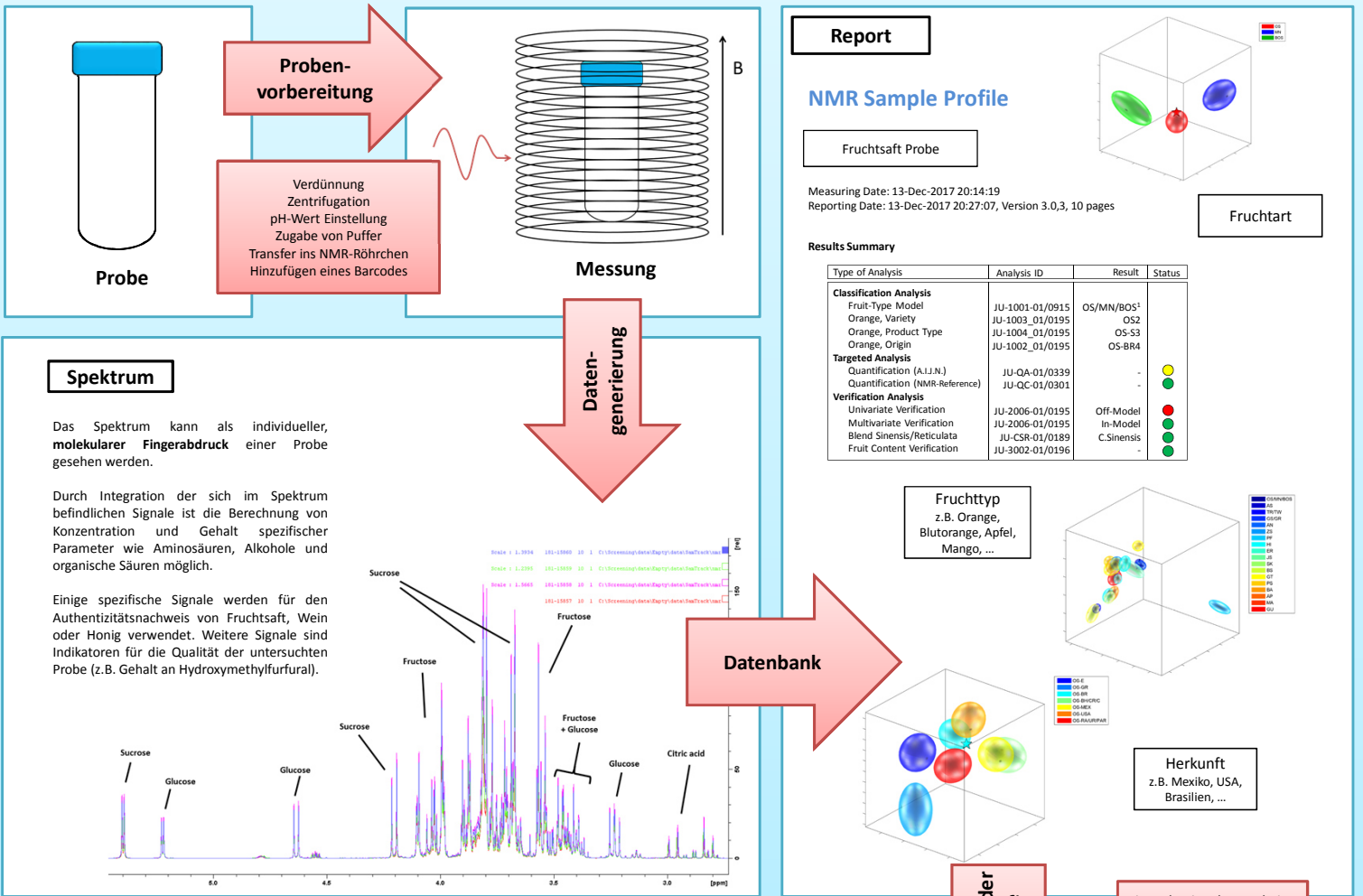
Screening von Fruchtsaft, Wein und Honig  
via NMR-Spektroskopie



G. Bischof, A. Juadjur

Lebensmittelsicherheit | Deutsches Institut für Lebensmitteltechnik | Quakenbrück

## Screening von Fruchtsaft, Wein und Honig zur Bestimmung von Authentizität und Qualität durch über 20 verschiedene Parameter

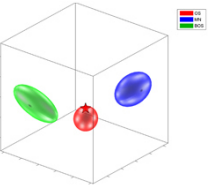


### Report

#### NMR Sample Profile

Fruchtsaft Probe

Measuring Date: 13-Dec-2017 20:14:19  
Reporting Date: 13-Dec-2017 20:27:07, Version 3.0.3, 10 pages

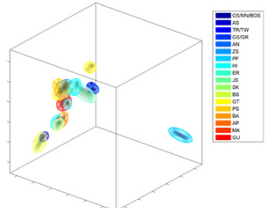


Fruchart

#### Results Summary

Type of Analysis	Analysis ID	Result	Status
<b>Classification Analysis</b>			
Fruit-Type Model	JU-1001-01/0915	OS/MN/BOS <sup>1</sup>	
Orange, Variety	JU-1003_01/0195	OS2	
Orange, Product Type	JU-1004_01/0195	OS-S3	
Orange, Origin	JU-1002_01/0195	OS-BR4	
<b>Targeted Analysis</b>			
Quantification (A.I.J.N.)	JU-QA-01/0339	-	●
Quantification (NMR-Reference)	JU-QC-01/0301	-	●
<b>Verification Analysis</b>			
Univariate Verification	JU-2006-01/0195	Off-Model	●
Multivariate Verification	JU-2006-01/0195	In-Model	●
Blend Sinensis/Reticulata	JU-CSR-01/0189	C.Sinensis	●
Fruit Content Verification	JU-3002-01/0196	-	●

Fruchtyp  
z.B. Orange,  
Blutorange, Apfel,  
Mango, ...

