

Untersuchung von Kaffeeproben mit DIP-APPI-MS

S. Horst, Arbeitsgruppe Prof. Dr. O. J. Schmitz, Universität Duisburg-Essen

Es wurden verschiedene Espresso-Kaffees mittels DIP-APPI-Q-TOF-MS und DIP-APPI-IM-Q-TOF-MS untersucht. Dabei wurde versucht Unterschiede zwischen den einzelnen Sorten zu identifizieren. Abbildung 1 zeigt ein gemitteltes Massenspektrum einer coffeinhaltigen Espresso-Sorte und einer coffeinfreien Espresso-Sorte.

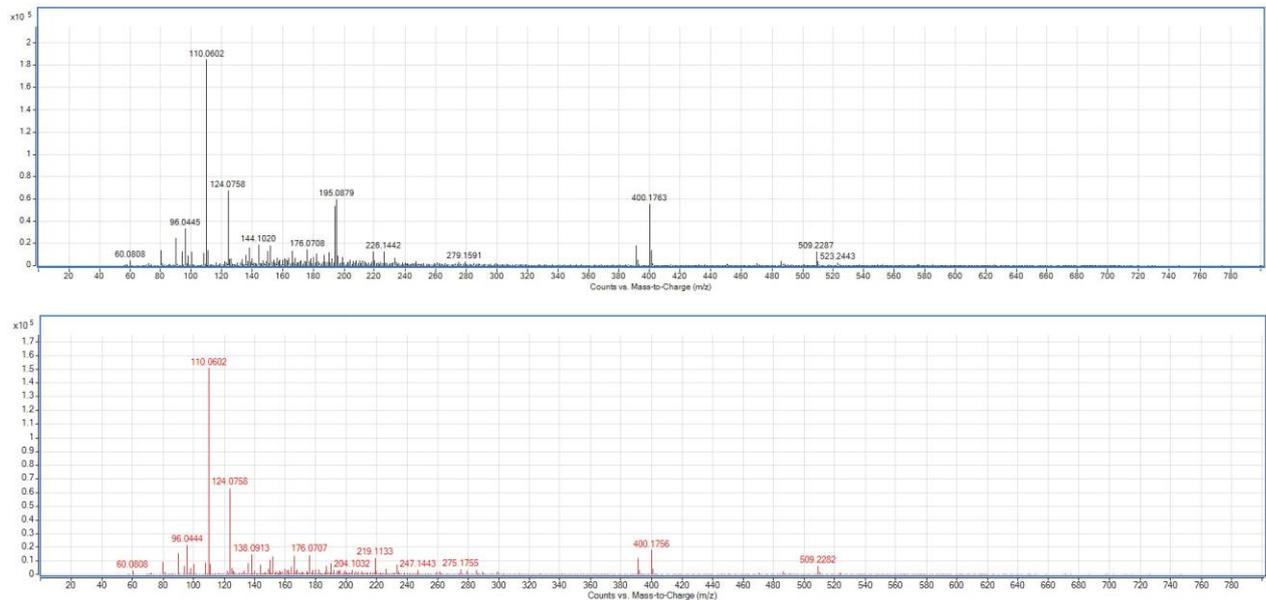


Abbildung 1: gemitteltes Massenspektrum einer coffeinhaltigen Espresso-Sorte (oben) und einer coffeinfreien Espresso-Sorte (unten).

Wie aus der Abbildung 1 ersichtlich ist, unterscheiden sich die beiden Espresso-Sorten bezüglich der Signalintensität der Inhaltsstoffe. Durch den Einsatz der Ionenmobilität als zusätzliche Trenddimension konnten diese Unterschiede weiter deutlich gemacht werden (siehe Abbildung 2).

Durch die Anwendung von T-Varianztest konnten Massenspuren isoliert werden, welche mit einer Wahrscheinlichkeit von 99% einen Unterschied zwischen den einzelnen Kaffeeproben aufweisen. Durch den Vergleich der erhaltenen exakten Masse und der Isotopenverteilungen konnten für einige dieser Komponenten Summenformeln erhalten werden. Eine Zuordnung dieser Summenformeln zu konkreten Verbindungen ist aber nur bedingt möglich, da für eine sichere Identifizierung mindestens eine weitere stoffspezifische Größe bekannt sein sollte. Dies wäre mit der Collision-cross-section für die Ionenmobilität gegeben, jedoch befindet sich die Datenbank noch im Aufbau, sodass hier keine Übereinstimmungen gefunden werden konnten.

