

# Chemische Aspekte des Kaffees

Tobias Flassig, SS 00; Katharina Kleiber, SS 09

## Gliederung

1	Herstellung des Kaffees .....	2
1.1	Die Kaffee-Pflanze.....	2
1.2	Vom Roh-Kaffee zum Röst-Kaffee – der Röst-Prozess.....	2
2	Physiologisch wirksame Inhaltsstoffe .....	3
2.1	Koffein – Hauptursache der physiologischen Wirkung des Kaffees .....	3
2.2	Chlorogensäuren – Ester der Hydroxycimtsäuren und Chinasäuren.....	6
3	Die Aroma-Stoffe des Kaffees .....	7
4	Geschmacksstoffe des Kaffees .....	9
5	Kaffee-Farbstoffe.....	9
6	Rösten von Rohkaffee .....	10

### **Einstieg:** Wer entdeckte das Lieblingsgetränk der Deutschen?



Abb. 1: Ziege [9]

*Zahlreiche Legenden und Märchen berichten über die Entdeckung des Kaffees. So soll um 850 n. Chr. Den mohammedanischen Mönchen des äthiopischen Klosters von Ghebel Abor eines Abends aufgefallen sein, dass ihre Ziegen außergewöhnlich munter waren. Sie entdeckten, dass sie Ziegen von unbekanntem roten Beeren gefressen hatten. Neugierig geworden, probierten sie selbst von den dunkelroten Früchten. Sie waren aber vom bitteren Geschmack enttäuscht und warfen die Beeren ins Feuer. Kurz darauf verbreitete sich ein gar köstlicher Duft. Die Mönche löschten das Feuer und brauten aus den inzwischen „gerösteten“ Bohnen ein schwarzes Getränk. Es half ihnen von da an, beim Abend-Gebet wach zu bleiben. [7]*

# 1 Herstellung des Kaffees

Kaffee ist am Wert gemessen das Welthandelsgut Nr.2 nach dem Erdöl. Er zählt zu den wichtigsten agrarischen Export-Gütern einiger Länder der Dritten Welt.

## 1.1 Die Kaffee-Pflanze



Abb. 2: Kaffee-Kirschen [10]

Die Kaffee-Pflanze gehört zur Gattung *Coffea* der Familie Rubiaceae (Rötegewächse), die als holzige bzw. strauchige Pflanzen hauptsächlich in den Tropen vorkommen. Die einheimischen Arten sind dagegen überwiegend krautige, unverholzte Pflanzen.

Für den Anbau werden hauptsächlich zwei Arten verwendet:

- *C. arabica* (75% der Welt-Produktion)
- *C. canephora* (Robusta-Kaffee, widerstandsfähigere Art mit höherem Koffein-Gehalt)

Die Früchte (Kaffee-Kirschen) werden geerntet, sobald sie rot sind (2x jährlich). Anschließend wird das Fruchtfleisch der Kaffee-Kirschen entfernt und die Kerne (Kaffee-Bohnen) getrocknet.

## 1.2 Vom Roh-Kaffee zum Röst-Kaffee – der Röst-Prozess

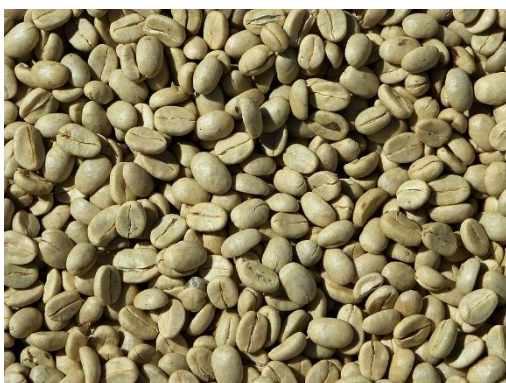


Abb. 3: Roh-Kaffee [11]



Abb. 4: Röst-Kaffee [12]

Die Röstung der Bohnen erfolgt bei 200 – 250°C, einer für Lebensmittel ungewöhnlich hohen Temperatur. Dabei finden für Aroma und Aussehen der Bohnen grundlegende chemische Veränderungen statt:

- Wasser, Kohlenstoffdioxid und andere Gase entweichen
- Karamellisierungsprozesse und Farbstoff-Entwicklung bewirken die Braun-Färbung der Bohnen

