



Application Note AN-NIR-105

Analyse von geröstetem und gemahlenem Kaffee mittels Nahinfrarotspektroskopie

Schnelle Bestimmung von Koffein, Wasseraktivität und Feuchtigkeit

Durch die kontinuierliche Analyse gerösteter Kaffeebohnen können Röstereien ihre Rösteinstellungen verbessern, was zu einer höheren Energieeffizienz und konsistenteren Endprodukten führt. Der Röstgrad beeinflusst nicht nur den Geschmack, auch der Koffeingehalt kann sich verändern. Herkömmliche Analysemethoden wie HPLC (Hochleistungsflüssigkeitschromatographie) zur Bestimmung der Koffeinkonzentration erfordern technische Kenntnisse und chemische Reagenzien und benötigen mehrere Minuten bis Stunden, um die

Ergebnisse zu erhalten.

Im Gegensatz dazu ist die Nahinfrarotspektroskopie (NIRS) eine schnelle und chemikalienfreie Alternative zur Koffein-, Wasseraktivitäts- und Feuchtigkeitsanalyse in gerösteten Kaffeebohnen und gemahlenem Kaffee. Die NIRS-Lösung ist einfach zu benutzen und erfordert keine Probenvorbereitung. Diese Analysegeräte können in der Nähe des Rösters oder in einem Qualitätskontrolllabor betrieben werden.

EXPERIMENTELLE GERÄTE

Bis zu 35 Proben gerösteter gemahlener Kaffeebohnen wurden auf einem Metrohm DS2500 Solid Analyzer mit dem DS2500 Holder und NIRS-Miniprobebechern analysiert (**Abbildung 1**). Die Proben wurden für die Analyse im diffusen Reflexionsmodus in die NIRS-Miniprobebecher positioniert. Die Datenerfassung und die Entwicklung von Vorhersagemodellen wurden mit dem Softwarepaket Vision Air Complete durchgeführt

(**Tabelle 1**).

Referenzwerte für Koffein, Wasseraktivität und Feuchtigkeit wurden mit den jeweiligen Primärmethoden ermittelt. Die Koffeinanalyse folgte der Richtlinie ISO 20481 und wurde mit einem Ionenchromatographen (IC) durchgeführt, die Bestimmung des Wassergehalts erfolgte nach der Norm ISO 18787 und die Feuchtigkeitsbestimmung erfolgte nach DIN 10772-1.

Tabelle 1. Übersicht über die Hardware- und Softwareausstattung.

| Equipment | Artikelnummer |
|-------------------------|---------------|
| DS2500 Solid Analyzer | 2.922.0010 |
| DS2500 Halter | 6.7430.040 |
| NIRS Mini-Probenbecher | 6.7402.030 |
| Vision Air 2.0 Complete | 6.6072.208 |



Abbildung 1. Ein Metrohm DS2500 Feststoffanalysator mit gemahlene Kaffeebohnen in einem NIRS-Miniprobebecher.

ERGEBNIS

Die erhaltenen Vis-NIR-Spektren (**Abbildung 2**) wurden verwendet, um Vorhersagemodelle für die verschiedenen Referenzparameter zu erstellen. Korrelationsdiagramme, die den Zusammenhang

zwischen der Vis-NIR-Vorhersage und den Referenzwerten darstellen, sind in dargestellt **Abbildungen 3–5** zusammen mit den jeweiligen Figures of Merit (FOM).

