



universität
wien

DIPLOMARBEIT

Untersuchungen zum Duft Wiener Kaffeehäuser

zur Erlangung des akademischen Grades

Magistra der Naturwissenschaften (Mag. rer. nat.)

an der

Fakultät für Lebenswissenschaften

der Universität Wien

Verfasserin: Marianne Pestitschek

Matrikelnummer: 0201156

Studienrichtung: A 474 Diplomstudium Ernährungswissenschaften

Betreuer: Univ.-Prof. Mag. Dr. Gerhard Buchbauer,
Department für Klinische Pharmazie und Diagnostik

Wien, am 12. August 2008

*Ein Ort, wo man alleine sein möchte, dazu
aber Gesellschaft braucht.*

Alfred Polgár



Abbildung 1: Wiener Mélange

*Es gibt Kaffeehäuser für alle, an allen Orten
und für jeden Augenblick des Tages.*

Michel Vernes

Danksagung

Ich möchte mich ganz herzlich bei Univ.-Prof. Mag. Dr. Gerhard Buchbauer für die überaus zuvorkommende und kompetente Betreuung meiner Diplomarbeit bedanken. Durch seine Ratschläge und Hilfestellungen ist es erst möglich geworden, meine Arbeit auf diese Weise durchzuführen!

Weiters möchte ich mich bei René Klucky bedanken, der mir mit Ratschlägen und Tipps bei der Einarbeitung und dem richtigen Umgang mit dem Gaschromatographie/Massenspektrometrie-Gerät geholfen hat!

Außerdem geht auch ein riesiges Dankeschön an meine Familie und Freunde, die mich in jeder Hinsicht während meines Studiums und der Diplomarbeit unterstützten!

Ich möchte mich auch ausdrücklich bei Patricia Pauzenberger bedanken. In Zusammenarbeit mit ihr wurden sehr viele Messungen zu den Kaffeehausdüften Wiens und Recherchen zum Thema Kaffee durchgeführt.

Ein sehr großer Dank geht auch an Herrn Professor Edelbauer, der mir als Kaffeeexperte Österreichs sehr viel Wissen zum Thema Kaffee übermitteln konnte und es mir ermöglichte, den von ihm geleiteten Kaffee-Experten-Kurs in der Volkshochschule Hietzing zu absolvieren.



Inhaltsverzeichnis

KAPITEL I	1
1) EINLEITUNG UND ZIELSETZUNG	1
1.1.) Einleitung	1
1.2.) Zielsetzung.....	2
KAPITEL II.....	4
2) LITERATURÜBERSICHT.....	4
2.1.) Die Wiener „Kaffeetrinker-Kultur“ und die Bedeutung von Kaffee ...	4
2.2.) Die ersten Kaffeehäuser in Wien.....	5
2.2.1.) Das Café HAWELKA – Geschichte und Einrichtung	6
2.2.2.) Das Café SPERL– Geschichte und Einrichtung.....	9
2.3.) Ernährungsphysiologische und gesundheitliche Aspekte.....	12
2.3.1.) Bestandteile des gerösteten Kaffees.....	12
2.3.2.) Die richtige Menge - Verträglichkeit von Kaffee	14
2.3.3.) Häufige Fragen – Flüssigkeitsbilanz, Schlaf, Blutdruck.....	15
2.4.) Die Physiologie des Kaffees: Geschmack und Aroma.....	16
2.4.1.) Der Kaffeegeschmack.....	16
2.4.2.) Duftstoffe und das Kaffeearoma.....	17
2.5.) Der Metabolismus von Koffein	19
2.6.) Die GC/MS-SPME-Methode	24
2.6.1.) Die Grundlagen der GC/MS-Kopplung	24
2.6.2.) Die SPME- Methode.....	26
2.6.3.) Die SPME-Apparatur und Einsatz	27

KAPITEL III	29
3) MATERIAL UND METHODEN	29
3.1.) Gaschromatographische Untersuchung zum Duft Wiener Kaffeehäuser	29
3.2.) Entwickelte Methode	30
3.3.) Material, Zubehör und technische Details	31
3.4.) Auswertung der GC-MS-Chromatogramme	33
KAPITEL IV	34
4) ERGEBNISSE UND DISKUSSION	34
4.2.) Auswertung und Interpretation der Chromatogramme	34
4.2.1.) Ergebnisse des Cafés HAWELKA.....	35
4.2.2.) Ergebnisse des Cafés SPERL	46
4.2.3.) Ergebnisse der Ausschließungstests	56
4.3.) Vergleiche der Chromatogramme untereinander	61
KAPITEL V	68
5) SCHLUSSBETRACHTUNG	68
5.1.) Charakteristische Substanzen in den Kaffeehäusern	68
5.2.) Der Duft Wiener Kaffeehäuser	69
KAPITEL VI	71
6) ZUSAMMENFASSUNG	71
KAPITEL VII	72
7) SUMMARY	72

KAPITEL VIII	73
8) LITERATURVERZEICHNIS	73
KAPITEL IX	82
9) ANHANG	82
9.1.) Chromatogramme.....	82
9.2.) Lebenslauf	82

Abbildungsverzeichnis

Abbildung 1: Wiener Mélange.....	0
Abbildung 2: Leopold Hawelka in seinem Café.....	6
Abbildung 3: Café Hawelka.....	8
Abbildung 4: Eingang des Café Sperl	9
Abbildung 5: Café Sperl.....	11
Abbildung 6: Kaffeearoma	17
Abbildung 7: Metabolismus von Koffein.....	20
Abbildung 8: Koffein-Metabolismus in der Leber	22
Abbildung 9: Chromatogramm von Koffein und seinen Metaboliten	23
Abbildung 10: Schematischer Aufbau eines GC/MS-Systems.....	24
Abbildung 11: GC/MS-Gerät (Firma Thermo)	26
Abbildung 12: SPME- Field Sampler (Supelco)	27

Tabellenverzeichnis

Tabelle 1: Die Spitzenposition im Kaffeeverbrauch.....	5
Tabelle 2: Übersicht zu den Kaffee-Inhaltsstoffen.....	14
Tabelle 3: Anzahl der gefundenen Stoffklassen in einer flüchtigen Röstkaffeefraktion	18
Tabelle 4: Übersicht über einige Maillard-Produkte mit ihrem Geruch.....	19
Tabelle 5: Jene Verbindungen, die am meisten zum Kaffeearoma beitragen, beginnend mit den wirksamsten Stoffen.	19
Tabelle 6: Die Tabelle zeigt alle Kaffeearoma-Komponenten der ersten 20 Minuten der dreistündigen „Hawelka-Raumluftmessung“	37
Tabelle 7: Die Tabelle zeigt alle Kaffeearoma-Komponenten zwischen 20 und 55 Minuten der dreistündigen „Hawelka-Raumluftmessung“	40
Tabelle 8: Die Tabelle zeigt alle Kaffeearoma-Komponenten der ersten 20 Minuten der achtstündigen „Hawelka-Raumluftmessung“	41
Tabelle 9: Die Tabelle zeigt alle Kaffeearoma-Komponenten zwischen 20 und 55 Minuten der achtstündigen „Hawelka-Raumluftmessung“	45
Tabelle 10: Die Tabelle zeigt alle Kaffeearoma-Komponenten der ersten 20 Minuten der dreistündigen „Sperl-Raumluftmessung“	49
Tabelle 11: Die Tabelle zeigt alle Kaffeearoma-Komponenten zwischen 20 und 55 Minuten der dreistündigen „Sperl-Raumluftmessung“	51
Tabelle 12: Die Tabelle zeigt alle Kaffeearoma-Komponenten der ersten 20 Minuten der achtstündigen „Sperl-Raumluftmessung“	54
Tabelle 13: Die Tabelle zeigt alle Kaffeearoma-Komponenten zwischen 20 und 55 Minuten der achtstündigen „Sperl-Raumluftmessung“	56
Tabelle 14: Wichtigsten Substanzen im „Zigarettenrauch“ (links) und „Tabakrauch“ (rechts)	60
Tabelle 15: Zigarettenrauch- und andere Substanzen der achtstündigen „Hawelka-Raumluftmessung“	64
Tabelle 16: Zigarettenrauch- und andere Substanzen der achtstündigen „Sperl-Raumluftmessung“	66

Abkürzungsverzeichnis

µA	Microampere
µl	Mikroliter
µm	Mikrometer
amu	atomic mass unit, 1 amu = 1,6605655 *10 ⁻²⁷ kg
bzw.	beziehungsweise
EI	Elektronenstoßionisation, electron impact
et al.	und andere
eV	1 Elektronenvolt = 1.60217646 ×10 ⁻¹⁹ Joules
GC	Gaschromatographie
HPLC	High Performance Liquid Chromatography
HS	Headspace
MS	Massenspektrometrie
PDMS	Polydimethylsiloxan
P-Nr.	Peak-Nummer
ppm	parts per million, 10 ⁻⁶
RT	Retentionszeit
SPME	Solid Phase Microextraction
TIC	total ion current
u.a.	unter anderem
v.a.	vor allem
z.B.	zum Beispiel

KAPITEL I

1) EINLEITUNG UND ZIELSETZUNG

1.1.) Einleitung

Da weltweit immer mehr Kaffee konsumiert und auch sehr viel Zeit in den Kaffeehäusern verbracht wird, hat sich die Frage gestellt, was den typischen Duft bzw. Geruch in den Kaffeehäusern Wiens ausmacht. Dazu hat das insgesamt drei Jahre dauernde Projekt des Wiener Wissenschafts-, Forschungs- und Technologiefonds (WWTF) "Tast- und Duftdesign. Ressourcen für die Creative Industries in Wien 2007-2010" den Ausschlagpunkt gegeben. Im Rahmen dessen begannen die Raumluf-Messungen in ausgewählten Wiener Kaffeehäusern.

Fast jeder kennt das „Café Hawelka“ oder geht auf eine Mélange zwischendurch ins „Sperl“ oder eben in andere Cafés, um Freunde zu treffen oder um sich einfach nur etwas Ruhe, Unterhaltung und Entspannung zu gönnen und das in jeder Altersgruppe. Die Kaffeehäuser sind aber auch für Touristen ein großer Anziehungspunkt, weil es in Wien eine sehr bedeutende Kaffeehauskultur gibt. Aus diesem Grund ist es interessant zu wissen und herauszufinden, was genau die typische Wiener Kaffeehauskultur ausmacht.

Natürlich spielen beim Kaffeehausbesuch viele Eindrücke eine Rolle wie die Einrichtung, die Besucherzahl, welche Berufsschichten das Café besuchen oder auch das Angebot an Speisen und Getränke. Das alles liefert einen großen Beitrag zur Duftentwicklung in einem Raum und ist in den Untersuchungen zu berücksichtigen.

Zu den Untersuchungen der Wiener Kaffeehäuser zählt die Atmosphäre, diese umfasst sowohl den Ort als auch die Umgebung, aber auch die Geschichte der Cafés. *Vosicky* definiert das Wiener Kaffeehaus als „nicht zu Hause, und doch nicht an der frischen Luft.“ Diese Definition ist nämlich für die Untersuchung der Geruchsempfindung von besonderer Bedeutung. Eine Reihe von Merkmalen machen das Kaffeehaus aus, wie die angebotenen Zeitungen und Zeitschriften,

die Öffnungszeiten und die Platzierung der Uhr. Auch akustische Kriterien sind miteinzubeziehen. Der Geruch ist Teil der Atmosphäre [VOSICKY, 2007].

Um diese Düfte in den Kaffeehäusern Wiens gezielt und effektiv „einfangen“ und analysieren zu können, wurde die GC/MS- SPME Methode gewählt, die es ermöglicht, die flüchtigen Verbindungen in den Kaffeehäusern zu identifizieren. Die daraus resultierenden Ergebnisse aus einer kombinierten Auswertung von zwei Bibliotheken zur Identifikation der Peaks, literarischen Vergleichsstudien und olfaktorischen Daten sollen dazu dienen, jene Aromakomponenten zu identifizieren, die den Duft der Wiener Kaffeehäuser ausmacht.

1.2.) Zielsetzung

Ziel der vorliegenden Arbeit war es, die durch die Nase wahrgenommenen Düfte und Gerüche genauer zu untersuchen. Auch jene Düfte, die olfaktorisch nicht wahrgenommen werden können, zum Beispiel solche, die in zu geringen Mengen in der Luft sind oder von anderen Gerüchen „überspielt“ werden, sollten analytisch identifiziert werden. Die Ergebnisse sollten beweisen, dass es nicht der wohlriechende Kaffeeduft allein ist, der die Kaffeehäuser Wiens zum Treffpunkt vieler Leute macht. Das heißt also, dass nicht nur das gute Kaffeearoma die Gäste in die Kaffeehäuser lockt, sondern vor allem die Atmosphäre des Lokals bedeutend ist. Aus diesem Grund wird in dieser Arbeit auch allgemein auf bestimmte Kriterien in einem typischen Kaffeehaus eingegangen, genauso wie auf geschichtliche Hintergründe zweier repräsentativer Cafés. Hierzu wurden die bekanntesten Innenstadtcafés - das „Hawelka“ und das „Sperl“ – genauer unter die Lupe genommen.

Der Beginn der Arbeit beschäftigt sich mit der Bedeutung von Kaffee weltweit und spezifisch in Österreich, um einen Einblick in das umfassende Thema Kaffee zu schaffen. Da fast jeder (Wiener) morgens Kaffee trinkt, ist der Kaffee auf ernährungswissenschaftlicher Ebene - welche Inhaltsstoffe im Kaffee enthalten sind und wie dieser vom Organismus verstoffwechselt wird - sehr wichtig zu durchleuchten. Es wird genauer auf den Metabolismus von Koffein eingegangen. Wie die meisten Lebensmittel wird auch Kaffee oft sehr kritisch betrachtet, da ihm des Öfteren negative Effekte nachgesagt werden. Um solche

Vorurteile aus dem Weg zu schaffen, wird in den folgenden Kapiteln auch kurz auf den gesundheitlichen Aspekt hingewiesen. Es ist schließlich wichtig zu wissen, was genau man aufnimmt, wenn man täglich im Kaffeehaus oder auch zu Hause seine Mélange oder seinen Cappuccino genießt.

Es werden die theoretischen Grundlagen der GC/MS-SPME-Methode erklärt und allgemein auf die wichtigsten Kaffeearoma-Komponenten eingegangen. Es wird eine geeignete Methode entwickelt, mit der sich die Raumluft in den Cafés gezielt interpretieren lässt. Auch Zigarettenrauch-Messungen sollen durchgeführt werden, um genaue Vergleichsergebnisse liefern zu können, welche dann mit der Kaffeehausluft verglichen werden.

Diese Arbeit soll also einen Einblick in das breitgefächerte Thema „Kaffee“ schaffen: Insbesondere wird das gute Kaffeearoma beschrieben und vor allem die Raumluft der Wiener Kaffeehäuser analysiert.

KAPITEL II

2) LITERATURÜBERSICHT

2.1.) Die Wiener „Kaffeetrinker-Kultur“ und die Bedeutung von Kaffee

Unter Kaffee versteht man die fast vollständig von der Samenhaut befreiten rohen oder gerösteten sowie ganzen oder zerkleinerten Samen verschiedener Coffea-Arten. Von den insgesamt 80 bekannten Arten, sind nur zwei wirtschaftlich von Bedeutung, nämlich Coffea *arabica* und Coffea canephora var. *Robusta*. Diese unterscheiden sich deutlich in Geschmack und Aroma. Arabica-Sorten, die meist in höheren Lagen wachsen, sind geschmacklich wertvoller als Sorten aus niederen Lagen [HÄNSEL und PERTZ, 2007]. Robustas sind kräftiger und grober und haben ein herberes, erdig-phenolisches Aroma, da sie höhere Gehalte an Chlorogensäuren enthalten. Außerdem weisen Robustas höhere Koffeingehalte als Arabicas auf [GROSCH, 1996].

Fast jeder Wiener trinkt täglich Kaffee. Pro Haushalt werden durchschnittlich fünf Tassen Kaffee am Tag getrunken [GRAFINGER, 2008]. Der häufigste Grund für den Kaffeegenuss ist seine aktivierende Wirkung. Kaffee steht knapp hinter dem Erdöl an zweiter Stelle der Welthandelsprodukte und zählt somit zu den bedeutendsten internationalen Handelsgütern. Fünfundzwanzig Millionen Menschen sind weltweit mit dem Anbau, der Verarbeitung und dem Vertrieb von Kaffee beschäftigt [EDELBAUER, 2003]. Arabica-Kaffee liefert mehr als 80% der Weltproduktion. Espressomischungen, die in bestimmten Mischungsverhältnissen (80:20, Arabica zu Robusta) geröstet werden, gewinnen in Österreich extrem an Bedeutung [GROSCH, 1996]. Das große Angebot an Einzelportions-Maschinen mit Kapseln und Pads hat den Kaffeekonsum in Österreich stark erhöht. Aber auch die Gastronomie weist einen deutlich steigenden Kaffeeabsatz auf [GRAFINGER, 2008].

Die Werte aus Tabelle 1 sind aus dem Jahr 2005 und zeigen hier bereits Österreich als Land mit dem höchsten Kaffeeverbrauch.

Tabelle 1: Die Spitzenposition im Kaffeeverbrauch [GRAFINGER, 2008]

Land in Europa	Kopfquote
Österreich	8.00 kg
Deutschland	6.20 kg
Italien	5.65 kg
Frankreich	5.01 kg
Slowakei	4.09 kg

2.2.) Die ersten Kaffeehäuser in Wien

Ein Kaffeehaus ist nicht automatisch ein Lokal, in dem man Kaffee bestellen kann. In Wien ist sehr genau festgelegt, was in einem Kaffeehaus serviert werden darf und was nicht. Im Jahr 1999 gab es in Wien jedenfalls 2.635 „Kaffeelokale“ in insgesamt 6 verschiedenen Kategorien wie zum Beispiel Kaffeehäuser, Kaffee-Restaurants oder Kaffee-Konditoreien. Trotzdem sind die traditionellen Kaffeehäuser noch weit in der Überzahl [RODGERS, 2006].

Das klassische Kaffeehaus liegt zentral an einer belebten Kreuzung, wo der Kaffee auf einem Metalltablett serviert wird. Dazu wird immer ein Glas Wasser gestellt, das eine alte türkische Tradition ist. Diese drückt aus, dass der Gastgeber es nicht eilig hatte, seinen Gast loszuwerden. Ein weiteres „Kaffeehausritual“ ist, dass der Kaffeelöffel quer auf dem Wasserglas liegend serviert wird. Kaffeehäuser spielen auch in der Geschichte einer Großstadt eine wichtige Rolle, da sich hier sehr oft die intellektuellen Kreise trafen [RODGERS, 2006]. Das erste Kaffeehaus auf europäischen Boden wurde laut türkischem Geschichtsschreiber *Bichevili* 1554 in Konstantinopel errichtet [EDELBAUER, 2003]. Um 1683 begann in Wien der Siegeszug des Kaffees. Die Wiener Mélange zählt zu den Boten österreichischer Tradition.

In den Wiener Kaffeehäusern war der Zutritt anfangs nur Männern gestattet. Frauen reagierten darauf mit Kaffeekränzchen und im Laufe der Zeit entwickelte sich daraus die sog. Kaffeejause.

Der kleine Kaffeeimporteur *Julius Meinl* eröffnete 1862 sein erstes Geschäft. *Meinl* beeinflusste den Kaffeegeschmack ganz Wiens maßgeblich, da er als erster die gerösteten Bohnen verkaufte. Typisch für den Wiener Kaffee ist - im Gegensatz zum Türkischen - den bitteren Kaffeegeschmack mit Milch oder Schlagobers zu verfeinern [RODGERS, 2006].

Das „Café Hawelka“ im 1. Wiener Gemeindebezirk stellt eines der letzten großen Literaten- und Künstlerkaffeehäuser dar; es entspricht zentraleuropäischer Tradition. Wie das „Café Hawelka“ ist auch das „Café Sperl“ ein sehr bekanntes Innenstadtcafé. Beide sind im Originalzustand erhalten und sowohl bei ihren Stammkunden als auch bei Touristen sehr beliebt.

2.2.1.) Das Café HAWELKA – Geschichte und Einrichtung

1936 eröffnete der Servierkellner *Leopold Hawelka* das Café Alt-Wien in der Bäckerstraße, das er gemeinsam mit seiner Frau drei Jahre lang führte. Da der Kaufpreis zu hoch war, suchten sie sich ein günstigeres Geschäftslokal und kauften das Café in der Dorotheergasse. Am 15. Mai 1939 unterschrieb Herr *Hawelka* den Vertrag und gründete das „Café Hawelka“ [VEIGL, 1989].



Abbildung 2: Leopold Hawelka in seinem Café

In der winzigen Küche begann *Josefine Hawelka* die bekannten Buchteln, eine böhmische Mehlspeise, ganz frisch zu backen, die jeden Abend gegen 22 Uhr warm serviert wurden [HAWELKA, 2008]. Der Ausbruch des Krieges im September 1939 zwang sie das Café zu schließen [VEIGL, 1989]. Als die *Hawelkas* 1945 nach Wien zurückkehrten, war ihr Kaffeehaus eines der ersten, die wieder an das öffentliche Versorgungsnetz angeschlossen wurden. Trotz vieler Schwierigkeiten gelang es dem Ehepaar das Kaffeehaus im Herbst 1945 wiederzueröffnen. Der Kaffee wurde auf einem Holzofen zubereitet und im Winter musste Herr *Hawelka* selbst im Wiener Wald Feuerholz sammeln, während seine Frau sich um die Gäste kümmerte.

Das Kaffeehaus wurde bald ein günstig gelegener und zentraler Treffpunkt. In den späten Fünfziger und frühen Sechziger Jahren eröffneten dann die neuen Espressobars nach italienischer Art überall in Wien. Diese schienen viel besser zum schnelleren Leben zu passen als das traditionelle Kaffeehaus; tatsächlich wurden viele große Kaffeehäuser geschlossen. Herr *Hawelkas* einziges Zugeständnis an die Moderne war, eine Espressomaschine zu installieren, die manche Gäste mit ihrem Lärm irritierte, doch das Kaffeehaus überlebte durch die Loyalität seiner Stammgäste als zeitloser Raum. In der Mitte der Sechziger Jahre fand man sogar einige der jüngeren, wilderen Generation wie *Friedensreich Hundertwasser*, *Ernst Fuchs* und *Wolfgang Hutter*. Die Atmosphäre des ruhigen, verrauchten, männerdominierten Leseraumes wurde von der jugendlichen Energie des Jahrzehnts gestürmt [HAWELKA, 2008]. Auch die Dichter *H.C. Artmann*, *Friedrich Achleitner* und *Gerhard Rühm*, der Schauspieler *Helmut Qualtinger* und *Oskar Werner*, der Sänger *Georg Danzer* und *André Heller* und der Fotograf *Franz Hubmann*, der das Kaffeehaus über die Jahrzehnte durch seine Bilder unsterblich machte, zählten zu den Stammgästen. Berühmtheiten aus dem Ausland wie *Arthur Miller* oder *Andy Warhol* besuchten das „Café Hawelka“. Es wurde eine Institution und die *Hawelkas* wurden genauso berühmt wie ihre Gäste. Das *Hawelka* ist mit Marmortischen, Thonetsesseln und mit originaler Jugendstileinrichtung ausgestattet, die bis heute unberührt geblieben ist. Rotgold gestreifte Sofas stehen bei den kleinen Tischchen, die sehr eng

aneinander stehen [SIEBECK, 1996]. Eine Wand wurde mit Postern und Gemälden bedeckt, die die neuesten Ausstellungen, Konzerte und Lesungen bewerben (eine Innovation von Herrn *Hawelka*, die nun in den meisten Cafés Österreichs Anklang gefunden hat). An den anderen Wänden wuchs Herrn *Hawelkas* Sammlung von Bildern [HAWELKA, 2008]. Die vielen Gemälde wurden meist von bekannten Wiener Künstlern gestiftet. Auch der Literaturnobelpreisträger *Elias Canetti* war in jungen Jahren Stammgast im *Hawelka* [RODGERS, 2006]. Im *Hawelka* von Einrichtung zu sprechen, ist fast schon vermessen, denn diese scheint wahl- und geschmacklos in den Raum geworfen worden zu sein. An der Decke ist eine buckelige, dicke Schicht braunroter Ölfarbe und der Boden besteht aus altem Parkett, dessen Schönheit geschickt unter einer grauschwarzen Schicht verborgen ist [MARTINEK, 1990].

Heute wird das „Café *Hawelka*“ von *Leopold Hawelka*, seinem Sohn *Günter Hawelka* und seinen zwei Enkeln *Amir* und *Michael* weiter geführt. Als *Leopold Hawelka* 1991 seinen 80. Geburtstag feierte wurde ihm der Titel "Kommerzialrat" verliehen. Nach fast 70 Jahren Leidenschaft zum Gast verstarb *Josefine Hawelka* am 22. März 2005 [HAWELKA, 2008].

Zum Mythos ist auch das Gästebuch geworden, in das *Hans Weigel* damals schrieb: „Wenn das *Hawelka* nicht wär´, müsste man es erfinden.“ [VEIGL, 1989].



Abbildung 3: Café *Hawelka*

2.2.2.) Das Café SPERL– Geschichte und Einrichtung

Im Jahr 1880 ließ *Jakob Ronacher* von den Theophil-Hansen-Schülern *Groß* und *Jelinek* ein Kaffeehaus in der Gumpendorferstraße 11 (6. Bezirk) einrichten. Dieses betrieb er dann einige Monate als „Café Ronacher“, bis er sich resigniert aus der Öffentlichkeit zurückzog. Danach gehörte dieses Café Herrn *Sperl*, der es zwar nur drei Jahre leitete, nach dem es aber noch immer benannt ist. Ihm folgte der Cafetier *Adolf Kratochwilla*, in dessen Familie das Lokal über achtzig Jahre verblieb [VEIGL, 1989].



Abbildung 4: Eingang des Café Sperl

Das Kaffeehaus wurde unter der neuen Leitung bald ein beliebter Treffpunkt von Schauspielern und Künstlern. In der Festschrift zum fünfzigjährigen Bestehen des „Café Sperl“ berichtete 1930 *Adolf Kratchowilla junior*, dass bis zum ersten Weltkrieg vor allem Künstler und Offiziere dem Café „ein ganz besonderes Gepräge gaben“ [VEIGL, 1989]. Ohne Qualitäts- und Traditionsverlust durchlebte es die Zeit nach dem ersten Weltkrieg, war weiterhin Stammlokal der Komponisten, Maler und Architekten und wurde 1935 unter den gutbürgerlichen Kaffeehäusern an die Spitze gesetzt. Der Kaffee wurde etwas billiger, das Rundherum sehr teuer. Nach dem 2. Weltkrieg konnte man das Sperl durch seine Stammgäste, guten Beziehungen des Besitzers und Bewahrung seiner Tradition über diese Jahre hinüberretten und langsam wieder einen normalen Betrieb aufbauen.

Im Juni 1968 übernahm *Manfred Staub* das Kaffeehaus. Er arbeitete mit dem Bundesdenkmalamt und Architekt *Nairz* einen Plan zur Restaurierung der Räumlichkeiten aus [STAUB-ZOJER, 2008].

Zu den Stammgästen zählten Generalstabschef *Conrad* von *Hötzendorf* und die Erzherzöge *Josef Ferdinand* und *Karl Ferdinand*. Der Besucherkreis prägte das „Café Sperl“ zum Künstler und Militärcafé. Besonders erwähnenswert ist die „Hagengesellschaft“. Ab 1895 siedelte dieser Malerzirkel im Sperl und der Stammtisch hielt sich bis 1942. Diese Künstlervereinigung setzte sich mit dem eigens zu diesem Zweck gegründeten „Siebenerclub“ für die Schaffung der Sezession ein. Die jungen Künstler der Hagengesellschaft saßen oft spätabends zusammen und bemalten dabei die Marmortische des Cafés. *Adolf Kratochwilla* folgte dann einer Anregung des Malers *Stöhr* und stellte den Künstlern Packpapier zur Verfügung. So entstand Mappe um Mappe eine humoristische Wiener Kunstgeschichte, die sich heute in der Albertina und im Archiv der Akademie der bildenden Künste befindet [VEIGL, 1989]. Um 1890 begeisterte die Operette die Wiener und wie heute waren das Raimundtheater und das Theater an der Wien Hauptbühnen für die Publikumsliebhaber. Wegen der Nähe war „das Sperl“ Stammkaffee der Stars. Sie prägten bis um 1930 das Geschehen auf den Bühnen und „im Sperl“ [STAUB-ZOJER, 2008].