- das typische „Kaffee-Aroma“ entsteht unter anderem durch die Maillard-Reaktion (Roh-Kaffee ist geruchlos)
- Koffein ist unter den Röst-Bedingungen stabil und geht deshalb nicht verloren

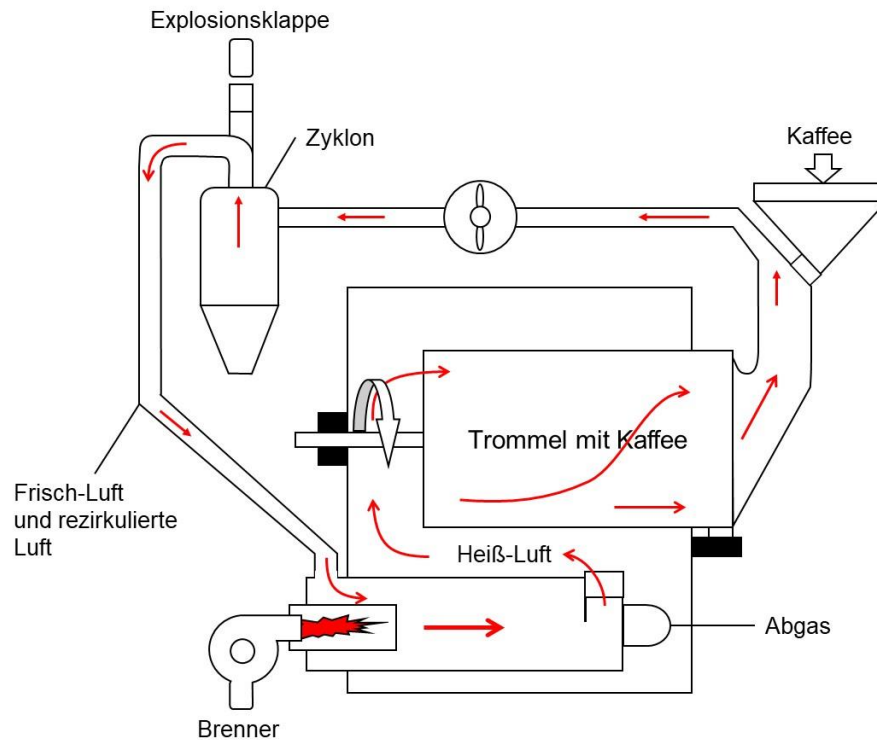


Abb. 5: Dreh-Röstanlage [1]

## 2 Physiologisch wirksame Inhaltsstoffe

Die Beliebtheit des Kaffees beruht vor allem auf seiner anregenden Wirkung. Diese kann im Wesentlichen auf das enthaltene Koffein und die Chlorogensäuren zurückgeführt werden.

### 2.1 Koffein – Hauptursache der physiologischen Wirkung des Kaffees

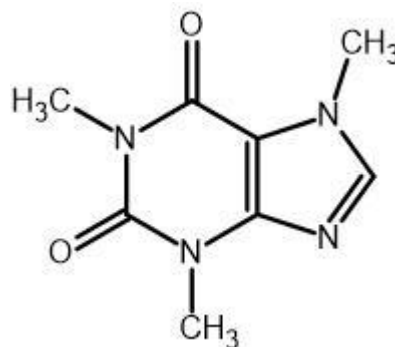


Abb. 6: Koffein

Koffein wurde 1820 vom deutschen Chemiker Runge isoliert. Es handelt sich um 1, 3, 7-Trimethylxanthin und zählt zu den Purin-Alkaloiden. Purine sind auch Bausteine der Nucleotide, nämlich Adenin und Guanin. Arabica-Bohnen enthalten 1,1% - 1,7% Koffein; Robusta-Bohnen 2% - 4,5%. Koffein schützt die Kaffee-Bohne vor dem Verschimmeln, wirkt somit antimykotisch.

Auch die verschiedenen Zubereitungsformen des Kaffees besitzen unterschiedliche Koffein-Gehalte. So ist in Maschinen-Kaffee der Koffein-Gehalt mit 560 µg/mL überraschenderweise deutlich höher als der Koffein-Gehalt von Espresso (480 µg/mL) oder handgefiltertem Kaffee (440 µg/mL).

