

# Inhaltsverzeichnis

---

## I Grundlagen

|          |   |           |
|----------|---|-----------|
| <b>1</b> | <b>Strategien zur Untersuchung von Lebensmitteln .....</b>                | <b>3</b>  |
| 1.1      | Gewährleistung von Qualität und Sicherheit der Lebensmittel.....          | 4         |
| 1.2      | Grundprinzipien der Untersuchung von Lebensmitteln.....                   | 5         |
| 1.3      | Methodische Vorgehensweise bei der Untersuchung von Lebensmitteln ...     | 6         |
| 1.3.1    | Probenbeschreibung.....   | 7         |
| 1.3.2    | Probenvorbereitung .....  | 8         |
| 1.3.3    | Analysenparameter .....   | 8         |
| 1.3.3.1  | Allgemeine Parameter .....  | 8         |
| 1.3.3.2  | Spezielle Parameter .....   | 8         |
| 1.3.3.3  | Authentizitätsparameter .....   | 9         |
| 1.4      | <b>Rechtliche Regelungen und Normen .....</b>                             | <b>10</b> |
| 1.4.1    | Europäische Gesetzgebung .....  | 10        |
| 1.4.1.1  | Basis-Verordnung (EG) Nr. 178/2002 .....                                  | 10        |
| 1.4.1.2  | Europäisches Schnellwarnsystem für Lebens- und Futtermittel (RASFF) ..... | 11        |
| 1.4.1.3  | Hygiene-Paket .....   | 11        |
| 1.4.1.4  | HACCP-Konzept.....  | 11        |
| 1.4.1.5  | Lebensmittelinformationsverordnung .....                                  | 12        |
| 1.4.1.6  | EU-Zusatzstoffverordnung .....  | 12        |
| 1.4.1.7  | Rückstände und Kontaminanten.....   | 12        |
| 1.4.1.8  | Biologisch erzeugte Lebensmittel.....                                     | 13        |
| 1.4.1.9  | EU-Kontrollverordnung .....   | 13        |
| 1.4.2    | Nationales Recht.....   | 13        |
| 1.4.2.1  | Lebensmittel-, Bedarfsgegenstände- und Futtermittelgesetzbuch .....       | 13        |
| 1.4.3    | Normen und Empfehlungen.....  | 14        |
| 1.4.3.1  | ISO-Normen .....  | 14        |
| 1.4.3.2  | EN-Normen.....  | 14        |
| 1.4.3.3  | DIN-Normen.....   | 14        |
| 1.4.3.4  | Codex Alimentarius .....  | 14        |
| 1.4.3.5  | International Food Standard.....  | 15        |
| 1.4.3.6  | Leitsätze .....   | 15        |
| 1.4.3.7  | Produktrichtlinien.....   | 15        |
|          | <b>Literatur.....</b>   | <b>15</b> |
| <b>2</b> | <b>Methodenkategorien .....</b>   | <b>17</b> |
| 2.1      | <b>Analysenmethoden .....</b>   | <b>18</b> |
| 2.1.1    | Labormethoden, Schnellmethoden, Sofortmethoden .....                      | 18        |
| 2.1.2    | Absolutmethoden .....   | 20        |
| 2.1.3    | Relativmethoden .....   | 20        |
| 2.1.4    | Aussagekraft.....   | 20        |
| 2.2      | <b>Standardmethoden .....</b>   | <b>20</b> |
| 2.2.1    | Offizielle Methoden .....   | 21        |

|       |                            |    |
|-------|----------------------------|----|
| 2.2.2 | Modifizierte Methoden..... | 22 |
| 2.3   | Literaturmethoden.....     | 22 |
| 2.4   | Hausmethoden.....          | 22 |
|       | Literatur.....             | 22 |

## II Qualität im Labor

|         |  |    |
|---------|--|----|
| 3       | <b>Beurteilung von Methoden und Ergebnissen.....</b>         | 25 |
| 3.1     | Methoden.....  | 26 |
| 3.1.1   | Validierung und Verifizierung.....                           | 26 |
| 3.1.1.1 | Spezifität, Selektivität .....                               | 28 |
| 3.1.1.2 | Präzision.....   | 28 |
| 3.1.1.3 | Richtigkeit, Wiederfindung .....                             | 29 |
| 3.1.1.4 | Robustheit.....  | 34 |
| 3.1.1.5 | Linearität .....   | 34 |
| 3.1.1.6 | Nachweis-, Erfassungs- und Bestimmungsgrenzen .....          | 34 |
| 3.1.2   | Kalibrierung .....   | 38 |
| 3.2     | <b>Ergebnisse .....</b>                                      | 42 |
| 3.2.1   | Anzahl der Einzelmessungen .....                             | 42 |
| 3.2.2   | Mittelwert, Varianz und Standardabweichung.....              | 42 |
| 3.2.3   | Prüfung auf Normalverteilung (Schnelltest) .....             | 43 |
| 3.2.4   | Ausreißer .....  | 44 |
| 3.2.5   | Angabe des Messergebnisses.....                              | 49 |
| 3.2.5.1 | Konfidenzintervall für kleine Stichprobenumfänge .....       | 49 |
| 3.2.5.2 | Vergleich eines Mittelwertes mit einem Soll-/Grenzwert ..... | 49 |
| 3.2.5.3 | Messunsicherheit .....                                       | 49 |
| 3.2.6   | Umgang mit Datensätzen .....                                 | 52 |
| 3.2.6.1 | Zensierte Daten.....   | 52 |
| 3.2.6.2 | Praktische Anwendung.....                                    | 53 |
| 3.3     | Nulltoleranz.....  | 54 |
|         | Literatur.....   | 55 |
| 4       | <b>Qualitätsmanagement im Labor .....</b>                    | 57 |
| 4.1     | Akkreditierung.....  | 58 |
| 4.2     | <b>Qualitätslenkung.....</b>                                 | 58 |
| 4.2.1   | Interne Qualitätssicherung .....                             | 58 |
| 4.2.2   | Externe Qualitätssicherung.....                              | 60 |
| 4.3     | <b>Eignungsprüfungen .....</b>                               | 61 |
|         | Literatur.....   | 62 |

