



# Neue Routinen in der amtlichen Untersuchung von Süßwaren

Qualitatives und quantitatives Screening von Süßwaren mittels  $^1\text{H}$ -Kernspinresonanzspektrometrie ( $^1\text{H}$ -NMR)

Sabrina Schott | Wiebke Behrens | Philipp-Marius Zech | Michael Romoth

Am CVUA-OWL wurde ein ressourcenschonendes Screening-Verfahren für Süßwaren entwickelt und etabliert, mit dem in einem Analysengang 14 verschiedene Inhaltsstoffe von Süßwaren qualitativ und quantitativ bestimmt werden können. Dabei kann eine Vielzahl verschiedener Süßwaren, z. B. Kaugummis, Bonbons und Fruchtgummis, mit derselben  $^1\text{H}$ -NMR-Methode untersucht werden.

Bonbons, Kaugummis, Gummibärchen, Lakritz, Zuckerwatte, Brausepulver, Eiskonfekt, Nugat, Marzipan, [...]. Die Liste ließe sich noch eine ganze Weile fortführen. Süßwaren kennen und verzehren wir alle. Sie sind süß, sie sind bunt und in Form und Geschmacksrichtungen an Vielseitigkeit kaum zu überbieten. Rund 31 kg Süßwaren haben die Deutschen 2019 pro Kopf laut einer Statistik des Bundesverbands der Deutschen Süßwarenindustrie (BDSI) verzehrt [1]. In dieser Statistik gehören zu den Süßwaren neben Zucker- auch Schokoladenwaren, Speiseeis, Knabberartikel und Feine Backwaren. Aber auch bei den Zuckerwaren (Bonbons, Fruchtgummis & Co.) alleine liegt der Pro-Kopf-Verbrauch der Deutschen pro Jahr bei etwa 5 kg [1].

Wie andere Lebensmittel auch unterliegen die Süßwaren den Bestimmungen des europäischen und nationalen Lebensmittelrechts. In diesen Gesetzen und Verordnungen sind unter anderem Vorschriften zu Zusatzstoffen, Kennzeichnungsbestimmungen und weitere Vorgaben festgelegt. Der Lebensmittelunternehmer trägt dabei die Hauptverantwortung für das Einhalten dieser Vorschriften und Vorgaben. Als Kontrollinstanz für die Verantwortlichkeiten der Lebensmittelunternehmer fungiert die amtliche Lebensmittelüberwachung. Effektive, effiziente, vielseitige und zuverlässige analytisch-chemische Untersuchungsverfahren sind notwendig, um dieser Aufgabe nachzukommen. Leistungsfähige Screening-Methoden wie die quantitative Kernspinresonanzspektrometrie (qNMR), die eine Vielzahl von Analyten mit unterschiedlichen Gehalten innerhalb kurzer Zeit in einem einzelnen Analysengang nachweisen, werden dabei immer öfter eingesetzt. Im Bereich der Getränke, insbesondere bei der Analyse von Fruchtsäften, Bier, Wein und alkoholfreien Erfrischungsgetränken, wurden bereits ent-

sprechende Untersuchungsmethoden entwickelt und etabliert [2 - 5]. Für Süßwaren sind solche Verfahren nach momentanem Kenntnisstand in der Literatur bisher noch nicht beschrieben worden.

Ziel war es, für Süßwaren eine entsprechende qNMR-Screening-Methode zu entwickeln, diese zu validieren und in die Routineanalytik zu überführen. Da das CVUA-OWL unter anderem Schwerpunktlabor für die Untersuchung von amtlichen Süßwaren-Proben in Nordrhein-Westfalen ist, werden pro Jahr etwa 1000 Süßwaren-Proben zur Untersuchung vorgelegt. Bisher ist eine große Bandbreite von etablierten Analysemethoden notwendig, um die verschiedenen Inhaltsstoffe untersuchen zu können. So erfolgt die Bestimmung von Zutatensubstanzen wie Konservierungsstoffen, Süßungsmitteln oder Zuckern flüssigchromatographisch. Bei milchfetthaltigen Süßwaren wie Karamell oder Sahnebonbons wird der Milchfettanteil gaschromatographisch untersucht. Auch enzymatische, titrimetrische oder nasschemische Untersuchungsmethoden finden für die Analyse verschiedener Inhaltsstoffe Anwendung. Dies ist mit einem erheblichen Personal-, Geräte-, Verbrauchsmaterial- und Zeitaufwand verbunden. Die Etablierung einer schnellen und leistungsfähigen Screening-Methode zur Analyse einer Vielzahl von Inhaltsstoffen der Süßwaren in einem Analysengang ist also wünschenswert.