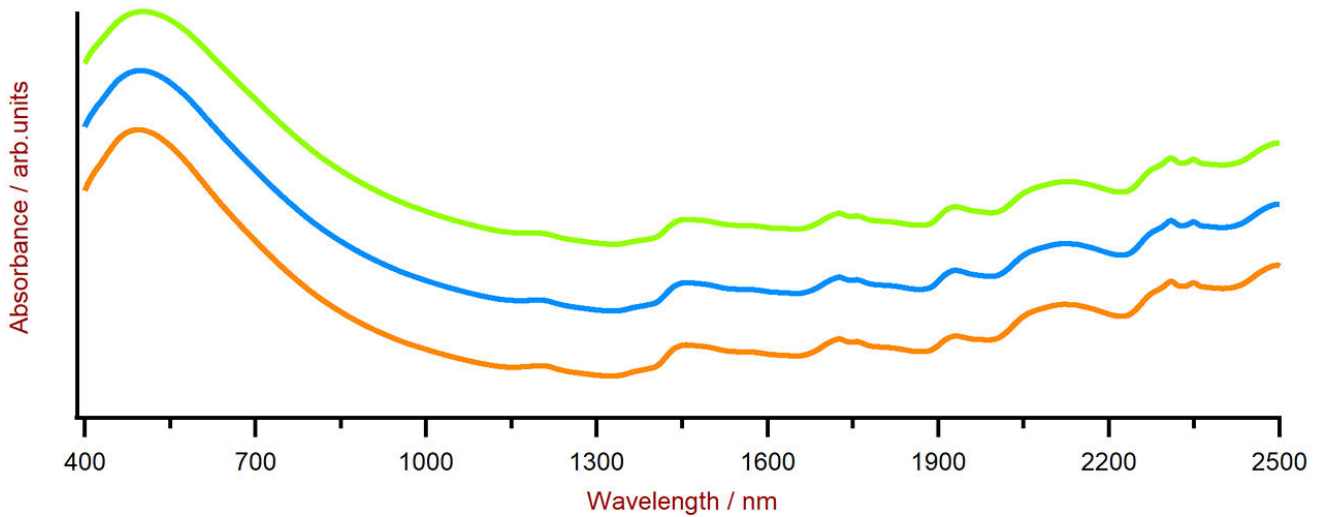
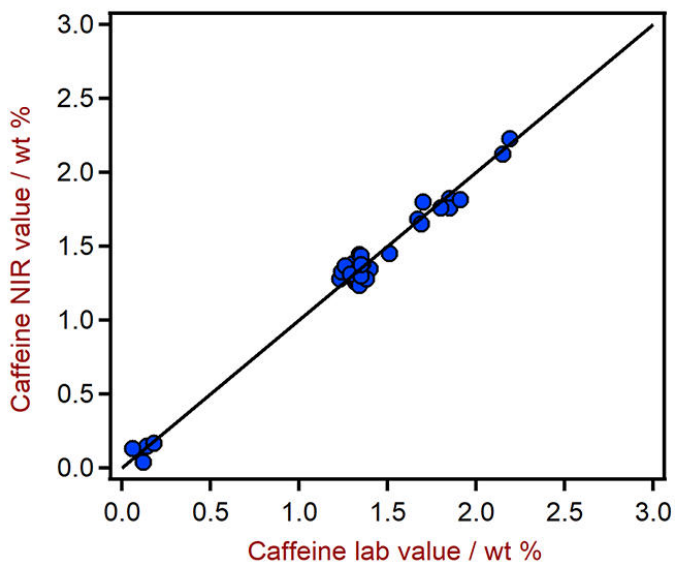


Abbildung 2. Auswahl von Vis-NIR-Spektren von gerösteten und gemahlten Kaffeebohnenproben. Die Daten wurden mit einem DS2500 Solid Analyzer ermittelt. Zur Visualisierung wurde ein Spektrenoffset angewendet.

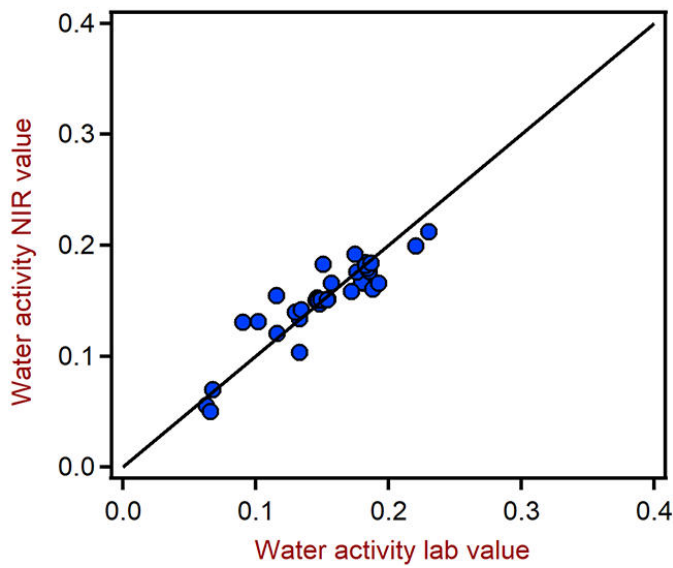
ERGEBNIS KOFFEIN IN RÖSTKAFFEE



| Figures of Merit | Value |
|------------------------------------|------------|
| R^2 | 0.986 |
| Standard Error of Calibration | 0.0742 wt% |
| Standard Error of Cross-Validation | 0.0721 wt% |

Abbildung 3. Korrelationsdiagramm und die jeweiligen FOMs für die Vorhersage von Koffein in gerösteten gemahlten Kaffeeproben mit einem DS2500 Solid Analyzer. Die Laborwerte wurden nach den Richtlinien der ISO 20481 ermittelt.