### Physiologische Wirkung des Koffeins:

- Koffein hemmt Phosphodiesterasen, die cyclisches Adenosinmonophosphat (AMP) in AMP umwandelt, besitzt somit eine erregende Wirkung auf das Zentrale Nervensystem
- Herztätigkeit, Stoff-Wechsel und Atmung werden angeregt. Blutdruck und Körpertemperatur steigen, die Blut-Gefäße im Gehirn erweitern sich, die der Eingeweide verengen sich, weshalb die Müdigkeit verschleudert wird, sich die Stimmung hebt und die Leistungsfähigkeit gesteigert wird
- Koffein ist auch bekannt für seine diuretische (harntreibende) Wirkung
- Koffein wirkt als Antagonist von Adenosin, was eine gesteigerte Freisetzung von Neuro-Transmittern bewirkt
- Koffein wird auch pharmazeutisch eingesetzt gegen Kopf-Schmerzen, Asthma, Herz-Schwäche, Morphin-Vergiftung, uvm.

### Negative Wirkungen:

Koffein besitzt auch negative Wirkungen, allerdings erst in höheren Dosen. So können leichte Abhängigkeitserscheinungen bei Missbrauch auftreten, v. a. bei Entzug Kopfschmerz. Außerdem verursachen höhere Dosen Hände-Zittern, Druck in der Herz-Gegend und Blut-Drang zum Kopf. Die letale Dosis liegt mit 5 – 30 g jedoch sehr hoch.

### Abbau des Koffeins in der Leber:

In der Leber wird Koffein durch Demethylierung, Oxidation und Acetylierung abgebaut. Dabei entstehen diverse Zwischen-Produkte wie Paraxanthin und das auch in der Kakao-Bohne enthaltene Theobromin:

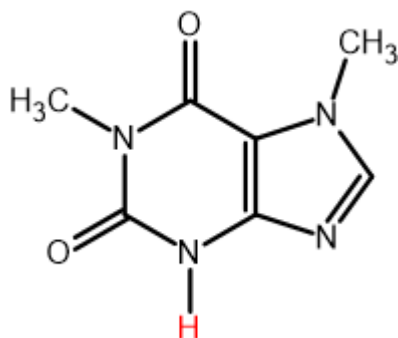


Abb. 7: Paraxanthin\*

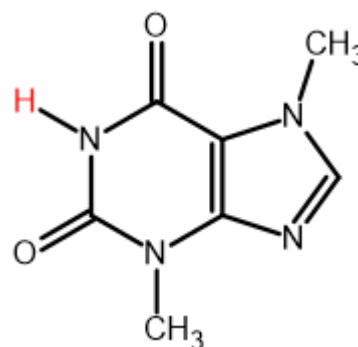


Abb. 8: Theobromin\*

Letztendlich wird Koffein zu Harnsäure oxidiert, die dann in der Niere ausgeschieden werden kann:

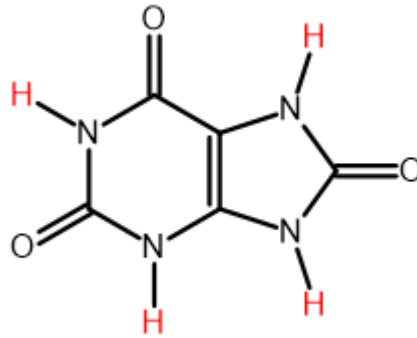


Abb. 9: Harnsäure\*

\*Das Vorhandensein (oder nicht) von Wasserstoff an den Stickstoff-Atomen soll veranschaulichen, inwiefern sich Paraxanthin, Theobromin und Harnsäure unterscheiden.

### Entkoffeinierung:

Zur Entkoffeinierung existieren mehrere Verfahren. Früher wurde der Roh-Kaffee mit heißem Wasser-Dampf gequollen, dann das Koffein mit organischen Lösemitteln wie Essigester oder Dichlormethan extrahiert. Der Nachteil dieser Methode liegt in der Giftigkeit der Chlorkohlenwasserstoffe, die zwar nach dem Prozess abgedampft werden, aber in Spuren noch in den Kaffee-Bohnen enthalten sein können.