Süßwaren eignen sich, ähnlich wie Getränke, aufgrund ihrer Zusammensetzung besonders für die Untersuchung mittels qNMR. Dabei ist ein breites Spektrum an verschiedenen Analyten zu bestimmen: neben Zuckern und einigen Süßungsmitteln, sind diese verschiedene organische Säuren und Aromastoffe wie Coffein, Ethanol und Vanillin. Diese

Tab. 1: Validierungsdaten: BIAS = Richtigkeit, Sr = Wiederholstandardabweichung, SL = Laborstandardabweichung; \*Acesulfam-K: Aufgrund der Nähe des Signals zur Wasserunterdrückung ist die Reproduzierbarkeit innerhalb der Varianz pro Person erhöht. Dies spiegelt sich in der erweiterten Messunsicherheit wieder. \*Benzoessäure und Vanillin: Beide Analyten sind schwer löslich in Wasser (Löslichkeitsprodukt: 3,4 g/l Benzoessäure und 10 g/l Vanillin). Daher fielen beide Substanzen während der Messung im NMR-Tube aus (siehe BIAS). \*Fructose: Erhöhte erweiterte Messunsicherheit bedingt durch die Inversion der Saccharose in Fructose und Glucose. \*Saccharin: Das auszuwertende Signal ist ein Multiplet, welches in der Automation schwieriger reproduzierbar zu quantifizieren ist. Dies zeigt sich in der Laborstandardabweichung mit ca. 10 %.

Validierungsergebnisse														
Analyt	Konzentration vom Ansatz [g/kg]	Tag1; 4 unterschiedliche Proben und 2 verschiedene Personen			Tag2; 4 unterschiedliche Proben und 2 verschiedene Personen			Tag3; 4 unterschiedliche Proben und 2 verschiedene Personen			LOD (Nachweisgrenze) bestimmt mittels Signal-/Rauschverhältnisses über 1D	LOD bestimmt mittels 2D-Quantifizierung	LOQ (Bestimmungsgrenze) bestimmt mittels 1D-Quantifizierung	Erweiterte Messunsicherheit
		BIAS	Sr	SL	BIAS	Sr	SL	BIAS	Sr	SL	LOD [mg/kg]	LOD [mg/kg]	LOQ [mg/kg]	U mit k = 2; P = 95 %
*Acesulfam-K	2,5	-3,4%	4,5%	7,1%	-5,7%	4,9%	8,6%	-6,3%	4,6%	9,1%	40	40	150	22,59%*
Äpfelsäure	10	10,6%	1,7%	2,2%	10,1%	1,8%	2,2%	10,1%	1,7%	1,9%	80	30	120	20,45%
Ameisensäure	1	-5,0%	0,6%	2,1%	-5,6%	0,5%	3,4%	-5,0%	0,8%	2,8%	5	5	15	10,33%
*Benzoessäure	1,5	-14,1%	8,5%	5,7%	-13,2%	9,8%	3,0%	-13,7%	10,4%	4,5%	41	25	140	27,60%*
Citronensäure	9	-7,3%	7,3%	2,0%	-7,3%	6,7%	2,9%	-8,1%	6,6%	1,1%	14	1	50	26,49%
Coffein	4	3,0%	3,4%	4,5%	2,0%	3,8%	5,8%	-0,4%	2,1%	5,6%	80	80	106	15,64%
Essigsäure	1	0,5%	0,9%	2,6%	-0,8%	0,6%	4,0%	-0,3%	0,3%	3,3%	2	1	5	7,15%
Ethanol	1	-4,1%	2,3%	3,5%	-5,6%	2,4%	4,5%	-5,1%	2,3%	3,9%	13	10	50	11,44%
*Fructose	40	7,3%	8,8%	0,0%	9,5%	9,7%	2,5%	11,3%	8,4%	0,4%	222	100	800	32,76%
Glucose	65	3,9%	4,7%	2,0%	4,5%	5,1%	1,4%	6,4%	4,7%	2,8%	185	100	668	16,24%
Milchsäure	10	-1,2%	0,9%	5,4%	-2,2%	0,8%	5,5%	0,6%	5,5%	-2,2%	13	10	50	13,94%
*Saccharin	0,3	-3,3%	3,9%	8,5%	-8,1%	3,6%	11,9%	-7,7%	4,6%	10,7%	104	50	400	27,95%*
Saccharose	25	-7,7%	5,3%	3,5%	-7,8%	5,1%	3,9%	-7,7%	5,8%	3,8%	95	50	340	22,34%
*Vanillin	0,2	-8,8%	3,0%	10,0%	-9,9%	2,6%	10,2%	-12,6%	2,6%	13,6%	19	10	70	34,53%*