## III Instrumentelle Techniken in der Lebensmittelanalytik

|       |                                      |    |
|-------|--------------------------------------|----|
| 5     | <b>Chromatographie .....</b>         | 67 |
| 5.1   | Dünnschichtchromatographie (DC)..... | 70 |
| 5.1.1 | Eindimensionale DC.....              | 70 |

## Inhaltsverzeichnis

|  |    |
|--|----|
| 5.1.1.1 Prinzip.....   | 70 |
| 5.1.1.2 Geräte und Hilfsmittel (allgemein) .....   | 70 |
| 5.1.1.3 DC-Platten und Sorbenzien.....   | 71 |
| 5.1.1.4 Laufmittel (mobile Phase) .....  | 72 |
| 5.1.1.5 Auftragen der Lösungen .....   | 73 |
| 5.1.1.6 Entwicklung .....  | 74 |
| 5.1.1.7 Auswertung .....   | 74 |
| 5.1.1.8 Anwendungsgebiete.....   | 75 |
| 5.1.2 Zweidimensionale DC.....   | 75 |
| 5.1.3 Zirkulare DC .....   | 76 |
| <b>5.2 Hochleistungs-Dünnschichtchromatographie (HPTLC)</b> .....  | 76 |
| 5.2.1 Prinzip.....   | 76 |
| 5.2.2 Geräte und Hilfsmittel.....  | 77 |
| 5.2.3 HPTLC-Platten .....  | 77 |
| 5.2.4 Auftragen und Entwickeln.....  | 77 |
| 5.2.5 Dokumentieren und Quantifizieren.....  | 78 |
| 5.2.6 Anwendungsgebiete.....   | 79 |
| <b>5.3 Gaschromatographie (GC)</b> .....   | 79 |
| 5.3.1 Prinzip.....   | 79 |
| 5.3.2 Geräte und Hilfsmittel (allgemein) .....   | 80 |
| 5.3.3 Trennsäulen und stationäre Phasen.....   | 80 |
| 5.3.4 Probenaufgabe/Injektion.....   | 81 |
| 5.3.5 Säulentemperatur/Trennung .....  | 82 |
| 5.3.6 Detektoren .....   | 82 |
| 5.3.6.1 Flammenionisationsdetektor .....   | 82 |
| 5.3.6.2 Wärmeleitfähigkeitsdetektor .....  | 83 |
| 5.3.6.3 Elektroneneinfangdetektor .....  | 83 |
| 5.3.6.4 Chemolumineszenzdetektor .....   | 84 |
| 5.3.7 Gaschromatogramme/Auswertung.....  | 84 |
| 5.3.7.1 Externe Standardmethode .....  | 84 |
| 5.3.7.2 Interne Standardmethode.....   | 85 |
| 5.3.7.3 Standardadditionsmethode .....   | 85 |
| 5.3.8 Anwendungsgebiete.....   | 86 |
| <b>5.4 Hochleistungs-Flüssigchromatographie (HPLC)</b> .....   | 86 |
| 5.4.1 Prinzip.....   | 86 |
| 5.4.2 Geräte und Hilfsmittel (allgemein) .....   | 87 |
| 5.4.3 Trennsäulen und Teilchentypen .....  | 87 |
| 5.4.4 Trennverfahren und Säulenfüllmaterialien .....   | 88 |
| 5.4.4.1 Adsorptionschromatographie (Normalphasen-Chromatographie) .....  | 88 |
| 5.4.4.2 Reversed-Phase (RP)-Chromatographie (Umkehrphasen-Chromatographie) ..  | 88 |
| 5.4.4.3 Ionenpaarchromatographie (Ion Pair Chromatography, IPC) .....  | 89 |
| 5.4.4.4 Ionenaustauschchromatographie (Ion Exchange Chromatography, IEC),<br>Ionenchromatographie (High Performance Ion Chromatography, HPIC)..... | 89 |
| 5.4.4.5 Weitere Trennverfahren .....   | 90 |
| 5.4.5 Probenaufgabe/Injektion.....   | 90 |
| 5.4.6 Elutionsmittel und Flussrate .....   | 91 |
| 5.4.7 Trennmodus und Temperatureinfluss .....  | 92 |
| 5.4.8 Detektoren .....   | 92 |

|         |  |     |
|---------|--|-----|
| 5.4.8.1 | UV/Vis-Detektor.....   | 93  |
| 5.4.8.2 | Fluoreszenzdetektor .....  | 93  |
| 5.4.8.3 | Refraktionsindex-Detektor .....  | 93  |
| 5.4.8.4 | Chemilumineszenzdetektor .....   | 94  |
| 5.4.8.5 | Lichtstreuendetektor (Evaporative Light Scattering Detector, ELSD) ..... | 94  |
| 5.4.8.6 | Massenselektive Detektoren.....  | 95  |
| 5.4.9   | Flüssigchromatogramme/Auswertung.....                                    | 95  |
| 5.4.10  | Anwendungsgebiete.....   | 95  |
| 5.5     | <b>Denaturierende HPLC</b> .....   | 95  |
| 5.5.1   | Prinzip.....   | 96  |
| 5.5.2   | Geräte und Hilfsmittel.....  | 96  |
| 5.5.3   | Arbeitsweise.....  | 96  |
| 5.5.3.1 | Nicht-denaturierender Modus.....   | 97  |
| 5.5.3.2 | Partiell-denaturierender Modus .....                                     | 98  |
| 5.5.3.3 | Komplett-denaturierender Modus.....                                      | 99  |
| 5.5.4   | Anwendungsgebiete.....   | 99  |
|         | <b>Literatur</b> .....   | 100 |
| 6       | <b>Massenspektrometrie</b> .....   | 103 |
| 6.1     | Prinzip .....  | 104 |
| 6.2     | <b>Ionenerzeugung</b> .....  | 104 |
| 6.2.1   | Elektronenstoßionisation.....  | 105 |
| 6.2.2   | Chemische Ionisation .....   | 105 |
| 6.2.3   | Elektrosprayionisation.....  | 105 |
| 6.2.4   | Chemische Ionisierung unter Atmosphärendruck .....                       | 106 |
| 6.2.5   | Induktiv gekoppeltes Plasma .....  | 106 |
| 6.2.6   | Matrix-unterstützte Laserdesorptionsionisation .....                     | 106 |
| 6.3     | <b>Ionen-Analysatoren</b> .....  | 106 |
| 6.3.1   | Quadrupol-Massenspektrometer .....                                       | 107 |
| 6.3.2   | Ionenfallen .....  | 108 |
| 6.3.3   | Flugzeit-Massenspektrometer .....  | 108 |
| 6.3.4   | Sektorfeld-Massenspektrometer.....                                       | 108 |
| 6.4     | <b>Ionen-Detektoren</b> .....  | 109 |
| 6.5     | <b>Auswertung</b> .....  | 109 |
| 6.5.1   | SCAN-Modus .....   | 109 |
| 6.5.2   | SIM-Modus .....  | 109 |
| 6.5.3   | SRM-Modus.....   | 110 |
| 6.5.4   | MRM-Modus.....   | 110 |
|         | <b>Literatur</b> .....   | 110 |
| 7       | <b>Kopplungstechniken</b> .....  | 111 |
| 7.1     | <b>Kopplung Chromatographie und Massenspektrometrie</b> .....            | 112 |
| 7.1.1   | Massenspektrometrie mit HPTLC .....                                      | 112 |
| 7.1.2   | Massenspektrometrie mit Gaschromatographie (GC-MS/GC-MSD) .....          | 113 |
| 7.1.2.1 | Prinzip .....  | 114 |
| 7.1.2.2 | Anwendungsgebiete.....   | 114 |
| 7.1.3   | Tandem-Massenspektrometrie mit Flüssigchromatographie (LC-MS/MS) .....   | 114 |