Heute sind die Literaten immer stärker vertreten und die Stammtischbesetzungen erweiterten sich. Filmaufnahmen erhöhten den Bekanntheitsgrad. Die berühmten Schriftsteller *Robert Menasse* und *Michael Köhlmeier* sind aus dem täglichen Bild des Sperls nicht mehr wegzudenken [STAUB-ZOJER, 2008]. Das Café Sperl ist vielleicht das klassischste aller klassischen Kaffeehäuser. Zur Jahrhundertfeier des Lokals sah man sich gemeinsam mit dem Personal das Nachmittagsprogramm im Fernsehen an, doch seit der Renovierung 1983 hat sich vieles geändert [VEIGL, 1989]. Im selben Jahr wurde es unter Denkmalschutz gestellt. In aufwändiger Renovierungsarbeit wurde das Café daraufhin erneuert und detailgetreu wieder hergestellt, ohne jedoch die alte Patina und die gemütliche Atmosphäre mit den

weichen Plüschsofas, der alten ausladenden Theke und dem blanken Parkettboden zu zerstören [RODGERS, 2006].

Der erste Eindruck beim Betreten des Sperl ist, dass man sich genau so ein richtiges altes Wiener Kaffeehaus vorstellt, doch handelt es sich hier um eine vorgetäuschte Echtheit. Die Decken sind hier etwas höher als in den anderen Kaffeehäusern, deshalb hängen die Lampen an längeren Ketten. Den Vorhängen vor den Fenstern fehlt das Plüschige. Die Logenbänke sind zwar gepolstert, werden aber durch eine lange, mittlere Reihe von Zweiertischen mit Thonetstühlen in eine eher strenge Ordnung miteinbezogen. Außerdem hat das Sperl einen Parkettfußboden sowie direkt gegenüber dem Eingang, eine kleine Theke [SIEBECK, 1996]. Hinter dem kleinen, verzierten Holztresen saß zumeist eine Frau und bonierte die Rechnungen. Der prächtige Windfang des Cafés besteht aus einem kleinen Vorraum und einem schmalen Gang, den man durchschreiten muss, bevor man das Lokal betritt. Auf den ersten Blick ist der Windfang komplett verglast und die eintretenden Kaffeehausgäste sind zunächst deutlich erkennbar. Plötzlich scheinen sie jedoch verschwunden zu sein. Die optische Täuschung entsteht durch Spiegel, die im Mittelteil des schmalen Ganges wie durchsichtiges Glas wirken, den neuen Gast aber „verschlucken“. Dann teilt sich das Sperl in zwei große Flügel. Der linke Teil ist ausschließlich den Kaffeetrinkern vorbehalten, der rechte den Billard- und Kartenspielern. Das Publikum ist bunt gemischt [MARTINEK, 1990].



Abbildung 5: Café Sperl

2.3.) Ernährungsphysiologische und gesundheitliche Aspekte

Neben den Vitaminen und Mineralien sind viele sekundäre Pflanzeninhaltsstoffe in der Kaffeebohne enthalten, die gesundheitsfördernde Wirkungen entfalten [HESSMANN-KOSARIS, 2000]. Sensorische und stimulierende Effekte sind daher bei einer Tasse Kaffee mehr von Bedeutung als sein Nährwert. Dieser bezieht sich mehr auf die Zugabe von Milch und Zucker und liefert somit Energie, Proteine und Mikronährstoffe [CLARKE und MACRAE, 1988]. Auch die Art und Weise der Kaffeezubereitung ist ausschlaggebend: Die zwei wichtigsten cholesterinsteigenden Substanzen in gebrühtem Kaffee sind das Cafestol und das Kahweol. Diese gelangen aber nur dann in großer Menge in das Getränk, wenn man den gemahlene Kaffee direkt mit kochendem Wasser überbrüht und ihn danach nur durch ein Kaffeefilter gießt. Beim Filterkaffee hingegen hält das feinporige Papier ca. 80% der öligen Partikel zurück, sodass sie nicht mitgetrunken werden [HESSMANN-KOSARIS, 2000].

2.3.1.) Bestandteile des gerösteten Kaffees

Essentielle Nährstoffe des Kaffees sind die B-Vitamine Riboflavin (B₂), Niacin (B₃), Pantothenensäure (B₅) und Pyridoxin (B₆). Diese Vitamine braucht der Körper unter anderem zur Energiegewinnung, für den Eiweiß-, Kohlenhydrat- und Fettstoffwechsel, das Nervensystem, zur Blutbildung und für die Haut und das Haarwachstum. Niacin ist der ernährungsphysiologisch wichtigste Mikronährstoff in Kaffee, denn mit einer Tasse Kaffee deckt ein Erwachsener etwa 5% seines Tagesbedarfs [HESSMANN-KOSARIS, 2000]. Kaffee kann also entscheidend für die Prävention von Mangelzuständen sein. In Regionen wie Zentralamerika- oder -afrika, wo Mais zu den Grundnahrungsmitteln gehört, tritt sehr oft die Vitamin B₃-Mangelerscheinung Pellagra auf, deren Symptome man durch Kaffeekonsum mildern kann [CLARKE und MACRAE, 1988].

Im Kaffee selbst sind ca. 30% *Kohlenhydrate* enthalten, vor allem wasserlösliche und wasserunlösliche Polysaccharide, zu einem kleinen Teil auch Zucker wie Saccharose, Glucose, Fructose und Arabinose. Diese werden aber beim Rösten zu anderen Verbindungen umgewandelt oder völlig

umgebaut. Nur das Kaffeepulver des löslichen Kaffees weist geringfügige Mengen an Kohlenhydraten auf, die hier für die Aromabildung von Vorteil sind [HESSMANN-KOSARIS, 2000].

Der Anteil an *Fettstoffen und Säuren* im Rohkaffee liegt, je nach Sorte, bei 10-20%, er nimmt nach dem Rösten sogar prozentuell ab. Aufgrund ihrer geringen Wasserlöslichkeit, gelangen sie kaum in das Getränk. Der Anteil aller Säuren im Rohkaffee beträgt zwischen 4 und 12%. Zu den wichtigsten zählen die Chlorogensäuren, die in keinem anderen Lebensmittel vergleichbar stark konzentriert sind. Die Chlorogensäuren im Kaffee sollen ein Schutzfaktor vor Dickdarm- und Leberkrebs sein [HESSMANN-KOSARIS, 2000] und zudem noch antioxidative Wirkung haben [CLARKE und MACRAE, 1988]. Die Kaffeesäuren werden allerdings nach dem Rösten größtenteils abgebaut. So entsteht beispielsweise aus dem Alkaloid mit dem Namen Trigonellin nach dem Rösten die Nikotinsäure. Weiters enthalten die gerösteten Kaffeebohnen Linolsäure, Palmitinsäure, Essigsäure, Zitronensäure, Apfelsäure, Oxalsäure und sogar Spuren von Buttersäure. Es sollen insgesamt 80 Säuren im Kaffee ausfindig gemacht worden sein. Die Säuren haben alle mehr oder weniger Einfluss auf den Geschmack und fördern überdies die Salzsäurebildung im Magen und regen den Gallenfluss an. Kahweol und Cafestol kommen ebenfalls in den Fettstoffen vor. Auch geringe Mengen von Theobromin (3,7-Dimethylxanthin) und Theophyllin (1,3-Dimethylxanthin) sind im Kaffee enthalten. Koffein, ein Purin-Alkaloid [FLASSIG, 2000], ist die physiologisch aktivste und quantitativ wichtigste Substanz des Kaffees. Der Koffeingehalt von Arabica-Kaffee liegt bei 0.8-1.8%, während Robusta-Kaffee 1.4-3% aufweisen kann. Trigonellin und Nikotinsäure sind im Kaffee zu 0.2-1% enthalten. Diese Werte werden beim Röstvorgang bis zu 50% abgebaut [EDELBAUER, 2003].

Der *Mineralstoffgehalt* der Bohne variiert sehr stark nach den Anbaugebieten. Den größten Wert nimmt Kalium mit ungefähr 1% ein, gefolgt von Kalzium, Magnesium und Phosphor. Schwefel, Mangan, Eisen und andere Mineralstoffe kommen nur in winzigen Spuren vor [HESSMANN-KOSARIS, 2000]. Bei

Personen mit extremen Diäten sind diese Mineralsalze ernährungsphysiologisch von Bedeutung.

Tabelle 2: Übersicht zu den Kaffee-Inhaltsstoffen

[HESSMANN-KOSARIS, 2000]

Kohlenhydrate	30 %	Trigonellin	0,4 %
Fette	13 %	Essigsäure	0,25 %
Eiweiß	9 %	Koffein	1,2 %
Säuren	4,5 %	Flüchtige Aromastoffe	0,1 %
Mineralstoffe	4 %	Ameisensäure	0,1 %
Chlorogensäure	3,7 %	Nikotinsäure	0,02 %
Wasser	2,5 %	Unbekannte Substanzen	35 %
Nichtflüchtige Säuren	0,4 %		

Die Zahlen aus der Tabelle 2 sind Mittelwerte für einen Arabica-Kaffee normaler Röstung.

2.3.2.) Die richtige Menge - Verträglichkeit von Kaffee

Sehr viele Menschen vertragen Kaffee nicht. Laut *Edelbauer* liegt die Ursache der Unverträglichkeit am hohen Robusta-Gehalt verschiedener Kaffeemischungen, der ja viel höhere Koffein- und Chlorogensäure-Werte aufweist als der Arabica. Es gibt keine gesetzliche Kennzeichnungspflicht, wo sich der Konsument über den Inhalt der Kaffeepackung informieren kann [EDELBAUER, 2003]. 300 mg Koffein, die man mit vier Tassen Kaffee aufnimmt, scheinen die rechte Menge zu sein, um einen gesundheitlichen Nutzen zu ziehen und den Energieumsatz des Körpers anzukurbeln. Bei ca. 4 Tassen pro Tag wird das Zentralnervensystem stimuliert. Ein klarer Gedankenfluss, eine schnellere Assoziationsfähigkeit und eine Verzögerung oder Unterdrückung des Müdigkeitsgefühls sind die Folgen. Die positiv

anregende Wirkung von Koffein ist jedenfalls durch höhere Dosen nicht zu überbieten. Es erweitert die Herzkranzgefäße, wirkt auf das Atem- und Gefäßzentrum im verlängerten Rückenmark, beeinflusst die Herzkontraktion positiv und wirkt schließlich harntreibend. Ein Zuviel an Koffein führt zu Unruhe, Gedankenflucht, Schweißausbrüchen, Schlaflosigkeit und Muskelzittern. Die Aufnahme extrem hoher Dosen äußert sich in Krämpfen. Die tödliche Dosis liegt für Erwachsene bei etwa 11 Gramm [EDELBAUER, 2003]. Sobald aber der Abbau des Koffeins im Organismus beginnt, kommt es zu einer Dämpfung auf Verhaltens- und mentaler Ebene und eine zunächst unterdrückte Müdigkeit tritt schneller und verstärkt ein [HÄNSEL und PERTZ, 2007]. Bei gastrointestinalen Erkrankungen wie Magengeschwüren sollte der Kaffeekonsum eingeschränkt werden, da Kaffee unabhängig vom Koffeingehalt einen erheblichen stimulierenden Effekt auf die Säuresekretion des Magens hat. Beim Schonkaffee sind diese Säuren weitgehend entzogen [HESSMANN-KOSARIS, 2000]. Die sog. Wochenendmigräne kann durch einen plötzlichen Koffeinentzug ausgelöst werden. Diese tritt auf, wenn am Arbeitsplatz viel Kaffee getrunken wird und die Koffeinzufuhr am Wochenende unterbrochen wird; eine Entzugserscheinung tritt also auf [WEISS, 2007].

Wie stark jemand auf Kaffee reagiert, hängt von der körperlichen und seelischen Verfassung ab. Wer einen schnellen Stoffwechsel besitzt, baut die Inhaltsstoffe des Getränks rascher ab. Der Organismus von Rauchern setzt bekanntlich Koffein sehr schnell um, da bei ihnen das entsprechende Enzym eine höhere Aktivität besitzt [HESSMANN-KOSARIS, 2000].

2.3.3.) Häufige Fragen – Flüssigkeitsbilanz, Schlaf, Blutdruck

Während der Harnproduktion filtern die Nieren die beim Stoffwechsel anfallenden Abfallprodukte aus dem Blut heraus und schwemmen diese mit dem Harn aus. Kristalle werden in Lösung gehalten, so dass sie nicht zu Nieren- oder Harnsteinen zusammenklumpen. Kaffee fördert diesen Prozess, indem er über verschiedene Mechanismen die haarfeinen Blutgefäße in den Nieren erweitert. So erhöht er deren Filtrationsleistung und hemmt die Rückresorption von Wasser. Das Risiko Nierensteine zu bilden, sinkt bei

Menschen, die zwei Tassen Kaffee (insgesamt 240 ml) am Tag trinken, um 10%. Kaffeetrinker scheiden keineswegs nur die Wassermenge aus, die sie mit dem Getränk aufgenommen haben. Damit es nicht zur Dehydration kommt, muss der Flüssigkeitsverlust unbedingt ausgeglichen werden. Zum Beispiel, indem man – wie es in den alten Wiener Kaffeehäusern üblich ist – zu jeder Tasse Kaffee ein Glas Wasser trinkt [HESSMANN-KOSARIS, 2000]. Der Kaffeekonsum hat also eine eindeutige diuretische Wirkung, wobei es zur Ausscheidung von Wasser und Natrium kommt [ADAM, 2005]. Die Gesamtschlafdauer wird Studien zufolge durch Koffein nicht beeinflusst. Es beeinträchtigt aber den Schlaf im Verlauf der ersten drei Stunden, denn dieser Zeitbedarf deckt sich mit dem, der für den Koffeinabbau in der Leber notwendig ist [MÜLLER-LIMMROTH, 1972]. Ein regelmäßiger Kaffeekonsum ist auch kein Risikofaktor für kardiovaskuläre Erkrankungen. Zwar gibt es einen Zusammenhang zwischen getrunkenen Kaffeemenge und Blutdruckanstieg, doch ist das Risiko eines tödlichen Herzinfarkts nicht mit dem Kaffeekonsum assoziiert. Der wahre Grund einer erhöhten Gesamtmortalität ist, dass Raucher mehr Kaffee trinken und auch weniger Bewegung machen. Nach vorliegenden klinischen Studien gibt es also keinen eindeutigen Hinweis, dass eine koronare Herzkrankheit durch Kaffee ungünstig beeinflusst wird [SHNAWA, 2004].

2.4.) Die Physiologie des Kaffees: Geschmack und Aroma

2.4.1.) Der Kaffeegeschmack

Kaffee enthält im Wesentlichen eine bittere und eine saure Geschmackskomponente. Der Großteil der am Bittergeschmack beteiligten Stoffe sind thermolytische Folgeprodukte der Maillard-Reaktion. Besonders intensiver Bittergeschmack tritt beim Erhitzen von Saccharose, Glucose oder Fructose mit Prolin auf. Am bitteren Kaffeegeschmack ist zu etwa 30% auch das Koffein beteiligt. Für den Geschmack wesentlich ist die Chlorogensäure und geschmacksbestimmend sind aliphatische Carbonsäuren wie Zitronen-, Brenztrauben-, Milch- und Weinsäure [HÄNSEL und PERTZ, 2007]. Eine feine Säure im Kaffee ist eine sehr erwünschte Eigenschaft. Diese spürt man mit den Geschmacksknospen am Zungenrand und im hinteren Mundraum. Die Säure

verleiht dem Kaffee Lebendigkeit und Frische, wenn sie aber fehlt, tendiert der Kaffee zu einem flachen Geschmack. Je kräftiger der Kaffee geröstet wird, desto stärker wird die Säure von anderen Eigenschaften verdeckt. Diese Säure hat aber nichts mit einem sauren Geschmack zu tun [PREIBISCH, 2004].

2.4.2.) Duftstoffe und das Kaffeearoma

Der Mensch kann etwa 10000 Düfte unterscheiden. Bei allen natürlich vorkommenden Düften handelt es sich um Duftgemische, in denen es charakteristische »Leitdüfte« gibt (z.B. Geraniol für blumig). Nach einer gewissen Zeit kann man bekanntlich einen Duft im Raum nicht mehr wahrnehmen, das ist die sog. Kreuzadaptation. Ist man zum Beispiel auf Zigarettenrauch adaptiert, kann man Kaffeeduft trotzdem noch wahrnehmen [HATT, 2005]. Röstkaffee ist eines der aromareichsten Lebensmittel. Die Aromastoffe werden erst während des Röstprozesses gebildet. Kommt der Kaffee allerdings mit Milch in Kontakt, verliert er etwas an seinem Aroma. Je höher der Fettgehalt der Milch, umso geringer ist die Konzentration der flüchtigen Aromastoffe [HESSMANN-KOSARIS, 2000].



Abbildung 6: Kaffeearoma

2.4.2.1.) Erste Untersuchungen zum Kaffeearoma

Die ersten Untersuchungen zu den flüchtigen Aromastoffen liegen ca. 70 Jahre zurück. Als erstem gelang es *Bernheimer* einige dieser mit Wasserdampf flüchtigen Inhaltsstoffe zu identifizieren, unter anderem Pyrrol, Hydrochinon und

Methylamin. *Reichstein* und *Staudinger* entwickelten einen Trennungsgang: Dazu destillierten sie die flüchtigen Verbindungen in Vakuum ab und gewannen durch Abkühlung des Dampfes ein Kondensat, das sie anschließend in Verbindungsklassen trennten. Insgesamt wurden 70 Substanzen identifiziert, von denen 29 bei Raumtemperatur flüchtig sind. Dazu zählen 2-Furfurylthiol, Guajacol, 4-Vinylguajacol, Acetaldehyd, 2-Methylbutanal, 2,3-Butandion, 2,3-Pentandion und Methanthiol. Zusammenfassend stellten sie fest, dass nicht eine einzige Verbindung das Kaffeearoma hervorruft [GROSCH, 1996].

2.4.2.2.) Die Kaffeearoma-Hautkomponenten

In der sehr kompliziert zusammengesetzten flüchtigen Fraktion von Röstkaffee dominieren heterocyclische Verbindungen. Diese sind Furane mit 38-45%, gefolgt von Pyrazinen (25-30%), Pyridinen (3-7%) und Pyrrolen (2-3%).

Tabelle 3: Anzahl der gefundenen Stoffklassen in einer flüchtigen Röstkaffeefraktion [GROSCH,1996]

Aliphatische KW`s	45	Amine	13	Thiole	7
Aromatische KW`s	35	Pyrrole	72	Sulfide	13
Alkohole	25	Pyridine	20	Disulfide	10
Aldehyde	37	Pyrazine	89	Thiophene	28
Ketone	85	Chinoxaline	11	Thiazole	27
Säuren	28	Furanone	128	Phenole	49
Ester	33	Oxazole	35	Sonstige	45

Identifiziert wurden bis 1994 insgesamt 835 Verbindungen. Dem Aromawertkonzept von *Rothe* und *Thomas* zufolge wären nur diejenigen in Betracht zu ziehen, deren Konzentrationen höher als ihre Geruchsschwellen sind. Der Aromawert ist definiert als das Verhältnis der Konzentration im Kaffee zur Geruchsschwellenkonzentration in wässriger Lösung. *Tressl* hat hierzu die Aromawerte für eine Reihe von Verbindungen geschätzt. Neben 2-Furfurylthiol hat auch das nach Karamell riechende 4-Hydroxy-2,5-dimethyl-3[2H]-furanon einen sehr hohen Aromawert. Diese rufen daher entsprechende Geruchsnoten im Aromaprofil von Kaffee hervor [GROSCH, 1996].

Tabelle 4: Übersicht über einige Maillard-Produkte mit ihrem Geruch
[GROSCH, 1996]

Substanz/Substanzgruppe	Geruch
Pyrazine	nußartig-röstig
Pyrrolderivate	brenzlich
cyclische Carbonylverbindungen	karamellartig
Kahweofuran	röstig-rauchig
trans-2-Nonenal	holzartig
2-Mercaptomethylfuran	kaffeeartig

Besonders charakteristisch sind einige Schwefelverbindungen, von denen das 2-Furfurylthiol als einzige Substanz in starker Verdünnung ähnlich wie Kaffee riecht. Das volle Kaffeearoma entwickelt sich aber nur in einer Mischung mehrerer flüchtiger Stoffe. Angeblich reichen nur etwa 25 Aromastoffe aus, um das volle Kaffeearoma zu bilden [BALLSCHMIETER, 2001].

Tabelle 5: Jene Verbindungen, die am meisten zum Kaffeearoma beitragen, beginnend mit den wirksamsten Stoffen [BALLSCHMIETER, 2001]

2,3- Pentandion	3-Mercapto-3-methylbutylformiat
2,3-Butandion	Furfurylthiol
2- Isobutyl-3-methoxypyrazin	3-Hydroxy-4,5-dimethyl-2(5H)-furanon
Acetaldehyd	3-Methylbutanal
2-Ethyl-3,5-dimethylpyrazin	2,3-Diethyl-5-methylpyrazin
Methional	Damascenon
2-Methyl-3-furanthiol	

2.5.) Der Metabolismus von Koffein

Koffein (1,3,7-Trimethylxanthin) wird im menschlichen Organismus zu über 95% verstoffwechselt, d.h. weniger als 5% werden unverändert mit dem Urin ausgeschieden [SCHÄNZER, 2004]. Koffeinmoleküle aus dem Kaffee werden sofort vom Dünndarm aufgenommen und zum kleinen Teil auch vom Magen

absorbiert. Der Großteil wird in der Leber durch das hepatische, mikrosomale Enzymsystem abgebaut, wobei eine intakte Leberfunktion sehr wichtig ist. Koffein bleibt also so lange im Körperkreislauf, bis es die Enzyme der Leber nach und nach abgebaut haben. Dabei entstehen Umwandlungsprodukte wie das Paraxanthin (1,7-Dimethylxanthin), das pharmakologisch noch mehr Durchschlagskraft als das Koffein hat. Die Substanz verteilt sich rasch in allen Körpergeweben und bereits nach 20-30 Minuten beginnt das Koffein zu wirken.

Die maximale Blutkonzentration ist nach einer Stunde erreicht, die Plasmahalbwertszeit beträgt ca. 5 Stunden, bei Rauchern ist diese auf 3.5 Stunden verkürzt [SHNAWA, 2004]. Nach 5-6 Stunden ist die Wirkung des Koffeins halbwegs abgeklungen. Bei Schwangeren und Frauen, die die Pille nehmen, braucht der Körper manchmal zwölf Stunden, um die Hälfte des Koffeins abzubauen [HESSMANN-KOSARIS, 2000]. Erst mit der Chromatographie-Technik konnte man nachweisen, dass nach einer oralen Aufnahme von 1g Koffein im menschlichen Urin 65-75 % von Methylxanthenen und Methylharnsäure enthalten sind [CLARKE und MACRAE, 1988].

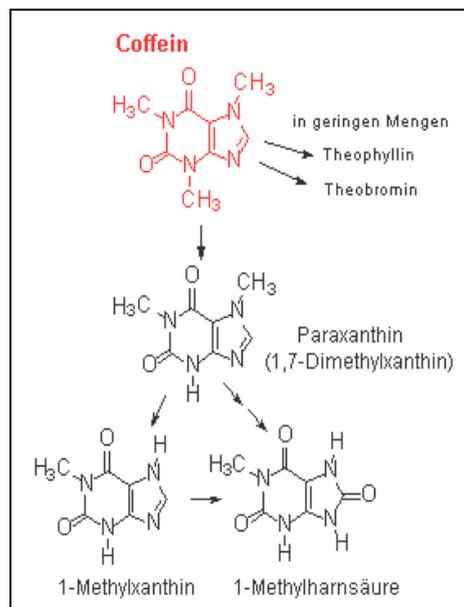


Abbildung 7: Metabolismus von Koffein

[SCHÄNZER, 2004]

Koffein ist - außer in Blut und Urin - in anderen Körperflüssigkeiten wie Speichel, Samenflüssigkeit, Muttermilch und dem Fruchtwasser nachweisbar. Für den Koffeinnachweis ist Urin am geeignetsten, da sich hier die gesuchten Stoffe und deren Metaboliten noch nach Tagen nachweisen lassen. Urinproben werden in Kunststoffgefäßen (meist Polyethylen/-carbonat) zu je 50-2000 ml (nach Bedarf) gesammelt. Eine genaue Kennzeichnung mit Personalien, Abnahmezeitpunkt und Sammelperiode ist wichtig [GERHARDS et al., 1997].

In einer Studie von *Caubet et al.* (2002) wurden die Koffein-Metaboliten genauer untersucht. Nach einer oralen Extragabe von gekennzeichnetem Koffein wurden die Metabolismus-Raten von 20 gesunden Testpersonen mit unterschiedlich charakteristischen CYP1A2-Aktivitäten in Abhängigkeit der Rauchgewohnheit und der Einnahme oraler Kontrazeptiva bestimmt. CYP1A2 ist ein Isomeres von CYP1A aus der Unterfamilie von Cytochrom P450. Durch die Kennzeichnung von Koffein mussten für die Kalkulation metabolischer Raten die endogenen Koffeinmetaboliten nicht berücksichtigt werden. Nach spezifischen Diäten ist diese nämlich sehr schwierig zu eliminieren.

Koffein und seine Metaboliten wurden mittels SPE (solid phase extraction) aus dem Urin extrahiert und mittels HPLC getrennt. Die Selektivität und hohe Sensitivität der Massenspektrometrie-Detektion ermöglichte es, den Urin in 3-Stunden-Perioden zu sammeln. Vergleiche zwischen charakteristischen Gruppen zeigten, dass die metabolischen Raten von gekennzeichnetem Koffein empfindliche Marker für Änderungen in der CYP1A2-Aktivität sind.

Mit Hilfe der entwickelten HPLC/MS-Methode wurde also das gekennzeichnete Koffein und vierzehn seiner Metaboliten im Urin nachgewiesen. Die folgende Abbildung zeigt den Koffein-Metabolismus in der Leber mit all seinen Metaboliten. Die fettgedruckten Pfeile in Abbildung 8 zeigen die Hauptwege und die punktierten die unwesentlicheren Stoffwechselwege, die nicht viel zur Aktivität von CYP1A2 oder N-Acetyltransferase beitragen. „X“ zeigt den gekennzeichneten Kohlenstoff mit dem Isotop ^{13}C an, das dem markierten Koffein entspricht [CAUBET et al., 2002].