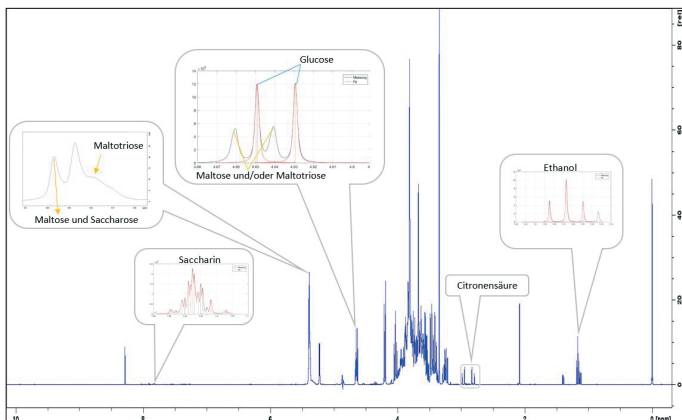


Abb. 1: <sup>1</sup>H-NMR-Spektrum einer Hartkaramell-Probe.

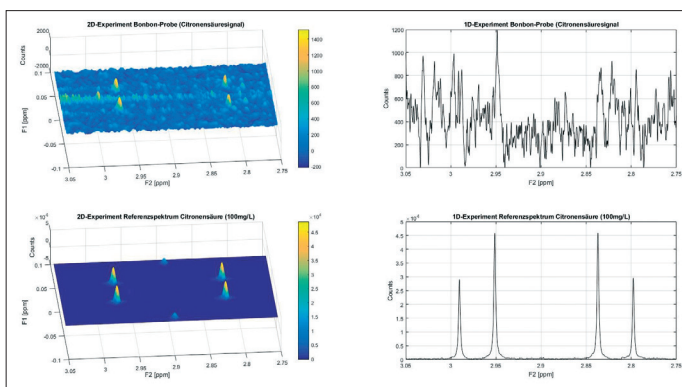


Abb. 2: oben: Citronensäure-Spektrum einer Hartkaramell-Probe; unten: Citronensäure-Referenzspektrum (Vgl. 1D- / 2D-Experiment).

Analyten liegen größtenteils in verschiedenen Bereichen des Spektrums, sodass Probleme mit sich überlagernden Signalen wenig ausgeprägt sind.