## Inhaltsverzeichnis

|   |            |
|---|------------|
| 7.1.3.1 Prinzip.....  | 114        |
| 7.1.3.2 Anwendungsbereiche.....   | 115        |
| 7.1.4 Matrix-unterstützte Laserdesorption/Ionisierung-Flugzeit-Massenspektrometrie (MALDI-TOF-MS) ..... | 115        |
| 7.1.4.1 Prinzip.....  | 115        |
| 7.1.4.2 Anwendungsbereiche.....   | 116        |
| 7.1.5 Massenspektrometrie mit induktiv-gekoppeltem Plasma (ICP-MS) .....                                | 116        |
| 7.1.5.1 Prinzip.....  | 116        |
| 7.1.5.2 Arbeitsweise.....   | 116        |
| 7.1.5.3 Probeneinführungssystem .....   | 116        |
| 7.1.5.4 Interface und Ionenoptik.....   | 117        |
| 7.1.5.5 Quadrupol-MS und Detektor .....   | 117        |
| 7.1.5.6 Anwendungsbereiche.....   | 117        |
| 7.2 Kopplung Chromatographie und Chromatographie .....  | 117        |
| 7.2.1 Flüssigchromatographie mit Gaschromatographie (LC-GC) .....                                       | 117        |
| 7.2.2 Gaschromatographie mit Gaschromatographie .....   | 118        |
| 7.2.2.1 Mehrdimensionale Gaschromatographie (GC-GC) .....   | 118        |
| 7.2.2.2 Multidimensionale umfassende Chromatographie (GCxGC) .....                                      | 120        |
| Literatur (Auswahl).....  | 121        |
| <b>8 Spektrometrie.....</b>   | <b>123</b> |
| 8.1 Ultraviolet/Visuell-Spektrometrie – Photometrie .....   | 126        |
| 8.1.1 Prinzip.....  | 126        |
| 8.1.2 Aufnahme von UV/Vis-Spektren .....  | 126        |
| 8.1.3 Interpretation von UV/Vis-Spektren.....   | 127        |
| 8.1.4 Das Lambert-Beersche Gesetz .....   | 127        |
| 8.1.5 Photometrie .....   | 128        |
| 8.1.6 Anwendungsbereiche.....   | 128        |
| 8.1.7 Auswertung .....  | 129        |
| 8.2 Infrarotspektrometrie (IR-Spektrometrie).....   | 129        |
| 8.2.1 Prinzip.....  | 129        |
| 8.2.2 Anzahl und Art der Schwingungen .....   | 130        |
| 8.2.3 Aufnahme von IR-Spektren .....  | 130        |
| 8.2.4 Anwendungsbereiche .....  | 132        |
| 8.2.5 Auswertung/Interpretation von IR-Spektren .....   | 132        |
| 8.3 Kernspinresonanzspektrometrie (NMR-Spektrometrie).....  | 133        |
| 8.3.1 Prinzip.....  | 133        |
| 8.3.2 Messverfahren .....   | 136        |
| 8.3.3 Relaxation .....  | 137        |
| 8.3.4 Geräte und Hilfsmittel.....   | 137        |
| 8.3.5 Anwendungen .....   | 137        |
| 8.3.5.1 Hochauflösende NMR-Spektrometrie .....  | 137        |
| 8.3.5.2 SNIF-NMR .....  | 138        |
| 8.3.5.3 Festkörper-NMR .....  | 138        |
| 8.3.5.4 Kernspintomographie (MRI-NMR).....  | 138        |