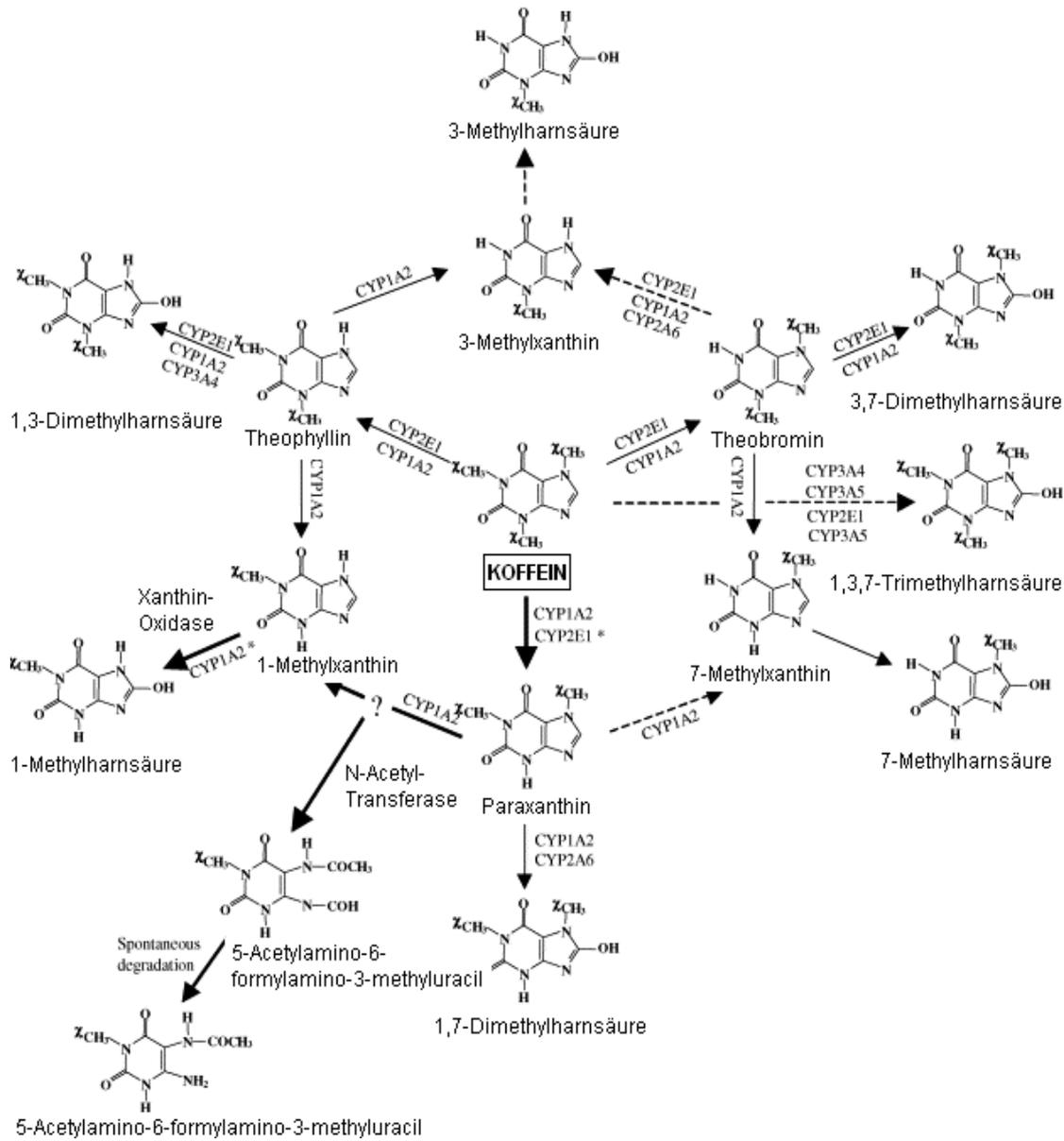


Abbildung 8: Koffein-Metabolismus in der Leber

[CAUBET et al., 2002]

Wenn Demethylierung von Koffein ohne Oxidation eintritt, können sechs Mono- und Dimethylxanthine, sowie unveränderte Koffeine, im Xanthin-Eluat vorkommen. Zirka 46% vom aufgenommenen Koffein werden zu 1-Methylharnsäure und 1-Methylxanthine umgewandelt. Dazu kommen 1,7-Dimethylxanthin, 7-Methylxanthin, 1,3-Dimethylharnsäure und unverändertes Koffein vor. All diese Produkte, außer 1,3-Dimethylharnsäure, können als direkter Stoffwechselweg der Demethylierung und Oxidation durch 1,7-

Dimethylxanthin ausgeschieden werden. Nach der Aufnahme einer bestimmten Dosis Koffein, kann man ungefähr gleiche Mengen an Methylxanthinen (methylierte Derivate der Harnsäure) [FORTH und ADAM, 2001]) und Methylharnsäure im Urin nachweisen [CORNISH und CHRISTMAN, 1957].

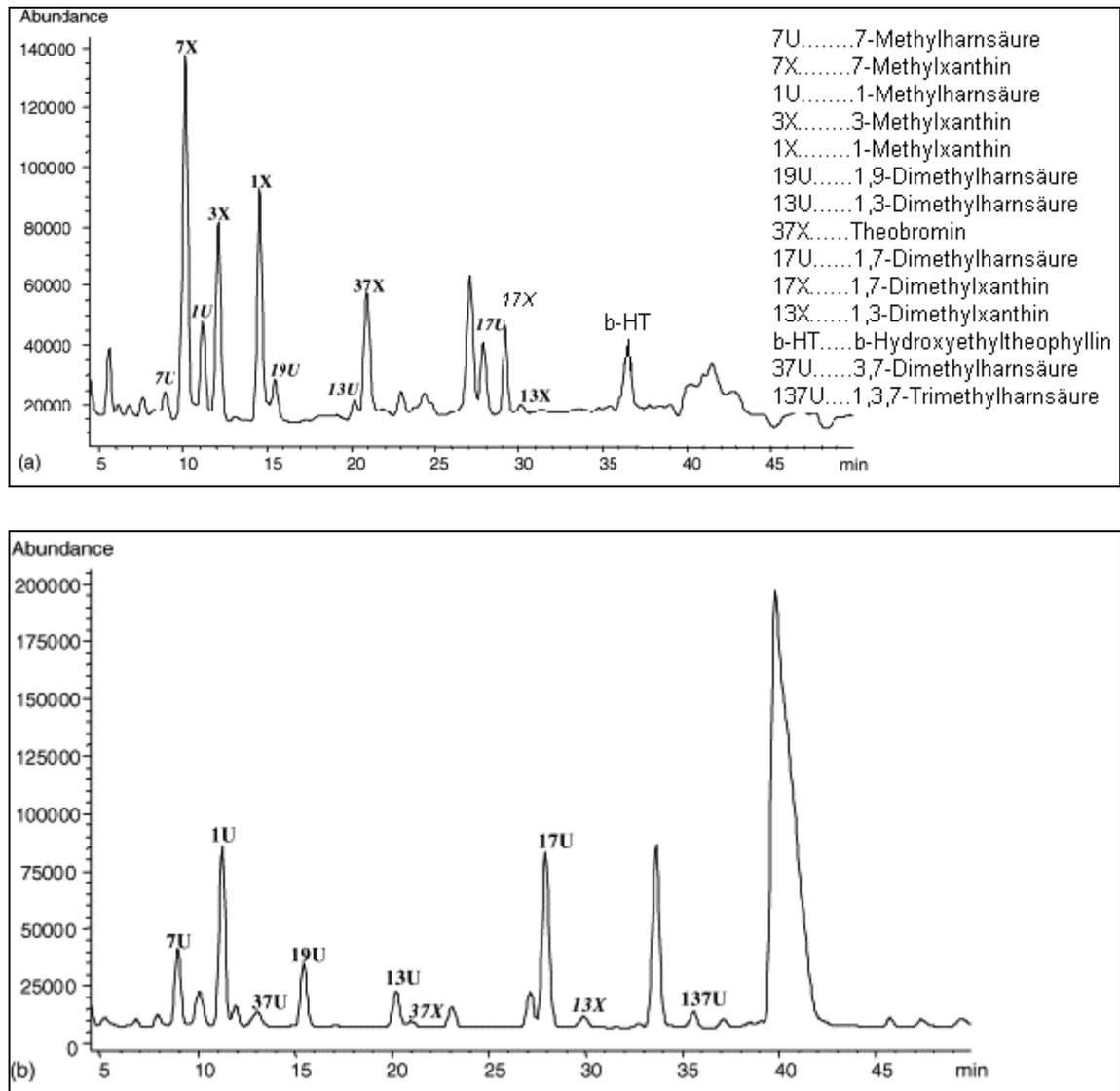


Abbildung 9: Chromatogramm von Koffein und seinen Metaboliten

[CAUBET et al., 2002]

Das in obiger Abbildung zu sehende Chromatogramm wurde unter (a) positiven und (b) negativen Ionen-Nachweisverfahren analysiert und von einer repräsentativen Urinprobe eines Rauchers entnommen. Es zeigt die 14 Abbauprodukte von Koffein im Harn.

2.6.) Die GC/MS-SPME-Methode

2.6.1.) Die Grundlagen der GC/MS-Kopplung

Die Kombination eines Chromatographen mit einem Massenspektrometer als Detektor ist die beste Methode, um Riechstoffe identifizieren zu können.

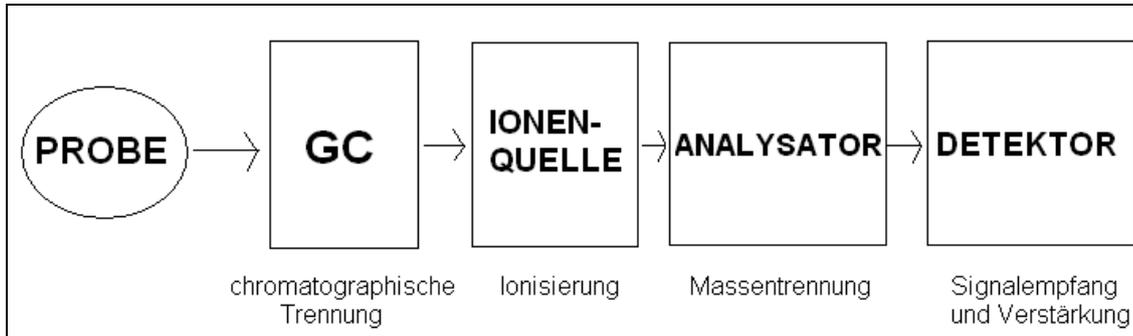


Abbildung 10: Schematischer Aufbau eines GC/MS-Systems

In der Gaschromatographie werden die zu analysierenden Verbindungen verdampft und mit Hilfe eines Gases als mobile Phase durch die Säule transportiert. Dieses Gas wird nur als Trägergas genutzt, sodass Wechselwirkungen der mobilen Phase mit den Analyten keine Rolle spielen. Die Gas-Fest-Chromatographie oder Adsorptionschromatographie ist insbesondere für die Analyse von Gasen der Luft bedeutsam. Die Auftrennung von zwei Komponenten wird durch die relative Flüchtigkeit bestimmt. Naturgemäß sind die Dampfdrücke temperaturabhängig [OTTO, 1995]. Der Massenspektrometer selbst ist aus mehreren Einheiten aufgebaut: Im Einlasssystem wird die Probensubstanz verdampft und dampfförmig in die Ionenquelle eingeführt, in welcher die Ionisierung durch Elektronenstöße stattfindet. Die übrigen Einheiten wie der Empfänger, der Verstärker, der Schreiber oder auch das EDV-System dienen der Aufzeichnung der getrennten positiven Ionen nach Massezahl (m/z) und Häufigkeit in Form eines Massenspektrums [SCHWEDT, 1996].

Die Kopplung erleichtert die direkte Identifizierung unbekannter Substanzen. Bei einer direkten Kopplung wird das Ende der Trennsäule bis in die Ionenquelle des Massenspektrometers vorgeschoben. So können die aufgetrennten Substanzen nämlich direkt und ungehindert in das

Massenspektrometer gelangen. Hier werden die Moleküle bzw. Atome im Vakuum mittels eines Elektronenstrahls hoher Energie (meist 70 eV) ionisiert, worauf es zur Fragmentierung des Moleküls kommt. Die Ionisierung durch das Elektronenstoßverfahren (EI) ist bei allen GC/MS-Geräten das Standardverfahren. Zur Ionisierung eines Moleküls sind jedoch lediglich 5-8 eV notwendig. Die überschüssige Energie führt durch verschiedene Schwingungen und Rotationen zur bereits erwähnten Fragmentierung des Probenmoleküls. Diese Fragmente können wichtige Hinweise zur Strukturaufklärung liefern. Die geladenen Strukturen werden in einem elektrischen Feld beschleunigt und im entsprechenden Magnetfeld je nach Größe und Ladung abgelenkt. Die Größe der Ablenkung wird vom Massenspektrometer gemessen und das Verhältnis von Masse zu Ladung in Form eines Massenspektrums registriert [HÜBSCHMANN, 1996].

Gasförmige und auch flüssige Proben werden mit einer Injektionspritze durch ein Septum (meist aus Silicongummi) am Kopf der Säule in den Trägergasstrom gebracht. Eine Verringerung des Probenvolumens ist bei niedrig belastbaren Säulen mit Hilfe einer Stromteilung (Splitinjektion) möglich. Über Strömungswiderstände kann das Splitverhältnis eingestellt werden, nur ein Teil des Gesamtvolumens gelangt in die Säule. Bei Spurenanalysen wird eine splitlose Injektion angewendet, wobei hier der Splitausgang geschlossen wird. Um flüchtige Bestandteile von der nicht oder schwer flüchtigen Matrix abzutrennen, wird in der GC-Analyse die Headspace-Technik angewendet [SCHWEDT, 1996]. In diesem abgeschlossenen, statischen System stellt sich ein Gleichgewicht von flüchtigen Stoffen zwischen Probenmatrix und der darüber liegenden Gasphase ein. Die angereicherten Verbindungen werden dann durch thermische Desorption im Injektorblock des Gaschromatographen von der Faser entfernt und der Messung zugeführt [HÜBSCHMANN, 1996]. Bei der HS-Analyse können also leicht flüchtige Stoffe in flüssigen oder festen Proben in geringen Konzentrationen nachgewiesen werden. Die zu analysierende Probe wird in einem speziellen Septumfläschchen gasdicht verschlossen und im HS-Gerät auf eine vorgewählte Temperatur erhitzt; nach

Einstellung des Gleichgewichts zwischen Probe und Dampfraum wird diese gaschromatographisch analysiert.



Abbildung 11: GC/MS-Gerät [Firma Thermo]

2.6.2.) Die SPME- Methode

Die Festphasenmikroextraktion (*SPME*) wurde 1989 von *Pawliszyn* erfunden und ist eine sehr einfache, effiziente und lösungsmittelfreie Probenvorbereitungsmethode. Alle Stufen der herkömmlichen Flüssig-Flüssig-Extraktion wie Extraktion, Konzentration, Derivatisierung und der Transfer zum Chromatographen sind hier zusammengeschlossen, was die Probenvorbereitungs-Prozedur wesentlich vereinfacht. Die anfänglichen Einsatzmöglichkeiten der SPME-Methode gab es in Bereichen der Umwelt- und Nahrungsmittel-Analysen. Sie lässt sich ideal mit der Massenspektrometrie (MS) koppeln. Die SPME-Technik kann routinemäßig in Kombination mit Gaschromatographie, Hochleistungs-Flüssigkeits-Chromatographie und Kapillar-Elektrophorese angewandt werden [VAS und VÈKEY, 2004].

Allgemein wird die SPME-Methode in der Analytischen Chemie für Aroma-Analysen angewandt. Sie stellt eine gute Methode zum Vorkonzentrieren aromatischer Komponenten dar. Es gibt zwei typische SPME-Einsatzmöglichkeiten, die Probenentnahme aus Gasen (HS) oder aus Lösungen [BALTUSSEN et al., 2002], was von der natürlichen Matrix und der Flüchtigkeit der Aromen abhängig ist. Die chemische Analyse von Geschmack

und Aroma besteht aus drei Schritten. Diese sind erstens die Extraktion und Konzentration aromatischer Stoffe, die instrumentelle Analyse der erhaltenen Extrakte und die Interpretation der Resultate. Ohne der Bereitstellung von Standards und der Kenntnis der Analyt-Zusammensetzungskoeffizienten zwischen der Probenmatrix und der SPME-Faser ist die SPME-Methode für die Quantifizierung in Mehrfachkomponenten-Analysen schwierig [SCHEPPERS und WERCINSKI, 1999].

2.6.3.) Die SPME-Apparatur und Einsatz

Die SPME-Apparatur ist ein sehr einfach gehaltenes „Gerät“. Sie ähnelt einer Injektionsspritze, die aus einem Faser-Halter und einem Faser-Teil besteht. Der letztere besteht aus einer 1-2 cm langen einziehbaren Faser, die eine sehr dünne Quarzfaser ist. Diese ist mit einem dünnen Polymer-Film überzogen, nämlich mit einer Divinylbenzen(DVB)/Carboxen/PDMS-Schicht. Die Außenseite ist mit einer stationären Phase bedeckt. Die Analyte aus der Probe werden direkt auf der Faser-Schicht extrahiert.

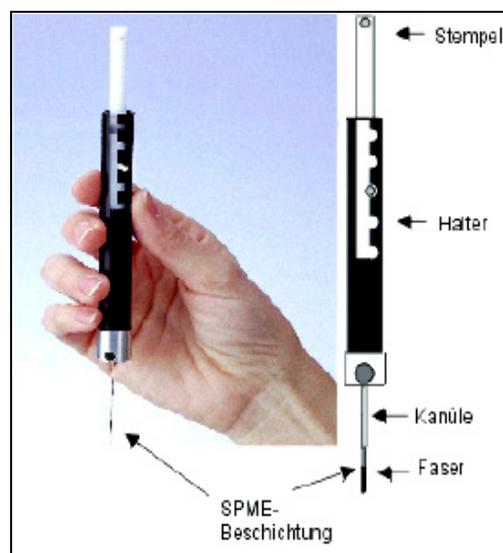


Abbildung 12: SPME- Field Sampler [Supelco]

Bei der Anwendung wird die SPME-Nadel in die richtige Position gebracht. Die Nadel, die die Faser schützt, wird ausgefahren und im Raum aufgestellt. Die Polymer-Schicht arbeitet wie ein Schwamm, der die Analyte beim Adsorptionsprozess konzentriert. Die Kinetik des SPME-Extraktionsprozesses ist u.a. von der Filmdicke oder Agitation der Probe abhängig. Die Probenentnahme-Zeiten belaufen sich auf ein paar Minuten oder auch Stunden. Nach der Probenentnahme wird die Nadel zum mechanischen Schutz wieder eingefahren. Danach erfolgt der Transfer der Analyte von der Faser in den Chromatographen. Die Gaschromatographie oder GC/MS wird bevorzugt angewandt. Hier findet eine thermische Desorption der Analyte im Einspritzventil statt. Nach dem Einbringen der Nadel in den Injektor, wird die Faser aus der Metallnadel herausgeschoben. Die Auswahl verschiedener Methoden der Probenentnahme und Chromatographie hängt hauptsächlich von der Polarität und Flüchtigkeit der Analyte ab. Eine andere häufige Variante ist die Analyse mittels HPLC (HPLC/MS). Flüchtige Anteile werden meist in geeigneter Weise bei HS-Analysen untersucht, gefolgt von GC bzw. GC/MS. Wenn es kein Lösungsmittel gibt, also nur das, was von der Faser adsorbiert wird, wird die sog. „splitless-injection“ verwendet, die Analyse ist daher sehr empfindlich. Polare und nicht-flüchtige Proben werden sehr oft mittels „Direct Immersion“ (DI) untersucht, wo die Faser direkt in eine Flüssigkeit eingetaucht wird, gefolgt von GC- oder HPLC-Analysen. Die Probenentnahme-Fasern können mehrmals verwendet werden, doch sollte man sehr vorsichtig damit umgehen [VAS und VÉKEY, 2004].

SPME reduziert die Zeit für die Probenvorbereitung, mindert die anfallenden Kosten für Lösungsmittel und kann die Detektions-Grenzen verbessern.

KAPITEL III

3) MATERIAL UND METHODEN

3.1.) Gaschromatographische Untersuchung zum Duft Wiener

Kaffeehäuser

Die ersten Probemessungen wurden in naheliegenden Kaffeehäusern der Universität Wien (z.B. „Café Blaustern“ oder „The Roast“) durchgeführt, um sich in die SPME-Methode einzuarbeiten und den Umgang mit dem Gaschromatographen zu optimieren. So wurden im Laufe der Untersuchungen einige Methoden entwickelt und immer wieder verfeinert, bis man schlussendlich eine Methode gefunden hatte, die ein übersichtliches Chromatogramm lieferte. Später wurden mit dieser Methode auch Probeläufe mit Kaffeearoma-Reinsubstanzen durchgeführt. Diese 5 Substanzen waren 2-Methoxy-3(1-methylpropyl)-pyrazin, 2,5-Dimethyl-4-hydroxy-3(H2)-furanon (Erdbeeraldehyd), Damascenon, Guajacol (2-Methoxyphenol) und 2-Methoxy-4-vinylphenol. Somit konnte getestet werden, ob man tatsächlich diese mit Sicherheit im Kaffeearoma enthaltenen Substanzen mit der entwickelten Methode finden konnte, was auch gelang. Man konnte also davon ausgehen, dass die Methode „rmp2.“ für die Kaffeehaus-Raumluftmessungen geeignet war. Mit der „rmp2.“-Methode wurden auch einige Tests mit einer Tasse frisch gebrühten Kaffee durchgeführt. Diese Messung erfolgte, indem man einen üblichen Espresso über Nacht oder auch nur für einige Stunden unter die SPME-Faser stellte, um die Aromastoffe direkt einzufangen, dann in den GC einspritzte und auswertete. Es wurde die Espressozubereitung gewählt, da diese am häufigsten in den Kaffeehäusern angeboten wird. Anhand der Tabelle von *Nijssen et al.* (1996) konnten die gefundenen Substanzen mit den Kaffeearoma-Bestandteilen verglichen werden. Somit ergab sich eine weitere Sicherheit, dass die Methode für die Kaffeehausmessungen geeignet war, da eine Menge von Kaffeearoma-Komponenten identifiziert werden konnte.

Es wurden unter anderem Messungen im „Café Ritter“, „Alt Wien“ und „Aida“ gemacht. Die Ergebnisse dieser drei Kaffeehäuser, ebenso wie die des „Hawelkas“ und die des „Sperls“, waren für das WWTF-Projekt von Bedeutung.

Diese fünf typischen Wiener Kaffeehäuser wurden nämlich von der Projektleitung vorgegeben. Wie anfangs bereits erwähnt, wird hier aber nur auf das „Café Hawelka“ und das „Café Sperl“ genauer eingegangen, da diese beiden die wahrscheinlich bekanntesten Innenstadtcafés sind. Außerdem lieferten die Chromatogramme untereinander keine allzu großen Unterschiede und die „Hawelka“- und „Sperl“- Ergebnisse erwiesen sich als repräsentativ!

Wichtig zu erwähnen ist noch, dass aufgrund geringfügig abweichender Messbedingungen, einzelne RT-Werte bestimmter Substanzen nicht immer exakt an denselben Stellen liegen.

3.2.) Entwickelte Methode

Bei den Untersuchungen zu den Kaffeehausdüften Wiens wurden die flüchtigen Anteile im Gasraum mittels GC/MS erforscht. Es wurde also eine eigene Methode für die flüchtigen Anteile in der Gasphase entwickelt.

Das Prinzip dieser Methode besteht darin, dass die flüchtigen Verbindungen aus dem Dampfraum über der Probe an beschichteten Quarzfasern angereichert werden. Die Desorption der Analyten erfolgt ohne weitere Probenvorbereitung direkt im beheizten Injektor des Gaschromatographen. Hohe Nachweisempfindlichkeiten, wie sie in der Aromastoffanalytik erforderlich sind, können damit erreicht werden. Die Identifizierung der Aromastoffe stellt aufgrund der Vielzahl der flüchtigen Verbindungen und der teils sehr geringen Konzentrationen eine sehr große Herausforderung dar.

Sehr wichtig war es auch, die richtige Messdauer, in der man die SPME-Faser im Kaffeehaus aufstellte, auszutesten, um die Säule weder zu überladen noch um zu wenig Raumluftbestandteile einfangen zu können. Die SPME-Faser wurde schließlich für je drei, sechs und acht Stunden in den jeweiligen Kaffeehäusern aufgestellt, um die Raumluft analysieren zu können. Danach wurden die eingefangenen Moleküle in den GC eingespritzt und die Dauer der entwickelten Methode, also 55 Minuten, abgewartet. Danach wurden die einzelnen Peaks der erhaltenen Chromatogramme mit Hilfe der beiden Bibliotheken identifiziert.

In der vorliegenden Arbeit werden jeweils die drei und achtstündigen Messungen verglichen, da die sechsstündigen keinen großen Unterschied zu den achtstündigen Messungen machen.

3.3.) Material, Zubehör und technische Details

Für die GC/MS-Messungen wurde ein Trace GC Ultra/ DSQ II von der Firma Thermo gekoppelt an einen MS verwendet. Die Probenvorbereitung erfolgte mit einer SPME-Faser [Field Sampling SPME, Field Holder] von Supelco. Für die GC-Trennung wurde eine 60m-Kapillarsäule [TRACE TR-5MS GC Column, 60 m x 0.25 mmID x 0.25 µm Film] ebenfalls von der Firma Supelco mit Helium als Trägergas verwendet. Die Injektion erfolgte splitlos bei 250°C.

Bei der optimierten Methode wurde mit folgendem Temperaturprogramm gearbeitet: 3 min bei 40°C, mit 3°C/min auf 250°C erhitzt. Die Temperatur der Ionenquelle betrug 200°C. Die Analyten wurden im Scan-Modus von $m/z = 50$ bis 350 detektiert. Jeder erhaltene Peak aus dem Chromatogramm wurde im Scan-Modus mithilfe der NIST (National Institute of Standards and Technology)-Datenbank und der MS-Spektren-Datenbanken von Wiley Registry™ (8. Auflage) identifiziert. Die letztere enthält mehr als 390 000 Spektre (©2006 by John Wiley & Sons, Inc. All Rights Reserved) und liefert so eine viel bessere Identifikation der erhaltenen Peaks. Die NIST-Datenbank diente lediglich als Vergleich bzw. Kontrolle zur Wiley-Bibliothek.

Analytische Bedingungen

Gaschromatographie

Gerät:	Thermo, Trace GC Ultra
Trägergas:	UN1046 Helium, verdichtet
Trägergeschwindigkeit:	1ml/min; Flow Mode = constant flow
Trennsäule:	60 m (TR-5MS; Artikelnr. 260F154P)
Innendurchmesser:	0.25 mmID
Filmdicke:	0.25 µm Film
Injektorblock:	split/ splitless Injektor, Temp. 250°C, ausgestattet mit einem Inlet Liner für SPME; 0.75 mm ID (Thermo Artikelnr. 45352083, Supelco)

Temperaturprogramm

Anfangstemperatur:	40°C; 2 min halten
Aufheizrate:	3°C/min auf 250°C
Gesamtzeit:	55.33 min
Max. Temp.:	350°C

Probenaufgabe Standards

- manuell mit Portable Field Sampler
- Injektor, T: Ausheizzeit: 2 min. (desorption time)
- Splitratio: splitless

Massenspektrometrie

Gerät:	Thermo DSQ II, direkte Kopplung
Transferline-Temperatur:	250°C
Ionenquelle:	200°C, EI
Scan-Bereich:	40-400 amu/ 0.35 sec; full scan; TIC
Elektronenenergie:	70 eV

3.4.) Auswertung der GC-MS-Chromatogramme

Die elektronische Datenerfassung und Auswertung der Messungen erfolgte mit Hilfe der Software Xcalibur des GC/MS-Gerätes (Firma Thermo). Die Massenspektren wurden anhand folgender Spektrenbibliotheken verglichen und analysiert:

- Wiley Registry of Mass Spectral Data, 8th Edition
- NIST/EPA/NIH Mass Spectral Library 1.5a (match factors >850)

Die von den Bibliotheken vorgeschlagenen Treffer werden nach dem Grad der Übereinstimmung gereiht, also nach der Wahrscheinlichkeit. Diese dient als Hilfestellung bei der Analyse der Spektren. Prinzipiell führen nur Übereinstimmungen der Probenspektren mit den Analysen der untersuchten Ausschließungstests (Kaffeearomakomponenten-Listung von *Nijssen* et al. (1996) und Zigarettenrauch-Messungen), die unter den gleichen Bedingungen durchgeführt wurden (das heißt mit derselben Methode) bzw. bereits vorhandene Chromatogramme, zu eindeutigen Identifizierungen der Verbindungen. Vergleiche mit den beiden vorhin erwähnten Spektrenbibliotheken können lediglich zu einer näherungsweisen, qualitativen Identifizierung der Substanzen führen, da die Untersuchungsparameter nicht ident sind [BURGER, 2005].

