



Application Note AN-NIR-104

Analyse grüner Kaffeebohnen mittels Nahinfrarotspektroskopie

Zuverlässige Ergebnisse zu Dichte, Wasseraktivität und Feuchtigkeit in wenigen Sekunden

Rohe (grüne) Kaffeebohnen müssen vor der Verarbeitung zum Verzehr geröstet werden. Für Röster ermöglicht die kontinuierliche Analyse der Rohkaffeebohnen eine Verbesserung der Lagerverwaltung. Mithilfe dieser Informationen können Röster die Reihenfolge der zu verarbeitenden Chargen priorisieren und die Rösteeinstellungen für mehr Konsistenz und Energieeffizienz optimieren. Allerdings können der Zeitaufwand, der Aufwand und die etwas komplexen Arbeitsabläufe, die bei der Verwendung herkömmlicher Analysemethoden (z. B.

Densimeter, Wasseraktivitätsanalyatoren) erforderlich sind, eine Unannehmlichkeit sein.

Die Nahinfrarotspektroskopie (NIRS) ist eine schnelle Multiparameter-Analyseverfahren, die sich zur Analyse von Dichte, Wasseraktivität und Feuchtigkeitsgehalt grüner Kaffeebohnen eignet. Es sind weder Chemikalien noch Probenvorbereitung erforderlich, so dass NIRS problemlos im Lager, in der Nähe des Rösters oder in einem Qualitätskontrolllabor eingesetzt werden kann.

Bis zu 31 Proben grüner Kaffeebohnen wurden auf einem Metrohm DS2500 Feststoffanalysator mit dem DS2500-Halter und NIRS-Miniprobebechern analysiert (**Abbildung 1**). Für die Analyse im diffusen Reflexionsmodus wurden grüne Kaffeebohnen in die NIRS-Miniprobebecher gegeben. Die Datenerfassung und die Entwicklung von Vorhersagemodellen wurden mit dem Softwarepaket Vision Air Complete durchgeführt (**Tabelle 1**).

Referenzwerte für Dichte, Wasseraktivität und Feuchtigkeitsgehalt wurden mit den jeweiligen Primärmethoden ermittelt. Die Analyse der Wasseraktivität folgte den Richtlinien von ISO 18787, der Feuchtigkeitsgehalt wurde gemäß ISO 6673 bestimmt und die Dichte wurde mit einem Dichtebestimmungsset für eine Precisa-Waage bestimmt.

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

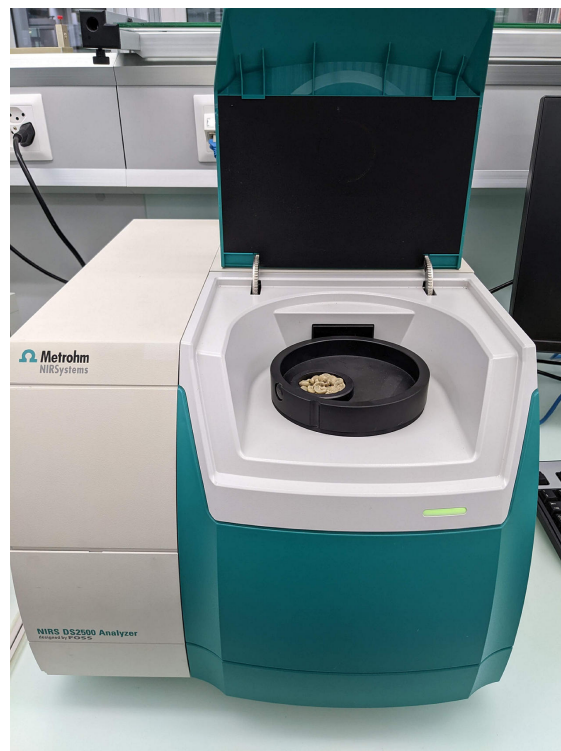


Abbildung 1. Ein Metrohm DS2500 Feststoffanalysator mit grünen Kaffeebohnen in einem NIRS-Miniprobebecher.