|         |  |     |
|---------|--|-----|
| 8.3.5.5 | Niederfeld-NMR.....  | 138 |
| 8.4     | <b>Atomabsorptionsspektrometrie (AAS).....</b>   | 139 |
| 8.4.1   | Prinzip.....   | 139 |
| 8.4.2   | Arbeitsweise eines Atomabsorptionsspektrometers.....   | 140 |
| 8.4.3   | Strahlungs-/Lichtquelle .....  | 141 |
| 8.4.3.1 | Atomisierung .....   | 141 |
| 8.4.3.2 | Ablauf eines Analysenganges .....  | 143 |
| 8.4.3.3 | Monochromator .....  | 144 |
| 8.4.3.4 | Detektor .....   | 145 |
| 8.4.4   | Leistungsfähigkeit und Untergrundkompensation .....  | 145 |
| 8.4.4.1 | Spezifität .....   | 145 |
| 8.4.4.2 | Selektivität.....  | 145 |
| 8.4.4.3 | Störmöglichkeiten .....  | 145 |
| 8.4.4.4 | Kompensation unspezifischer Strahlungsverluste durch Deuterium( $D_2$ )-Untergrundkompensator..... | 146 |
| 8.4.5   | Anwendungsgebiete.....   | 146 |
| 8.4.6   | Auswertung .....   | 146 |
| 8.5     | <b>Flammenphotometrie.....</b>   | 147 |
| 8.5.1   | Prinzip.....   | 147 |
| 8.5.2   | Arbeitsweise eines Flammenphotometers .....  | 147 |
| 8.5.3   | Anwendungsgebiete.....   | 148 |
| 8.5.4   | Auswertung .....   | 149 |
| 8.6     | <b>Polarimetrie.....</b>   | 149 |
| 8.6.1   | Prinzip.....   | 149 |
| 8.6.1.1 | Optische Aktivität und spezifische Drehung.....  | 150 |
| 8.6.2   | Arbeitsweise eines Polarimeters .....  | 151 |
| 8.6.3   | Anwendungsgebiete.....   | 152 |
| 8.6.4   | Auswertung .....   | 153 |
| 8.7     | <b>Refraktometrie.....</b>   | 153 |
| 8.7.1   | Prinzip.....   | 153 |
| 8.7.2   | Arbeitsweise eines Refraktometers .....  | 154 |
| 8.7.3   | Anwendungsgebiete.....   | 156 |
| 8.7.4   | Auswertung .....   | 157 |
| 8.8     | <b>Spektrometrische Schnellmethoden .....</b>  | 157 |
| 8.8.1   | Prinzip.....   | 157 |
| 8.8.2   | Anwendungsgebiete.....   | 158 |
|         | Literatur.....   | 158 |
| 9       | <b>Polarographie .....</b>   | 161 |
| 9.1     | Prinzip .....  | 162 |
| 9.2     | <b>Polarographische Verfahren.....</b>   | 163 |
| 9.2.1   | Gleichstrompolarographie .....   | 163 |
| 9.2.2   | Wechselstrompolarographie .....  | 164 |
| 9.2.3   | Puls-Polarographie.....  | 165 |
| 9.3     | <b>Arbeitsweise und Durchführung.....</b>  | 166 |
| 9.4     | Anwendungsgebiete .....  | 167 |
| 9.5     | Auswertung .....   | 168 |
|         | Literatur (Auswahl).....   | 168 |

|           |   |     |
|-----------|---|-----|
| <b>10</b> | <b>Enzymatische Analyse</b>                                     | 169 |
| 10.1      | Prinzip   | 170 |
| 10.2      | Arbeitsweise und Durchführung                                   | 171 |
| 10.2.1    | Probenvorbereitung  | 171 |
| 10.2.2    | Messung   | 173 |
| 10.2.3    | Arbeitsschema   | 173 |
| 10.3      | Anwendungsgebiete   | 174 |
| 10.4      | Auswertung  | 174 |
|           | Literatur (Auswahl)   | 175 |
| <b>11</b> | <b>Elektrophorese</b>   | 177 |
| 11.1      | Aufbau einer Elektrophoreseeinheit                              | 178 |
| 11.2      | Trägermaterial  | 181 |
| 11.3      | Agarose-Gelelektrophorese                                       | 181 |
| 11.3.1    | Prinzip   | 181 |
| 11.3.2    | Probenvorbereitung  | 182 |
| 11.3.3    | Agarosegele   | 182 |
| 11.3.4    | Elektrophorese  | 182 |
| 11.3.5    | Auswertung  | 183 |
| 11.3.6    | Anwendungsgebiete   | 183 |
| 11.4      | Natriumdodecylsulfat-Polyacrylamid-Gelelektrophorese (SDS-PAGE) | 183 |
| 11.4.1    | Prinzip   | 183 |
| 11.4.2    | Arbeitsweise  | 183 |
| 11.4.3    | Auswertung  | 186 |
| 11.4.4    | Anwendungsgebiete   | 187 |
| 11.5      | Isoelektrische Fokussierung auf Polyacrylamid-Gelen (IEF-PAGE)  | 187 |
| 11.5.1    | Prinzip   | 187 |
| 11.5.2    | Arbeitsweise  | 187 |
| 11.5.3    | Anwendungsgebiete   | 189 |
|           | Literatur   | 189 |
| <b>12</b> | <b>Immunchemische Verfahren</b>                                 | 191 |
| 12.1      | Enzyme-linked Immunosorbent Assay (ELISA)                       | 193 |
| 12.1.1    | Prinzip   | 193 |
| 12.1.2    | Arbeitsweise  | 194 |
| 12.1.2.1  | Sandwich-ELISA  | 194 |
| 12.1.2.2  | Kompetitiver ELISA  | 194 |
| 12.1.3    | Anwendungsgebiet  | 195 |
|           | Literatur   | 195 |
| <b>13</b> | <b>Molekularbiologische Verfahren</b>                           | 197 |
| 13.1      | DNA-Isolierungsverfahren  | 200 |
| 13.1.1    | Prinzip   | 200 |
| 13.1.2    | Arbeitsweise  | 200 |
| 13.2      | DNA-Konzentrationsbestimmungsverfahren                          | 202 |
| 13.2.1    | Prinzip   | 202 |
| 13.2.2    | Arbeitsweise  | 203 |
| 13.2.3    | Anwendungsgebiete   | 203 |