Anhand der genannten Hilfestellungen, versuchte man jeden einzelnen Peak optimal zu identifizieren, um gut-möglichste Ergebnisse zu erzielen.

KAPITEL IV

4) ERGEBNISSE UND DISKUSSION

4.2.) Auswertung und Interpretation der Chromatogramme

Zur richtigen Interpretation der Ergebnisse halfen einige Ausschließungstests. Die Substanzen aus den Chromatogrammen wurden mit der Liste der im Kaffee Aroma enthaltenen Substanzen der Autoren *Nijssen* et al. (1996) verglichen und zutreffende als Kaffee Aroma-Bestandteile identifiziert. Die anderen unbekannt Substanzen wurden anhand aufliegender Studien und literarischen Recherchen identifiziert. Um die Zigarettengerüche in den Kaffeehäusern richtig zu deuten, wurden eigene Zigarettenrauch-Messungen durchgeführt. Man führte unter anderem eine Messung mit Zigarettenrauch und etwas Asche in einem geschlossenen Gefäß durch, in welchem man die SPME-Faser über Nacht beließ (= „Tabakrauch, 24std Messung, geschlossen“). Ein weiteres Vergleichschromatogramm lieferte der Versuch, die SPME-Faser während des Genusses einer Zigarette immer wieder anzuhauchen (= „Zigarettenrauch, angehaucht“) und diese dann in die entsprechende GC-Einrichtung einzubringen.

Diese Chromatogramme erleichterten die Interpretation der Kaffeehaus-Raumluft. Die Nikotin-Peaks wurden also mit jenen im Kaffeehaus verglichen und man konnte anhand der wiederholt gefundenen Substanzen tatsächlich auf „Zigarettenrauch-Peaks“ schließen.

Es konnten jedoch keine der anfangs getesteten fünf Reinsubstanzen (siehe Seite 29) in den Kaffeehaus-Chromatogrammen gefunden werden, da das Kaffee Aroma nicht so stark verbreitet war, dass man diese Substanzen in der Raumluft finden konnte.

4.2.1.) Ergebnisse des Cafés HAWELKA

Das Café Hawelka war das erste traditionelle Kaffeehaus, dessen Raumluft untersucht wurde. Dementsprechend wurden mehrere Messungen durchgeführt. Auch unterschiedliche Messzeiten wurden ausgetestet, um ein optimales Chromatogramm zu bekommen und die Säule nicht zu überladen, indem man die SPME-Faser etwa zu lange im Raum stehen ließ. Man stellte zwei Fasern gleichzeitig auf, um diese dann mit zwei unterschiedlichen Methoden austesten zu können. Es hat sich herausgestellt, dass die „rmp2.-Methode“ am geeignetsten ist. Nach längeren Testläufen lieferte diese die besten Ergebnisse.

Im Hawelka wurde anfangs nur eine Stunde gemessen, was sich im Nachhinein als zu kurz herausstellte. Schon bessere Ergebnisse lieferten die drei-, sechs-, und achtstündigen Messungen, die man dafür nutzte, um die verschiedenen Chromatogramme miteinander vergleichen und interpretieren zu können.

Die dreistündige Messung Anfang Dezember (07.12.07) ergab sich in der Zeit von elf Uhr vormittags bis 14 Uhr. Die rauchige Luft war kaum zu „überriechen“, was wahrscheinlich trotz großem Kaffeekonsum der Gäste, das gute Kaffeearoma übertönte, doch mit der Zeit wieder abklang (Kreuzadaptation). Auch die servierten Gulaschsuppen, die verschiedenen Düfte der Parfums, die die Gäste trugen, oder auch die alt-modrig riechende Originaleinrichtung im Hawelka waren ausschlaggebend für das Ergebnis der Messungen. Das verregnete und kühle Wetter trieb viele Touristen und andere Gäste in das Café, das aber um die Mittagszeit allgemein normal ist und so das Café ausgelastet ist. Die SPME-Faser wurde zuerst für drei Stunden in der Nähe der Kaffeemaschine positioniert. Bei den kürzeren Messungen (d.h. bei einer oder drei Stunden) und v.a. am Anfang wurden die Messzeiten im Kaffeehaus abgewartet, um die SPME-Faser gleich wieder mitnehmen und auch darauf achten zu können, dass die Faser nicht beschädigt wird. Bei den längeren Messzeiten jedoch wurden die Sampler nach der abgelaufenen Zeit wieder abgeholt.

Auf Nachfrage erfuhr man, dass das „Café Hawelka“ Äthiopischen Kaffee verwendet, d.h. qualitativ hochwertigen Arabica-Kaffee, was – v.a. auf das Aroma bezogen - zur Robusta-Sorte einen sehr großen Unterschied macht.

Die Achtstundenmessung am 17.12.07 dauerte von zehn Uhr vormittags bis 18 Uhr. Auch hier war wieder das Café um die Mittagszeit sehr gut besucht, draußen war es trotz der wenigen Sonnenstrahlen kalt und - wie immer – war der Zigarettengeruch stark wahrnehmbar. Die Chromatogramme der sechs- und achtstündigen Messzeiten ergaben minimale Unterschiede, weshalb die längere Messung bevorzugt wurde.

4.2.1.1.) Die dreistündige „Hawelka-Messung“

Nach einer Retentionszeit von ca. 3.5 Minuten zeigten sich die Substanzen 2-Methyl-1,3-butadien, auch als Isopren bezeichnet, und 1,3-Pentadien, anders Piperiden. Diese Kohlenwasserstoffe sind im Kaffee Aroma schon nachgewiesen worden [NIJSSEN et al., 1996]. Isopren wird manchmal als Aromastoff in Lebensmitteln eingesetzt [ADAM et al., 2000] und kann aber auch von bestellten Mahlzeiten stammen. Später zeigten sich (*E, Z*)-2,6-Nonadienal, ein Aldehyd im Kaffee Aroma, Hexen, sowie der Alkohol 1-Pentanol (1-Pentanol ist Bestandteil der Fuselöle). Die im Kaffee Aroma enthaltene Säure Pentansäure (Valeriansäure) und 2-Methylfuran, wurden ebenfalls gefunden. Nach fast sechs Minuten zeigte sich der Peak von Ethylacetat, ein Ester, der laut *Nijssen* et al. (1996) auch das Kaffee Aroma bestimmt. Möglicherweise stammt dieser aber auch aus einer mit Limonen aromatisierten Limonade, die zur Zeit der Messung ausgeschenkt wurde. In natürlicher Form ist Ethylacetat in Rum und Wein zu finden. Dieser Essigester zählt zu den Fruchtestern und hat daher einen fruchtigen Duft [ADAM et al., 2000]. Benzol, eine Kaffee Aroma-Komponente, zeigte sich nach sieben Minuten. Dieses ist auch ein Bestandteil von Benzin und kann auch ein Zigarettenrauchinhaltsstoff sein. Nonanal wurde ebenfalls in der „Hawelka-Luft“ gefunden, es hat einen blumig-rosenhaften, citrusartigen Geruch, doch anhand seiner geringen Intensität kaum erwähnenswert. 2,5-Dimethylfuran und der Alkohol 3-Methyl-1-butanol lassen sich wiederum aus dem Kaffee Aroma begründen. Nach 10 Minuten Retentionszeit zeigte sich ein

als Pyridin identifizierter Peak. Pyridin ist eine Base im Kaffeearoma oder auch ein Zigarettenrauchbestandteil [MERCCKEL und PRAGST, 2007]. Es folgen die Base Pyrrol und der Ester Butylacetat. Hexanal, das aufgrund seines grasigen Geruches in der Riechstoffchemie Verwendung findet, aber auch von Autoabgasen stammen kann, ist mit geringer Intensität nach 12.5 Minuten zu finden. Weitere Kaffeearoma-Komponenten sind Furfural (2-Furancarbaldehyd) und die Basen α - und β -Picolin. Unter zwanzig Minuten Retentionszeit fand man auch noch Furfurylalkohol, anders 2-Furanmethanol, die Kohlenwasserstoffe 1,3-Dimethylbenzen (= p-Xylol) und Nonan. Benzaldehyd, der nach 19.96 Minuten im Chromatogramm erscheint, kann aus dem Kaffeearoma oder auch aus der Zigarette stammen. Weiters kommt Benzaldehyd natürlich in geringen Mengen in vielen ätherischen Ölen und auch in Blumenaromen vor. Benzaldehyd findet Einsatz in Duftstoffen und als Zwischenprodukt für „Geruchschemikalien“, zum Beispiel für die Synthese von Zimtaldehyd, Farbstoffen oder Medikamenten [ADAM et al., 2000].

Im weiteren Verlauf zeigen sich die Peaks von Decan, von der Base 3- bzw. 4-Ethylpyridin, die letzteren kommen in hoher Intensität vor, und von Phenol. Diese Verbindungen stammen ebenfalls aus dem Kaffeearoma. Furfurylacetat (=2-Furanmethanolacetat) und Mesitylen (=1,3,5-Trimethylbenzen) sind auch in der dreistündigen Hawelka-Raumluft-Messung zu finden. Den höchsten Peak im Chromatogramm weist die Substanz Limonen auf. Diese ist sowohl ein Kohlenwasserstoff aus dem Kaffeearoma als auch ein Aromastoff aus einem Putz- oder Geschirrspülmittel. Limonen hat unterschiedliche Geruchseigenschaften und ist wichtig für den sensorischen Charakter von Pinusarten, Pfefferminz- und Eukalyptusöl. Allgemein riecht (l)-Limonen terpentin- und (d)-Limonen orangenartig [OHLOFF, 1990]. Später zeigen sich die Kohlenwasserstoffe Dodecan, Undecan und Linalool (= 1,6-Octadien-3-ol, 3,7-dimethyl-). Es weist einen blumig, eher muffigen Geruch auf und riecht vergleichbar nach Bergamotte [BÜCKING, 1999]. Linalool kann aber auch aus einer Zigarette stammen [MERCCKEL und PRAGST, 2007]. Linalool kann sowohl einen holzigen Lavendelton als auch eine süßliche Lavendelnuance haben, je nach Enantiomerie [OHLOFF, 1990]. Nonanal ist in Duftstoffen

enthalten und riecht nach Eisbonbon [BÜCKING, 1999]. Es hat einen blumigen Geruch und seine hohe Intensität ist im Chromatogramm deutlich erkennbar. Nach ca. dreißig Minuten Retentionszeit macht sich Benzenethanol (=β-Phenylethylalkohol) bemerkbar. Dieser Alkohol ist ein Bestandteil des Orangen- und Rosenöles, welcher auch als Zusatzstoffgemisch in Zigaretten Einsatz findet [MERCCKEL und PRAGST, 2007]. Danach zeigt sich (l)-Menthol, das auch als Additiv in der Zigarette vorkommen kann. Es hat einen pfefferminzartigen Geruch, trotzdem aber geringe Bedeutung für den Kaffeehausduft, außerdem ist die Intensität des Peaks sehr gering. (-)-Menthol wird in Cremes und Salben verwendet, da es einen kühlenden Effekt hat. Große Mengen werden in Likören, Süßigkeiten und eben in der Tabakindustrie verwendet [ADAM et al., 2000].

Tabelle 6: Die Tabelle zeigt alle Kaffee Aroma-Komponenten der ersten 20 Minuten der dreistündigen „Hawelka-Raumluftmessung“

P-Nr.	RT	Substanz	P-Nr.	RT	Substanz
1	4.27	Isopren	12	10.19	Pyridin
2	4.39	Piperylen	13	10.32	Pyrrrol
3	5.10	(E,Z)-2,6-Nonadienal	14	13.03	Butylacetat
4	5.30	Hexen*	15	13.60	β-Picolin
5	5.39	1-Pentanol	16	13.75	α-Picolin
6	5.42	Pentansäure	17	14.39	2-Furancarbaldehyd
7	5.59	2-Methylfuran	18	15.32	2-Furanmethanol
8	5.80	Ethylacetat	19	15.63	p-Xylol
9	7.04	Benzol	20	16.34	Xylol*
10	8.33	2,5-Dimethylfuran	21	17.30	Nonan
11	9.55	3-Methyl-1-butanol	22	19.96	Benzaldehyd

*richtiges Isomer nicht bestimmt

Das zugehörige Chromatogramm befindet sich im Anhang auf Seite 83.

Nach nicht ganz 34 Minuten Analysenzeit erscheint der Peak von Naphthalin, einem Kohlenwasserstoff aus dem Kaffeearoma [NIJSSEN et al., 1996], danach folgt vermutlich eine aus dem Zigarettenrauch stammende Substanz, nämlich Zimtaldehyd [MERCKEL und PRAGST, 2007]. Schließlich zeigt sich innerhalb der ersten vierzig Minuten noch der Kohlenwasserstoff Tridecan. 1-Methylnaphthalin erscheint dann bei ca. 40.19 Minuten im Chromatogramm. (S)-, 3-(1-Methyl-2-pyrrolidiny)-pyridin, bekannt als Nikotin, zeigt sich mit hoher Intensität nach einer Retentionszeit von 41.55 Minuten. Dazwischen findet man immer wieder Siloxan-Verbindungen, die eindeutig von der Säule bzw. SPME-Faser stammen. Darauf folgen Tetradecan und Pentadecan, die ebenfalls bereits von *Nijssen* et al. (1996) als Kaffeearomakomponenten identifiziert wurden. Gegen Ende der Messung erscheinen die Verbindungen α -Methylionon und Fliederaldehyd (*p*-tert-Butyl- α -methylhydrozimtaldehyd), die häufig in Kosmetika und Parfums eingesetzte Duftstoffe sind [BEHRENDT et al., 1999]. Das Öl des Fliederaldehyds besitzt einen süßen, blumigen Duft, welcher an Flieder, Lilie, Linde oder Maiglöckchen erinnert. Weiters ist es in zahlreichen Parfumkompositionen einsetzbar, vorzugsweise solche mit Blütencharakter [RAU, 2000]. Daher ist es sehr wahrscheinlich, dass die beiden Fliederaldehyd und α -Methylionon aus dem Parfum eines Gastes stammen könnten. Nach 51.43 Minuten zeigt sich die letzte im Chromatogramm befindliche Kaffeearoma-Komponente, nämlich der Kohlenwasserstoff Hexadecan. *n*-Hexadecan lässt sich aber auch als Inhaltsstoff des Zigarettenrauchs interpretieren [MERCKEL und PRAGST, 2007]. Bei 51.44 Minuten findet man Biacetyl (=2,3-Butandion), das in Spuren in vielen ätherischen Ölen und Lebensmitteln enthalten ist. Es wird in der Kosmetikindustrie vor allem in Handcremen verarbeitet. Es ist ein wichtiger Bestandteil beispielsweise in Butter, Käse, Whiskey oder Brot und eben auch im Kaffeearoma und in der Johannisbeere enthalten [ADAM et al., 2000]. Methyl-(3-oxo-2-pentylenylpentyl)-acetat oder besser bekannt unter dem Namen Methyl Dihydrojasmonat ist ein modernes Parfumöl, das wieder auf parfümierte Gäste schließen lässt.

Tabelle 7: Die Tabelle zeigt alle Kaffeearoma-Komponenten zwischen 20 und 55 Minuten der dreistündigen „Hawelka-Raumluftmessung“

23	20.51	Decan	31	28.61	Linalool
24	21.90	3- bzw. 4-Ethylpyridin*	32	33.05	α -Terpineol
25	22.30	Phenol	33	33.89	Naphthalin
26	22.91	Furfurylacetat	34	38.34	Tridecan
27	23.05	Mesitylen	35	40.19	1-Methylnaphthalin
28	24.91	Limonen	36	42.94	Tetradecan
29	26.92	Dodecan	37	47.31	Pentadecan
30	28.27	Undecan	38	51.43	Hexadecan

*richtiges Isomer nicht bestimmt

Das zugehörige Chromatogramm befindet sich im Anhang auf Seite 84. Einen Überblick über alle Kaffeearoma-Komponenten der dreistündigen Messung liefert das Bild auf Seite 85.

4.2.1.2.) Die achtstündige „Hawelka-Messung“

Bei der achtstündigen Messung erscheint schon unter den ersten 4 Minuten Benzol, ein aromatischer Kohlenwasserstoff aus dem Kaffeearoma. Benzol kann aber auch aus dem Zigarettenrauch stammen [GROB, 1962]. Ebenso wie bei der dreistündigen Messung findet man hier nach ungefähr gleicher Retentionszeit 2-Methyl-1,3-butadien (=Isopren) und davor 2,5-Dimethylfuran. Zwischen acht und elf Minuten kommt der Peak von Methylbenzol, welches laut *Nijssen et al. (1996)* im Kaffeearoma zu finden ist. Toluol ist aber auch ein üblicher Bestandteil des Zigarettenrauchs [EMMEL, 2002]. Im weiteren Verlauf erscheinen die Basen Pyrrol und Pyridin, beide eine Kaffeearomakomponente. Pyridin kann aber auch aus dem Zigarettenrauch stammen.

Später findet man Furfural, 2-Furanmethanol und die Base 2-Methylpyridin (= α -Picolin). Diese Substanzen sind ebenso wie das später zu findende Xylol als

Kaffee Aroma-Komponenten in der „Hawelka-Luft“ zu finden. Furfurylalkohol, dessen Peak nach ca. 15.5 Minuten aufscheint, und p-Xylol sind weitere Kaffee Aroma-Stoffe. Der manchmal in Zigaretten eingesetzte Zusatzstoff Phenylethylacetat ist nach p-Xylol zu finden [MERCKEL und PRAGST, 2007]. Benzaldehyd dagegen ist Ausgangsstoff für die Synthese zahlreicher aromatisch-aliphatischer Duft- und Aromastoffe. Auch in der Lebensmitteltechnologie findet Benzaldehyd für Bittermandel-Aromen und als Geschmackskorrigens Einsatz [RAU, 2000]. Auch aus dem Zigarettenrauch kann Benzaldehyd stammen. Bei 17.59 Minuten erscheint die Substanz Styrol und nach 18.61 Minuten die Base 2,5-Dimethylpyrazin.

Tabelle 8: Die Tabelle zeigt alle Kaffee Aroma-Komponenten der ersten 20 Minuten der achtstündigen „Hawelka-Raumluftmessung“

P-Nr.	RT	Substanz	P-Nr.	RT	Substanz
1	3.95	Benzol	9	13.57	3-Methylpyridin
2	4.33	Isopren	10	15.03	Xylol*
3	7.85	Toluol	11	15.26	Furfurylalkohol
4	8.33	2,5-Dimethylfuran	12	16.04	p-Xylol
5	10.32	Pyrrrol	13	17.32	Styrol
6	10.33	Pyridin	14	18.61	2,5-Dimethylpyrazin
7	12.30	α -Picolin	15	19.68	Benzaldehyd
8	13.12	2-Furancarbaldehyd			

*richtiges Isomer nicht bestimmt

Im Anhang auf Seite 86 sieht man das Chromatogramm zu dieser Tabelle.

Dann findet man 5-Methyl-2-furancarboxaldehyd, ein Furan aus dem Kaffee Aroma, sowie Ethyltoluol. Dieses wird als Lösemittel für verschiedene Natur- und Kunstharze verwendet [PAATSCH, 2006]. Nach 22 Minuten erscheint wieder der Peak von Phenol, der bei der dreistündigen Messung ebenso aufzufinden ist. Danach zeigt sich der Peak von 2-Furfurylacetat,

ebenfalls eine Komponente des Kaffeearomas. Der nächste Peak wurde als (d)-Limonen identifiziert und erscheint sowohl bei der drei- als auch bei der achtstündigen Messung im „Café Hawelka“ als derjenige mit der höchsten Intensität. Darauf folgt Toluol, ein üblicher Bestandteil des Zigarettenrauchs [EMMEL, 2002] und anschließend 4-Methylphenol (= p-Cresol) und Undecan. Die Substanz 3,4-Dimethylstyren ist bei 28.28 Minuten zu finden. Linalool, ein Monoterpenalkohol im Kaffeearoma, wurde auch gefunden. Linalool kann aber auch als Zusatzstoff im Zigarettenrauch erkannt werden [MERCKEL und PRAGST, 2007]. Weiters ist Linalool eine häufig in Deodorants und Kosmetika nachgewiesene Duftstoff-Komponente [IRION, 2008]. Linalool riecht angenehm bergamotteartig, vergleichbar mit dem Birnenduft, frisch, süß, blumig-fruchtig [RAU, 1996]. Bei 28.28 Minuten Retentionszeit findet man p-Cymol, ein Bestandteil des Limettenöls [OHLOFF, 1990].

Nach ca. einer halben Stunde der Messung findet man wie bei der kürzeren Messung die Substanz Nonanal, was in vielen Duftstoffen verwendet wird. Der Duftstoff ist in der Natur in verschiedenen Citrus- und Rosenölen sowie im Lemongras-, Zimt-, Ingwer- und Orrisöl zu finden. Der Duft des aliphatischen Aldehyds Nonanal ist prägnant, komplex, oszillierend, aber auch blumig-rosenhaft und citrusartig mit einer Iris- und Orangenblütennote. Der aldehydische Riechstoff passt in blumige Kompositionen und Phantasiebouquets, insbesondere in solche mit Rosen-, Cassien- und Liliencharakter, aber auch für Orangenblüten- und Citruspräparationen [RAU, 2003].

Später zeigt sich 3-Phenyl-(Z)-2-propenal, auch als cis-Zimtaldehyd bezeichnet. Zimtaldehyd findet Anwendung in Parfums und ebenso als Zigarettenzusatzstoff [MERCKEL und PRAGST, 2007]. Die trans-Form von Zimtaldehyd ist der Hauptbestandteil des chinesischen Cassiaöls (mit einem Gehalt von 75-90%), des *Padang*-Zimtöls und des *Ceylon*-Zimtrindenöls (Anteil 65-75%). Daneben kommt der Duftstoff im ätherischen Zimtblätter-, Patchouli- und Myrrhenöl vor. Zimtaldehyd wird vor allem in würzigen und orientalischen Parfumkompositionen eingesetzt. Er ist der Hauptbestandteil von künstlichem

Zimtöl. Weiterhin ist die Substanz wichtiges Zwischenprodukt für Riechstoffsynthesen, z.B. von Zimtalkohol und Dihydrozimtalkohol. Der Aldehyd findet auch in Haushaltsprodukten und Seifen als kostengünstige Beduftungskomponente Einsatz [SCHROEDER, 2000].

Im weiteren Verlauf zeigt sich Phenylethylalkohol im Chromatogramm, auch ein Bestandteil des Orangenöls. Orangenöl (süß) wird aus der Fruchtschale von *Citrus sinensis* gewonnen, wobei hier die Terpenkohlenwasserstoffe hauptsächlich von (d)-Limonen vertreten werden. Auch Carbonylverbindungen sind in diesem Öl enthalten, nämlich v.a. Decanal und Citral. Orangenöl findet als Aromazusatz in Reinigungsmitteln in Verbindung mit Alkohol und einem geringen Tensid Anwendung [PURKL, 1997]. 2-Phenylethanol stammt von einem Zigarettenzusatzstoff [MERCKEL und PRAGST, 2007]. Schließlich findet man 2,6-Dimethylphenol als weitere Kaffeearoma-Komponente. Menthol (=l)-Menthol) mit dem typischen Pfefferminzgeruch stammt möglicherweise aus der Zigarette, der es oft als Additiv zugesetzt wird. Menthol ist der einzige Zusatzstoff, der aktiv und sichtbar für den Konsumenten vermarktet wird. Menthol wird jedoch nicht nur in Mentholzigaretten verwendet, sondern in geringerer Dosierung in fast allen „regulären“ Zigaretten, auch solchen, die nicht nach Menthol riechen und schmecken [WAYNE und CONNOLLY, 2003]. Der Duft- und Aromastoff (-)-Menthol ist die Hauptkomponente der verschiedenen Minz- und Pfefferminzöle (v.a. *Arvensis*- und *Piperita*-Öle). Der Terpenalkohol ist darüber hinaus in weiteren natürlichen ätherischen Ölen verbreitet, jedoch nur als Nebenkomponekte. Geringe Mengen von Menthol sind z.B. in Kalaminthkrautöl (Bergmelisse), Geraniumöl Afrika sowie - neben Menthon und Isomenthon - in Buccublätteröl enthalten. Menthol wird in der Lebensmittel- und Kosmetikindustrie in einem breiten Einsatzfeld gebraucht, vor allem als Aromastoff für Süßwaren, Kaugummi, Liköre, Zahn- und Mundpflegemittel sowie für Zigaretten, schließlich als duftender, erfrischender und desinfizierender Bestandteil von Kosmetika (Haar- und Körperpflegemittel, Lotionen, Balsame usw.). Die Pharmazie nutzt Menthol als Wirkstoff, denn es hat zahlreiche pharmakologische Wirkungen. In Riechmitteln und Parfums wird ebenfalls der erfrischende Effekt genutzt [RAU, 1999]. Nach dem Menthol-Peak

findet man den Kohlenwasserstoff Dodecan, der als Kaffeearoma-Komponente gilt und auch schon bei der kürzeren „Hawelka-Messung“ gefunden wurde. Bei 33.78 Minuten findet man Naphthalin, dieses wird überwiegend zur Herstellung von Kunststoffen verwendet. Offene Anwendungen mit Freisetzung von Naphthalin in die Luft sind u. a. der Einsatz von Naphthalin als Mottenkugeln, als Insektizid und als Porenbildner bei der Herstellung von Schleifscheiben. Naphthalin entweicht auch aus Teerfarben und Wasser abweisenden Anstrichmitteln auf Teerbasis (z.B. Unterbodenschutz) [SAGUNSKI und HEGGER, 2004].

Nach etwa 37 Minuten Analysezeit findet man Carvon, das verschiedene Isomere hat und auch dementsprechend anders riecht. D-(+)-Carvon riecht nach Kümmel und die L-(-)-Form nach Spearmint, der typische Kaugummigeruch. L-Carvon kann aber auch als Zusatzstoff für Zigaretten von Bedeutung sein [MERCKEL und PRAGST, 2007]. Später findet man den Peak, der als Chinolin bzw. 2,3-Benzopyridin identifiziert werden konnte und als Komponente aus dem Tabakrauch stammt [DRINGS, 2004]. Danach folgt der Kohlenwasserstoff Tridecan aus dem Kaffeearoma und auch die Substanz 1-Methoxy-4-(1-propenyl)-benzol, auch als Aniskampfer bekannt, die auch als Duftstoff Verwendung findet. Eine weitere Substanz, die man im Zigarettenrauch finden kann, ist Indol [MERCKEL und PRAGST, 2007]. Nach 40 Minuten erscheinen die Kaffeearomakomponenten 1-Methylnaphthalin und Tetradecon, beides Kohlenwasserstoffe. Triacetin (1,2,3-Propantrioltriacetat) wird als Hilfsstoff eingesetzt, als Lösemittel für ätherische Ölkomponenten oder als Feuchthaltemittel für Tabak. Die nach ca. 41 Minuten auftretenden Substanzen Solanon und Nikotin stammen aus dem Zigarettenrauch, genauso wie 5-Methyl-1H-indol und Myosmin [MERCKEL und PRAGST, 2007]. Typisch für den Tabakgeruch ist Solanon [ADAM et al., 2000]. Der Tabakalkaloid Nikotin sowie die Tabaknebenalkaloide Nornicotin, Nicotyrin, Myosmin, Anabasin, Anatabin und 2,3-Bipyridin sind in Zigaretten bestimmt worden [MERCKEL und PRAGST, 2005]. Nach dem Nikotin-Peak wurde β -Ionon identifiziert, das in geringen Konzentrationen nach Veilchen riecht, in höherer aber nach Holz und wird ebenfalls als Zusatzstoff in Zigaretten verwendet. Es ist ein Bestandteil des

Veilchenöls, was in der Parfumerie Einsatz findet [OHLOFF, 1990]. Dann findet man im GC den Peak des Kohlenwasserstoffs Pentadecan, einer Kaffeearoma-Komponente. Nach fast fünfzig Minuten Messdauer erscheint der Peak des Fliederaldehyds, ein Aromastoff mit süßem, blumigem Duft. Das Schlusslicht der gefundenen Kaffeearomakomponenten bilden Hexadecan und Heptadecan, wobei n-Hexadecan auch im Zigarettenrauch vorkommen kann [MERCHEL und PRAGST, 2007].