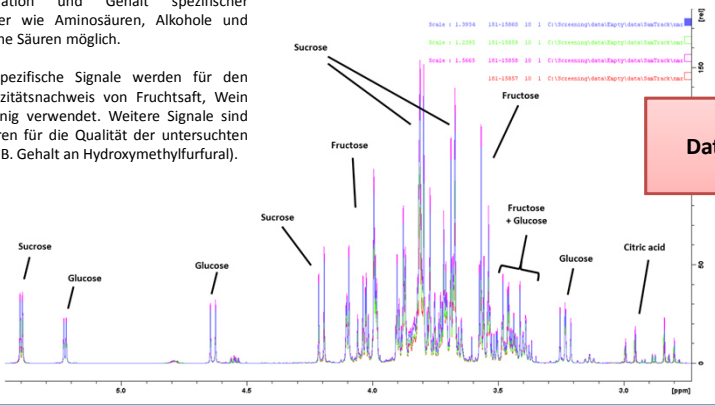


### Spektrum

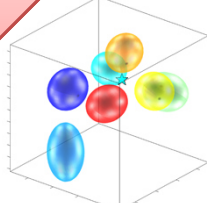
Das Spektrum kann als individueller, molekularer Fingerabdruck einer Probe gesehen werden.

Durch Integration der sich im Spektrum befindlichen Signale ist die Berechnung von Konzentration und Gehalt spezifischer Parameter wie Aminosäuren, Alkohole und organische Säuren möglich.

Einige spezifische Signale werden für den Authentizitätsnachweis von Fruchtsaft, Wein oder Honig verwendet. Weitere Signale sind Indikatoren für die Qualität der untersuchten Probe (z.B. Gehalt an Hydroxymethylfurfural).



### Datenbank



Herkunft  
z.B. Mexiko, USA,  
Brasilien, ...

**Marker:**

Compound	Value	Unit	LOQ	Official Reference min	Official Reference max	Flag	Honey Profiling™ NMR Distribution
3-phenyllactic acid	<LOQ	mg/kg	300	-	-	○	<200 mg/kg in reference dataset
dihydroxyacetone	<LOQ	mg/kg	20	-	-	○	<10
kynurenic acid	<LOQ	mg/kg	60	-	-	○	<60 mg/kg in reference dataset
methylglyoxal	<LOQ	mg/kg	30	-	-	○	<10
shikimic acid	<LOQ	mg/kg	80	-	-	○	<80

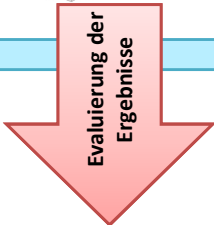
Zur Bestimmung der **Authentizität** und **Qualität** der Probe sind viele verschiedene Parameter notwendig wie der Gehalt von Aminosäuren, Zuckern, Alkoholen, Hydroxymethylfurfural (HMF), etc.

Zum Beispiel:

- HMF als Indikator für das Alter des Honigs
- Prolin, Methylglyoxal und Kynurensäure sind Indikatoren für eine Honigart und Haltbarkeit des Honigs
- Ein hoher Mannosegehalt im Honig gibt einen Hinweis auf Süßung des Honigs mit Industriezucker
- Ethanol ist ein Indikator für das Alter der im Saft verwendeten Früchte
- Kontrolle des Methanol- und Acetaldehydgehalts in Wein
- Ameisensäure, Gluconsäure oder Fumarsäure als Indikator für die Verwendung von *botrytis cinerea* befallenen Trauben
- Salicylsäure in Wein als Indikator für die Zugabe von Konservierungsmitteln

**Aminosäuren:**

Compound	Value	Unit	LOQ	Official Reference min	Official Reference max	Flag	Honey Profiling™ NMR Distribution
alanine	<LOQ	mg/kg	5	-	-	○	<5
aspartic acid	<LOQ	mg/kg	150	-	-	○	<150
glutamine	<LOQ	mg/kg	200	-	-	○	<200
leucine	<LOQ	mg/kg	40	-	-	○	<40
proline	<LOQ	mg/kg	150	-	-	○	<150
valine	<LOQ	mg/kg	10	-	-	○	<10
tyrosine	<LOQ	mg/kg	50	-	-	○	<50
phenylalanine	<LOQ	mg/kg	100	-	-	○	<100



Die Evaluation der Ergebnisse wird von einem Wissenschaftler durchgeführt. Dabei werden analytisches Know-How und biologischer Kontext mit den Ergebnissen in Zusammenhang gebracht.

Compound	Value	Unit	LOQ	Flag	Official Ref. max	Official Ref. min	Wine-Profiling™ NMR reference database
acetic acid	318	mg/L	100	○	-	-	<100
acetoin	10	mg/L	10	○	-	-	<10
ethylacetate	<50	mg/L	50	○	-	-	<50
ethyl lactate	150	mg/L	150	○	-	-	<150
formic acid	<5	mg/L	5	○	-	-	<5 mg/L in reference set
fumaric acid	<5	mg/L	5	○	-	-	<5 mg/L in reference set
gluconic acid	<400	mg/L	400	●	-	-	<400
putrescine	<50	mg/L	50	○	-	-	<50 mg/L in reference set
cadaverine	<50	mg/L	50	○	-	-	<50 mg/L in reference set
HMF	<5	mg/L	5	●	-	-	<5 mg/L in reference set
furfural	<2	mg/L	2	○	-	-	<2 mg/L in reference set