|          |  |     |
|----------|--|-----|
| 13.3     | <b>Qualitative Endpunkts-PCR</b> .....   | 203 |
| 13.3.1   | Prinzip.....   | 203 |
| 13.3.2   | Arbeitsweise.....  | 204 |
| 13.3.3   | Auswertung.....  | 206 |
| 13.3.4   | Anwendungsgebiete.....   | 206 |
| 13.4     | <b>PCR-Restriktionsfragmentlängenpolymorphismus (RFLP)</b> .....                             | 207 |
| 13.4.1   | Prinzip.....   | 207 |
| 13.4.2   | Arbeitsweise.....  | 207 |
| 13.4.3   | Auswertung.....  | 208 |
| 13.4.4   | Anwendungsgebiete.....   | 209 |
| 13.5     | <b>Quantitative Realtime-PCR</b> .....   | 209 |
| 13.5.1   | Prinzip.....   | 209 |
| 13.5.2   | Geräte und Hilfsmittel.....  | 210 |
| 13.5.3   | Arbeitsweise.....  | 211 |
| 13.5.4   | Auswertung.....  | 211 |
| 13.5.4.1 | Absolute Quantifizierung.....  | 211 |
| 13.5.4.2 | Relative Quantifizierung.....  | 213 |
| 13.5.5   | Anwendungsgebiete.....   | 214 |
| 13.6     | <b>Isothermale Amplifikationsverfahren</b> .....   | 214 |
| 13.6.1   | Übersicht .....  | 214 |
| 13.6.2   | LAMP (Loop-Mediated Isothermal Amplification).....   | 215 |
| 13.6.3   | Methodenvergleich: LAMP versus PCR.....  | 216 |
| 13.7     | <b>Moderne DNA-Sequenzierungsverfahren:</b><br><i>Next Generation Sequencing (NGS)</i> ..... | 218 |
| 13.7.1   | Prinzip.....   | 218 |
| 13.7.2   | Aktuelle Verfahren .....   | 218 |
| 13.7.3   | Limitationen und Ausblick.....   | 220 |
| 13.8     | <b>Molekularbiologische Schnellmethoden</b> .....  | 221 |
| 13.8.1   | Analyterfassung – Antikörper und Aptamere .....  | 221 |
| 13.8.1.1 | Prinzip.....   | 222 |
| 13.8.1.2 | Anwendungsgebiete.....   | 223 |
| 13.8.2   | Auslesetechniken – Lateral Flow Assay .....  | 223 |
| 13.8.2.1 | Prinzip.....   | 223 |
| 13.8.2.2 | Anwendungsgebiete .....  | 224 |
| 13.8.3   | Biochip-Technologien .....   | 224 |
| 13.8.3.1 | Prinzip.....   | 224 |
| 13.8.3.2 | Anwendungsgebiete .....  | 226 |
|          | <b>Weiterführende Literatur</b> .....  | 226 |

## IV Untersuchung von Lebensmitteln

|        |   |     |
|--------|---|-----|
| 14     | <b>Allgemeine Parameter</b> .....                   | 231 |
| 14.1   | Dichte .....  | 232 |
| 14.1.1 | Pyknometrische Bestimmung der relativen Dichte..... | 233 |
| 14.1.2 | Dichtebestimmung mittels Biegeschwinger.....        | 235 |

## Inhaltsverzeichnis

|   |            |
|---|------------|
| <b>14.2 Wasser .....</b>  | <b>237</b> |
| 14.2.1 Bestimmung von Wasser durch Karl-Fischer-Titration .....                               | 237        |
| 14.2.2 Bestimmung von Wasser durch azeotrope Destillation.....                                | 240        |
| <b>14.3 Trockensubstanz .....</b>   | <b>242</b> |
| 14.3.1 Gravimetrische Bestimmung der Trockensubstanz.....                                     | 243        |
| 14.3.2 Refraktometrische Bestimmung der Trockensubstanz .....                                 | 245        |
| 14.3.3 Pyknometrische Bestimmung der Trockensubstanz.....                                     | 246        |
| <b>14.4 Glührückstand.....</b>  | <b>247</b> |
| 14.4.1 Bestimmung des Glührückstandes durch direkte Veraschung<br>(Aschegehalt) .....         | 247        |
| 14.4.2 Bestimmung des säureunlöslichen Glührückstandes (Sandgehalt) .....                     | 249        |
| 14.4.3 Bestimmung der Type von Getreidemehl.....  | 251        |
| 14.4.4 Bestimmung der Aschenalkalität.....  | 252        |
| <b>14.5 Ballaststoff-/Rohfaser .....</b>  | <b>253</b> |
| 14.5.1 Bestimmung der unlöslichen organischen Ballaststoffe nach van Soest.....               | 254        |
| 14.5.2 Bestimmung der Rohfaser nach Scharrer-Kürschner .....                                  | 256        |
| Literatur.....  | 258        |
| <b>15 Fette, Fettbegleitstoffe .....</b>  | <b>261</b> |
| <b>15.1 Fett.....</b>   | <b>262</b> |
| 15.1.1 Direkte Extraktion – Methode nach Soxhlet .....  | 264        |
| 15.1.2 Extraktion nach Säureaufschluss – Methode nach Weibull-Stoldt.....                     | 267        |
| 15.2 Fett in Milch und Milcherzeugnissen.....   | 269        |
| 15.2.1 Extraktion nach Ammoniakaufschluss – Methode nach Röse-Gottlieb.....                   | 269        |
| 15.2.2 Extraktion nach Säureaufschluss – Methode nach Schmid-<br>Bondzynski-Ratzlaff .....    | 271        |
| 15.2.3 Acidobutryometrische Bestimmung – Methode nach Gerber .....                            | 273        |
| 15.3 Charakterisierung von Fetten und Ölen.....   | 275        |
| 15.3.1 Chemische Methoden – Kennzahlen .....  | 275        |
| 15.3.1.1 Bestimmung der Verseifungszahl .....   | 276        |
| 15.3.1.2 Bestimmung der Iodzahl – Methode nach Kaufmann .....                                 | 277        |
| 15.3.1.3 Bestimmung der Säurezahl und des FFA-Gehaltes .....                                  | 280        |
| 15.3.1.4 Bestimmung der Peroxidzahl – Methode nach Wheeler.....                               | 284        |
| 15.3.1.5 Bestimmung der Anisidin Zahl.....  | 287        |
| 15.3.1.6 Bestimmung der Totox-Zahl .....  | 289        |
| 15.3.1.7 Bestimmung der Oxidationsbereitschaft .....  | 290        |
| 15.3.1.8 Bestimmung der Halbmikro-Buttersäurezahl .....                                       | 292        |
| 15.3.1.9 Bestimmung der Unverseifbaren Anteile .....  | 296        |
| 15.3.2 Spektrometrische Methoden .....  | 298        |
| 15.3.2.1 Charakterisierung von Fetten und Ölen anhand des UV-Spektrums .....                  | 298        |
| 15.3.2.2 Nachweis der Fettraffination mittels UV-Spektrometrie .....                          | 300        |
| 15.3.2.3 Nachweis der Fetthärtung mittels IR-Spektrometrie .....                              | 302        |
| 15.3.3 Chromatographische Methoden.....   | 305        |
| 15.3.3.1 Charakterisierung von Fetten und Ölen mittels DC.....                                | 305        |
| 15.3.3.2 Trennung und Identifizierung von Fettsäuren (als Methylester) mittels<br>GC-FID..... | 307        |

