

# Aromaprofil-Analyse: Fallstudie zur Lagerstabilität von Orangensaft

Artikel vom 2. Februar 2021  
 Laborausstattung

Für eine Fallstudie wurden von Winopal Orangensäfte unterschiedlichen Abfülldatums mit einer elektronischen Nase untersucht. Ziel dabei war es, die Veränderungen im Aromaprofil des Produktes über den Zeitraum der Lagerung darzustellen.



Auch kleinste Veränderungen im Aromaprofil während der Lagerung lassen sich mit der elektronischen Nase zuverlässig identifizieren. Bilder: Winopal

Für den Versuch haben dankenswerterweise zwei Hersteller Rückstellmuster über sieben Monate von jeweils einem Produkt zur Verfügung gestellt. Zur Untersuchung wurde das System »Heracles Neo« des französischen Herstellers Alpha Mos eingesetzt. Das Gerät wurde speziell für den Einsatz in der Getränke- und Lebensmittelindustrie entwickelt und verbindet die Funktionen einer elektronischen Nase mit der sehr schnellen »Fast Gas Chromatography«. Das System besteht aus zwei parallel

geschalteten, kurzen Säulen unterschiedlicher Polarität, die mit Flammenionisationsdetektoren (FID) arbeiten. Dieser Aufbau ermöglicht Analysezeiten von durchschnittlich 45 bis 120 Sekunden – statt klassischerweise 45 Minuten und länger – mit einer Sensitivität im ppb-Konzentrationsbereich. Die hohe Geschwindigkeit und die eingebaute »pre-concentration trap« ermöglichen es, auch stark flüchtige Verbindungen und geruchslose Gase zuverlässig zu identifizieren und vollständige Aromaprofile sowie umfassende Analysen von chemischen Zusammensetzungen in einem einzigen Testdurchlauf zu erstellen. Die Software und die zugehörige Datenbank sind ebenfalls speziell auf den Einsatz in der Getränke- und Lebensmittelindustrie ausgelegt. Das verwendete Statistikmodul ermöglicht beispielsweise den automatischen Abgleich vollständiger Chromatogramme mit eigens definierten Standards und Toleranzen, um schnell und automatisch Stichproben bewerten zu können.

## Erste Anhaltspunkte für die Qualitätssicherung

Um festzustellen, ob sich zwischen den einzelnen Proben desselben Herstellers überhaupt Unterschiede messen lassen, wurde im ersten Schritt eine Hauptkomponentenanalyse (Principal Component Analysis, PCA) durchgeführt.

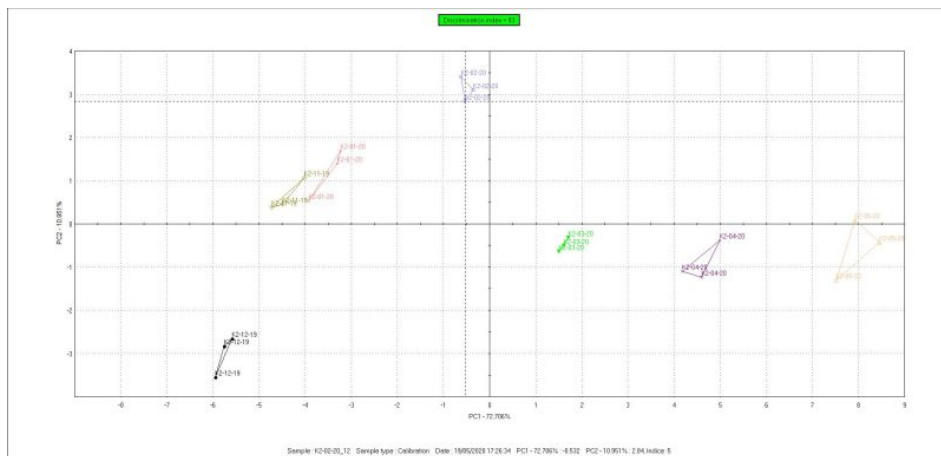


Abbildung 1: Ergebnisse der PCA für den Orangensaft eines Herstellers (Hersteller A).