Tabelle 9: Die Tabelle zeigt alle Kaffeearoma-Komponenten zwischen 20 und 55 Minuten der achtstündigen „Hawelka-Raumluftmessung“

16	20.90	5-Methyl-2-furancarbaldehyd	24	33.33	Dodecan
17	22.21	Phenol	25	38.21	Tridecan
18	22.83	Furfurylacetat	26	40.04	1-Methylnaphthalin
19	24.77	Limonen = (d)-Limonen	27	42.79	Tetradecan
20	27.40	p-Cresol	28	47.18	Pentadecan
21	28.16	Undecan	29	51.30	Hexadecan
22	28.46	Linalool	30	55.00	Heptadecan
23	32.41	2,6-Dimethylphenol			

Im Anhang (Seite 87) findet man das dazugehörige Chromatogramm.

Später findet man noch Phthalsäurediethylester, was als Fixateur (Duftverzögerer) in der Parfumerie eingesetzt wird. Dieser Ester ist eine farblose Flüssigkeit mit geringem Eigengeruch [MARTINETZ und HARTWIG, 1998].

Bei 53.93 Minuten erscheint Jasmonat, was im Jasminöl enthalten ist und als Inhaltsstoff von Rosmarinöl und im Absolve von Tuberose- und Gardeniablüten bekannt geworden ist. Jasmonat ist ein essentieller Baustein in weltbekannten Luxusparfums und hat eine dezente, exotische Blütennote [OHLOFF, 1990]. Bei

54.62 Minuten fand man β -Methylionon, das in Kosmetika und Reinigungsmitteln Einsatz findet.

Zusammenfassend fand man Alkohole wie Methanol und Furfurylalkohol und auch Verbindungen wie Lilial[®] und ein nicht identifiziertes Benzylderivat, die alle Komponenten eines Parfums sein könnten. Kohlenwasserstoffe wie Toluol, Naphthalin und Decan gab es auch auffällig viele. Außerdem wurde Phthalsäurediethylester identifiziert, der v.a. in der Kunststoffindustrie als Weichmacher Verwendung findet. Der persönliche Eindruck war, dass der Zigarettengeruch mit Sicherheit der dominanteste war. Um die Mittagszeit ließ sich auch der Gulaschsuppenduft nicht verbergen.

Einen Überblick über alle gefundenen Kaffeearoma-Substanzen findet man im Anhang auf Seite 88.

4.2.2.) Ergebnisse des Cafés SPERL

Im „Café Sperl“ führte man insgesamt vier Messungen mit unterschiedlichen Messzeiten durch, um die Intensitäten der Peaks und die möglichen auftretenden Unterschiede der „Einwirkzeit“ zu erkennen.

Bei der ersten Messung wurde die SPME-Faser (Sampler) für ca. drei Stunden aufgestellt („Sperl1“). Diese Messung erfolgte am 9.1.08 und zwar vormittags in der Zeit von 10:30 bis 13:45. An diesem Tag war es sehr kalt, etwas neblig und trüb, aber trocken. Der Sampler wurde auf dem Podest in der Nähe des Kuchenbuffets positioniert, gleich im Eingangsbereich. Eine Auffälligkeit „im Sperl“ ist, dass der Kaffee in einem vom Gästeraum abgesonderten Raum, also in der Küche, zubereitet wird. Daher ist der Kaffeeduft noch weniger wahrnehmbar. Aus diesem Grund, da man ja die Raumluft messen wollte, stand die Faser einmal nicht in der Nähe der Espressomaschine, sondern auf einem Podest am Holztresen mitten im Raum.

Das Kaffeehaus Sperl hat zwar eine Raucher- und Nichtraucherzone, doch da die Nichtraucherzone genau zwischen den beiden Raucherzonen liegt,

verbreitet sich der Rauch sicher noch mehr im ganzen Lokal, als in vollkommen abgetrennten Zonen.

Die Eindrücke, die man während der Messung bekam, sind, dass man den Zigarettenrauch sofort wahrnehmen konnte, und, dass die Räume ziemlich hoch waren, wo sich die verschiedenen Düfte und Gerüche besser ausbreiten konnten. Schon vormittags ist „das Sperl“ ziemlich gut besucht, was sich natürlich auch auf die Raumluft auswirkt, und nachmittags ist man froh, wenn man noch einen Platz bekommt. Natürlich war die Kälte auch ein großer Grund, warum es so viele Besucher „ins Sperl“ trieb. Eine weitere Auffälligkeit ist, dass „im Sperl“ eine sehr große Auswahl an Kaffeespezialitäten angeboten wird, wie der sogenannte „Karlsbader-Aufguss“, eine typisch Wiener Zubereitungsart, die schon fast in Vergessenheit geraten ist. Dieser „Karlsbader“-Kaffee ist laut *Edelbauer* die bekömmlichste aller Zubereitungsmethoden.

Die zweite Messung fand ebenfalls am 9.01.08 statt, nur dauerte diese sechs Stunden („Sperl2“). Die Ergebnisse der ersten Faser wurden also früher verwertet als die der zweiten. Diese blieb also von 10:30 bis 17:45 auf dem Podest stehen.

Die dritte und vierte Messung wurde zwei Tage später, also am 11.01.08, durchgeführt. Dieses Mal wurde der Sampler für acht Stunden aufgestellt. Um mögliche Unterschiede zu erkennen, stellte man zwei Fasern gleichzeitig auf, um sie danach ebenfalls vergleichen zu können. Im Nachhinein stellte sich dann heraus, dass diese beiden Sampler, die zur gleichen Zeit und an fast derselben Stelle aufgestellt wurden, keine großen Unterschiede im Chromatogramm aufweisen. Der einzige Unterschied bezieht sich auf die Intensitäten.

4.2.2.1.) Die dreistündige „Sperl-Messung“

Eine der ersten gefundenen Substanzen bei der dreistündigen „Sperl-Messung“ ist der ungesättigte Kohlenwasserstoff 1,3-Butadien. Es hat einen milden, aromatischen Geruch [ADAM et al., 2000]. Weiters ist dieses Dien eine eher giftige Substanz im Tabakrauch, wird aus Autoabgasen freigegeben [SCHENK et al., 2008] und wurde auch bei der Messung des „Tabakrauch“-Ausschlusschromatogramms gefunden, knapp unter den ersten vier Minuten. Die erste gefundene Kaffeearomakomponente ist der Aldehyd Propanal mit einem fruchtigen, frischen und stechenden Geruch [BÜCKING, 1999]. Nach 4.5 Minuten kommt die nächste Kaffeearoma-Komponente, nämlich 1,3-Pentadien (= Piperlylen). Unter den ersten zehn Minuten Retentionszeit finden sich auch Benzol und die Propionsäure, sowie die beiden im Kaffeearoma vorkommenden Furane 2,5-Dimethylfuran und 5-Methyl-2-furancarbaldehyd (= 5-Methylfurfural). Die zuletzt genannte Substanz ist auch Bestandteil des Zigarettenrauchs [MERCCKEL und PRAGST, 2007]. Danach folgt die Base Pyridin, die sowohl im Kaffeearoma enthalten sein kann als auch im Zigarettenrauch. Auch 3-Methylpyridin (= β -Picolin) wurde im Kaffeearoma identifiziert, ebenso wie 2-Furanmethanol und Ethylbenzol. Es folgen Dimethylbenzol und ein Isomer davon, nämlich p-Xylol. Eine der wenigen gefundenen Schwefelverbindungen aus der Luft des „Café Sperl“ ist Isopropylthiophen bzw. 2-Propylthiophen, die im Kaffeearoma vorkommt [NIJSSEN et al., 1996]. Unter den ersten zwanzig Minuten findet man noch Nonan.

Tabelle 10: Die Tabelle zeigt alle Kaffeearoma-Komponenten der ersten 20 Minuten der dreistündigen „Sperl-Raumluftmessung“

P-Nr.	RT	Substanz	P-Nr.	RT	Substanz
1	4.29	Propanal	9	14.36	2-Furancarbaldehyd
2	4.33	Piperylen	10	15.26	2-Furanmethanol
3	7.05	Benzol	11	15.57	Ethylbenzol
4	7.96	Propionsäure	12	16.08	Xylol*
5	8.33	2,5-Dimethylfuran	13	16.11	p-Xylol
6	9.23	5-Methylfurfural	14	17.11	Isopropylthiophen
7	10.53	Pyridin	15	17.24	Nonan
8	13.61	β-Picolin			

*richtiges Isomer nicht bestimmt

Das Chromatogramm zu dieser Tabelle befindet sich im Anhang auf Seite 89.

Später, bei 20.78 und 22.76 Minuten finden sich die Peaks von 2-Methylnonan und Decan. Nach fast 25 Minuten erscheint wieder der Terpenkohlenwasserstoff Limonen, der den höchsten Peak im Chromatogramm darstellt. Unter der ersten halben Stunde Analysezeit findet man noch 4-Methylphenol (=p-Cresol), den Kohlenwasserstoff Undecan, der auch Bestandteil von Benzin und Diesel sein kann, und auch (+)-Linalool. Linalool ist ein Alkohol, der sowohl im Kaffeearoma nachgewiesen wurde, als auch ein Zusatzstoff aus Zigaretten ist [MERCKEL und PRAGST, 2007]. Ebenfalls wie in der Raumluft im Hawelka ist 2-Phenylethanol zu finden, ein Bestandteil vieler ätherischer Öle und auch aus dem Zigaretterrauch. L-Menthon erscheint nach fast 32 Minuten, es ist ein Pfefferminzkampfer und wird sowohl in der Lebensmittel- als auch in der Kosmetikindustrie verwendet und ist oft ein Zusatzstoff in Zigaretten [MERCKEL und PRAGST, 2007]. (-)-Menthon findet sich im Geraniumöl und im Pfefferminzöl. (+)-Menthon ist zusammen mit (-)-

Isomenthon der Hauptbestandteil des Buccublätteröls und entsteht durch Oxidation von Menthol.

Die Kohlenwasserstoffe Dodecan und Naphthalin sind weitere Aromakomponenten aus dem Kaffee, die auch in der „Hawelkaluft“ zu finden sind. α -Terpineol ist ein Alkohol aus dem Kaffee Aroma, wird aber auch für Toilettenartikel und Waschmittel verwendet. α -Terpineol ist nämlich ein synthetisch leicht herzustellender, daher billiger Riechstoff und besitzt einen fliederartigen Duft [MÜLLER, 2005]. Decanal wird in verschiedenen Farben und Lacken und eben auch als Duftstoff verwendet. Ab einer Kettenlänge von 9 Atomen dominiert die ranzig-fettige Note mit citrus-blumigen Untertönen [MÜLLER, 2005]. Nach 35 Minuten erscheint der Peak von Citronellol, das als Duftstoffkomponente häufig in Deodorants und Kosmetika nachgewiesen wird [BEHRENDT et al., 1999]. Es folgt 2-Phenoxyethanol, das als Fixiermittel von Parfums oder als Insektenabwehrmittel Anwendung findet [ADAM et al., 2000]. Danach findet man Bergamol (= Lilial), das angenehm bergamotteartig riecht, auch nach Birne, frisch, süß und blumig-fruchtig [RAU, 1996]. 1-Methylnaphthalin ist dann der nächste Kohlenwasserstoff und Kaffee aromabestandteil [NIJSSEN et al., 1996], der im Chromatogramm gefunden und identifiziert wurde.

Es folgen die Zigarettenrauch-Komponenten Triacetin und Nikotin, letzteres hat die halbe Intensität des Limonen-Peaks, dennoch sind beide auffallend hoch. Tetradecan, ein Kohlenwasserstoff, ist wieder eine Kaffee aroma-Komponente. 3-(3,4-Dihydro-2H-pyrrol-5-yl)-pyridin (= Myosmin) wird bei fast 46 Minuten gefunden und ist ein Zigarettenzusatzstoff [MERCKEL und PRAGST, 2007]. Wie in der „Café Hawelka-Messung“ wird auch hier Pentadecan als letzte Kaffee aromakomponente im Chromatogramm identifiziert. Nach 55 Minuten erscheint dann noch der Peak von Lactaropallidin (=Lactaransesquiterpenoid), ein natürliches Produkt [BUCKINGHAM, 1994], das ein Pilz-Metabolit ist [BELL, 2000].

Tabelle 11: Die Tabelle zeigt alle Kaffeearoma-Komponenten zwischen 20 und 55 Minuten der dreistündigen „Sperl-Raumluftmessung“

16	20.78	2-Methylnonan	23	33.83	Naphthalin
17	22.76	Decan	24	33.92	α -Terpineol
18	24.79	Limonen	25	40.00	1-Methylnaphthalin
19	27.39	4-Methylphenol = p-Cresol	26	42.67	Tetradecan
20	28.19	Undecan	27	47.23	Pentadecan
21	28.51	Linalool			
22	33.35	Dodecan			

Das Chromatogramm befindet sich im Anhang auf Seite 90. Einen Überblick über alle gefundenen Kaffeearoma-Bestandteile liefert das Bild auf Seite 91.

4.2.2.2.) Die achtstündige „Sperl-Messung“

Die achtstündige Messung im Café Sperl lieferte auch einige interessante Ergebnisse.

Die erste gefundene Aromakomponente des Kaffees bildet hier wie bei der dreistündigen Messung 1,3-Pentadien (Piperylen), welches in der „Hawelka-Raumluft“ nicht erschien. Nach ungefähr sechs Minuten kommt der Peak der Essigsäure, ein Geschmacksstoff, der auch bei der Produktion von Kosmetikartikeln wie Cremes und Seifen eingesetzt wird [OHLOFF, 1990]. Nach ungefähr sieben Minuten folgen Benzol, die Propionsäure und 2,5-Dimethylfuran aus dem Kaffeearoma.

Noch knapp vor den ersten zehn Minuten erscheint die Substanz Propylenglycol, welches in Lösungsmitteln und in Hygieneartikeln, wie Hautcremes, Zahnpasta und Deos als Feuchthaltemittel und Weichmacher enthalten ist. Weiters ist es auch in fast allen Tabakprodukten als Zusatzstoff zu finden [MERCKEL und PRAGST, 2007]. Es ist in der EU als

Lebensmittelzusatzstoff zugelassen und trägt die Bezeichnung E 1520. Auch Pyridin, das sowohl aus dem Kaffeearoma als auch aus dem Zigarettenrauch stammen kann, wird wieder bei ca. 10 Minuten gefunden. Danach erscheint der Peak von Toluol, der sowohl ein Kohlenwasserstoff aus dem Kaffeearoma, als auch ein üblicher Bestandteil des Zigarettenrauchs sein kann [EMMEL, 2002].

Nach zwölf Minuten Retentionszeit sieht man den Peak von Hexanal, der in der Riechstoffchemie Einsatz findet und einen grasigen Geruch hat. Der Aldehyd wird als Komponente in vielen Anstrichmitteln, wie Farben und Lacke eingesetzt und ist im Linoleum (= Bodenbelag) enthalten, sowie in Arzneimitteln und wird hauptsächlich in Fruchtaromen verwendet. Allgemein kommen Alkanale in Citrusölen, Koriander oder auch im Rosenöl vor, als auch in Spuren in vielen Aromen. Der Geruch ist orangen-, citrus- und rosenähnlich. Dieser Stoff ist aber auch in Autoabgasen zu finden. Durch den sehr intensiven Geruch ergibt sich ein Richtwert für geruchliche Innenraumbelastungen von maximal $50 \mu\text{g}/\text{m}^3$. Hexanal kann schon ab einer Konzentration von $2\text{-}3 \mu\text{g}/\text{m}^3$ wahrgenommen werden [ADAM et al., 2000]. Der organische Umweltschadstoff Tetrachlorethylen wurde auch identifiziert, woher dieser stammen kann, konnte allerdings nicht eruiert werden.

Nach 13 Minuten findet man den Peak von Benzylacetat. Es wird hauptsächlich als Komponente von jasminähnlichen Düften verwendet, in kleinen Mengen auch als Lösungsmittel von Druckerfarben. Benzylacetat ist eines der am häufigsten verwendeten Duft-Substanzen [ADAM et al., 2000]. Auch 2-Methylpyridin (α -Picolin) als Kaffeearomakomponente ist wieder zu finden. Der Naturstoff Tulipalin A (Dihydro-3-methylen-2(3H)-furanon) zeigt sich im Chromatogramm nach 14.5 Minuten. Dieser kommt in Pflanzen der Familien der Liliaceae – wie Lilien oder Tulpen - und Alstroemeriaceae (=Inkaliliengewächse) der Ordnung Liliales vor. Es gibt mehrere Tulipaline (A-D), welche in der Pflanze glycosidisch gebunden vorkommen (Tuliposide A-D) und durch hydrolytische Spaltung zum Beispiel nach Verletzung des Pflanzengewebes und Lactonisierung gebildet werden [ANONYM, 1999]. Diese

Substanz kann von einem Blumenstrauß, den ein Gast bei sich hatte, oder auch von einem blumigen Parfum stammen.

Später zeigt sich dann wieder eine Kaffeearomakomponente, nämlich 2-Furancarbaldehyd. Tuberolacton ist auch in der „Sperl-Raumluft“ der achtstündigen Messung zu finden, es ist ein Bestandteil des Duftes von Narzissengewächsen wie zum Beispiel der Schneeglöckchen, Amaryllis oder Narzissen [WAGNER, 2000]. Tuberolacton ist ein Bestandteil des Tuberosenöls, was eines der teuersten und wertvollsten Parfumrohstoffe ist. Es wird vor allem in modernen, blumigen Parfum-Kompositionen verwendet [MARTINETZ und HARTWIG, 1998].

Bei ca. 16 Minuten zeigt sich Ethylbenzol, das dem Benzin zur Erhaltung der Oktanzahl beigemischt wird. Es dient als Lösungsmittel für Farben und findet sich in Kunststoffen. Neben Benzol und dem Toluol gehört Ethylbenzol zu den technisch wichtigen leichtflüchtigen aromatischen Kohlenwasserstoffen, den sog. BTEX-Aromaten. BTEX ist ein Akronym für Benzol, Toluol, Ethylbenzol und Xylol. Ähnlich wie die leichtflüchtigen halogenierten Kohlenwasserstoffe sind diese Aromaten im Boden und Grundwasser mobil und leichtflüchtig, daher reichern sie sich in der Bodenluft an. BTEX-Aromaten können auch nicht zur Grundwassersohle absinken, weil sie spezifisch leichter als Wasser sind. Beim Boden- und Grundwasserschutz oder in der Abfallwirtschaft ist besonders auf Benzol zu achten, da es im Gegensatz zu den anderen BTEX-Aromaten sowohl blutschädigend als auch krebserregend wirkt.

Danach folgen die Kaffeearomakomponenten β -Picolin, Xylol, 2-Propylthiophen und in weiterer Folge des Chromatogramms Nonan. Bei 16.77 Minuten Retentionszeit erscheint die Substanz Pyrrolizidin, welche ein Naturstoff ist. Allgemein kommen Pyrrolizidinalkaloide in Hülsenfrüchten vor [ADAM et al., 2000]. Möglicherweise stammt Pyrrolizidin aus einer Mahlzeit mit Bohnen, Linsen oder Erbsen.

Unter den ersten zwanzig Minuten der Achtstunden-Messung der Luft im „Café Sperl“ finden sich noch 2-Butoxyethanol, welches ein Hauptbestandteil verschiedener Flüssigseifen, Kosmetika oder Reinigungsmitteln ist. Die danach

im Chromatogramm gefundene Isonicotinsäure ist ein Isomeres von Nikotinsäure und wird in Pharmazeutika und Agrarchemikalien verwendet.

Tabelle 12: Die Tabelle zeigt alle Kaffee Aroma-Komponenten der ersten 20 Minuten der achtstündigen „Sperl-Raumluftmessung“

P-Nr.	RT	Substanz	P-Nr.	RT	Substanz
1	4.39	Piperlylen	7	13.76	α -Picolin
2	7.19	Benzol	8	14.64	2-Furancarbaldehyd
3	7.95	Propionsäure	9	15.98	β -Picolin
4	8.36	2,5-Dimethylfuran	10	16.14	Xylol*
5	10.20	Pyridin	11	17.15	Isopropylthiophen
6	11.81	Toluol	12	17.27	Nonan

*richtiges Isomer nicht bestimmt

Im Anhang auf Seite 92 findet man das dazugehörige Chromatogramm.

Nach zwanzig Minuten kommen die Kaffee Aroma-Komponenten Decan, Phenol, Limonen und Tetradecan, wobei Limonen wieder einen sehr hohen Peak darstellt. 3-Methylphenol, anders m-Cresol ist auch eine weitere Phenolkomponente im Kaffee Aroma.

Bei fast 25 Minuten ist die Substanz Butylcyclohexan und bei 27.02 ist Dihydromyrcenol im Chromatogramm zu sehen. Dieses wird in Toilettenartikel und Waschmitteln verwendet, da es einen frischen, citrus- und limonenartigen Duft hat. Am häufigsten wird es in Seifen verwendet.

Später zeigt sich Undecan, ein Kohlenwasserstoff im Kaffee und auch Bestandteil von Benzin. Auch Linalool, das sowohl aus dem Kaffee Aroma als auch aus dem Zigarettenrauch stammen kann, ist nach 28 Minuten wieder zu finden. Dem folgt Zimtaldehyd, der im Zigarettenrauch gefunden wurde. Ein

Bestandteil des Orangenöls, nämlich Phenylethanol, das auch in Reinigungsmitteln zu finden ist, ist ebenfalls im Chromatogramm zu sehen.

Nach der ersten halben Stunde findet man Menthan, dessen Geruch an Minze bzw. Fenchel erinnert. Es folgt Menthol, das als Additiv oft Zigaretten zugesetzt wird. Die nächsten Kaffeearoma-Stoffe sind dann Terpeneol, der Kohlenwasserstoff Dodecan und Naphthalin. α -Terpeneol ist eine in vielen ätherischen Ölen vorkommende farblose kristalline Masse mit Fliedergeruch [MARTINETZ und HARTWIG, 1998]. Auch Citronellool, das in Kosmetika und Reinigungsmitteln Einsatz findet, und 2-Phenoxyethanol, ein Fixativ für Parfums, erscheinen im Chromatogramm. Der Peak vom aromatischen Linalylanthranilat kommt nach 36 Minuten, sowie Carvon, das zu ca. 60% im Kümmelöl enthalten ist und auch im Dillöl und in Mandarinenschalen zu finden ist. Bei ca. 36 Minuten findet man das Bergamol bzw. Linaloolacetat. Dieser bekannte Duftstoff riecht bergamotteartig, erinnert auch an Birne, weiters frisch, süß und blumig-fruchtig. Die nächsten identifizierten Substanzen aus der „Sperl-Kaffeehausluft“ stammen aus dem Zigarettenrauch und sind n-Hexadecan, Triacetin und Nikotin.

Nach 42.9 Minuten folgt der Kohlenwasserstoff Tetradecan aus dem Kaffeearoma und danach findet man den Peak von α -Ionon, das in geringer Konzentration nach Veilchen riecht und in höherer nach Holz. Weiters ist es auch ein Zusatzstoff in Zigaretten. Myosmin, charakteristisch für den Zigarettenrauch, kommt dahinter [MERCKEL und PRAGST, 2007]. Bei 47.72 Minuten erscheint die Substanz α -Isomethylionon (α -Ceton®), ein Duftbestandteil in Parfums. Pentadecan bildet wieder das Schlusslicht der Kaffeearoma-Komponenten im Chromatogramm. Nicotyrin aus dem Zigarettenrauch folgt nach. Auch der Fliederaldehyd, der einen süßen, blumigen Duft besitzt, ist wieder zu finden. Die Parfumkomponente Methylidihydrojasmonat ist nach 54 Minuten zu sehen. Etwas später kommt β -Methylionon, das auch in Kosmetika und Reinigungsmitteln Einsatz findet. Ebenso wie bei der dreistündigen Messung ist auch hier wieder Lactaropallidin als letzte Substanz im Chromatogramm zu finden.

Tabelle 13: Die Tabelle zeigt alle Kaffeearoma-Komponenten zwischen 20 und 55 Minuten der achtstündigen „Sperl-Raumluftmessung“

13	22.32	Phenol	19	28.55	Linalool
14	22.78	Decan	20	33.20	α -Terpineol
15	24.85	Limonen	21	33.39	Dodecan
16	25.29	Tetradecan	22	33.82	Naphthalin
17	27.47	3-Methylphenol = m-Cresol	23	42.90	Tetradecan
18	28.23	Undecan	24	47.26	Pentadecan

Auf Seite 93 sieht man das Chromatogramm zu der obigen Tabelle. Im Anhang auf Seite 94 findet man auch alle gefundenen Kaffeearoma-Komponenten auf einem Bild, die man in der achtstündigen Messung finden konnte.

Weiters gibt es im Anhang auch einen Überblick über die gesamten Kaffeearomakomponenten in den Chromatogrammen des „Cafés Hawelka“ (siehe Seite 95) und des „Sperl“ (siehe Seite 96). Auch ein Vergleich unter den Kaffeehäusern wird veranschaulicht. Das Bild auf Seite 97, das jeweils die kürzere Messung der beiden Cafés zeigt, da hier mehr Kaffeearoma-Komponenten identifiziert werden konnten, zeigt den Vergleich.

4.2.3.) Ergebnisse der Ausschließungstests

Der Zigarettenrauch enthält 3000 bis 4000 chemische Substanzen in fester und gasförmiger Form. Zigarettenhersteller brachten kürzlich in den USA neue, aromatisierte Marken auf den Markt, die sich gezielt an ein junges Publikum richten. Zu den neuen Zigarettenaromen gehören Pfefferminze, Schokolade und Zitrone, welche den rauen Geschmack des Tabakrauchs überdecken [CARPENTER et al., 2005] und sich eben auch auf die Raumluft auswirken.

Laut der zweitgrößten Zigarettenfirma der Welt „British American Tobacco Germany“ werden Zusatzstoffe in Tabakprodukten verwendet, die sich auf Geschmack und Geruch auswirken. So kann zum Beispiel Menthol, das in der

Raumluft gefunden wurde, auch von einer Zigarette stammen. In den Untersuchungen des Zigarettegeruchs von *Pragst* wurden insgesamt 89 wichtige chemische Komponenten identifiziert, darunter natürliche Tabakbestandteile wie Nikotin und andere Tabakalkaloide sowie Geschmacksstoffe, Feuchthalte- und Lösungsmittel, die bei der Zigarettenherstellung hinzugefügt wurden. Menthol, 2-Ethyl-1-hexanol, Benzylalkohol, Benzaldehyd, Acetophenon, Indol, Pyridin und Furfurylamin kommen natürlicherweise im Tabak vor, gehen allerdings während des Herstellungsprozesses teilweise verloren. Um den natürlichen Tabakgeschmack zu erhalten, werden sie als Additive zugesetzt. Beispielsweise war die Mentholkonzentration in Nicht-Menthol-Zigaretten bis zu 100-fach höher als in Rohtabaken und rund 40-fach höher als in der Referenzzigarette [PRAGST, 2007].

4.2.3.1.) Eigene Zigarettenrauch-Messungen

Um genauere Ergebnisse bei der Auswertung der Kaffeehaus-Raumluft zu erzielen, wurden Vergleichsmessungen mit reinem Zigarettenrauch durchgeführt. Hierzu wurden insgesamt zwei verschiedene Messungen nur mit Zigarettenrauch ausgeführt, um Fremdgerüche ausschließen zu können. Beim Versuch der ersten Messung „Zigarettenrauch“, wurde die SPME-Faser direkt während des Rauchens einer Zigarette vom Probanden mehrmals angehaucht, um die Rauch-Teilchen auf der Faser zu sammeln. Als die Zigarette dann fertig geraucht war, wurde die SPME-Faser dann wieder „eingezogen“, um die Aufnahme von Fremddüften zu verhindern. Gleich darauf wurde der GC-Durchlauf gestartet, eben auch mit der selbst entwickelten Methode „rmp2.“, um das Ergebnis nicht zu verfälschen und die Chromatogramme mit den Kaffeehausmessungen vergleichen zu können.