Das qNMR-Screening sollte eine schnelle erste Überprüfung der Richtigkeit und Vollständigkeit von Kennzeichnungselementen, wie Zutatenverzeichnis und Nährwertdeklaration, ermöglichen. Auch der Nachweis unzulässiger oder nicht deklarerter Zutaten ist eine lohnende Anwendung des qNMR-Screenings. Abweichungen, die im Rahmen der NMR-Untersuchung auffallen, können dann gezielt mit weiteren Untersuchungsmethoden verifiziert werden. So reduziert sich der zuvor genannte Aufwand in Bezug auf Personal, Geräte, Verbrauchsmaterial und Zeit erheblich. Nicht bei jeder Probe muss das gesamte Methodenspektrum zur Anwendung kommen. Es werden nur gezielte Untersuchungen durchgeführt.

### Experimentelle Durchführung

Süßwaren sind eine sehr heterogene Lebensmittelgruppe, für deren Herstellung verschiedene Inhaltsstoffe zum Einsatz kommen. Die unterschiedliche Konsistenz und die damit verbundenen Matrixeffekte sind bei der Untersuchung zu beachten. Bei der Probenvorbereitung werden die zu untersuchenden Süßwarenproben daher in eine der folgenden Unterkategorien eingeteilt: Hartkaramellen, Fruchtgummis oder Kaugummi.

- Einwaage von 5 g ggfs. homogenisiertem oder zerkleinertem Probenmaterial
- Lösen der Probe in 50 mL Bidest-Wasser (Hartkaramellen direkt), über Nacht im Schüttelwasserbad (Fruchtgummis Raumtemperatur, Kaugummi 40 °C)
- Zentrifugieren von 1,7 mL Probenlösung bei 10.000 U/min und anschließende Mikrofiltration des Überstandes (H-PTFE-Membran, 0,20 µm Porosität)
- 600 µL des Filtrats werden mit 100 µL Phosphatpuffer (10 mL Bidest-Wasser + 7,5 g NaH<sub>2</sub>PO<sub>4</sub> + 1000 mg H<sub>3</sub>PO<sub>4</sub> 85%-ig) auf einen pH-Wert von 2,95 ± 0,25 eingestellt und mit 70 µL TSP-Lösung (10 mg TSP/mL D<sub>2</sub>O; 3-(Trimethylsilyl)-propionsäure-Natriumsalz (TSP) als Referenzsignal zur Normierung der pH-Wert-abhängigen chemischen Verschiebung) versetzt
- 600 µL dieser Messlösung werden in ein NMR-Tube überführt

Tab. 2: Vergleichsmessungen organische Säuren NMR und HPLC: ABW = Abweichung bezogen auf das HPLC-Ergebnis [(NMR-HPLC)/HPLC]; \*Fumarsäure: Manuelle Auswertung, da Analyt nicht valide.

Organische Säuren															
Proben	Citronensäure [mg/kg]			Milchsäure [mg/kg]			Äpfelsäure [mg/kg]			Essigsäure [mg/kg]			*Fumarsäure [mg/kg]		
	NMR	HPLC	ABW	NMR	HPLC	ABW	NMR	HPLC	ABW	NMR	HPLC	ABW	NMR	HPLC	ABW
Fruchtgummis	10103	11479	-12%	54	62	-14%	< n.n.	< n.n.	-	< n.n.	< n.n.	-	< n.n.	< n.n.	-
Fruchtgummis	8102	9155	-11%	4253	3999	6%	< n.n.	< n.n.	-	101	119	-15%	< n.n.	< n.n.	-
Fruchtgummis	12583	14696	-14%	1565	1335	17%	9591	8505	13%	-	-	-	69	61	13%
Hartkaramellen	8755	9980	-12%	3522	3742	-6%	< n.n.	< n.n.	-	< n.n.	< n.n.	-	< n.n.	< n.n.	-
Fruchtgummis	5916	6679	-11%	2208	2474	-11%	< n.n.	< n.n.	-	< n.n.	< n.n.	-	< n.n.	< n.n.	-
Hartkaramellen mit Füllung	60	< n.n.	-	16686	18411	-9%	< n.n.	< n.n.	-	< n.n.	< n.n.	-	< n.n.	< n.n.	-
Fruchtgummis	10289	11561	-11%	-	-	-	< n.n.	< n.n.	-	-	-	-	< n.n.	< n.n.	-