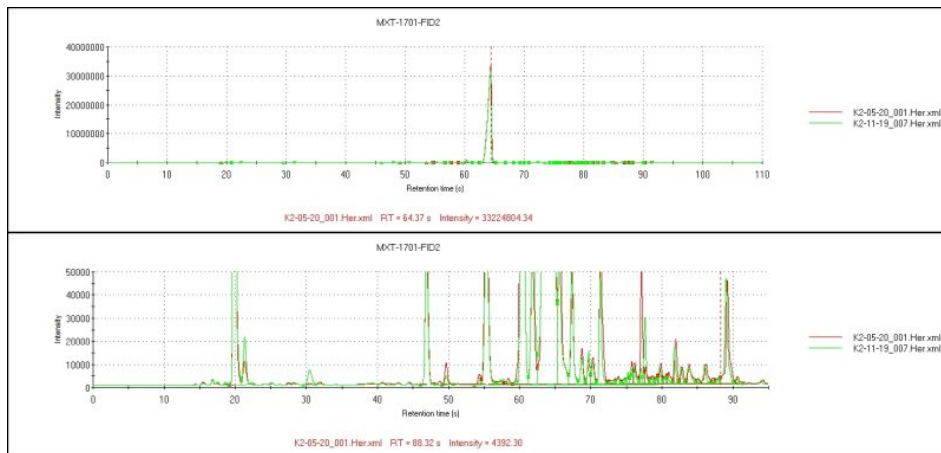


Abbildung 2: Oben Chromatogramm ohne Zoom, unten Chromatogramm mit Zoom (beide Diagramme Hersteller A).

Die PCA liefert insbesondere in der Qualitäts-sicherung einen guten ersten

Anhaltspunkt, da sie schnell erkennen lässt, ob sich relevante Unterschiede zwischen zwei oder mehr Messungen feststellen lassen. Dazu wurde jede einzelne Probe drei Mal vermessen, um einen Mittelwert sowie Hinweise auf eventuelle Fehler in der Vorbereitung zu erhalten. Die Ergebnisse wurden anschließend für eine schnelle Übersicht grafisch dargestellt (Abb. 1). Die Abstände der Punkte im Koordinatensystem geben dabei die statistischen Abweichungen zwischen den gemessenen Proben wieder.

Je näher sich zwei Punkte sind, desto geringer sind die gemessenen Unterschiede im Chromatogramm.

Die Auswertung der PCA zeigt zunächst, dass alle drei Einzelmessungen derselben Probe jeweils nah beieinander liegen, was auf eine gute Reproduzierbarkeit der Ergebnisse schließen lässt. Lagen die Werte weiter auseinander, wäre dies beispielsweise ein Hinweis auf Verunreinigungen oder eine (zu) geringe Homogenität der Probe. Außerdem sind die Dreiergruppen gut verteilt, was auf deutlich erkennbare Unterschiede zwischen den sieben Proben und somit auch auf eine Veränderung des Produktes über den Zeitraum der Lagerung schließen lässt.

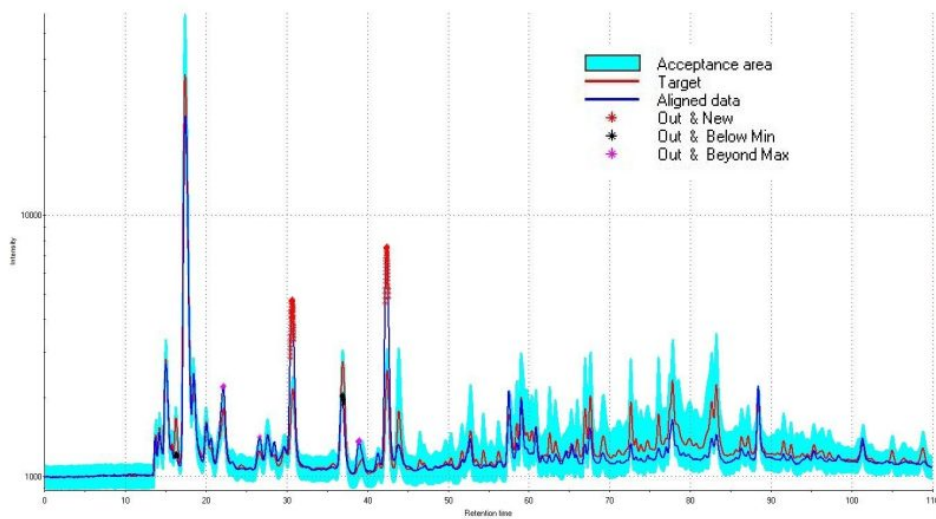
## **Vergleich und Bewertung der Chromatogramme**

Zur genaueren Untersuchung wurden im zweiten Schritt die Chromatogramme verglichen und analysiert – für eine bessere Übersichtlichkeit sind hier nur die zwei Kurvenverläufe der frischesten und der ältesten Probe (ausgehend vom Abfülldatum) abgebildet. Abbildung 2 zeigt im oberen Teil die vollständige Kurve bei entsprechend geringer Auflösung. Hier sind noch keine Unterschiede erkennbar, was allerdings bei dieser Auflösung zu erwarten ist. Zoomt man stärker hinein, lassen sich trotz insgesamt ähnlicher Verläufe einige deutliche Unterschiede erkennen. Was genau diese Unterschiede für das Aroma bedeuten, lässt sich an dieser Stelle aber lediglich vermuten. Es ist zwar nachvollziehbar, welche Stoffe nun präsenter bzw. dominanter sind, und diese Stoffe lassen sich über die integrierte Datenbank »AroChemBase« auch bestimmten Aromaprofilen zuweisen. Jedoch bedeutet ein messbarer Unterschied nicht zwangsläufig, dass sich auch das Aroma signifikant verändert. Ob und wie stark diese Abweichung wahrgenommen werden kann, muss von einem Sensorik-Panel untersucht werden.