Deshalb hat sich ein anderes, völlig harmloses Verfahren zur Entkoffeinierung durchgesetzt: Die Extraktion des Koffeins mit überkritischem Kohlenstoffdioxid ( $T_K = 31^\circ\text{C}$ ,  $p_K = 74 \text{ bar}$ ) bei 150 – 250 bar und  $60 - 80^\circ\text{C}$  aus den rohen Bohnen in speziellen Entkoffeinierungsanlagen. Neben der Ungefährlichkeit dieses Verfahrens besitzt es noch einen entscheidenden Vorteil: Überkritisches Kohlenstoffdioxid besitzt eine sehr hohe Selektivität für Koffein. Der Roh-Kaffee wird mit dem flüssigen Kohlenstoffdioxid versetzt und das mit Koffein beladene Lösemittel aus dem Behälter abgepumpt. In einer Waschkammer wird das Kohlenstoffdioxid mit Wasser versetzt, wobei es verdampft und das Koffein im Wasser zurückbleibt. Das Kohlenstoffdioxid kann nun erneut verflüssigt werden und steht dem Prozess wieder zur Verfügung. Das koffeinbeladene Wasser wird anschließend entgast (um Reste gelösten Kohlenstoffdioxids zu entfernen) und eingeeengt, so dass das Koffein in sehr reiner Form auskristallisiert. Das so gewonnene Koffein findet in der pharmazeutischen Industrie sowie in der Lebensmittel-Industrie (z. B. Red Bull) Verwendung.

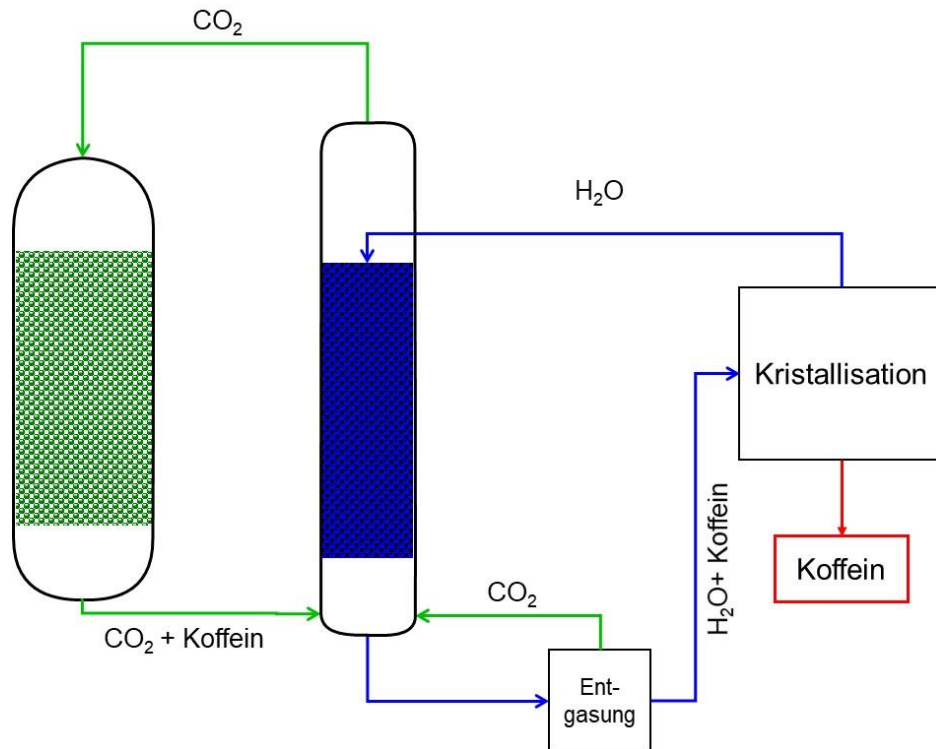
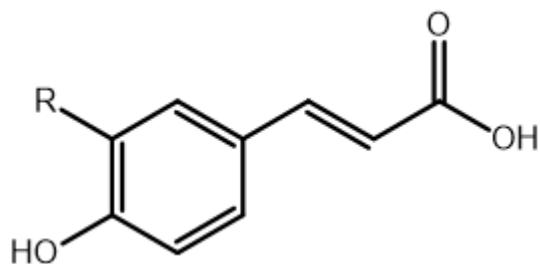