Tab. 3: Vergleichsmessungen Zucker, Konservierungsstoffe und Süßungsmittel: ABW = Abweichung bezogen auf das HPLC-Ergebnis [(NMR-HPLC)/HPLC]; \*Sorbinsäure: Nicht validierter Analyt aufgrund der schlechten Löslichkeit in Wasser. Analyt wird in der Automation ausgewertet und zeigt im Vergleich zu den HPLC-Daten reproduzierbare Ergebnisse.

Proben	Zucker									Konservierungsstoffe				Süßungsmittel			
	Fructose [mg/L]			Glucose [mg/L]			Saccharose [mg/L]			Proben	*Sorbinsäure [mg/L]			Proben	Acesulfam-K [mg/L]		
	NMR	HPLC	ABW	NMR	HPLC	ABW	NMR	HPLC	ABW		NMR	HPLC	ABW		NMR	HPLC	ABW
Hartkaramellen	13428	10778	25%	79987	78452	2%	545500	535624	2%	flüssige Süßware	27	30	-10%	Hartkaramellen	484	420	15%
Hartkaramellen	15762	12160	30%	73650	69533	6%	588419	579815	1%	flüssige Süßware	129	133	-3%	Kaugummis	1024	1066	-4%
-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	Hartkaramellen	233	198	17%

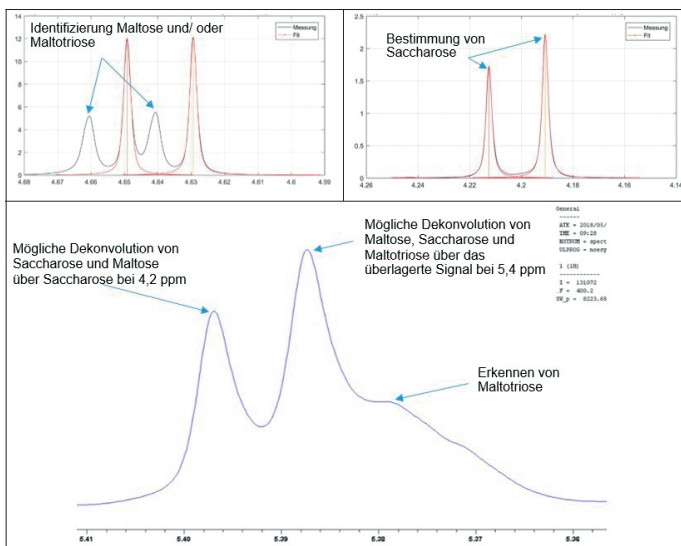


Abb. 3: Anwendung einer möglichen Dekonvolution am Beispiel Maltose, Maltotriose und Saccharose. Maltose bzw. Maltotriose sind typische Di- bzw. Trisaccharide, welche nach der Verzuckerung von Stärke in Sirupen nachweisbar sind.

Die <sup>1</sup>H-Messung erfolgt mit einem Bruker Avance III 400 MHz Ultrashield NMR-Spektrometer unter Nutzung eines 5 mm PABBI <sup>1</sup>H/D-BB Z-Grd Breitband-Invers Probenkopfs mit automatischem Tuning/Matching und Shim unter folgenden Bedingungen:

- 1D-Experiment mit Lösungsmittelunterdrückung *noesygprr1d* mit Zeitdomäne (Time Domain) 65536, 4 Dummy Scans, Summation von 32 Scans, spektrale Breite 20,55 ppm, Aufzeichnung des FID (Free Induction Decay) über 3,98 s bei einer Empfindlichkeit (Receiver Gain) von 16.
- 2D-Experiment mit Lösungsmittelunterdrückung *jresgprraf* mit Time Domain 8192 in F2 (Skala der chemischen Verschiebung) und 40 in F1 (Skala der Kopplungen), 16 Dummy Scans, Summation von 8 Scans, spektrale Breite 16,70 ppm in F2 und 0,19 ppm in F1, Receiver Gain 16.