|   |            |
|---|------------|
| 15.3.3.3 Quantifizierung des Milchfettgehaltes mittels GC-FID.....  | 310        |
| 15.3.3.4 Trennung und Identifizierung von trans-Fettsäuren (als Methylester)<br>mittels GC-FID .....                        | 311        |
| 15.3.3.5 Bestimmung von Epoxyfettsäuren mittels GC-FID .....  | 313        |
| 15.3.3.6 Bestimmung der Triglyceridverteilung mittels Hochtemperatur-GC-FID .....   | 316        |
| 15.3.3.7 Bestimmung von Kakaobutteräquivalenten mittels GC-FID (CoCal-<br>Verfahren) .....                                  | 319        |
| 15.3.3.8 Nachweis und Identifizierung von Sterinen mittels Kombination von DC<br>und GC-FID .....                           | 323        |
| Literatur.....  | 327        |
| <b>16 Aminosäuren, Peptide, Proteine, Nucleinsäuren .....</b>   | <b>331</b> |
| 16.1 <b>Aminosäuren.....</b>  | <b>337</b> |
| 16.1.1 Identifizierung von Aminosäuren mittels DC .....   | 338        |
| 16.1.2 Bestimmung der Formolzahl.....   | 339        |
| 16.1.3 Photometrische Bestimmung von Hydroxyprolin.....   | 341        |
| 16.1.4 Photometrische Bestimmung von Prolin .....   | 345        |
| 16.2 <b>Proteine.....</b>   | <b>347</b> |
| 16.2.1 Charakterisierung von Proteinen – Übersicht.....   | 347        |
| 16.2.1.1 Allgemeine Nachweisreaktionen.....   | 348        |
| 16.2.1.2 Möglichkeiten der Reinigung und Anreicherung .....   | 349        |
| 16.2.1.3 Möglichkeiten der Identifizierung (Strukturanalyse) .....  | 350        |
| 16.2.2 Bestimmung von Proteinen.....  | 350        |
| 16.2.2.1 Bestimmung des Gesamtproteinangehaltes über Stickstoff – Methode<br>nach Kjeldahl .....                            | 351        |
| 16.2.2.2 Bestimmung des Reinproteinangehaltes – Methode nach Barnstein .....  | 358        |
| 16.2.3 Elektrophoretische Methoden .....  | 360        |
| 16.2.3.1 Bestimmung der molekularen Masse von Proteinuntereinheiten<br>mittels SDS-PAGE.....                                | 360        |
| 16.2.3.2 Differenzierung von Tierarten mittels IEF .....  | 363        |
| 16.2.4 Immunchemische Methoden .....  | 365        |
| 16.2.4.1 Bestimmung von Molkenproteinen mittels ELISA.....  | 365        |
| 16.3 <b>Nucleinsäuren.....</b>  | <b>368</b> |
| 16.3.1 Nachweis von Bt-Mais mittels Qualitativer PCR .....  | 370        |
| 16.3.2 Differenzierung von Kakaoarten mittels PCR-RFLP .....  | 374        |
| Literatur.....  | 376        |
| <b>17 Kohlenhydrate .....</b>   | <b>379</b> |
| 17.1 <b>Mono-, Di- und Oligosaccharide .....</b>  | <b>380</b> |
| 17.1.1 Chromatographische Methoden .....  | 381        |
| 17.1.1.1 Identifizierung von Zuckern mittels DC.....  | 383        |
| 17.1.1.2 Bestimmung von Zuckern mittels HPLC-RI.....  | 384        |
| 17.1.1.3 Bestimmung von Zuckern mittels GC-FID .....  | 388        |
| 17.1.2 Polarimetrische Methoden .....   | 392        |
| 17.1.2.1 Polarimetrische Bestimmung von Saccharose und Glucose .....  | 393        |
| 17.1.3 Chemische Summenmethoden .....   | 396        |
| 17.1.3.1 Bestimmung der direkt reduzierenden Zucker vor der Inversion –<br>Reduktometrische Methode nach Luff-Schoorl ..... | 396        |