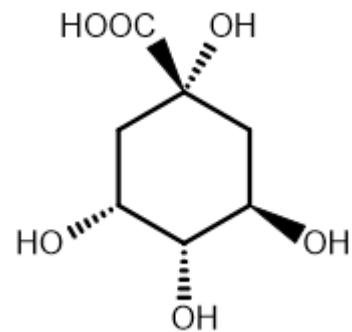
Abb. 10: Entkoffeinierungsanlage [1]

## 2.2 Chlorogensäuren – Ester der Hydroxyzimtsäuren und Chinasäuren

Auch entkoffeinierter Kaffee besitzt noch eine anregende Wirkung, die auf die Chlorogensäure zurückzuführen ist. Es handelt sich dabei um Ester der Kaffee-Säuren (z. T. auch der ähnlichen gebauten p-Cumarsäure bzw. Ferulasäure) mit Chinasäure, wie Abb. 11 zeigt:

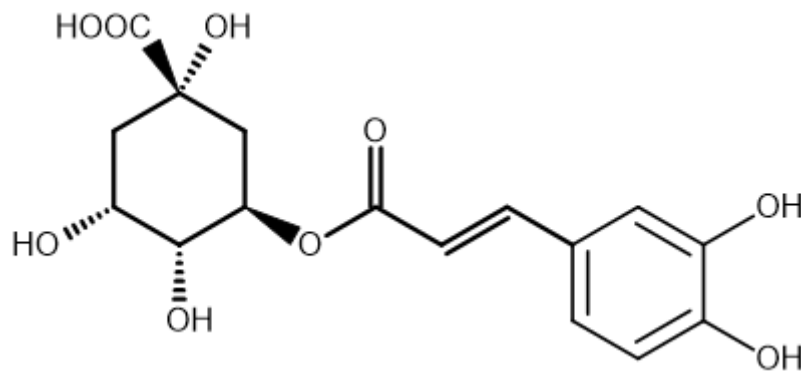


**Hydroxyzimtsäure**  
 R= H: p-Cumarsäure  
 R= OH: Kaffeesäure  
 R= OCH<sub>3</sub>: Ferulasäure



**Chinasäure**





### n-Chlorogensäure

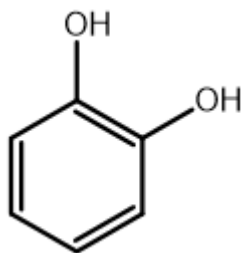
Abb. 11: Struktur der Chlorogensäuren

n-Chlorogensäure (= 3-Caffeoylchinasäure) ist die häufigste in Kaffee-Bohnen vorkommende Chlorogensäure. Ihr Kalium-Salz bildet mit Koffein einen schwerlöslichen Komplex, als die Chlorogensäuren entdeckt wurden. Oft bilden sie jedoch auch ein Salz mit der Purinbase Koffein. In geringer Menge liegen Chlorogen-Koffein-Komplexe auch in aufgebühtem Kaffee vor.

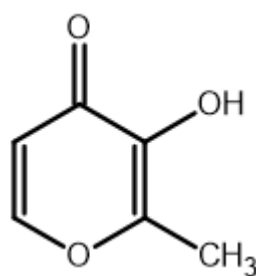
#### Reizstoffarmer (milder) Kaffee:

Chlorogensäuren standen schon bald im Verdacht, den Verdauungstrakt und insbesondere den Magen zu reizen. Das Ziel der Überlegungen zur Herstellung eines reizstoffarmen Kaffees ist deshalb die Verringerung des Anteils der Chlorogensäuren in den Kaffee-Bohnen, z. B. durch Hydrolyse der Ester-Bindung.

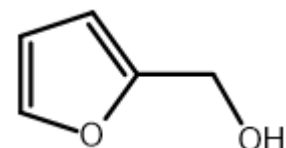
Beim Dämpfen (Lendrich-Verfahren) wird der Kaffee vor dem Rösten zwei Stunden mit heißem Wasser-Dampf behandelt, nachdem die Wachs-Schicht der Bohnen entfernt wurde. Andere brechreizerregende Substanzen (Abb. 12) werden dabei ebenfalls entfernt.