Die Messtemperatur für alle Spektren beträgt 300 K (± 0,2 K) und die Korrektur der Phasen und Basislinien erfolgt über die Bruker-Software TopSpin 3.2.

### Datenauswertung, Validierung und Vergleichsmessungen

Um die Effektivität der Screening-Methode mittels NMR weiter zu steigern, ist neben einer schnellen Probenvorbereitung auch eine einfache und leistungsfähige Datenauswertung notwendig. Die Vielzahl der Analyten, die gleichzeitig bestimmt werden, sowie die pH-Wert-abhängige chemische Verschiebung der Analytsignale führt bei der Auswertung oftmals zu Fehlern und beansprucht bei einer manuellen Auswertung sehr viel Zeit. Aus diesem Grund wurde im Zuge der Etablierung der Süßwaren-Analytik mittels <sup>1</sup>H-NMR auch auf eine Erweiterung der automatisierten Auswertung der NMR-Spektren hingearbeitet. Hierbei war die Aufgabe, die einzelnen Spektren zu 95 % automatisiert richtig zu qualifizieren und zu quantifizieren. Die qualitative Auswertung erfolgt dabei anhand des 2D-Spektrums und die Quantifizierung über das 1D-Spektrum. Mit der automatisierten Auswertung können pH-Wert-abhängige Shifts der Analytsignale von bis zu 0,25 pH-Einheiten ausgeglichen werden.

Für die Validierung wurden vier unterschiedliche Proben mit 14 Analyten in den in Süßwaren zu erwartenden Konzentrationen und unter Berücksichtigung der zulässigen Höchstmengen gespiket. Abbildung 1 zeigt ein typisches Spektrum einer Süßwaren-Probe. Die Aufarbeitung erfolgte von zwei verschiedenen Mitarbeitern an unterschiedlichen Tagen. Jede Probe wurde in einer Doppelbestimmung vermessen. Die Ergebnisse und daraus berechneten Validierungs- und Verfahrenskennndaten sind in Tabelle 1 dargestellt. Die Nachweis- und Bestimmungsgrenzen wurden mittels des Signal-/Rauschverhältnisses der Validierungsproben abgeleitet. Die Auswertung der Spektren erfolgte automatisiert über ein im CVUA-OWL programmiertes MatLab-Skript, basierend auf einem vom CVUA Karlsruhe programmierten Skript, welches durch Subskripte der Firma Bruker ergänzt wird. Die Validierung der Süßwaren zeigt, dass das eingesetzte Auswerteskript die Spektren zu 95 % richtig automatisiert auswertet. Da in der Validierung der alkoholfreien Erfrischungsgetränke das Absolutverfahren qNMR bereits ausreichend valide Ergebnisse erzielt hat (siehe [6]), wurde auf eine erneute Prüfung der Linearität der Konzentration gegenüber den Integralflächen in der Validierung der Süßwaren verzichtet. Mittels der etablierten Routineverfahren wurden Vergleichsmessungen zur qNMR durchgeführt (s. Tab. 2 und 3).

Bei der Aufnahme von 1D-Experimenten kommt es auch bei den Süßwaren zu Überlagerungen von Analytsignalen im Spektrum, wodurch einige Informationen z. B. die Kopplungskonstante nicht mehr eindeutig bestimmt werden können. 2D-Korrelationspektren stellen eine Möglichkeit zur Verbesserung der Auflösung der Analytsignale dar, sodass diese Informationen wieder zugänglich werden.

Wie anhand der Validierungsergebnisse zu erkennen ist, ermöglicht die Nutzung der 2D-Experimente teilweise deutlich niedrigere Nachweisgrenzen (s. Abb. 2). Im 1D-Experiment ist das Citronensäure-Signal nicht vom Grundrauschen zu unterscheiden, da die Konzentration zu gering ist. Es kann keine gesicherte Aussage über das Vorhanden- oder Nicht-Vorhandensein des Analyten getroffen werden. Im 2D-Spektrum jedoch ist Citronensäure eindeutig und signifikant erkennbar und somit ist sowohl eine qualitative Aussage gerechtfertigt, als auch eine quantitative Abschätzung des Gehaltes im Vergleich mit bekannten Referenzen möglich.

