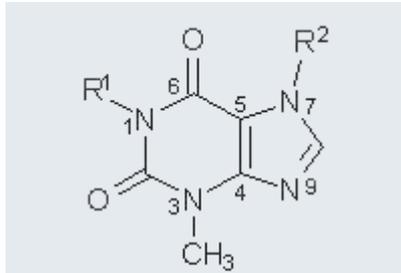


## Theobromin und Coffein



R<sup>1</sup> = H, R<sup>2</sup> = CH<sub>3</sub>: Theobromin  
R<sup>1</sup> = CH<sub>3</sub>, R<sup>2</sup> = H: Theophyllin  
R<sup>1</sup> = R<sup>2</sup> = CH<sub>3</sub>: Coffein

Theobromin und Coffein gehören neben Theophyllin zur Gruppe der Methylxanthine, einer Substanzklasse der sog. Alkaloide. Unter der Bezeichnung Alkaloide werden Substanzen zusammengefasst, die ein oder mehrere heterocyclisch eingebaute Stickstoff-Atome im Molekül aufweisen, primär in Pflanzen enthalten sind und pharmakologisch wirksam sind.

### Chemische Aspekte

Strukturell weisen Theobromin, Coffein und Theophyllin alle das gleiche Xanthin-Grundgerüst auf. Sie unterscheiden sich nur in der Anzahl und Positionen der Methylgruppen. Bei den Methylxanthinen handelt es sich um farb- und geruchlose Substanzen, die leicht bitter schmecken. Sie sind in Wasser löslich und werden durch Hitzeeinwirkung nicht verändert. Aufgrund der im Grundgerüst vorkommenden freien Elektronenpaare sind die Substanzen UV-aktiv, d.h., dass sie in der Lage sind, Strahlung im UV-Bereich zu absorbieren. Dies macht man sich in der Analytik dieser Substanzen zu Nutze.

### Wo kommen die Methylxanthine vor?

Coffein ist in der Pflanzenwelt weit verbreitet. Verhältnismäßig hohe Gehalte sind in Kaffeebohnen (1–1,5%), getrocknetem, schwarzen Tee (bis zu 5%), Colanuss (ca. 1,5%) und Guarana (bis 6,5%) nachweisbar. Geringer sind die Konzentrationen an Coffein in Kakaobohnen (bis 0,2%).

Theobromin ist das Hauptalkaloid des Kakaos (1,5–3%). Zu dem ist es auch noch in Tee, Colanuss, Mate und in Spuren in grünem Kaffee enthalten.

Theophyllin ist das "typische" Alkaloid des grünen Tees. Im Kakao sind nur geringste Spuren dieses

Alkaloids nachweisbar.

Die Alkaloide der Kakaobohne setzen sich zu 99% aus Theobromin und Coffein zusammen. Hierbei beträgt die Menge an Coffein im Kakao in der Regel nur ein Zehntel der Menge an Theobromin (aber durchaus schwankend), so dass dieser deutlich geringer anregend wirkt, als beispielsweise Kaffee.

Die Summe von Theobromin und Coffein stellt somit einen guten Indikator zur quantitativen Abschätzung des Kakaoanteils in kakaohaltigen Produkten dar.

## **Analytik**

Es gibt zwei gängige Methoden um die Gehalte an Theobromin und Coffein zu bestimmen:

Bei der ersten Methode handelt es sich um eine photometrische Bestimmungsmethode (IOCCC-Methode, Nr. 107-1988; IOCCC ist der internationalen Süßwarenverband), bei der die Summe aller Methylxanthine ermittelt wird. Hierbei werden zunächst alle wasserlöslichen Substanzen mit heißem Wasser extrahiert. Anschließend werden störende Begleitsubstanzen mit Bleiacetatlösung entfernt und die Absorption der Lösung bei 272 und 306 nm (letztere Untergrundabsorption) in einem Photometer gemessen. Aus der Differenz der Werte lässt sich die Summe der Methylxanthine berechnen. Streng genommen gilt diese Methode nur für nicht-milchhaltige Kakaoerzeugnisse. Sie liefert Gehalte, die im Vergleich zur unten erläuterten HPLC-Methode systematisch, ca. um 10% höher sind.

Die zweite Methode basiert auf der chromatographischen Trennung und Einzelbestimmung der Methylxanthine. Die Probenvorbereitung verläuft ähnlich wie bei der photometrischen Bestimmung. Normalerweise wird mit Hilfe der Hochleistungs-Flüssigchromatographie (HPLC) und UV-Detektion bei 280 und 272 nm gearbeitet. Im LCI wird eine einfach durchzuführende Methode mit schnellerer und isokratischer Elution, d. h. Elution mit konstantem Lösungsmittelgemisch, eingesetzt. Es ist hiermit die störungsfreie Bearbeitung sämtlicher Kakao- und Schokoladenerzeugnisse möglich.

## **Abschätzung des Kakaogehaltes**

Mit den analytisch ermittelten Gehalten an Theobromin und Coffein ist eine Abschätzung des Gehaltes an fettfreier Kakaotrockenmasse (FFKTM) in Kakaoerzeugnissen möglich. Die Kenntnis über diesen Gehalt ist wichtig für die Ermittlung der Kakaobestandteile. Da die Methylxanthingehalte in den verschiedenen Kakaosorten durchaus unterschiedlich sind, aber zur Schokoladenherstellung in der Regel Mischungen

(Blends) eingesetzt werden, kann für die Berechnung ein mittlerer Gehalt von 2,6–3,4% herangezogen werden. Tiefergehende Informationen in der Übersichtsarbeit Matissek R (1997) Evaluation of xanthine derivatives in chocolate - nutritional and chemical aspects. Z Lebensm Unters Forsch A 205: 175–184.

*SÜSSWAREN (2001) Heft 4*