Die zweite reine Zigarettenrauch-Messung, genannt „Tabakrauch“, wurde folgendermaßen durchgeführt: Man benutzte hierzu ein kleines Glasfläschchen, ein sog. „Vial“, mit einem Septum als Verschluss. Dahinein wurde frische Zigarettenasche gefüllt und verschlossen. Mit Hilfe eines Stativs, an dem man die SPME-Faser genau über dem Vial befestigen und in dieser Position die

Faser durch das Septum stechen konnte, nahm die Faser 24 Stunden lang nur den reinen Zigarettergeruch auf. Diese beiden Chromatogramme wurden zunächst untereinander und dann die gefundenen Substanzen mit anderen Studien zum Thema Zigarettenrauch verglichen, um abzusichern, dass diese auch tatsächlich vorkommen. Schließlich wurden diese Messdaten jenen der Kaffeehäuser gegenüber gestellt.

In beiden Chromatogrammen wurde nach ca. 4.5 Minuten Acrylnitril gefunden, eine Substanz, die man schon früher unter einer Vielzahl von Verbindungen im Zigarettenrauch nachweisen konnte [BERNHARD und AEBI, 2002; GROB, 1962]. Bei fast sieben Minuten erscheint bei beiden Messungen Benzol, das auch schon Grob im Zigarettenrauch identifizierte. Später kommen in beiden Chromatogrammen die Peaks von 2,5-Dimethylfuran, jeweils nach 8.23 bzw. 8.31 Minuten, vor. Bei ca. 24 Minuten erscheint in der „Zigarettenrauch“- und „Tabakrauch“- Messung der Peak von Phenol, welcher ebenfalls bereits als Zigarettenbestandteil beschrieben worden ist [MERCCKEL und PRAGST, 2007]. Pyridin wurde bei ca. 10 Minuten Retentionszeit entdeckt, ebenfalls in beiden Chromatogrammen, genauso wie das knapp danach kommende Pyrrol und nach ca. 13 Minuten 2-Furancarbaldehyd, sowie α -Picolin. Nach einer viertel Stunde erscheint auch in beiden Chromatogrammen Furfurylalkohol. Etwas vor 16 Minuten erscheint die Substanz 3-Methylpyridin ($=\beta$ -Picolin), dem folgt Benzaldehyd. Nikotinsäurenitril wurde bei ca. derselben Retentionszeit, also nach 24 Minuten gefunden.

Bei einer halben Stunde Retentionszeit findet sich dann die Substanz Zimtaldehyd, ebenfalls in beiden Zigarettenrauch-Chromatogrammen identifiziert. Nach 41.52 bzw. im anderen Chromatogramm bei ca. 41.89 Minuten wurde Nikotin gefunden, ein Peak mit jeweils sehr hoher Intensität.

Etwas nach 47 Minuten erscheint der Pentadecan-Peak bei beiden Zigarettenrauch-Messungen. Bei 50 Minuten sieht man jeweils die Substanz Isonicotin ($= 2,2$ -Bipyridin). Es folgt 2-Methyl-1-(1,1-dimethylethyl)-2-methyl-1,3-propionsäureester, eine Substanz die bei ca. 51 Minuten Retentionszeit gefunden wurde. Diese unbekannte Verbindung wurde sowohl bei beiden

Zigarettenversuchen als auch in den Kaffeehäusern gefunden. Die Intensität dieser Substanz ist jeweils sehr hoch, möglicherweise stammt sie aus dem Zigarettenrauch, da sie bei beiden Zigarettenrauch-Messungen gefunden werden konnte. Später findet man n-Hexadecan, wobei dieser Kohlenwasserstoff bereits als Zusatzstoff in Zigaretten beschrieben wurde. Danach folgt Megastigmatrienon, das fast an derselben Stelle in beiden Zigarettenrauch-Chromatogrammen identifiziert wurde und bereits von Merckel und Pragst als Zigarettenzusatzstoff erkannt wurde. Diese nun aufgezählten Substanzen wurden in beiden Rauchversuchs-Chromatogrammen identifiziert und auf Grund dessen wird angenommen, dass diese auch wirklich aus dem Zigarettenrauch stammen. Megastigmatrienone weisen einen tabakartigen und holzig-balsamischen Geruch auf und gelten als Schlüsselverbindungen im Aroma des *Burley*-Tabaks. Außerdem ist es auch Bestandteil des *Osmanthus*-Öles, das aus einem in Ostasien beheimateten Strauch einer Oleaceae stammt, dessen Blüten in China zum Parfumieren von Tee verwendet werden [OHLOFF, 1990]. Bei der „Zigarettenrauch“-Messung wurde noch der Zigarettenzusatzstoff 3-Oxo- α -ionol bei ca. 54 Minuten gefunden, hingegen beim „Tabakrauch“ der Peak des Myosmin bei 45.45 Minuten. In Tabelle 14 findet man die Substanzen beider Zigarettenrauch-Messungen. Die Gegenüberstellung verdeutlicht, dass bestimmte Rauchinhaltsstoffe bei beiden Messungen zu finden waren.

Tabelle 14: Wichtigsten Substanzen im „Zigarettenrauch“ (links) und „Tabakrauch“ (rechts)

P-Nr.	RT	Substanz	P-Nr.	RT	Substanz
1	6.92	Benzol	1	6.96	Benzol
2	10.05	Pyridin	2	9.98	Pyridin
3	20.31	Benzaldehyd	3	20.18	Benzaldehyd
4	22.15	Phenol	4	25.03	Phenol
5	28.87	Zimtaldehyd	5	31.04	Zimtaldehyd
6	41.52	Nikotin	6	41.89	Nikotin
7	47.20	Pentadecan	7	45.45	Myosmin
8	50.10	2,2-Bipyridin	8	47.27	Pentadecan
9	51.32	Hexadecan	9	50.15	2,2-Bipyridin
10	53.29	Megastigmatrienon	10	51.35	Hexadecan
11	53.90	3-Oxo- α -ionol	11	53.35	Megastigmatrienon

Im Anhang sind die beiden Chromatogramme der Zigarettenrauchmessungen zu sehen. Das Ergebnis der „Tabakrauch“-Messung zeigt Seite 101 und das der „Zigarettenrauch“-Messung die Seite 102.

4.2.3.2.) Rauchsubstanzen in der Kaffeehausluft

Benzol wurde bei den Kaffeehaus-Raumluft-Messungen immer identifiziert. 2,5-Dimethylfuran wurde ebenfalls bei allen vier Messungen gefunden. Phenol wurde nach 22 Minuten in beiden „Hawelka-Messungen“ nachgewiesen und auch in der „8-Std-Sperlmessung“. Pyridin fand man ebenfalls in allen vier Chromatogrammen nach knapp zehn Minuten. Pyrrol wurde nur bei den „Hawelka-Messungen“ entdeckt. 2- bzw. 3-Methylpyridin (= α - bzw. β -Picolin) wurde in jedem Chromatogramm nach ca. 13 Minuten gefunden. 2-Furancarbaldehyd wurde ebenfalls überall gefunden, an den Stellen zwischen 13 und 15 Minuten. Furfurylalkohol erschien in den beiden „Hawelka-Messungen“ bei ca. 15 Minuten, nicht jedoch in der achtstündigen „Sperl-

Messung“, dafür aber in der dreistündigen. Benzaldehyd wurde nur in den beiden „Hawelka-Messungen“ entdeckt, jeweils bei knapp 20 Minuten Retentionszeit. 4-Pyridincarbonitril wurde nur in der „Dreistunden-Hawelka-Messung“ gefunden, an der Stelle 24.34. Zimtaldehyd wurde ca. um eine halbe Stunde Messdauer herum in den „Hawelka-Messungen“ gefunden, aber auch in der achtstündigen „Sperl-Messung“. Die bedeutendste Substanz, die gefunden wurde, ist wahrscheinlich das Nikotin. Es trat jeweils kurz nach 41 Minuten auf und ist in allen Chromatogrammen aufzufinden, sowohl bei den Zigarettenrauch-Versuchen als auch in allen Kaffeehaus-Raumluftmessungen. Pentadecan zeigt sich auch in jedem der Chromatogramme, jeweils bei ca. 47.4 Minuten. Isonicotin (2,2-Bipyridin) konnte zwar in den beiden Zigarettenrauch-Messungen gefunden werden, nicht aber in den Kaffeehaus-Chromatogrammen, ebenso wie Megastigmatrienon. Eine sehr häufig auftretende Substanz ist 1-[2-(Isobutyryloxy)-1-methylethyl]-2,2-dimethylpropyl-2-methylpropionsäureester. Diese Verbindung konnte man in allen Kaffeehausmessungen immer bei ca. 51 Minuten sehen. Man nimmt an, dass sie aus dem Zigarettenrauch stammen könnte, da sie auch in den beiden Zigaretten-Chromatogrammen aufscheint.

Eine weitere Substanz ist Hexadecan, die nur in den „Hawelka-Raumluft-Chromatogrammen“ sichtbar wurde, bei ca. 51.3 Minuten. Auch Myosmin wurde in allen 4 Chromatogrammen entdeckt, jeweils an ca. der Stelle 45.5. Die Zigarettenbestandteile Triacetin und Nicotyrin wurden bei ca. 40.40 in der längeren „Hawelka“ sowie beiden „Sperl-Messungen“ bzw. bei ca. 47.57 Minuten in den achtstündigen Messungen gefunden. Die Zigarettenzusatzstoffe Linalool, Zimtaldehyd, Phenylethanol und Menthol konnte man in beiden Achtstunden-Chromatogrammen nachweisen.

Insgesamt wurden im „Hawelka“ um ca. das Doppelte mehr an Zigarettenrauchbestandteilen als im „Café Sperl“ gefunden.

4.3.) Vergleiche der Chromatogramme untereinander

In den dreistündigen Messungen konnte man aus der Raumluft beider Kaffeehäuser mehr Kaffeearomakomponenten nachweisen als in den

achtstündigen. Dafür fanden sich in den längeren Messungen mehr Zigarettenrauch- und andere Aromakomponenten. Der Überblick aller Kaffeesubstanzen beider Chromatogramme der 3 und 8-std Messungen im „Café Hawelka“ auf Seite 95 zeigt, dass in der kürzeren Messung mehr Kaffeearoma-Komponenten identifiziert werden konnten. Das Bild auf Seite 96 zeigt dasselbe der „Sperl-Messungen“.

Weiters sind die Chromatogramme im Vergleich „Hawelka“ 3 Std mit „Sperl“ 3 Std im Anhang auf der Seite 97 zu sehen.

Im Allgemeinen wurden viele typische Verbindungen, die für Aromen von Bedeutung sind, in den Chromatogrammen identifiziert, so zum Beispiel die Kohlenwasserstoffe Myrcen, Limonen und Isopren. Auch sehr viele Alkohole wie Menthol, Linalool, α -Terpineol oder Furfurylalkohol wurden gefunden, die sensorisch gesehen, wichtiger als Kohlenwasserstoffe sind. Kohlenwasserstoffe können nämlich durch Luft leicht oxidiert werden und sich so verändern. Weiters identifizierte man auch Acetale, Thiophen (z.B. 3-Ethylthiophen), Pyrrol oder Anthranilsäuremethylester (eben Linalylanthranilat). Diese Verbindungen sind ebenfalls für die Aromen von Bedeutung.

Bei der dreistündigen Messung ist - wie vermutet - die Intensität des Nikotin-Peaks deutlich geringer als jene der sechsstündigen Messung. Der Nikotin-Peak war hier von allen Messungen derjenige mit der höchsten Intensität. Weiters wurden Pentadien, Pyridin und wieder einige Alkohole nachgewiesen. Die Duftkomponenten Lilial® und Methylhydrojasmonat, die häufig bei der Parfümherstellung verwendet werden, wurden auch in der Raumluft beider Kaffeehäuser gefunden.

Zu erwähnen ist auch, dass sich die beiden Chromatogramme der achtstündigen Messungen im „Sperl“ unterscheiden. Beim Vergleich der Messungen „Sperl4“ und „Sperl3“ gibt es einen markanten Unterschied bei der Nikotin-Intensität: Im „Sperl4“ ist diese deutlich geringer als jene von „Sperl3“, vergleichbar mit der Intensität der sechsstündigen Messung.

Im Chromatogramm des „Sperl3“ wurde auch (d)-Limonen nachgewiesen. Dieses kann von einem Putzmittel stammen, womöglich wurde die Kuchenvitrine mit einem Zitronenduft-Putzmittel geputzt oder das Podest wurde damit gereinigt. Am wahrscheinlichsten ist aber, dass die Gläser, die am und um das Podest gestellt waren, den Zitronenduft, der von Geschirrspülmittel stammen wird, verursachten. Nach einer Retentionszeit von etwa elf Minuten konnte man in allen vier Chromatogrammen Toluol nachweisen.

Die nachfolgende Tabelle zeigt alle übrigen Substanzen aus dem „Hawelka-Chromatogramm“ auf einen Blick, die nicht als Kaffeearomakomponenten identifiziert wurden. Außerdem werden auch solche Aromakomponenten angeführt, die sowohl aus dem Kaffee als auch aus anderen Quellen stammen können; hierzu liefert Limonen das beste Beispiel, das sowohl im Kaffeearoma vorkommt als auch aus einem Reinigungsmittel stammen kann. Aus diesem Grund ist wahrscheinlich auch die Intensität von Limonen so hoch.

Alle anderen Substanzen der 8std „Hawelka“ und 8std „Sperl“-Messungen findet man im Überblick in den Chromatogrammen im Anhang auf Seite 98. Das Bild auf der Seite 99 zeigt alle übrigen Substanzen der „8-std-Hawelka-Messung“ und auf Seite 100 ist dasselbe des „Sperl“ zu sehen. Die Tabellen im Anschluss listen diese Verbindungen auf und zeigen auch die jeweiligen Herkunftsmöglichkeiten bzw. Anwendungsgebiete und Vorkommen. Somit lässt sich die Herkunft, woraus jene Substanzen stammen können, besser interpretieren.

Tabelle 15: Zigarettenrauch- und andere Substanzen der achtstündigen „Hawelka-Raumluftmessung“

P-Nr.	RT	Substanz	Vorkommen/ Verwendung
1	3.95	Benzol	Zigarettenbestandteil
2	5.14	Heptan	im Erdöl; in ätherischen Kiefern-Ölen
3	8.28	Pyridin	Zigarettenbestandteil
4	8.90	Toluol	Zigarettenbestandteil
5	16.46	Phenylethylacetat	Zusatzstoff in Zigaretten
6	19.68	Benzaldehyd	Zigarettenbestandteil
7	21.02	Ethyltoluol	Lösungsmittel für Natur- und Kunstharze
8	22.21	Phenol	Zigarettenbestandteil
9	24.07	Nicotinaldehyd	Zigarettenbestandteil
10	24.37	Limonen	Duftstoff, aus Reinigungsmitteln etc.
11	25.45	α -Toluol	Zigarettenrauchbestandteil
12	28.28	p-Cymol	Bestandteil des Limettenöls
13	28.46	Linalool	Zusatzstoff in Zigaretten
14	29.22	Zimtaldehyd	in Parfums, als Zigarettenzusatzstoff
15	29.69	Benzenethanol	Orangenöl-Bestandteil; in Reinigungsmitteln; Zigarettenzusatzstoff
16	32.90	Menthol	in Zigarette (natürlich oder Additiv); pfefferminzig
17	33.78	Naphthalin	aus Mottenkugeln und auch aus wasserabweisenden Anstrichmitteln
18	34.06	Decanal	Duftstoff; aus Reinigungsmitteln
19	36.43	Carvon	D-(+)-Carvon: Kümmel; L-(-)-Carvon: Pfefferminze; Zigarettenzusatzstoff
20	36.62	Chinolin	Zigarettenbestandteil
21	38.44	Aniskampfer	Duftstoff
22	39.10	Indol	Zigarettenbestandteil

23	40.39	Triacetin	Zigarettenbestandteil
24	41.29	Solanon	Zigarettenbestandteil
25	41.40	Nikotin	Zigarettenbestandteil
26	43.46	5-Methyl-1H-indol	Zigarettenbestandteil
27	45.31	Myosmin	Zigarettenbestandteil
28	47.02	β -Ionon	Veilchenöl-Bestandteil; Zusatzstoff in Zigaretten
29	47.18	Pentadecan	Zigarettenbestandteil
30	47.50	Nicotyrin	Zigarettenbestandteil
31	49.13	Lilial®	Aromastoff: süßer, blumiger Duft
32	51.04	2-Methyl-1-(1,1-dimethylethyl)-2-methyl-1,3-propionsäureester	Unbekannt
33	51.30	Hexadecan	Zigarettenbestandteil
34	51.59	Phthalsäurediethylester	Fixateur in der Parfumerie
35	53.93	Methyldihydrojasmonat	Parfumöl
36	54.62	β -Methylinon	In Kosmetika, Reinigungsmitteln etc.

Die nachfolgende Tabelle zeigt nun alle übrigen Substanzen aus dem „Sperl-Chromatogramm“. Wie bereits erwähnt, findet man im Anhang (Seite 100) das dazugehörige Chromatogramm mit den entsprechenden Peak-Beschriftungen.

Tabelle 16: Zigarettenrauch- und andere Substanzen der achtstündigen „Sperl-Raumluftmessung“

P-Nr.	RT	Substanz	Vorkommen/ Verwendung
1	5.74	Essigsäure	Geschmacksstoff; Kosmetikartikel
2	9.88	Propylenglycol	Zigarettenzusatzst.; Hygieneartikeln (Deos)
3	10.20	Pyridin	Zigarettenbestandteil
4	11.81	Toluol	Zigarettenbestandteil
5	12.50	Hexanal	in Abgasen; Fruchtaromen; orangen-, citrus-, rosenähnlich, grasiger Geruch
6	12.74	Tetrachlorethylen	Umweltschadstoff
7	13.02	Benzylacetat	eines der am häufigsten verwendeten Duftstoffen; jasminähnlich
8	14.26	Tulipalin A	Naturstoff der Liliaceae wie Lilien, Tulpen
9	15.49	Tuberolacton	Tuberosenöl-Bestandteil; in blumigen Parfum-Kompositionen
10	15.61	Ethylbenzol	in Benzin; gehört zu sog. BTEX-Aromaten
11	16.77	Pyrrrolizidin	Naturstoff; in Hülsenfrüchten
12	17.84	2-Butoxyethanol	Hauptbestandteil verschiedener Flüssigseifen, Kosmetika oder Reinigungsmitteln
13	18.96	Isonicotinsäure	Isomeres der Nikotinsäure; in Pharmazeutika und Agrarchemikalien
14	22.32	Phenol	Zigarettenbestandteil
15	22.45	m-Menthan	Geruch erinnert an Minze, Fenchel
16	24.85	Limonen	Duftstoff, aus Reinigungsmitteln
17	27.02	Dihydromyrcenol	in Toilettenartikel, Waschmittel, citruslimonenartigen, frischen Duft
18	28.55	Linalool	Zusatzstoff in Zigaretten
19	28.88	Zimtaldehyd	in Parfums und als Zusatzstoff in Zigaretten
20	29.76	Benzenethanol	Bestandteil des Orangenöls; zum Bsp. in Reinigungsmitteln; Zusatzstoff in Zigaretten

21	31.94	Menthan*	m-Menthan: minzig, Fenchelduft
22	32.98	Menthol*	im Zigarettenrauch; pfefferminzig
23	33.94	α -Terpineol	in ätherischen Ölen; Fliedergeruch
24	35.06	Citronellol	in Kosmetika und Reinigungsmitteln
25	35.25	2-Phenoxyethanol	Fixativ für Parfums
26	36.02	Linalylanthranilat	Duftstoff, aromatisch
27	36.52	Carvon	in Kümmel-, Dillöl, Mandarinenschalen
28	40.49	Triacetin	Zigarettenbestandteil: als Feuchthaltemittel
29	41.48	Nikotin	Zigarettenbestandteil
30	44.56	α -Ionon	Zusatzstoff in Zigaretten; Veilchen-/Holz-Duft
31	45.38	Myosmin	Zigarettenbestandteil
32	46.72	α -Isomethylionon	Duftbestandteil in Parfums, blumig
33	47.57	Nicotyrin	Zigarettenbestandteil
34	49.22	Lilial®	Aromastoff: süßer, blumiger Duft
35	51.11	2-Methyl-1-(1,1-dimethylethyl)-2-methyl-1,3-propionsäureester	Unbekannt
36	51.30	Hexadecan*	Zigarettenbestandteil
37	54.00	Methyldihydrojasmonat	Parfumöl
38	54.69	β -Methylionon*	in Kosmetika, Reinigungsmitteln
39	55.22	Lactaropallidin	Lactaransesquiterpenoid; Pilz-Metabolit

* richtiges Isomer nicht bestimmt

Fettgedruckte Substanzen wurden in beiden Kaffeehäusern gefunden

KAPITEL V

5) SCHLUSSBETRACHTUNG

Das Ziel dieser Arbeit war die Zusammensetzung der Raumluft in typischen Wiener Kaffeehäusern zu erfassen. Als passende Untersuchungsmethode wurde die SPME-Methode mittels GC/MS-Kopplung gewählt. Um die daraus erhaltenen Chromatogramme richtig auswerten zu können, wurden einige Hilfestellungen gewählt: Mit der selbst erarbeiteten Methode „rmp2.“ wurden Messungen mit reinem Zigarettenrauch durchgeführt, sowie mittels zwei verschiedenen Bibliotheken jeder einzelne Peak identifiziert. Die Peaks wurden nach der höchsten Wahrscheinlichkeit aufgelistet. Außerdem wurden auch bereits bestehende Studien aus der Literatur als Vergleich und zur Absicherung bei der Identifikation der Substanzen herangezogen. Die Feldarbeit wurde von Oktober 2007 bis Februar 2008 durchgeführt.

5.1.) Charakteristische Substanzen in den Kaffeehäusern

Beim Betreten der Kaffeehäuser war immer der Zigarettenrauch am dominantesten, erst nach einer gewissen Zeit konnte man andere Gerüche wahrnehmen. Die Ergebnisse belegen, dass der Nikotin-Peak in den Chromatogrammen immer vorhanden ist. Bei den achtstündigen Messungen zeigt sich die ca. doppelte Intensität von Nikotin, als es bei der dreistündigen der Fall ist. Man kann beobachten, dass mit der Dauer der Messung die Intensität von Nikotin ansteigt. Auch Linalool wird in allen Chromatogrammen gefunden. Im „Café Sperl“ sind die Intensitäten von Linalool etwas höher als im „Hawelka“ und auch bei der achtstündigen „Sperl-Messung“ fast doppelt so hoch. Von besonderem Interesse ist auch die Beobachtung, dass in jedem Chromatogramm die Substanz Limonen zu finden ist. Dieser Peak hat jeweils die höchste Intensität.

Daraus folgt also, dass immer wieder drei Substanzen auftreten, nämlich Limonen, Nikotin und Linalool.

In allen Chromatogrammen werden hauptsächlich Kohlenwasserstoffe, die nach *Nijssen et al.* (1996) als Kaffeearoma-Komponenten beschrieben wurden, gefunden. Aldehyde, die aus dem Kaffeearoma stammen, lassen sich bei den kürzeren Messungen öfter finden als bei den länger andauernden Messungen. Benzaldehyd zum Beispiel wird im „Hawelka“ identifiziert, Propanal nur in der Dreistundenmessung im „Sperl“. Säuren, Furane, Basen, Phenole und Alkohole aus dem Kaffeearoma sind auch in jeder GC/MS-Auswertung zu finden. Schwefelverbindungen wie Isopropylthiophen erscheinen nur in der „Sperl-Raumluft“, hingegen Ester wie Ethyl- oder Butylacetat nur im „Hawelka“.

Allgemein betrachtet sind die meisten Intensitäten im „Sperl“ viel höher und dichter als im „Hawelka“, vor allem in der Zeit zwischen 15 und 25 Minuten. Hier ist es auch gelungen - im Vergleich zum „Hawelka“ - insgesamt viel mehr andere Substanzen wie Parfumkomponenten oder Aromastoffe z.B. aus Reinigungsmitteln zu identifizieren.

Der Grund dafür, warum viel mehr Rauchbestandteile im „Hawelka“ gefunden worden sind, ist, dass im „Sperl“ sehr viel Wert auf eine „rauchfreie Luft“ gelegt wird und hier eine Entlüftung installiert ist, die diese Substanzen abführt. Das lässt sich anhand der Ergebnisse sehr gut nachvollziehen. Außerdem gibt es im „Sperl“ auch eine „Nichtraucher-Zone“, die es im traditionellen „Hawelka“ eben nicht gibt.

5.2.) Der Duft der Wiener Kaffeehäuser

Im direkten Vergleich der Chromatogramme untereinander, lässt sich sagen, dass im „Café Hawelka“ mehr Aromabestandteile des Kaffees, das heißt also 38, als im „Café Sperl“ (27 Kaffeearomasubstanzen) gefunden wurden. Trotzdem riecht es im „Hawelka“ nicht mehr nach Kaffee als im „Sperl“, da ja erst die Gesamtheit aller Kaffeearoma-Bestandteile das wohlriechende Kaffeearoma ausmacht. Die wenigen einzelnen gefundenen Aromakomponenten lassen die Raumluft der Cafés also nicht nach dem guten Kaffeearoma duften, da ja nur ein Zusammenspiel aller 835 Komponenten das Kaffeearoma ausmacht. Auch die Bestandteile wie Damascenon oder 2-

Furfurylthiol, von denen man sagen kann, dass sie am meisten zum Kaffeearoma beitragen, konnten nicht gefunden werden.

Die Ergebnisse der gaschromatografischen Untersuchungen zu den Düften Wiener Kaffeehäuser liefern den Beweis, dass in der Raumluft viel mehr als nur einzelne Kaffeearoma-Komponenten zu finden sind. Sowohl Zigarettenrauch-Bestandteile als auch verschiedene Duftkomponenten von Parfums oder Deodorants können identifiziert werden. Aber auch Gerüche verschiedener Getränke, Mahlzeiten oder auch aromatisierter Reinigungsmitteln wirken sich auf die „Luftzusammensetzung“ im Raum aus. In den Kaffeehäusern ist – wie vermutet - nicht nur bzw. teilweise auch gar nicht der gute Kaffeeduft zu riechen, sondern viele andere Düfte und Gerüche spielen beim gesamten Geruchseindruck zusammen.

Die Assoziation Kaffeeduft mit Kaffeehaus ist nicht immer wahrheitsgetreu. Man kann den Kaffeeduft eigentlich nur dann riechen, wenn man den Kaffee frisch serviert bekommt oder ein Kellner mit einer Tasse heißen Kaffee am Gast vorbeigeht. Dieses gute Aroma ist allerdings nur für „kurze Zeit“ wahrnehmbar, da ja in der Kaffeetasse alle Komponenten gemeinsam auftreten und zusammenspielen. Der Kaffee duftet nur solange, bis er wieder ausgekühlt ist.

Natürlich gibt es auch Cafés, die darauf achten, dass es in ihrem Lokal immer nach frischer Kaffeeröstung duftet, doch im typischen Wiener Kaffeehaus ist dies nicht der Fall. Vor allem das Umfeld, die Atmosphäre und der Kaffee, den man sich bestellt und dann genießt, machen das Wiener Kaffeehaus so attraktiv für seine Besucher.

Und da der Geruch eben auch zur Atmosphäre zählt, ist diese bunte Mischung aus Limonen-Nikotin-Linalool und vielen anderen Substanzen Teil des „typisch Wienerischen Kaffeehauses“.