Brenzkatechin



Maltol



Furfurylalkohol

Abb. 12: brechreizerregende Substanzen

Allerdings verliert der Kaffee dabei einen Teil seines Aromas, er schmeckt abgelagert. Einige der Chlorogensäuren werden auch während des Röst-Prozesses gespalten bzw. zu diversen Aroma-Stoffen umgewandelt.

## 3 Die Aroma-Stoffe des Kaffees

Die Kaffee-Bohnen erhalten erst beim Rösten ihr typisches Aroma, Roh-Kaffee ist geruchlos. Bei diesem Prozess entstehen aus wenigen Ausgangsstoffen zahlreiche Produkte mit aromatischem Geruch:

- die Röst-Produkte hydrolysierter Chlorogensäuren, sie beteiligen sich jedoch nur wenig am Kaffee-Aroma

- die Röst-Produkte des Trigonellins, ein in der Kaffee-Bohne vorkommendes Pyridin-Derivat. Neben diversen Aroma-Stoffen geht aus Trigonellin das einzige im Kaffee enthaltene Vitamin, die Nicotinsäure hervor. Alle anderen Vitamine werden bei den Röstbedingungen zerstört. Interessanterweise entsteht beim Röst-Prozess auch Pyridin (und weitere Pyridin-Derivate) aus Trigonellin, das bei stark geröstetem Kaffee auch wahrgenommen werden kann

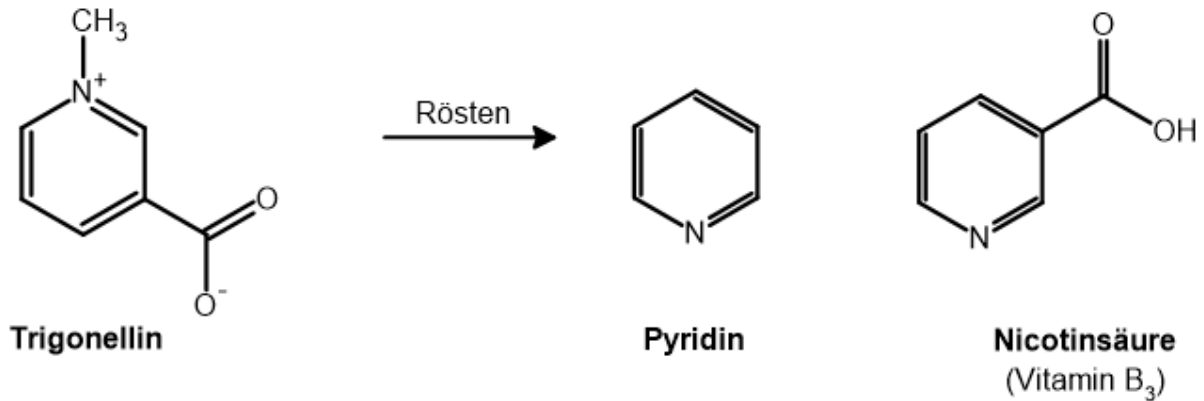


Abb. 13: Auswahl an Röst-Produkten des Trigonellin

- Beim Rösten läuft auch die wenig erforschte Maillard-Reaktion (nichtenzymatische Bräunung) ab, bei der aus wenigen Ausgangsstoffen zahlreiche Produkte hervorgehen. Es reagieren reduzierende Zucker (wie Glucose oder Fructose) mit Aminosäuren, Peptiden oder Proteinen. Beim ersten Schritt der Reaktion tritt ein Derivat des N-Glycosylamin auf, darauf folgt eine Amadori-Umlagerung. Der weitere Verlauf ist unbekannt, es folgen Ring-Schlüsse, Wasser-Abspaltung und Strecker-Abbau. Im Folgenden werden nur einige der zahlreichen (über 800) bekannten Produkte der Reaktion mit ihrem Geruch dargestellt:

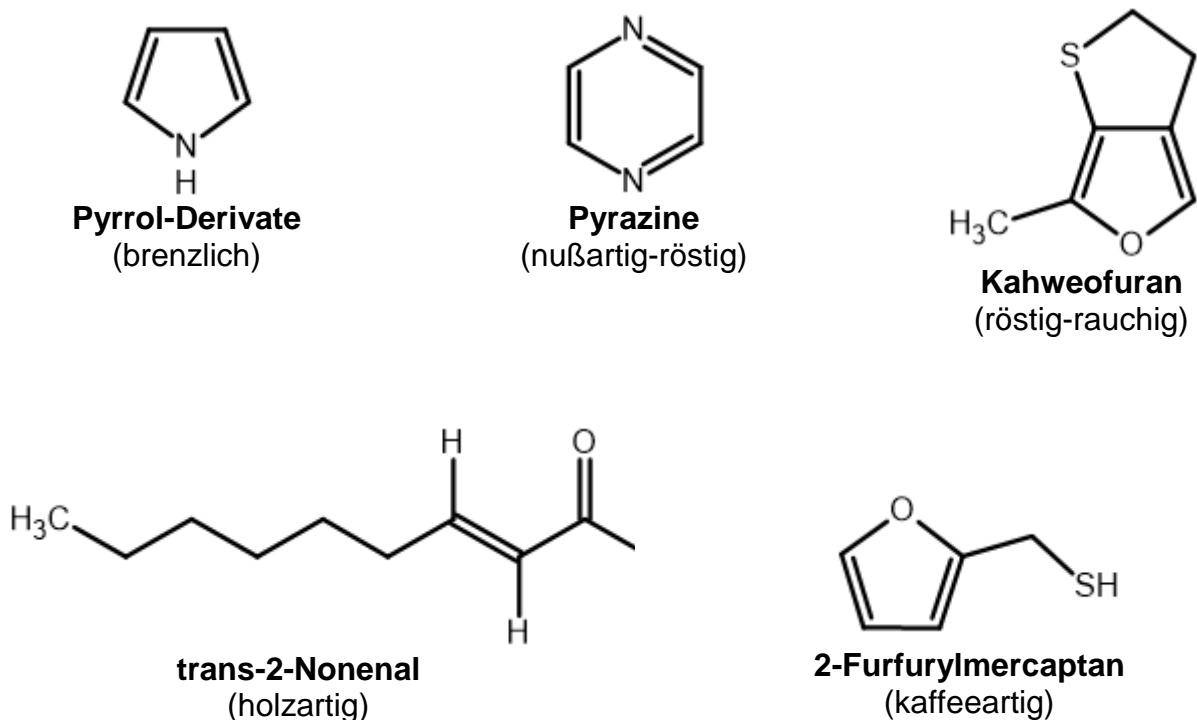


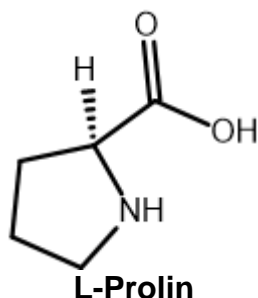
Abb. 14: Auswahl an Produkten der Maillard-Reaktion



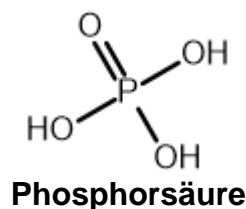
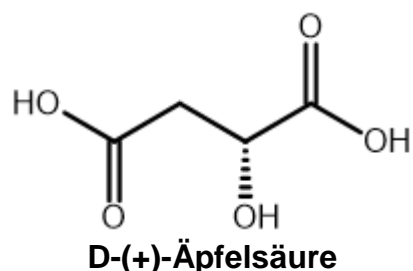
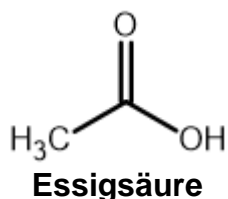
Am 2-Furfurylmercaptan kann die Abhängigkeit des subjektiven Aroma-Eindrucks von der Konzentration eines Stoffes gut demonstriert werden. Während der Reinstoff ein stechendes, unangenehmes Aroma besitzt, nimmt man bei einer Verdünnung von 1 ppm bzw. 1 pbm einen angenehmen Geruch wahr, der mit Kaffee assoziiert werden kann.