Sensorik-Panels werden durch die elektronische Nase grundsätzlich nicht ersetzt, sondern ergänzt und im Idealfall gleichzeitig entlastet. So kann das Gerät zum Beispiel auch zur Untersuchung potenziell gesundheitsgefährdender Substanzen eingesetzt werden oder Stoffe identifizieren, die der Mensch nicht wahrnehmen kann, zum Beispiel Lösemittel aus Kunststoffverpackungen.

## **Automatisierung von Stichprobenvergleichen**

Die Chromatogramme zeigen, dass die Dauer der Lagerung Einfluss auf das Aromaprofil der Säfte hat und sich dies deutlich abbilden lässt. Die Beurteilung des Einflusses muss nach wie vor durch ein Sensorik-Panel erfolgen.



Beispiel einer »Sensory ID«-Kurve.

Mithilfe des Statistikmoduls »Sensory ID« lässt sich dieser Abgleich dann, sobald er einmal von den Mitarbeitern geleistet wurde, fast vollständig automatisieren. Dazu wird vom Sensorik-Panel ein sogenannter Gold-Standard definiert: Eine perfekte Probe, die exakt dem gewünschten Aroma entspricht, wird vermessen und das zugehörige Chromatogramm als Referenz gespeichert. Weitere Proben, die zwar in den Messungen leicht vom Gold-Standard abweichen, vom Sensorik-Panel aber als ebenso gut bewertet werden, werden hinzugefügt, um einen Toleranzbereich zu definieren.

Alle zukünftigen Messungen des Produktes werden mit diesem Chromatogramm abgeglichen und dahingehend untersucht, ob sich der Kurvenverlauf der Stichprobe im Toleranzbereich befindet. Die Ergebnisse werden als einfaches »passed« oder »failed« ausgegeben. Damit kann viel Zeit in der Qualitätssicherung eingespart werden und das Sensorik-Panel wird entlastet. Gleichzeitig obliegt die Interpretation der Ergebnisse immer noch den Mitarbeiterinnen und Mitarbeitern.

## Fazit

Die Untersuchungen für diese Fallstudie haben gezeigt, dass sich auch kleinste Veränderungen im Aromaprofil während der Lagerung eines Produktes mithilfe der elektronischen Nase zuverlässig identifizieren lassen. Welche Bedeutung diese Veränderungen für den Geschmack und damit die Handelsfähigkeit des Produktes haben, muss nach wie vor von einem Sensorik-Panel untersucht werden – allerdings kann dieses, ebenso wie die Qualitätssicherung, bei zukünftigen Untersuchungen durch Analysegeräte stark entlastet werden.

Mit Statistikmodulen wie »Sensory ID« können Stichproben schnell analysiert oder große Probenmengen über Nacht getestet werden. Im Anschluss liegt eine Auswertung vor, die der Qualitätssicherung direkt auflistet, welche Proben einwandfrei sind und welche einer genaueren Prüfung bedürfen. Anstatt jede einzelne Stichprobe vollständig untersuchen zu müssen, können sich die Mitarbeiterinnen und Mitarbeiter so auf die relevanten Fälle konzentrieren. Darüber hinaus eignet sich »Heracles Neo« durch die technischen Voraussetzungen sowie durch die Software und die angeschlossene Datenbank, mit der eine Vielzahl der Moleküle direkt im Chromatogramm bestimmt werden kann, auch für Anwendungen in Forschung und Entwicklung.

---

**Hersteller aus dieser Kategorie**

---

**Anton Paar Germany GmbH**

Hellmuth-Hirth-Str. 6

D-73760 Ostfildern

0711 72091-0

[info.de@anton-paar.com](mailto:info.de@anton-paar.com)

[www.anton-paar.com](http://www.anton-paar.com)

[Firmenprofil ansehen](#)

---

**Dr. Möller & Schmelz GmbH**

Robert-Bosch-Breite 15

D-37079 Göttingen

0551 66708

[info@moeller-schmelz.de](mailto:info@moeller-schmelz.de)

[www.moeller-schmelz.de](http://www.moeller-schmelz.de)

[Firmenprofil ansehen](#)

---

**Kern & Sohn GmbH**

Ziegelei 1

D-72336 Balingen-Frommern

07433 9933-0

[info@kern-sohn.com](mailto:info@kern-sohn.com)

[www.kern-sohn.com](http://www.kern-sohn.com)

[Firmenprofil ansehen](#)

---