|  |            |
|--|------------|
| <b>17.1.3.2 Bestimmung der gesamtreduzierenden Zucker nach der Inversion – Reduktometrische Methode nach Luff-Schoorl .....</b>        | <b>401</b> |
| <b>17.1.3.3 Bestimmung von reduzierenden Zuckern (Lactose) und Saccharose – Komplexometrische Methode nach Potterat-Eschmann .....</b> | <b>404</b> |
| <b>17.1.4 Chemische Selektivmethoden .....</b>   | <b>413</b> |
| <b>17.1.4.1 Bestimmung von Fructose – Methode nach Willstätter-Schudel .....</b>   | <b>413</b> |
| <b>17.1.4.2 Bestimmung von Saccharose – Kalkvorschrift .....</b>   | <b>416</b> |
| <b>17.1.5 Enzymatische Methoden .....</b>  | <b>417</b> |
| <b>17.1.5.1 Enzymatische Bestimmung von Glucose, Fructose und Mannose.....</b>   | <b>418</b> |
| <b>17.1.5.2 Enzymatische Bestimmung von Glucose und Saccharose .....</b>   | <b>421</b> |
| <b>17.2 Polysaccharide .....</b>   | <b>423</b> |
| <b>17.2.1 Nachweis von Stärke .....</b>  | <b>423</b> |
| <b>17.2.2 Polarimetrische Bestimmung von Stärke .....</b>  | <b>425</b> |
| <b>17.2.3 Photometrische Bestimmung von Pektin.....</b>  | <b>428</b> |
| <b>Literatur.....</b>  | <b>431</b> |
| <br>   |            |
| <b>18 Spezielle Inhaltsstoffe .....</b>  | <b>433</b> |
| <b>18.1 Alkohole.....</b>  | <b>435</b> |
| <b>18.1.1 Pyknometrische Bestimmung des Gesamtalkoholgehaltes.....</b>   | <b>435</b> |
| <b>18.1.2 Bestimmung von Methanol – Chromotropsäuremethode.....</b>  | <b>440</b> |
| <b>18.1.3 Identifizierung und Bestimmung von Alkoholen mittels GC.....</b>   | <b>444</b> |
| <b>18.2 Organische Säuren .....</b>  | <b>446</b> |
| <b>18.2.1 Identifizierung von organischen Säuren mittels DC.....</b>   | <b>446</b> |
| <b>18.2.2 Bestimmung der flüchtigen Säuren .....</b>   | <b>449</b> |
| <b>18.2.3 Chemisch-photometrische Methoden .....</b>   | <b>450</b> |
| <b>18.2.3.1 Photometrische Bestimmung von Weinsäure.....</b>   | <b>450</b> |
| <b>18.2.3.2 Photometrische Bestimmung von Milchsäure .....</b>   | <b>452</b> |
| <b>18.2.3.3 Photometrische Bestimmung von Äpfelsäure .....</b>   | <b>455</b> |
| <b>18.2.4 Enzymatische Methoden .....</b>  | <b>457</b> |
| <b>18.2.4.1 Enzymatische Bestimmung von L-Äpfelsäure .....</b>   | <b>457</b> |
| <b>18.2.4.2 Enzymatische Bestimmung von Citronensäure .....</b>  | <b>460</b> |
| <b>18.3 Stickstoffsubstanzen .....</b>   | <b>463</b> |
| <b>18.3.1 Theobromin und Coffein .....</b>   | <b>464</b> |
| <b>18.3.1.1 Photometrische Bestimmung von Methylxanthinen.....</b>   | <b>465</b> |
| <b>18.3.1.2 Bestimmung von Coffein und Theobromin mittels HPLC-UV .....</b>  | <b>467</b> |
| <b>18.3.1.3 Abschätzung der Kakaostandteile.....</b>   | <b>469</b> |
| <b>18.3.2 Photometrische Bestimmung von Gesamtkreatinin.....</b>   | <b>471</b> |
| <b>18.3.3 Identifizierung von biogenen Aminen mittels DC.....</b>  | <b>475</b> |
| <b>18.3.4 Fluorimetrische Bestimmung von Histamin .....</b>  | <b>478</b> |
| <b>18.4 Vitamine .....</b>   | <b>481</b> |
| <b>18.4.1 Photometrische Bestimmung von Vitamin A (Retinol).....</b>   | <b>482</b> |
| <b>18.4.2 Fluorimetrische Bestimmung von Vitamin B<sub>1</sub> (Thiamin) .....</b>   | <b>485</b> |
| <b>18.4.3 Bestimmung von Vitamin C (L-Ascorbinsäure) .....</b>   | <b>489</b> |
| <b>18.4.3.1 L-Ascorbinsäurebestimmung – Methode nach Tillmanns.....</b>  | <b>490</b> |
| <b>18.4.3.2 Iodometrische Bestimmung von L-Ascorbinsäure.....</b>  | <b>492</b> |
| <b>18.4.3.3 Polarographische Bestimmung von L-Ascorbinsäure.....</b>   | <b>493</b> |
| <b>18.4.3.4 Bestimmung von L-Ascorbinsäure mittels HPLC-UV .....</b>   | <b>494</b> |
| <b>18.5 Polyphenole.....</b>   | <b>497</b> |

|           |   |     |
|-----------|---|-----|
| 18.5.1    | Bestimmung ausgewählter Polyphenole mittels HPLC-FD .....   | 498 |
| 18.5.2    | Bestimmung der Gesamtflavanole DP1–10 mittels HPLC-FD .....   | 500 |
| 18.6      | <b>Glycyrrhizin</b> .....   | 503 |
| 18.6.1    | Bestimmung von Glycyrrhizin mittels HPLC-UV.....  | 503 |
| 18.7      | <b>Aktivität von Enzymen</b> .....  | 506 |
| 18.7.1    | Photometrische Bestimmung der Amylase-Aktivität.....  | 506 |
| 18.7.2    | Photometrische Bestimmung der Phosphatase-Aktivität .....   | 509 |
| 18.8      | <b>Active Principles</b> .....  | 512 |
| 18.8.1    | Bestimmung von Cumarin mittels HPLC-UV und LC-MS/MS.....  | 512 |
| 18.9      | <b>Hydroxymethylfurfural (HMF)</b> .....  | 515 |
| 18.9.1    | Photometrische Bestimmung von Hydroxymethylfurfural (HMF) .....   | 515 |
| 18.10     | Mineralstoffe .....   | 517 |
| 18.10.1   | Bestimmung von Natrium und Kalium mittels Flammenphotometrie .....  | 518 |
| 18.10.2   | Bestimmung von Calcium und Magnesium mittels AAS .....  | 520 |
| 18.10.3   | Photometrische Bestimmung von Eisen.....  | 522 |
| 18.10.4   | Bestimmung von Chlorid.....   | 526 |
| 18.10.4.1 | Chloridbestimmung – Methode nach Mohr .....   | 526 |
| 18.10.4.2 | Chloridbestimmung durch potentiometrische Titration .....   | 529 |
| 18.10.4.3 | Chloridbestimmung – Methode nach Volhard.....   | 531 |
| 18.10.4.4 | Chloridbestimmung durch Titration mit Quecksilber(II)-nitrat .....  | 534 |
| 18.10.5   | Photometrische Phosphatbestimmung.....  | 536 |
| 18.10.6   | Simultanbestimmung von Anionen mittels Ionenchromatographie<br>(SCIC) .....   | 538 |
|           | <b>Literatur</b> .....  | 540 |
| 19        | <b>Zusatzstoffe</b> .....   | 545 |
| 19.1      | <b>Konservierungsstoffe</b> .....   | 547 |
| 19.1.1    | Identifizierung von Konservierungsstoffen mittels DC .....  | 549 |
| 19.1.2    | Identifizierung/Differenzierung von Benzoesäure und Sorbinsäure<br>mittels DC nach prächromatographischer In-situ-Derivatisierung ..... | 552 |
| 19.1.3    | Photometrische Bestimmung von Sorbinsäure.....  | 555 |
| 19.1.4    | Bestimmung von Konservierungsstoffen in fettarmen Lebensmitteln<br>mittels HPLC-UV .....  | 558 |
| 19.1.5    | Bestimmung von Konservierungsstoffen in fettrichen Lebensmitteln<br>mittels HPLC-UV .....   | 560 |
| 19.1.6    | Bestimmung von Gesamt-Schwefliger Säure (Gesamt-SO <sub>2</sub> ) .....   | 563 |
| 19.2      | <b>Süßungsmittel</b> .....  | 566 |
| 19.2.1    | Identifizierung von Süßstoffen mittels DC.....  | 567 |
| 19.2.2    | Bestimmung von Cyclamat .....   | 569 |
| 19.2.2.1  | Chemisch-gravimetrische Methode.....  | 569 |
| 19.2.2.2  | Bestimmung mittels HPLC-UV .....  | 572 |
| 19.2.3    | Bestimmung von Acesulfam-K, Aspartam und Saccharin mittels<br>Ionenpaar-HPLC-UV.....  | 574 |
| 19.2.4    | Bestimmung von Sucralose mittels HPLC-RI .....  | 578 |
| 19.2.5    | Bestimmung der Stevioglucoside mittels HPLC-UV.....   | 580 |
| 19.3      | <b>Farbstoffe</b> .....   | 583 |
| 19.3.1    | Identifizierung wasserlöslicher, synthetischer Farbstoffe mittels DC .....  | 585 |
| 19.3.2    | Identifizierung fettlöslicher Farbstoffe mittels DC.....  | 589 |