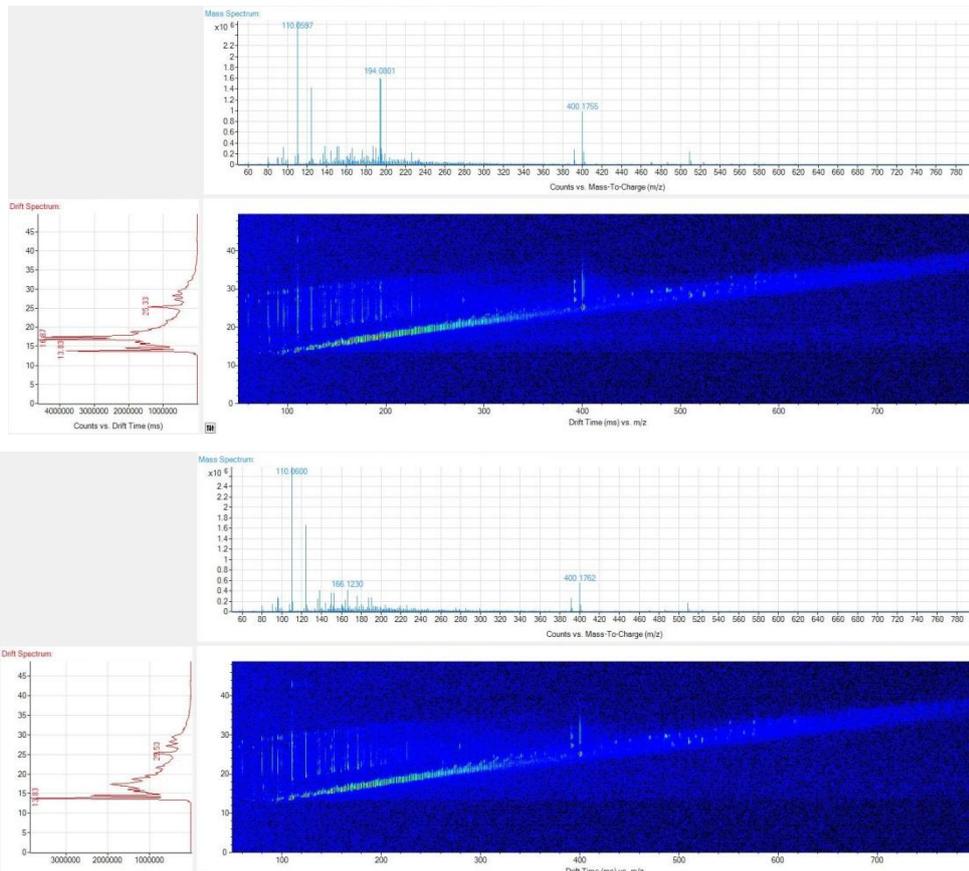


Abbildung 2: gemittelte Ionenmobilitäts-Massenspektren einer coffeinhaltigen Espresso-Sorte (oben) und einer coffeinfeinen Espresso-Sorte (unten)

Wird die DIP-APPI-Ionenquelle mit der vorherigen DIP-APCI-Ionenquelle verglichen, so fällt auf, dass bei der APPI ein reduzierter Hintergrund die Auswertung der Massenspektren erleichtert.

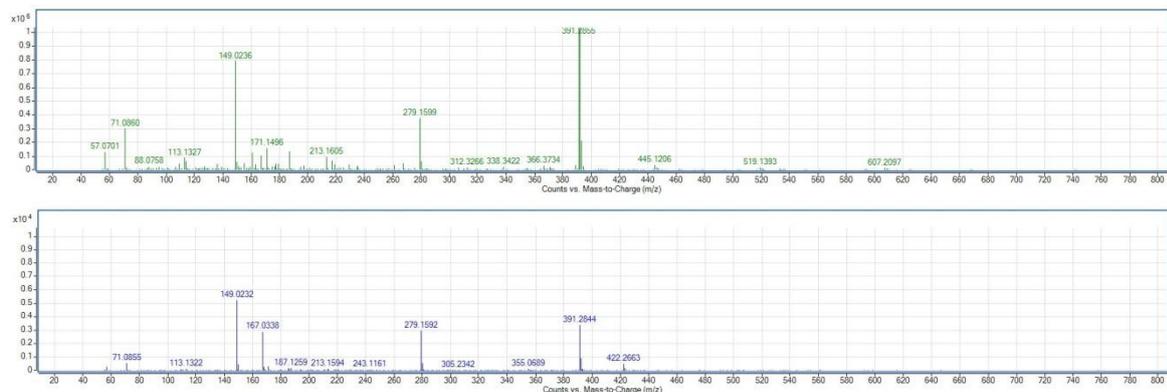


Abbildung 3: Vergleich der gemittelten Massenspektren die mit DIP-APCI (oben) und mit DIP-APPI (unten) für den Hintergrund erhalten werden.

Bei den gezeigten Massenspektren handelt es sich um Blindwerte. Aus diesen Spektren wird ersichtlich, dass das Hintergrundrauschen bei der DIP-APCI wesentlich größer ist als bei der DIP-APPI. So sind die Signalintensitäten für die Massenspuren m/z 149, 279 und 391 bei DIP-APPI wesentlich geringer. Bei den Massenspuren m/z 57 und 171 fällt auf, dass diese im elektronischen Rauschen des Instruments verschwinden.

Neben dieser Applikation wurden weiter Untersuchungen mit der DIP-APPI-MS durchgeführt. Dazu zählen:

- Die Quantifizierung von Bisphenol A in verschiedenen Papieren
- Die Qualitätskontrolle von Tinkturen auf Abbauprodukte
- Die Qualitätskontrolle von Olivenöl auf Beimischungen von Fremdölen