Die erhaltenen Vis-NIR-Spektren (**Abbildung 2**) wurden verwendet, um Vorhersagemodelle für die verschiedenen Referenzparameter zu erstellen. Um die Qualität der Vorhersagemodelle zu überprüfen, wurden die Datensätze für Wasseraktivität und Feuchtigkeit in Kalibrierungs- und Validierungssätze aufgeteilt. Für die Dichte wurde ein „Leave One Out“-

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

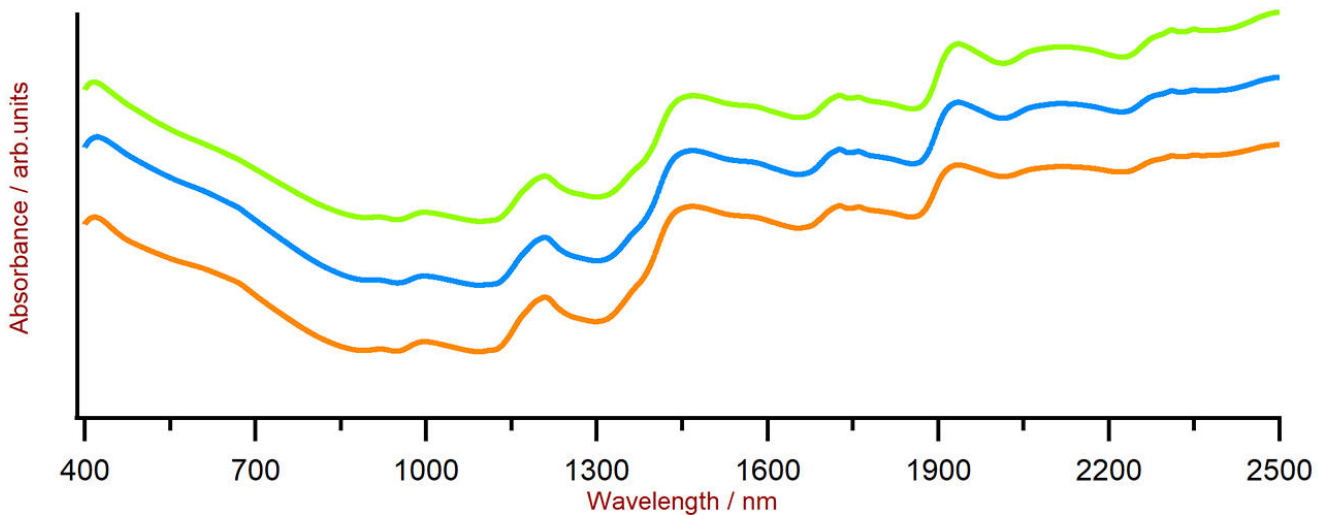
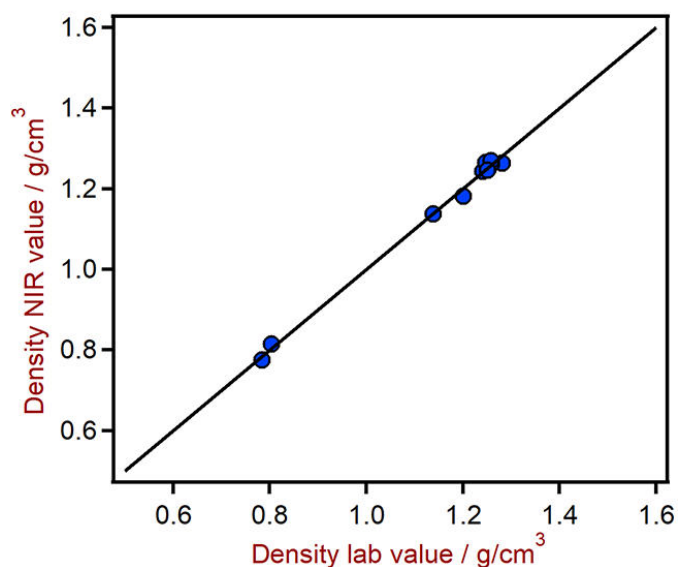