|   |     |
|---|-----|
| <b>19.4 Weitere Zusatzstoffe .....</b>  | 591 |
| 19.4.1 Identifizierung von Antioxidantien mittels DC .....  | 591 |
| 19.4.2 Photometrische Bestimmung von Nitrit und Nitrat .....  | 595 |
| 19.4.3 Nachweis von kondensierten Phosphaten mittels DC .....   | 601 |
| 19.4.4 Photometrische Bestimmung von Phosphat (Ermittlung der P-Zahl) .....   | 604 |
| 19.4.5 Photometrische Bestimmung von Milcheiweiß .....  | 606 |
| 19.4.6 Bestimmung von Ammoniumchlorid mittels Titration .....   | 609 |
| <b>Literatur .....</b>  | 611 |
| <b>20 Unerwünschte Stoffe, Kontaminanten und Prozesskontaminanten, Rückstände .....</b>   | 613 |
| <b>20.1 Elementanalytik .....</b>   | 616 |
| 20.1.1 Bestimmung von Blei mittels AAS .....  | 616 |
| 20.1.2 Bestimmung von Quecksilber mittels AAS (Kaltdampftechnik) .....  | 618 |
| 20.1.3 Bestimmung von Elementen mit ICP-MS – Übersichtsanalyse<br>(TotalQuant) .....  | 620 |
| <b>20.2 Kontaminanten .....</b>   | 622 |
| 20.2.1 Mykotoxine .....   | 622 |
| 20.2.1.1 Bestimmung von Ochratoxin A mittels HPLC-FD .....  | 623 |
| 20.2.1.2 Bestimmung von Aflatoxinen mittels HPLC-FD .....   | 625 |
| 20.2.1.3 Multimethode zur Bestimmung von Mykotoxinen mittels LC-MS/MS .....   | 629 |
| 20.2.2 Mineralölkohlenwasserstoffe (MOSH/MOAH) mittels LC-GC-FID .....  | 633 |
| 20.2.3 Bestimmung von polycyclischen aromatischen Kohlenwasserstoffen<br>(PAK) mittels HPLC-FD am Beispiel Benzo[a]pyren .....        | 638 |
| 20.2.4 Bestimmung von Benzol, Toluol und Xylool-Isomeren mittels GC/MS .....  | 643 |
| 20.2.5 Identifizierung und Bestimmung von Tetrachlorethen mittels GC-ECD .....  | 647 |
| <b>20.3 Prozesskontaminanten .....</b>  | 650 |
| 20.3.1 Bestimmung von Acrylamid mittels LC-MS/MS .....  | 650 |
| 20.3.2 Bestimmung von Chlorpropandiolen und Glycidol .....  | 654 |
| 20.3.2.1 Bestimmung von freiem 3-MCPD mittels GC-MS .....   | 655 |
| 20.3.2.2 Summenbestimmung von 3-MCPD-Fettsäureestern und Glycidyl-<br>Fettsäureestern mittels GC-MS (nach DGF) .....                  | 659 |
| 20.3.2.3 Simultanmethode zur Bestimmung von 2-, 3-MCPD- und Glycidylestern<br>mittels GC-MS (nach AOCS, sog. „Kuhlmann 3-in-1“) ..... | 662 |
| 20.3.3 Bestimmung von 5-Chlormethylfurfural (CMF) mittels GC-MS .....   | 669 |
| 20.3.4 Bestimmung von Imidazolen mittels LC-MS/MS .....   | 671 |
| 20.3.5 Bestimmung von Nitrosaminen mittels GC-TEA .....   | 676 |
| <b>20.4 Organische Rückstände .....</b>   | 680 |
| 20.4.1 Nachweis und Bestimmung von Malachitgrün mittels DC-Densitometrie .....  | 680 |
| <b>Literatur .....</b>  | 684 |
| <b>21 Authentizität .....</b>   | 687 |
| <b>21.1 Ansätze zur Authentizitätsprüfung .....</b>   | 688 |
| 21.1.1 Nicht-zielgerichteter Ansatz ( <i>Food Fingerprinting</i> ) .....  | 690 |
| 21.1.1.1 Identifizierung relevanter Parameter (Marker) .....  | 690 |
| 21.1.2 Zielgerichteter Ansatz ( <i>Food Targeting</i> ) .....   | 692 |
| 21.1.2.1 Bestimmung von DNA-Sequenzen .....   | 692 |
| 21.1.2.2 Bestimmung von Peptiden und Proteinen .....  | 692 |

|   |     |
|---|-----|
| 21.1.2.3 Bestimmung von Stoffwechselprodukten (Metaboliten) ..... | 693 |
| 21.1.2.4 Bestimmung von Elementen und Isotopen .....              | 693 |
| 21.1.3 <i>Omics</i> -Verfahren ( <i>Food Profiling</i> ) .....    | 693 |
| 21.1.3.1 <i>Genomics</i> .....                                    | 694 |
| 21.1.3.2 <i>Proteomics</i> .....                                  | 696 |
| 21.1.3.3 <i>Metabolomics</i> .....                                | 696 |
| 21.1.3.4 <i>Isotopolomics</i> .....                               | 697 |
| 21.1.3.5 Anwendungsgebiete.....                                   | 698 |
| Literatur.....  | 698 |

**Serviceteil**

|   |     |
|---|-----|
| Anhang .....                            | 702 |
| Abkürzungen .....                       | 702 |
| Konstanten (Auswahl) .....              | 705 |
| Kurzzeichen für Standardliteratur ..... | 705 |
| Sachverzeichnis .....                   | 706 |