KAPITEL VI

6) ZUSAMMENFASSUNG

Man ging der Frage nach, was den typischen Duft in den Wiener Kaffeehäusern ausmacht und ob wirklich der Kaffeeduft dominiert: Bei den Raumlufmessungen in den Wiener Kaffeehäusern wurden die Sampler mit dem Ziel positioniert, Kaffeearomastoffe einzufangen und nachzuweisen. Dazu verwendete man die SPME-Methode, die für Aroma-Analysen am geeignetsten ist. Man ließ die Sampler für jeweils drei und acht Stunden in den Kaffeehäusern in der Nähe der Espressomaschine in einem Glas stehen, um gute Ergebnisse zu erzielen. Man entwickelte eine geeignete Methode für das GC/MS-Gerät, um die flüchtigen Aromabestandteile auftrennen und identifizieren zu können. Danach wurden die erhaltenen Chromatogramme ausgewertet und die Peaks mittels zweier Datenbibliotheken identifiziert. Man spezialisierte sich auf die repräsentativen Ergebnisse des Café „Hawelka“ und des „Sperl“. Die Chromatogramme unterschieden sich nicht merklich voneinander. Bei beiden waren die Peaks von Limonen und Nikotin sehr dominant. Die Intensitäten der Nikotin-Peaks stiegen je nach Länge der Messdauer deutlich an. Es wurden nur wenige Kaffeearomabestandteile gefunden, vergleichbar mit den ca. 835 Komponenten, die tatsächlich im Kaffeearoma enthalten sind. Am häufigsten wurden Verbindungen der Gruppe der Kohlenwasserstoffe, Furane, Basen und Alkohole, aber auch Ester, Schwefelverbindungen, Säuren und Phenole identifiziert. Es wurden auch sehr viele Parfumkomponenten oder Aromastoffe verschiedener Reinigungsmitteln und Zigarettenrauch-Bestandteile gefunden.

Zusammenfassend kann man sagen, dass in allen getesteten Kaffeehäusern der Zigarettengeruch am dominantesten war. Es gelang zwar einige Kaffeearoma-Komponenten mittels GC/MS nachzuweisen, doch nur das Zusammenspiel aller Kaffeeinhaltsstoffe macht das typische Kaffeearoma aus! Im Wiener Kaffeehaus ist also die Atmosphäre, die den Ort als auch die Umgebung umfasst, aber auch die Geschichte der Cafés miteinbezieht, ausschlaggebend. Der Geruch ist ein großer Teil der Atmosphäre!

KAPITEL VII

7) SUMMARY

The objective of this research work was to analyze the compartment air in typical Viennese coffeehouses. Therefore, the GC/MS-coupling with solid phase micro extraction-technology has been utilized, which is the best method to sample and to analyze odorous substances. For air-measurements, the samplers were positioned in the middle of the room near the espresso machine to catch all the air-components as best as possible. Each of the samplers rested between three and eight hours in the coffeehouses. A special method for the GC/MS has been developed to attain a clearly arranged chromatogram. With the help of two different indices all the peaks in the chromatograms have separately been analyzed.

Because all investigated coffeehouses showed similar chromatograms, two of them have been picked out, namely the „Hawelka“ and „Sperl“. The peaks of limonene and nicotine showed very high intensities, while the intensities of nicotine increased depending on the measurement-period.

To sum up: cigarette-smoke is the most dominant output in the coffeehouses which is also demonstrated by the noticeable smell. Analyses showed that there are also a lot of perfume- and cleaning agents-components in the coffeehouse-air. The pleasant coffee aroma is only in the air when fresh and hot coffee is served. Some coffee aroma-substances were identified with the GC/MS-method but only the interaction of all components provides the distinct coffee smell. Considering that the coffee aroma contains 835 different components only a part of all these coffee-substances has been identified. The atmosphere is the most important feature in a Viennese coffeehouse: it is influenced by the surrounding area, the building and the history of a coffeehouse.

The aromas form a big part of this atmosphere!

KAPITEL VIII

8) LITERATURVERZEICHNIS

ADAM O. Ernährungs-Umschau: Auswirkungen des Kaffeetrinkens auf die Flüssigkeitsbilanz; 01/05, München, 2005. 14-20.

ANONYM. Zierpflanzenbestandteile: Tulipalin–Primin, 1999. URL <http://www.baua.de/de/Themen-von-A-Z/Gefahrstoffe/TRGS/pdf/907/907-zierpflanzenbestandteile.pdf>. April 08.

BALTUSSEN E, CRAMERS CA, SANDRA PJF. Sorptive sample Preparation; Anal Bioanal Chem.; 2002. 373 (1-2):3-22. URL <http://lib.bioinfo.pl/pmid:12012168>. Juni 08.

BEHRENDT H, EWERS H, HÜTTL R, JÄENICKE M, PLASSMANN E, REHBINDER E, SUKOPP H. Deutscher Bundestag- Unterrichtung durch die Bundesregierung- Sondergutachten des Rates von Sachverständigen für Umweltfragen Umwelt und Gesundheit Risiken richtig einschätzen, Bonner Universitäts-Buchdruckerei, Bundesanzeiger Verlagsgesellschaft mbH, 1999.

BELL R. Total Synthesis of Lactarane and Marasmane Sesquiterpenes: Wageningen University dissertation no. 2875; 2000; URL <http://library.wur.nl/wda/abstracts/ab2875.html>. Juni 08.

BERNHARD W, AEBI B. Gift in den Zigaretten-Tabak aus forensisch-chemischer und -toxikologischer Sicht; Chemische Abteilung, Institut für Rechtsmedizin, Universität Bern, 9. Sarganserländer Suchtfachtagung, Rauch&Inhalation; Kultur-Missbrauch-Sucht; 2002. URL <http://www.sd-sargans.ch/2002/bernhard.pdf>. Juni 08.

BÜCKING M. Freisetzung von Aromastoffen in Gegenwart retardierender Substanzen aus dem Kaffeegetränk; Dissertation; Fachbereich Chemie; Hamburg, 1999. 142, 143.

BUCKINGHAM J. Dictionary of natural Products: Type of compound index-Species Index, Volume 7, Chapman & Hall, Chemical Database; 1994.

BURGER A. Microbial volatile organic compounds (MVOC)- Analyse ausgewählter Schimmelpilzkulturen mittels Gaschromatographie-Massenspektrometrie; Diplomarbeit; Wien, 2005.

CARPENTER CM, et al. New Cigarette Brands with Flavors That Appeal To Youth: Tobacco Marketing Strategies, in: Health Affairs 2005. 24: 1601-1610.

CAUBET MS, ELBAST W, DUBUC MC, BRAZIER JL. Analysis of urinary caffeine metabolites by HPLC-DAD: the use of metabolic ratios to assess CYP1A2 enzyme activity, J. Pharm. Biomed. Anal. 27, 2002. 261-270.

CLARKE R, MACRAE R. Coffee Volume 3 Physiology, Elsevier Applied Science, 1988. 24, 33, 47, 50, 81, 125, 138.

CORNISH H, CHRISTMAN A. A study of the metabolism of Theobromine, Theophylline and Caffeine in man; J. Biol. Chem.; 1957. 228 (1): 315.

CZOK G, LANG K. Physiologische, Pharmakologische und Klinische Wirkungen des Kaffees; BALLSCHMIETER B; Lebensmittelzusatzstoffe, Kaffee und Tee – Flüchtige Aromastoffe; 2001.

DRINGS P. Rauchen und Krebs-Der Onkologe, Vol.10, Nr. 2; Springer; 2004. 6.

EDELBAUER L.J. Kaffee- Alles über ein Genussmittel, das die Welt veränderte; Pichler Verlag, 2003. 7-19, 23, 29, 50-52, 80, 105.

EMMEL CH. Gefahrstoff-Screening mittels SPME auf Baustellen – ein Erfahrungsbericht Messstelle für Gefahrstoffe der Tiefbau-Berufsgenossenschaft; Fachtagung Altlastensanierung 2002. URL http://www.baumaschine.de/Portal/download.php?w=TbgT&p1=altlastensanierung_2002&p2=thema7&n=a107_111.pdf. Mai 08.

FLASSIG T. Vortrag in "Übungen im Vortragen mit Demonstrationen-Organische Chemie": Chemische Aspekte des Kaffees; 2000. URL

<http://www.uni>

[bayreuth.de/departments/didaktikchemie/umat/kaffee2/1_kaffee2.htm#10](http://www.uni-bayreuth.de/departments/didaktikchemie/umat/kaffee2/1_kaffee2.htm#10). Feb. 08.

FORTH W, ADAM O. Coffein: Umgang mit einem Genussmittel, das auch pharmakologische Wirkungen entfalten kann; Deutsches Ärzteblatt 98, Ausgabe 43; 2001. A-2816 / B-2412 / C-2242.

GERHARDS P, BONNS U, SAWAZKI, SZIGAN J, WERTMANN A. GC/MS in der klinischen Chemie; VCH- Verlag, 1997. 192-194.

GRAFINGER HA. Kaffeewissen – Kaffeeanbau; Kaffee- und Tee-Verband, Zaunergasse 1-3, 1030 Wien; URL <http://www.teeverband.at>. Juni 08.

GROB K. Zur Gaschromatographie des Zigarettenrauches, 2. Teil, verfeinerte Trennung mit Hilfe von Kapillarkolonnen, Beiträge zur Tabakforschung, Heft 9, 1962.

GROSCH W. Warum riecht Kaffee so gut?; Chemie in unserer Zeit; 30.Jahrg. 1996. Nr.3. 126-133.

GRUBER L. Massenspektrometrie Gerätetypen des IVV für die organische Analytik, 1998. URL www.ivv.fraunhofer.de/ms/ms-einfuehrung.html. Juni 08.

HÄNSEL R, PERTZ H. Pharmakognosie — Phytopharmazie: Alkaloide-Kaffee; Springer; 8. Auflage 2007. 27.13.10: 1456-1459.

HATT H. Physiologie des Menschen: Geschmack und Geruch; Springer Berlin Heidelberg; 29. Auflage, 2005. 417-418.

HAWELKA A. Geschichte – Herr und Frau Hawelka; 2008; URL <http://www.hawelka.at/>. April 08.

HESSMANN-KOSARIS A. Kaffee: Nicht die Bohne ungesund- Leistungsfähig und kreativ mit Kaffee, Seine positiven Wirkungen, Neueste medizinische Erkenntnisse; Mosaik, 2000. 5; 11-18; 67-69; 88; 101.

HÜBSCHMANN HJ. Handbuch der GC/MS; VCH Verlagsgesellschaft mbH, Weinheim, New York, Basel, Cambridge, Tokyo, 1996.

IRION R. Duftstoffe-Typm IV-Kontaktallergene: Methylionon; 2008. URL <http://www.alles-zur-allergologie.de/Allergologie/Artikel/3688/Allergen,Allergie/Methylionon.html>. Mai 08.

KOCH H, RITSCHEL W. Synopsis der Biopharmazie und Pharmakokinetik – Arzneistoffe im Organismus; ecomed, 1986. 173ff, 287f.

MARTINEK T. Kaffeehäuser in Wien: Ein Führer durch die Wiener Kaffeehäuser. Mit 99 Beschreibungen, zahlreichen Geheimtipps und vielen Fotos; Falter Verlag, 1990. 15-17; 52-53; 62-63; 150-151.

MARTINETZ D, HARTWIG R. Taschenbuch der Riechstoffe: Ein Lexikon von A – Z; 1. Aufl. – Thun [u.a.]: Deutsch; Verlag Harri Deutsch; 1998. 310, 381.

MERCKEL C, PRAGST F. Analyse von Zigaretten auf Zusatzstoffe-Zusammenfassung des Berichtes zum Projekt Tabakzusatzstoffe; Im Auftrag des Bundesamtes für Gesundheit (BAG); 2005.

MERCKEL C, PRAGST F. Tabakzusatzstoffe in Zigaretten - Verwendungszweck und Gefahrenpotential, Journal of Consumer Protection and Food Safety; Volume 2, 3; 2007.

MINERS JO, BIRKETT DJ. The use of caffeine as a metabolic probe for human drug metabolizing enzymes; Gen. Pharmac.; Vol. 27, No. 2, 1996. 245-249.

MÜLLER T. Möglichkeiten und Grenzen zur Behandlung des Themas „Duft- und Aromastoffe-Konsequenzen aus einem Projekttag zu diesem Thema an der Universität Köln; Staatsexamensprüfung; 2005. 17,37,45.

MÜLLER-LIMMROTH W. Der Einfluss von coffeinhaltigem und coffeinfreiem Kaffee auf den Schlaf des Menschen; aus dem Institut für Arbeitsphysiologie der Technischen Universität München; Zeitschrift für Ernährungswissenschaft; Dr. Dietrich Steinkopff Verlag – Darmstadt, 1972. 46-53.

NIJSSEN LM, VISSCHER CA, MAARSE H, WILLESENS LC, BOELEN MH. TNO – Nutrition and Food Research Institute, Volatile Compounds in Food, Qualitative and Quantitative Data: Coffee-Tea-Cocoa, Seventh Edition, 1996.

OHLOFF G. Riechstoffe und Geruchssinn: Die molekulare Welt der Düfte, Mit 19 Abbildungen und 16 Tabellen; Berlin, Springer Verlag; 1990. 42, 65, 128, 138, 151, 164-165.

OTTO M. Analytische Chemie; VCH- Verlagsgesellschaft; Weinheim, 1995. 431-439.

PAATSCH T. Schadstoffinformationen – 4-Ethyltoluol; 2006. URL <http://www.enius.de/schadstoffe/4-ethyltoluol.html>. Mai 08.

PRAGST F. HS-SPME zum Nachweis von Tabakadditiven: Klare Sicht im blauen Dunst; GERSTEL Aktuell; 2007. 8-10.

PREIBISCH H. Faszination Kaffee - Kaffeewissen; Deutscher Kaffee-Verband e. V.; 2004. URL <http://www.kaffeeverband.de>. April 08.

PURKL S. Protokoll zum Experimentalvortrag: Ätherische Öle-Orangenöl, Philipps-Universität Marburg Fachbereich Chemie; 1997. Kapitel 4.1. http://www.chids.de/dachs/expvotr/582AetherischeOele_Purkl_Scan.pdf. Mai 08.

RAU P. Online-Riechstofflexikon: Benzaldehyd; Hydroxycitronellal; 2000. Linalylacetat, 1996. Menthol/Levomenthol, 1999. Nonanal, 2003. URL <http://www.omikron-online.de/cyberchem/aroinfo/hydrocit.htm>. bzw. <http://www.chemikalienlexikon.de/aroinfo/linala~1.htm>. Mai 08.

RODGERS R. Das Kaffeehaus, Kaleidoskop Buch, 2006. 67,130-131, 159, 162, 195, 210, 214-215.

SAGUNSKI H, HEGER W. Richtwerte für die Innenraumluft: Naphthalin; Behörde für Umwelt und Gesundheit, Hamburg ·Umweltbundesamt;

Bundesgesundheitsblatt – Gesundheitsforschung – Gesundheitsschutz,
Springer-Verlag, 2004. URL

<http://www.springerlink.com/content/dv01gkmwyghmgbfe/fulltext.pdf>. Mai 08.

SCHÄNZER W. Institut für Biochemie der DSHS Köln, (2004).URL
<http://www.dshs-koeln.de/biochemie/> -> Koffein; März 08.

SCHENK M, SCHALLER K, PÖTSCHKE-LANGER M. Fakten zum Rauchen-
Deutsches Krebsforschungszentrum, Heidelberg; Tabakrauch– ein Giftgemisch;
2008.

SCHIPPERS-WERCINSKI S. Solid Phase Microextraction – A practical Guide;
Marcel Dekker, Inc.; 1999. 177- 188.

SCHROEDER T. Riechstoff-Lexikon: Zimtaldehyd (cis+trans); 2000.
<http://www.chemikalienlexikon.de/aroinfo/6500-aro.htm>. Mai 08.

SCHWEDT G. Taschenatlas der Analytik; Thieme Verlag, Stuttgart, New York;
2.Auflage, 1996. 122-131, 142-147, 164-173.

SHNAWA N. Der Einfluss von alkoholischen und koffeinhaltigen Getränken auf
das Herz-Kreislaufsystem; Nutrition News; Mai/ Juni 2004. 31-34.

SIEBECK W. Die Kaffeehäuser von Wien - Eine Mélange aus Mythos und
Schmäh; Wien: Ed. Wien in d. Verlagsbuchh. Pichler; 1996. 33-38; 179-184.

SIGMA-ALDRICH CHEMIE GmbH. Solid Phase Microextraction: Theory and
Optimization of Conditions, Bulletin 923; ©1998. URL [http://
www.sigmaaldrich.com/Graphics/Supelco/objects/4600/4547.pdf](http://www.sigmaaldrich.com/Graphics/Supelco/objects/4600/4547.pdf); März 08.

STAUB-ZOJER A. Café Sperl – Geschichte - Zeittafel; 2008. URL
<http://www.cafesperl.at/html/CSkap2.html>. April 08.

STEGLICH W, FUGMANN B, LANG-FUGMANN S (editors). ADAM G, ANKE H
(authors) [Transl. by DUNMUR R]. Römp encyclopedia natural Products;
Stuttgart, Thieme Verlag; 2000. 18, 19, 76, 77, 96, 242, 243, 328, 533, 655.

VAS G, VÈKEY K. Trennung mit Hilfe von Kapillarkolonnen, Beiträge zur Tabakforschung, Heft 9, Solid-Phase Microextraction: a powerful sample preparation tool prior to mass spectrometric analysis; Journal of Mass Spectrometry; 2004. 39: 233-254.

VEIGL H. Wiener Kaffeehausführer; Kremayr & Scheriau, (1989) 2. Auflage 1994. 49-50, 59, 83, 91-92.

VOSICKY L.M. aus dem Protokoll des WWTF-Projekts – Haptic and Olfactory Design; 14. August 2007.

WAGNER E. Zur Synthese natürlich vorkommender pyranoider Enlactone aus gut zugänglichen, enantioreinen Bausteinen: Vom Fachbereich Chemie der Technischen Universität Darmstadt zur Erlangung des akademischen Grades eines Doktor-Ingenieurs genehmigte Dissertation; Darmstadt 2000.

WAYNE GF, CONNOLLY GN. Application, Function and Effects of Menthol in Cigarettes: A Survey of Tobacco Industry Documents, in press. Nicotine and Tobacco Research Menthol Supplement; 2003.

WEISS C. Ernährungs-Umschau: Koffein; 04/07; Karlsruhe; 2007. 210 f.

Abbildungsverzeichnis

Abbildung 1: Wiener Mélange

<http://www.fotosearch.de/AGE037/e12-363227/>

Abbildung 2: Leopold Hawelka in seinem Café

<http://www.hawelka.at/>

Abbildung 3: Café Hawelka

<http://www.foto-julius.at/wien/W632.html>

Abbildung 4: Eingang des Café Sperl

<http://www.foto-julius.at/wien1/W1147.html>

Abbildung 5: Café Sperl

<http://www.foto-julius.at/wien4/W2911.html>

Abbildung 6: Kaffeearoma

<http://brinaleinchen80.twoday.net/topics/nun+denn/index.rdf>

Abbildung 7: Metabolismus von Koffein

[SCHÄNZER, 2004]

Abbildung 8/ 9: Koffein-Metabolismus in der Leber/ Chromatogramm

[CAUBET et al., 2002]

Abbildung 10: Schematischer Aufbau eines GC/MS-Systems

[GRUBER, 1998]

Abbildung 11: GC/MS-Gerät (Firma Thermo)

<http://www.thermo.com>. Mai 08

Abbildung 12: SPME- Field Sampler (Supelco)

[EMMEL, 2002]

Tabellenverzeichnis

Tabelle 1: Die Spitzenposition im Kaffeeverbrauch

[GRAFINGER, 2008]

Tabelle 2: Übersicht zu den Kaffee-Inhaltsstoffen, Quelle: Katalyse Institut Köln

[HESSMANN-KOSARIS, 2000]

Tabelle 3: Die Anzahl der gefundenen Stoffklassen in einer flüchtigen Röstkaffeefraktion

[GROSCH, 1996]

Tabelle 4: Übersicht über einige Maillard-Produkte mit ihrem Geruch

[GROSCH, 1996]

Tabelle 5: Jene Verbindungen, die am meisten zum Kaffeearoma beitragen, beginnend mit den wirksamsten Stoffen

[BALLSCHMIETER, 2001]

KAPITEL IX

9) ANHANG

9.1.) Chromatogramme.....83-102

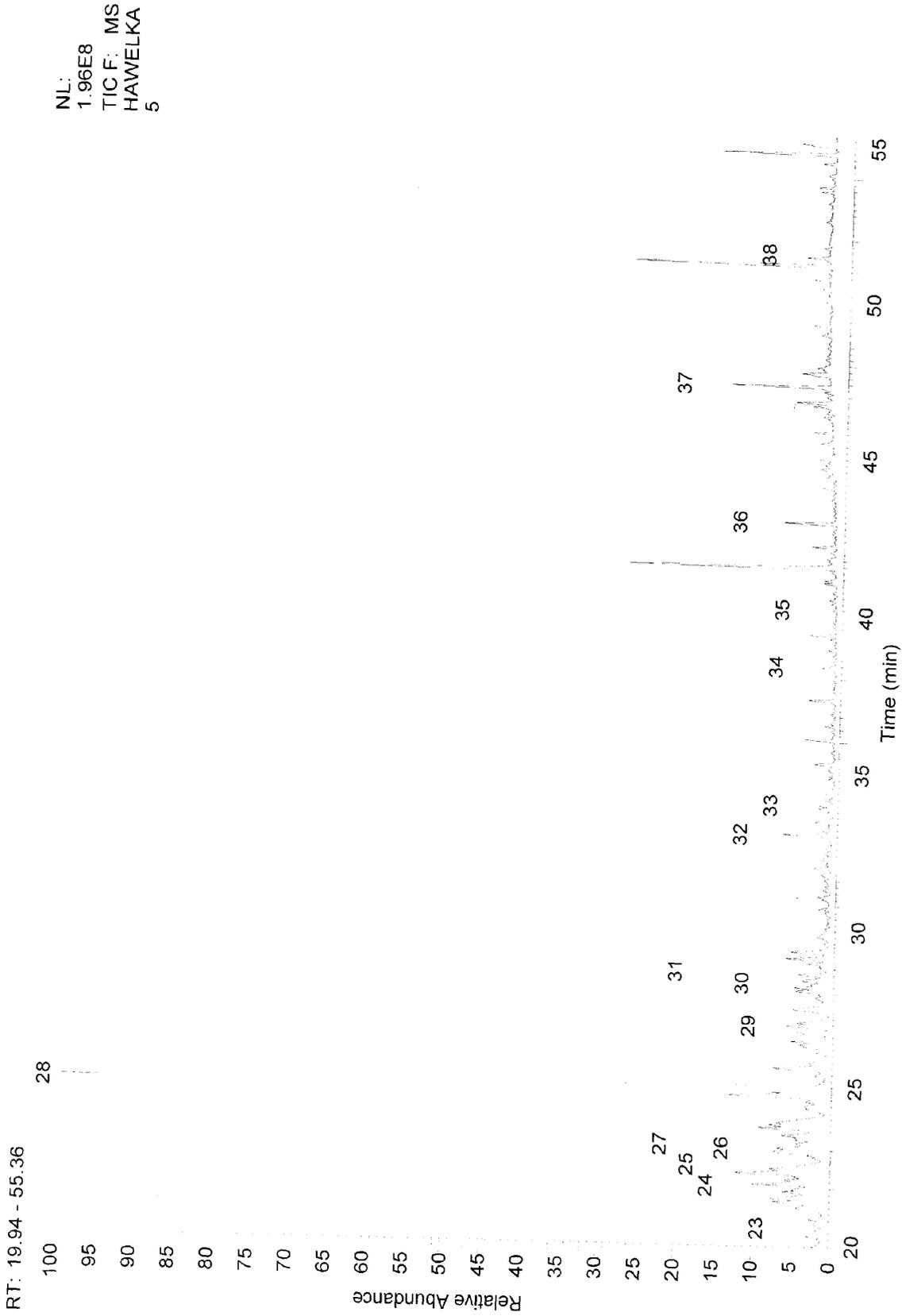
9.2.) Lebenslauf.....103

Alle Kaffeearoma-Komponenten der ersten 20 Minuten der dreistündigen „Hawelka-Raumluftmessung“

NL: 4.43E7
TIC F: MS
HAWELKA
5



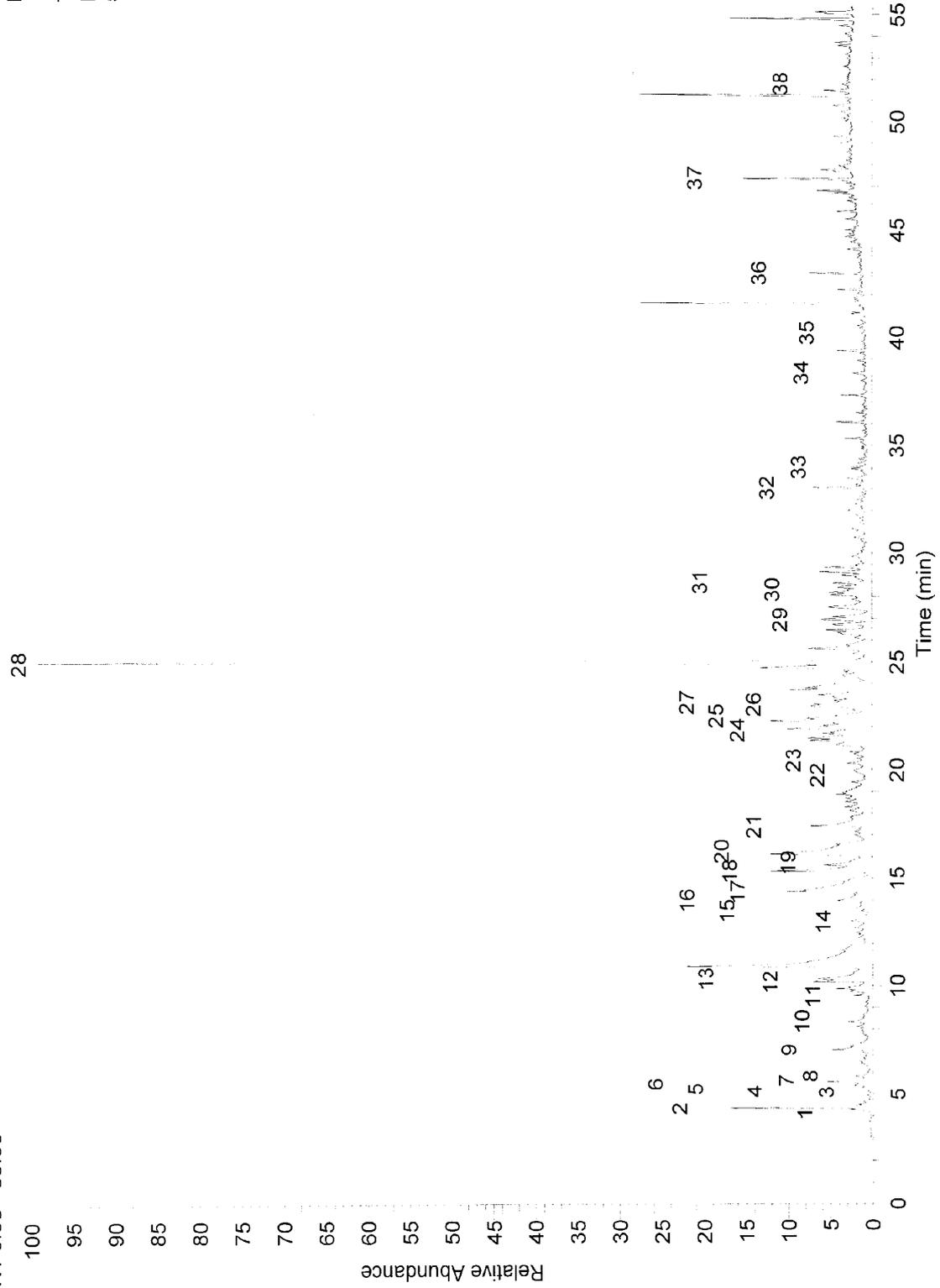
Alle Kaffeearoma-Komponenten zwischen 20 und 55 Minuten der dreistündigen „Hawelka-Raumluftmessung“



