

Er infrarød spektroskopi den gylne løsningen for koffeinanalyse?

Kvantitativ analyse av koffein i kaffebønner

Samuel Skaaret Lutnæs, Andre Wilhelmsen Selstø
Sr Engineer Egil Nodland, Prof Bjørn Grung
Kjemisk institutt, Universitetet i Bergen, Allégaten 41, 5007 Bergen, Norway



UNIVERSITETET I BERGEN
Fakultet for naturvitenskap og teknologi



295.2

INTRODUKSJON

Bakgrunn

Den mest brukte stimulant finner du inne i kaffebønne. Koffein er brukt av omtrent 80% av verdens befolkning på en daglig basis og de fleste av oss får det i oss gjennom en kopp på morgenen¹.

Koffein i kaffe blir som regel analysert ved hjelp av typiske våtkjemiske metoder, som HPLC.

Sirius

«Sirius» er et verktøy som gjør sammenligningen av store datamengder mer trivielt.

Den har verktøy for å identifisere uteliggere i datasettet og synliggjør grupperinger. Ved bruk data fra IR, NMR og HPLC skal vi utvikle en modell for kvantifisering av koffeininnhold som bare bruker IR data

Mål

Målet med oppgaven er å bedømme om det er mulig å bruke IR data til å beregne mengde koffein i hver enkelt kaffebønne.

Det å bruke IR data til å bestemme koffeinmengden i bønnene vil være en mye raskere og billigere metode enn de som vanligvis blir brukt i dag.

METODE

IR

Bønnene kvernes til det fineste nivået mulig med håndkvern og analyseres ved hjelp av IR-spektroskopi. Vi ønsker å se om IR-spekterene kan avsløre koffeininnholdet i bønnene og trenger derfor å utvikle en modell for analysen av kaffebønner med IR.

NMR

Kaffepulver ble ekstrahert i $CDCl_3$ og filtrert. Målet med NMR prøvene er å måle koffeininnholdet for hver enkelt bønne. Dette gjøres ved å måle intensiteten til toppene i spekteret.

HPLC

Kaffepulver ble ekstrahert i kokende vann. En standardkurve ble plottet ved bruk av eksterne standarder og konsentrasjonen til hver prøve ble beregnet. Til slutt legges alle verdiene inn i Sirius for å utvikle modellen.

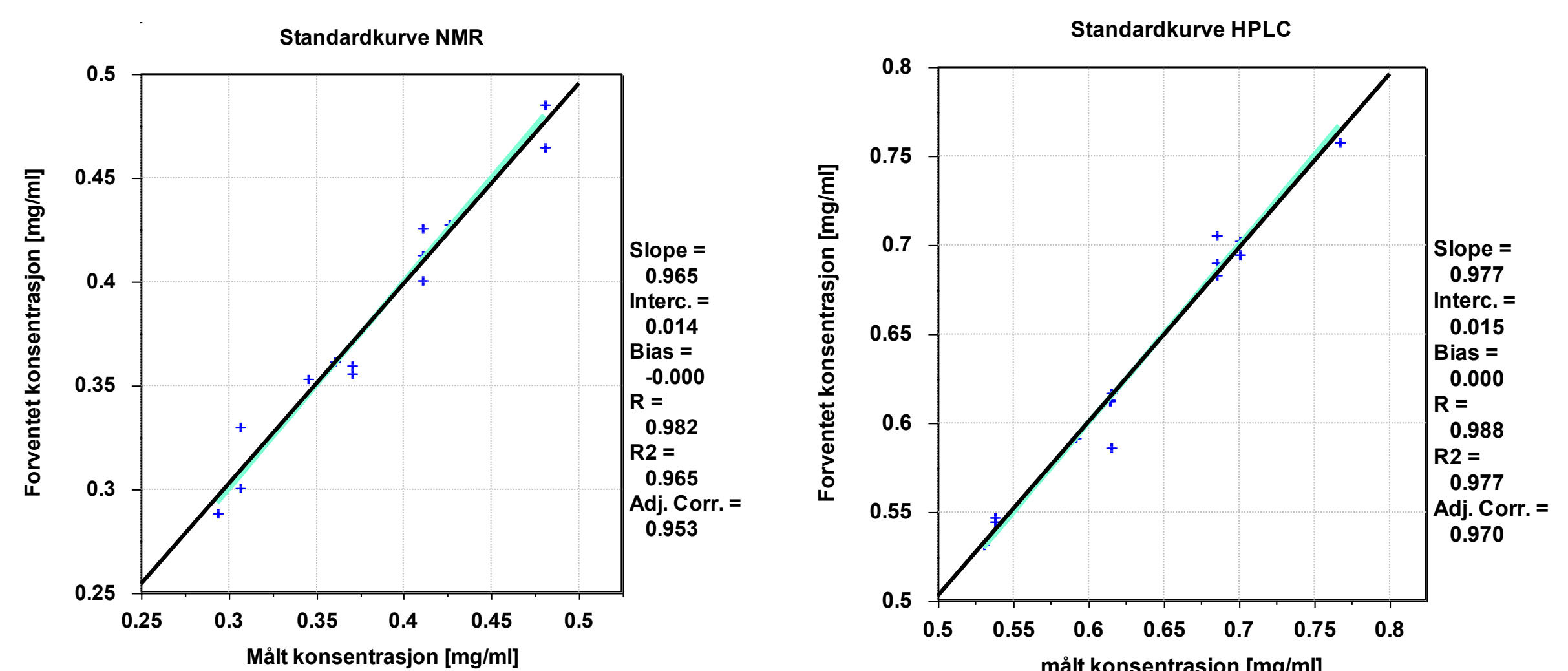
RESULTATER

Tabell 1.1 – Konsentrasjonen for hver bønne regnet ut ifra NMR-spekteret

| Prøvenavn | Konsentrasjon [mg/ml] (NMR) | Konsentrasjon [mg/ml] (HPLC) |
|---------------------------|-----------------------------|------------------------------|
| Kenya | 0,294 | 0,591 |
| Don Eli nr 1 | 0,426 | 0,767 |
| Fjellsmau | 0,360 | 0,700 |
| Kvinnekaffe | 0,306 | 0,537 |
| Månedens smak Uganda | 0,370 | 0,685 |
| Møhlenpris bærtørket | 0,345 | 0,615 |
| Monte Cristo | 0,334 | 0,763 |
| Snop (Ikke brent) | 0,516 | 0,857 |
| Sandviken spesial | 0,480 | 0,530 |
| Vinterkaffe | 0,410 | 0,431 |
| Decaf Mexico | 0,042 | 0,026 |
| Cascara | 3,341 | 0,105 |
| Malabar (Ikke brent) | 0,203 | 0,614 |
| Monte Cristo (Ikke brent) | 0,420 | 0,837 |

Konsentrasjonen er høyere på HPLC grunnet at koffein 3-4 ganger mer løselig i kokende vann enn i $CDCl_3$.²

Figur 1.1 – Standardkurve for NMR (venstre) og HPLC (høyre) konsentrasjonene. IR dataen er brukt til å finne en forventet konsentrasjon og sammenlignet med målt konsentrasjon. For NMR prøvene korrelerer modellen 96.5% med den målte verdien og for HPLC korrelerer den 97.7%



Konklusjon

Når IR modellen sammenlignes med målte verdier fra mer tradisjonelle metoder er det tydelig at den er brukbar. Ved å sammenligne en ukjent kvernet kaffebønne gjennom modellen utviklet i Sirius, kan du identifisere konsentrasjonen av koffein i prøven. Med denne metoden vil resultater fremstå mye fortere og billigere enn med de tradisjonelle metodene.