## 4 Geschmacksstoffe des Kaffees

Kaffee enthält im Wesentlichen zwei Geschmackskomponenten: **bitter** und **sauer**. Der für Kaffee typische bittere Geschmack wird ihm zum einen durch Koffein verliehen, das ca. 30% zum Geschmack beiträgt. Der Großteil der im Kaffee enthaltenen Bitter-Stoffe sind jedoch Maillard-Produkte, vor allem Produkte aus Saccharose, Glucose oder Fructose mit der Aminosäure Prolin:



Dagegen wird der Fein-Geschmack des Kaffees vom Gehalt der Säuren bestimmt. Bei einem pH-Wert von 4,9 – 5,2 wird Kaffee von deutschen Konsumenten als wohlschmeckend empfunden. Verantwortlich dafür sind v. a. Essig-, Zitronen-, Äpfel- und Phosphorsäure, die in den Kaffee-Bohnen enthalten sind.



## 5 Kaffee-Farbstoffe

Die Kaffee-Farbstoffe heißen Melanoidine (nicht zu verwechseln mit Melaninen, den braunschwarzen Farb-Stoffen, die bei enzymatischer Katalyse entstehen können, z. B. bei geschälten Äpfeln). Sie entstehen beim Rösten. Allerdings ist über diese braunen Farb-Stoffe bislang nur wenig bekannt. Ein Teil dürfte durch Produkte des beim Rösten stattfindenden Karamellisierungsprozesses (Karamell= Zersetzungsprodukte von Zuckern) entstehen. Aber auch Maillard-Produkte, deren Strukturen noch nicht geklärt sind, tragen zur Färbung des Kaffees bei. Es handelt sich wahrscheinlich um Oligo- bzw. Polysaccharide (beta-1,4-verknüpfte Mannose-Einheiten mit Galactose und Arabinose-Einheiten in den Seiten-Ketten), die mit Aminosäuren reagiert haben.

## 6 Rösten von Rohkaffee

Als Abschluss des Vortrags wurde Roh-Kaffee geröstet. Dazu wurden einige Kaffee-Bohnen in einer handelsüblichen Popcorn-Maschine für ca. 5 Minuten geröstet. Dabei ist ein Überhitzen der Maschine zu vermeiden. Alternativ kann man die Bohnen auch in einem Koch-Topf rösten. Dabei ist zu beachten, dass man die Bohnen regelmäßig wendet, damit sie nicht verbrennen. Die fertigen Bohnen wurden anschließend zermahlen und aufgebriht. Die Teilnehmer konnten sich vom Geschmack und Aroma des hergestellten Kaffees selbst überzeugen.

### Quellen:

1. H. G. Maier: Chemische Aspekte des Kaffees, Chemie in unserer Zeit, 1984,1, 17-23
2. Naturwissenschaften im Unterricht, Heft 43, Themenheft Lebende Getränke,1998, diverse Artikel
3. Beyer/Walter, Organische Chemie, 23. Auflage , Stuttgart 1998
4. P. Nuhn: Naturstoffchemie, 3. Auflage, Stuttgart 1997
5. Römpp, Lexikon Naturstoffe, Stuttgart 1997
6. E. Mutschler: Arzneimittelwirkungen, 6. Auflage, Stuttgart 1991
7. <http://www.sirocco.ch/> [Stand: 28.07.2010]
8. Zulassungsarbeit D. Schecklmann, Bayreuth 1999
9. <https://pixabay.com/de/ziege-lamm-wenig-gras-bauernhof-1596880/>  
Lizenz: CC0 Public Domain (16.03.2017) (kann aus Word nicht geöffnet werden, 22.04.2020)
10. <https://commons.wikimedia.org/wiki/File:MC200-09-Kaffeekirschen-rot-gruen.jpg>  
Lizenz: Creative Commons CC0 1.0 Universal Public Domain Dedication (16.03.2017)
11. <https://pixabay.com/de/rohkaffee-kaffeebohnen-kaffee-927604/> Lizenz: CC0 Public Domain (16.03.2017) (kann aus Word nicht geöffnet werden, 22.04.2020)
12. <https://pixabay.com/de/kaffeebohnen-ger%C3%B6stet-aroma-koffein-618858/> Lizenz: CC0 Public Domain (16.03.2017) (kann aus Word nicht geöffnet werden, 22.04.2020)