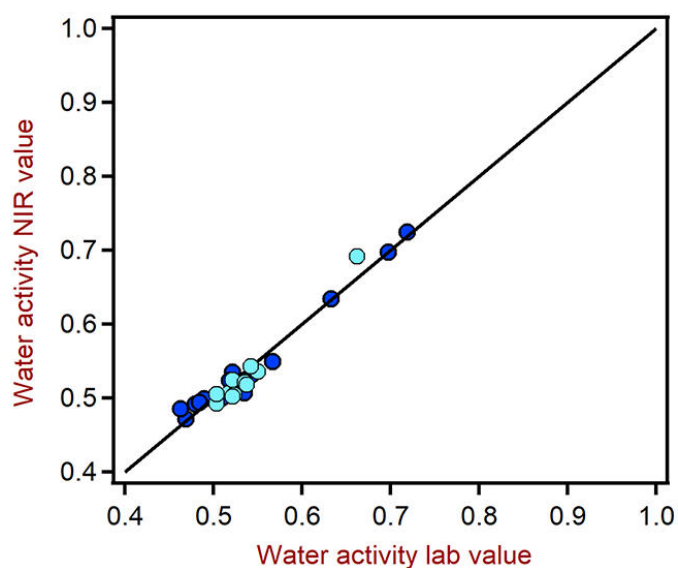
Abbildung 2. Auswahl von Vis-NIR-Spektren von Proben grüner Kaffeebohnen. Die Daten wurden mit einem DS2500 Solid Analyzer ermittelt. Zur Visualisierung wurde ein Spektrenoffset angewendet.

ERGEBNISDICHTE IN GRÜNEN KAFFEEBOHNEN



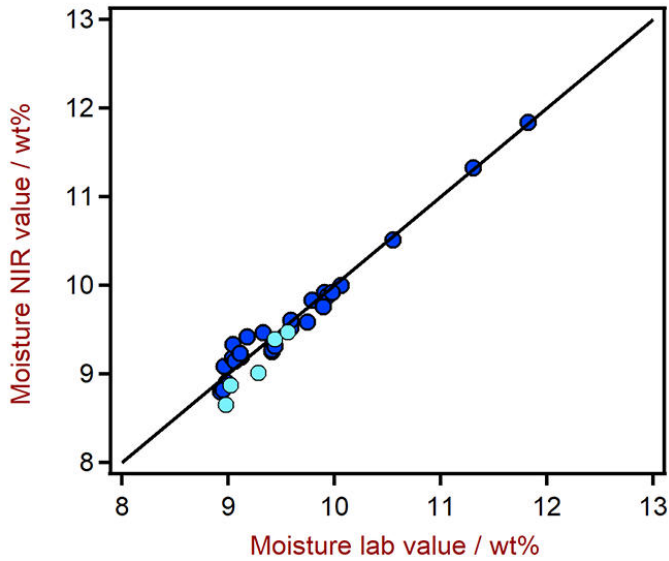
Figures of Merit	Value
R ²	0.99
Standard Error of Calibration	0.015 g/cm ³
Standard Error of Cross-Validation	0.042 g/cm ³

Abbildung 3. Korrelationsdiagramm und die jeweiligen FOMs für die Vorhersage der Dichte grüner Kaffeebohnen mit einem DS2500 Solid Analyzer. Die Laborwerte wurden mit einem Dichtebestimmungsset für eine Waage ermittelt.



Figures of Merit	Value
R ²	0.97
Standard Error of Calibration	0.014
Standard Error of Cross-Validation	0.017
Standard Error of Prediction	0.015

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



Figures of Merit	Value
R ²	0.97
Standard Error of Calibration	0.133
Standard Error of Cross-Validation	0.149
Standard Error of Prediction	0.205

Abbildung 5. Korrelationsdiagramm und die entsprechenden FOMs für die Vorhersage der Feuchtigkeit in grünen Kaffeebohnen mit einem DS2500 Solid Analyzer. Die Laborwerte wurden nach den Richtlinien der ISO 6673 ermittelt.

Diese Application Note zeigt die Machbarkeit der Nahinfrarotspektroskopie für die Analyse von Dichte, Wasseraktivität und Feuchtigkeitsgehalt in grünen Kaffeebohnen. Ohne den Einsatz von Chemikalien können diese Qualitätsparameter gemessen werden, und die Ergebnisse liegen in weniger als einer Minute vor. Mit dieser benutzerfreundlichen Methode

können Röster ihre Lagerverwaltung verbessern, indem sie die zu röstenden Rohbohnen anhand von Haltbarkeitsindikatoren auswählen. Darüber hinaus können die Rösteinstellungen für eine bessere Produktkonsistenz und eine höhere Energieeffizienz optimiert werden.

Internal reference: AW NIR CH-0068-042023

CONTACT

Metrohm Deutschland
In den Birken 3
70794 Filderstadt

info@metrohm.de

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.