**Fazit**

Das Screening von Süßwaren mittels qNMR ermöglicht die zeit- und ressourcenschonende Bestimmung von derzeit 14 Analyten, darunter Zucker, Süßungsmittel, Konservierungsstoffe, organische Säuren und Aromastoffe. Die NMR-Spektren bieten sowohl qualitative als auch quantitative Informationen im Hinblick auf die Zusammensetzung von Süßwaren. Die Auswertung von 2D-Spektren bietet die Möglichkeit zusätzlicher qualitativer Informationen, beispielsweise aufgrund niedriger Nachweisgrenzen im Vergleich zu 1D-Experimenten.

Die Qualität der Ergebnisse ist auch unter Berücksichtigung der erweiterten Messunsicherheit als gut einzustufen, was die Routinetauglichkeit der Methode zeigt. Die Methode erweist sich aufgrund hoher Reproduzierbarkeit als robust und valide, auch im Vergleich mit Standardverfahren. Das beschriebene qNMR-Screening-Verfahren für Süßwaren gehört zu den seit Sommer 2018 durch die DAkkS flexibel akkreditierten <sup>1</sup>H-NMR-Verfahren des CVUA-OWL und wird seitdem routinemäßig durchgeführt. Die einfache Probenvorbereitung und automatisierte Auswertung ermöglichen dabei eine kurze Bearbeitungszeit.

**Ausblick**

Ausgehend von den bisherigen positiven Ergebnissen soll das Potential der vorgestellten Methode weiterentwickelt und ausgebaut werden. Ein wichtiges Ziel ist die kontinuierliche und ggf. anlassbezogene Erweiterung des Analytspektrums. Prioritär sollen hier die Farbstoffe einbezogen werden, welche gemäß VO (EG) 1333/2008 zugelassen sein müssen und zum Teil einer Höchstmengenbeschränkung unterliegen. Zudem ist bei Verwendung bestimmter Farbstoffe die Anbringung eines Warnhinweises obligatorisch. In der Vergangenheit sind im CVUA-OWL immer wieder Süßwaren aufgrund der Zugabe von nicht zugelassenen Farbstoffen, Höchstmengenüberschreitungen oder falsch bzw. nicht korrekt angegebener Farbstoffe als auffällig beurteilt worden. Auch soll die Methode um weitere Zucker wie Maltose, Maltotriose oder Lactose erweitert werden.

Im Hinblick auf die Analyse der in den Süßwaren enthaltenen Zucker wird zudem die Weiterentwicklung der automatisierten Auswertung angestrebt mit besonderem Fokus auf Dekonvolution. Dieser Begriff bezeichnet eine mathematische Operation, die es erlaubt, sich überlagernde Signale anteilig zu berechnen. Gerade im Bereich zwischen 3 und 4 ppm, dem sog. „Zuckerwald“, führt dies in der Praxis zu Herausforderungen, da sich Signale aufgrund ähnlicher chemischer Verschiebung im Spektrum überlagern. Ein Beispiel hierfür sind die Signale von Maltose, Maltotriose und Saccharose bei 5,39 ppm (s. Abb. 3). Des Weiteren wird angestrebt, durch die Mitarbeit in der Next-NMR-AG und § 64 LFGB AG „NMR“ die quantitative <sup>1</sup>H-NMR-Methode zur Bestimmung der Inhalts- und Zusatzstoffe von Süßwaren zu standardisieren.

**Danksagung**

Die Autoren danken herzlich ihren technischen Mitarbeiterinnen Elvira Nährung, Rita Markwa, Bettina Klöpfer, Doreen Tilly und Diane Lewin für ihre Arbeit im Rahmen der experimentellen Durchführung zur Methoden-etablierung.