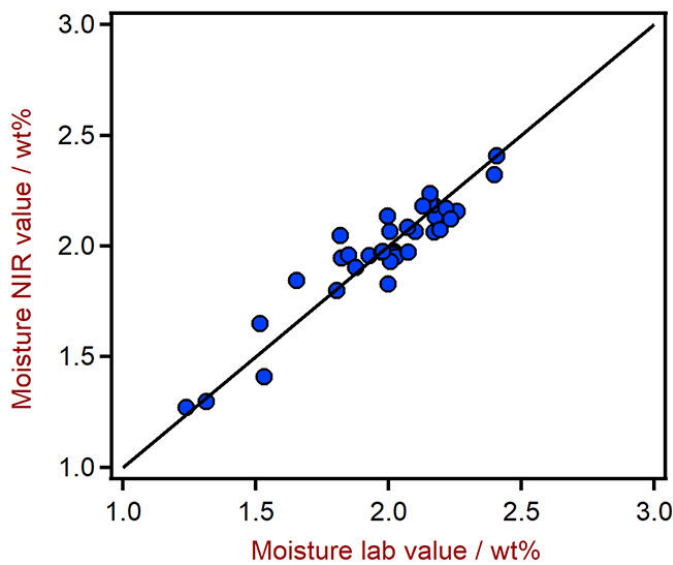
ERGEBNIS WASSERAKTIVITÄT IN RÖSTKAFFEE



| Figures of Merit | Value |
|------------------------------------|-------|
| R ² | 0.82 |
| Standard Error of Calibration | 0.018 |
| Standard Error of Cross-Validation | 0.021 |

Abbildung 4. Korrelationsdiagramm und die jeweiligen FOMs für die Vorhersage der Wasseraktivität in gerösteten gemahlene Kaffeeproben mit einem DS2500 Solid Analyzer. Die Laborwerte wurden nach den Richtlinien der ISO 18787 ermittelt.

ERGEBNIS FEUCHTIGKEIT IN RÖSTKAFFEE



| Figures of Merit | Value |
|------------------------------------|-----------|
| R ² | 0.88 |
| Standard Error of Calibration | 0.099 wt% |
| Standard Error of Cross-Validation | 0.109 wt% |

Abbildung 5. Korrelationsdiagramm und die entsprechenden FOMs für die Vorhersage der Feuchtigkeit in gerösteten gemahlene Kaffeeproben mit einem DS2500 Solid Analyzer. Die Laborwerte wurden nach den Richtlinien der DIN 10772-1 ermittelt.

FAZIT

Diese Application Note zeigt die Machbarkeit der Nahinfrarotspektroskopie zur Analyse mehrerer Qualitätsparameter in geröstetem gemahlenem Kaffee. Ein NIRS-Analysegerät kann in einer einzigen Messung neben der Wasseraktivität und dem Feuchtigkeitsgehalt auch die Kaffeinkonzentration

(0,1–2,5 Gew.-%) bestimmen. Die Ergebnisse werden nicht nur in weniger als einer Minute geliefert, es sind auch keine chemischen Reagenzien für die Analyse erforderlich. Die Zeitersparnis durch den Einsatz von NIRS im Vergleich zu herkömmlichen Analysemethoden (**Tabelle 2**) ist immens.

Tabelle 2. Vergleich der Zeit bis zum Ergebnis für verschiedene Methoden zur Analyse von Kaffee.

| Parameter | Methode | Zeit zum Ergebnis |
|-----------------|--|---|
| Koffein | IC-System (ISO 20481) | 120 min (Probenvorbereitung und Messung) |
| Wasseraktivität | Wasseraktivitätssystem (ISO 18787) | 15 ... 30 min |
| Feuchtigkeit | Ofen – Trocknungsverlust (DIN 10772-1) | 13 Stunden (Probenvorbereitung und Messung) |

Internal references: AW NIR CH-0069-042023; AW

NIR CH-0070-042023

CONTACT

Metrohm Inula
Shuttleworthstraße 25
1210 Wien

office@metrohm.at

KONFIGURATION



DS2500 Solid Analyzer

Robuste Nahinfrarotspektroskopie für die Qualitätskontrolle im Labor sowie im Produktionsumfeld.

Der DS2500 Analyzer ist die bewährte, flexible Lösung für die Routineanalytik von Feststoffen, Cremes und optional auch Flüssigkeiten entlang der gesamten Produktionskette. Das robuste Design macht den DS2500 Analyzer unempfindlich gegen Staub, Feuchtigkeit, Vibrationen sowie Temperaturschwankungen und damit hervorragend geeignet für den Einsatz im rauen Produktionsumfeld.

Der DS2500 deckt den gesamten Spektralbereich von 400 bis 2500 nm ab und liefert in weniger als einer Minute genaue und reproduzierbare Ergebnisse. Der DS2500 Analyzer erfüllt die Anforderungen der pharmazeutischen Industrie und unterstützt durch die einfache Bedienung die Anwender in ihren täglichen Routineaufgaben.

Durch perfekt auf das Gerät abgestimmtes Zubehör werden bei jedem noch so herausfordernder Proben typ, wie z.B. grobkörnige Feststoffe wie Granulate oder halb fest-flüssige Proben wie Cremes, bestmögliche Ergebnisse erzielt. Bei Messungen von Feststoffen kann die Produktivität gesteigert werden durch Einsatz des MultiSample Cups, welches automatisierte Messungen in Serie von bis zu 9 Proben ermöglicht.