[1] Bundesverband der Deutschen Süßwarenindustrie (BDSI); Pro-Kopf-Verbrauch von Süßwaren 2019; online abrufbar unter: [https://www.bdsi.de/index.php?elD=tx\\_cms\\_showpic&file=5594&md5=a4d3575f4c7b34fafa58f88f1fdf8973c3a4d177&parameters%5B0%5D=YTo00ntz0jU6indpZHRoljtz0jQ6ljgwMG0i03M6NjoiaGVpZ2h0jtz0jQ6ljYw&parameters%5B1%5D=MG0i03M6NzoiYm9keVRhZyl7czo0MT0iPGJvZGkgc3R5bGU9Im1hcndpbjowOyBi&parameters%5B2%5D=YWNrZ3JvdW5kOiNmZmY7Jj4i03M6NDoid3JhcC17czo2NzoiPG0iEgaHJlZj0iamF2&parameters%5B3%5D=YXNjcmlwdDpjbg9zZSgpOyl%2BIHwgPC9hPi17fQ%3D%3D](https://www.bdsi.de/index.php?elD=tx_cms_showpic&file=5594&md5=a4d3575f4c7b34fafa58f88f1fdf8973c3a4d177&parameters%5B0%5D=YTo00ntz0jU6indpZHRoljtz0jQ6ljgwMG0i03M6NjoiaGVpZ2h0jtz0jQ6ljYw&parameters%5B1%5D=MG0i03M6NzoiYm9keVRhZyl7czo0MT0iPGJvZGkgc3R5bGU9Im1hcndpbjowOyBi&parameters%5B2%5D=YWNrZ3JvdW5kOiNmZmY7Jj4i03M6NDoid3JhcC17czo2NzoiPG0iEgaHJlZj0iamF2&parameters%5B3%5D=YXNjcmlwdDpjbg9zZSgpOyl%2BIHwgPC9hPi17fQ%3D%3D)

[2] Belton, P. S.; Colquhoun, I. J.; Kemsley, E. K.; Delgadillo, I.; Roma, P.; Dennis, M. J.; Sharman, M.; Holmes, E.; Nicholson, J. K.; Spraul, M.; Application of chemometrics to <sup>1</sup>H NMR spectra of apples juices: discrimination between apple varieties. *Food Chem.* 1998, 61 (1/2), 207–2213.

[3] Lachenmeier, D. W.; Frank, W.; Humpfer, E.; Schäfer, H.; Keller, S.; Mörtter, M.; Spraul, M. Quality control of beer using Highresolution Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy and Multivariate Analysis. *Eur. Food Res. Technol.* 2005, 220, 215–221.

[4] Arvanitoyannis, I. S.; Katsota, M. N.; Psarra, E. P.; Soufleros, E. H.; Kallithraka, S. Application of quality control methods for assessing wine authenticity: Use of multivariate analysis (chemometrics). *Trends Food Sci. Technol.* 1999, 10 (10), 321–336.

[5] Maes, P.; Monakhova, Y. B.; Kuballa, T.; Reusch, H.; Lachenmeier, D.; Qualitative and quantitative control of Carbonated Cola Beverages Using <sup>1</sup>H NMR spectroscopy. *J. Agric. Food Chem.* 2012, 60, 2778-2784.

[6] Teipel, J.; Romoth, M.; Behrens, W.; Ackermann, S.; Kuballa, T.; Lachenmeier, D.W.; Gut erfrischt oder schal abserviert? Effizientes Screening alkoholfreier Erfrischungsgetränke mittels quantitativer Kernspinresonanzspektrometrie (qNMR); chrom+food Forum 09 2017, 21-24.



**Autoren | Kontakt**

**Wiebke Behrens | Sabrina Schott | Michael Romoth  
Philipp-Marius Zech**

CVUA Ostwestfalen-Lippe | Westerfeldstraße 1 | 32758 Detmold  
www.cvua-owl.de