Alle Kaffeearoma-Komponenten der dreistündigen „Hawelka-Raumluftmessung“

RT: 0.00 - 55.36

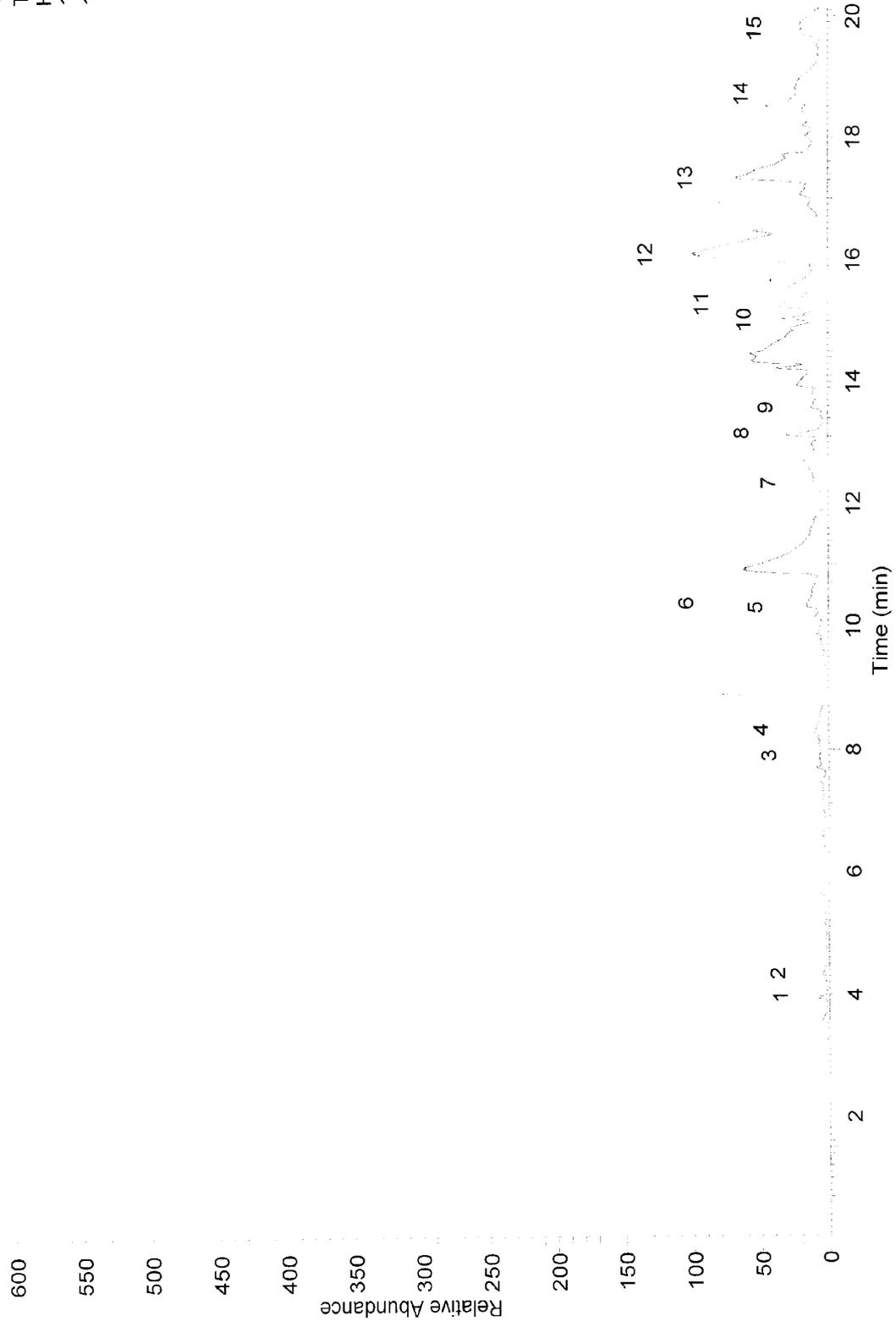
NL:
1.96E8
TIC F: MS
HAWELKA
5



Alle Kaffeearoma-Komponenten der ersten 20 Minuten der achtstündigen „Hawelka-Raumluftmessung“

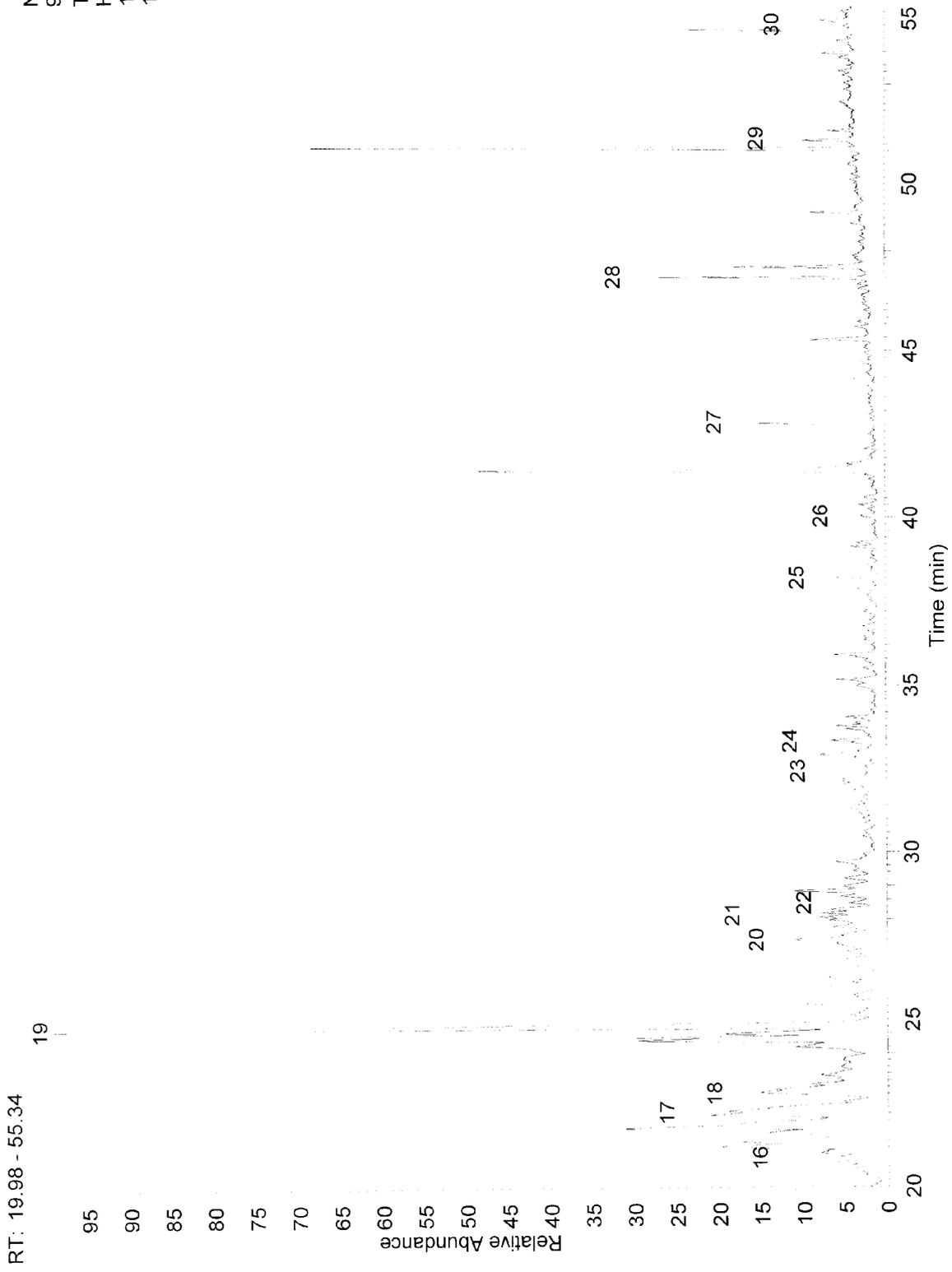
RT: 0.05 - 20.13

NL:
1.58E7
TIC F: MS
HAWELKA
11_071217
195634

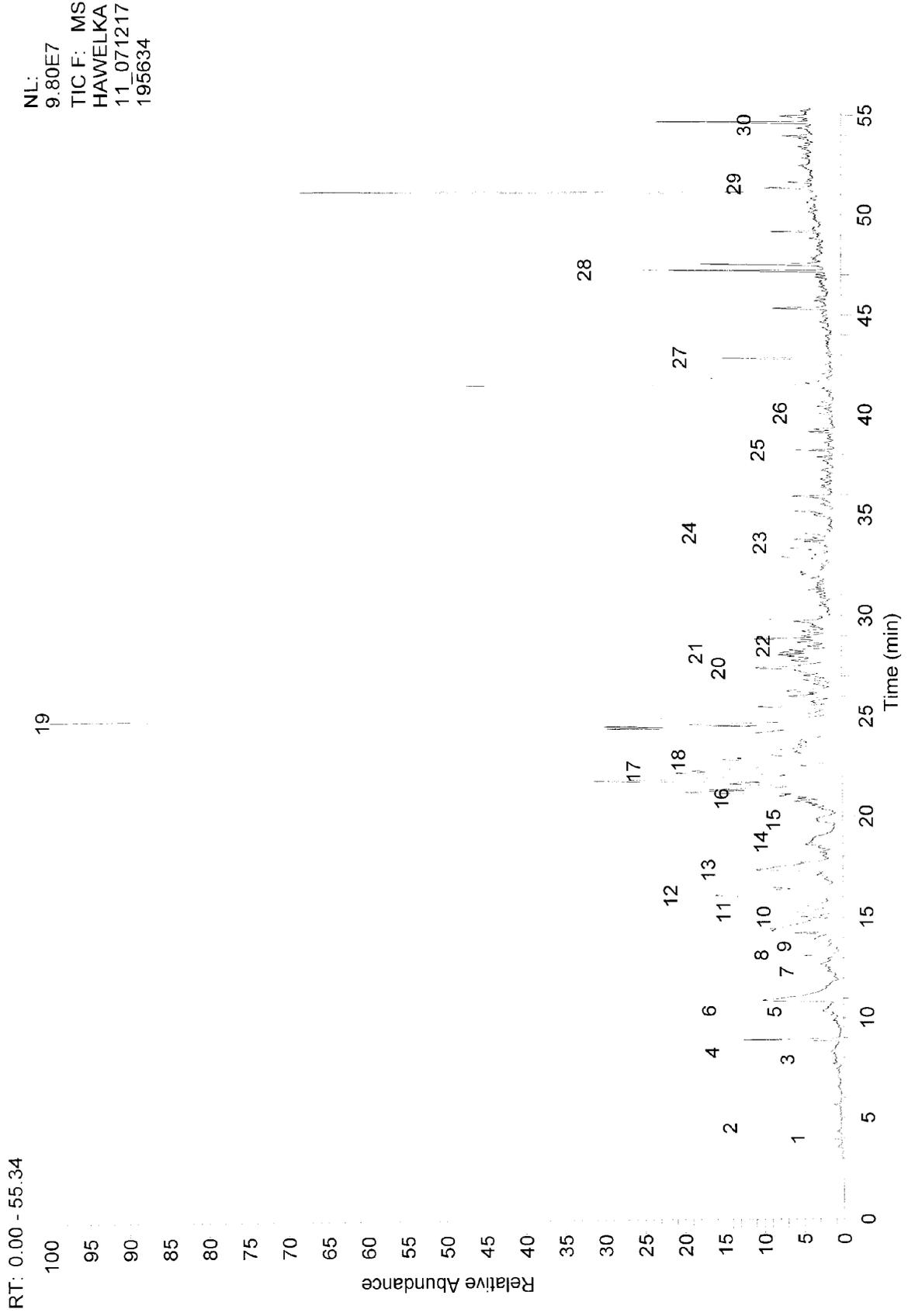


Alle Kaffeearoma-Komponenten zwischen 20 und 55 Minuten der achtstündigen „Hawelka-Raumluftmessung“

NL:
9.80E7
TIC F: MS
HAWELKA
11_071217
195634



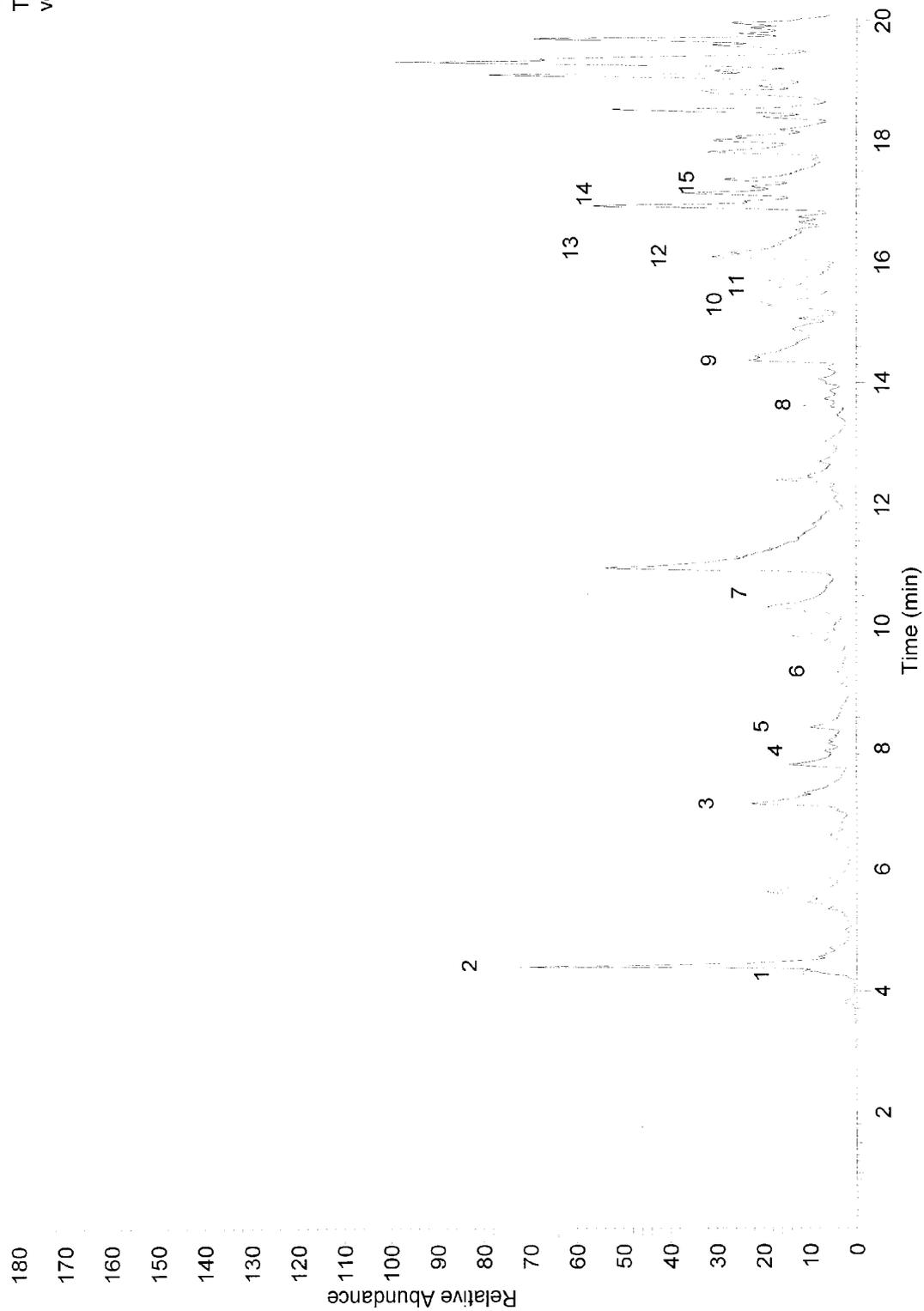
Alle Kaffeearoma-Komponenten der achtstündigen „Hawelka-Raumluftmessung“



Alle Kaffeearoma-Komponenten der ersten 20 Minuten der dreistündigen „Sperl-Raumluftmessung“

RT: 0.10 - 20.08

NL:
3.62E7
TIC F: MS
versuch



Alle Kaffeearoma-Komponenten zwischen 20 und 55 Minuten der dreistündigen „Sperl-Raumluftmessung“

RT: 19.89 - 55.35

NL:
6.77E7
TIC F: MS
versuch



Alle Kaffeearoma-Komponenten der dreistündigen „Sperr-Raumluftmessung“

RT: 0.00 - 55.35

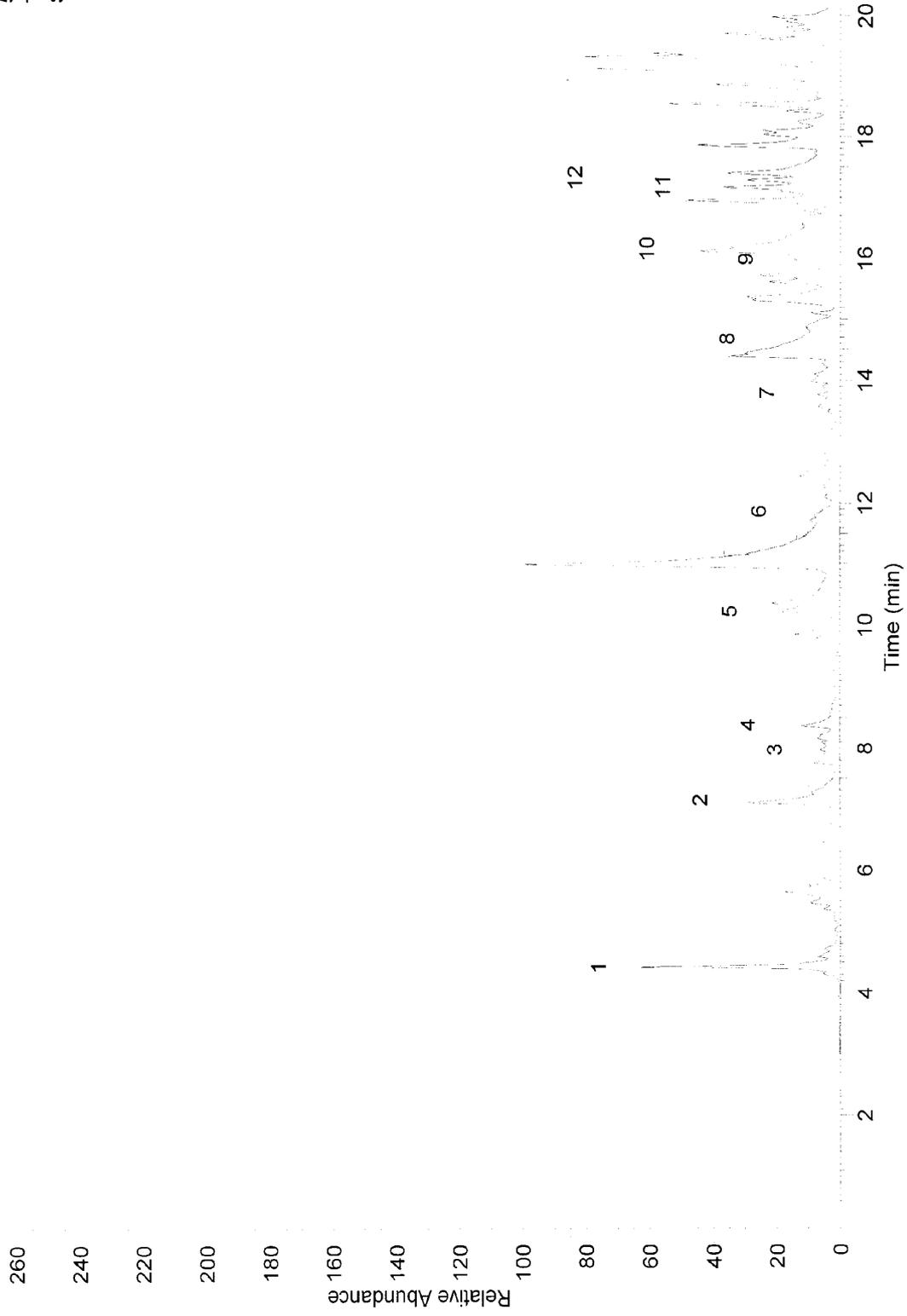
NL:
6.77E7
TIC F: MS
versuch



Alle Kaffeearoma-Komponenten der ersten 20 Minuten der achtstündigen „Sperl-Raumluftmessung“

RT: 0.15 - 20.13

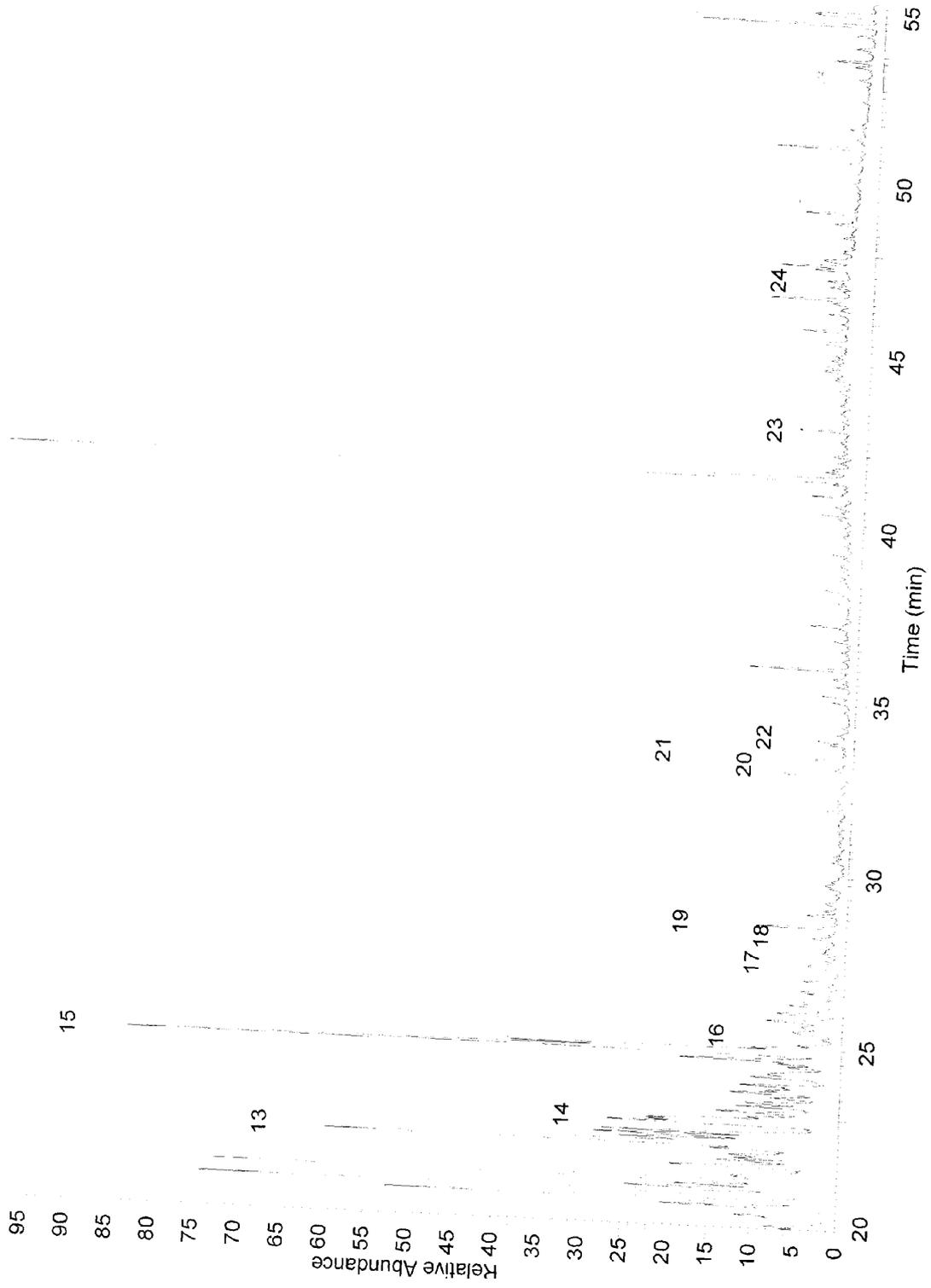
NL:
5.21E7
TIC F: MS
SPERL3



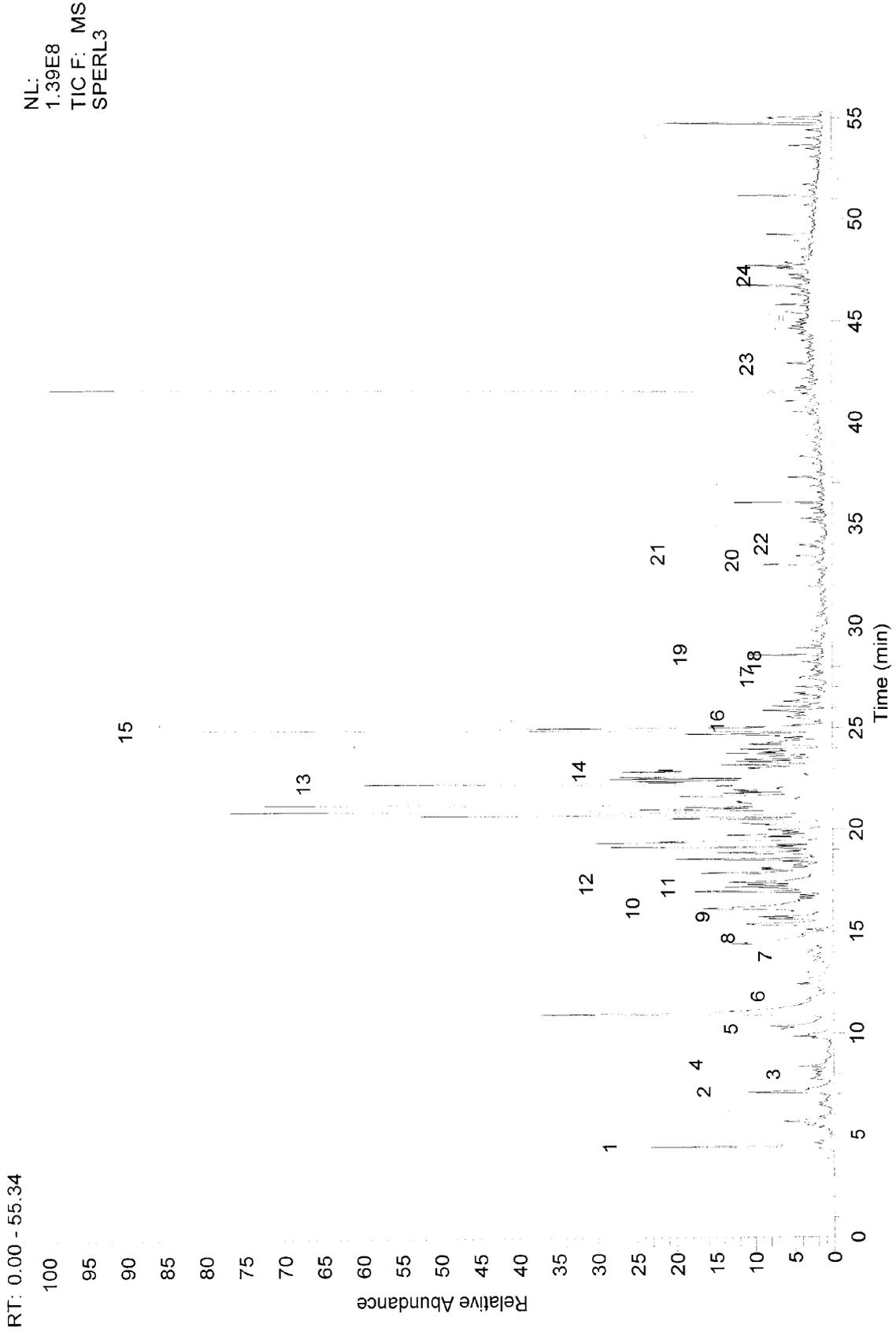
Alle Kaffeearoma-Komponenten zwischen 20 und 55 Minuten der achtstündigen „Sperl-Raumluftmessung“

RT: 19.88 - 55.34

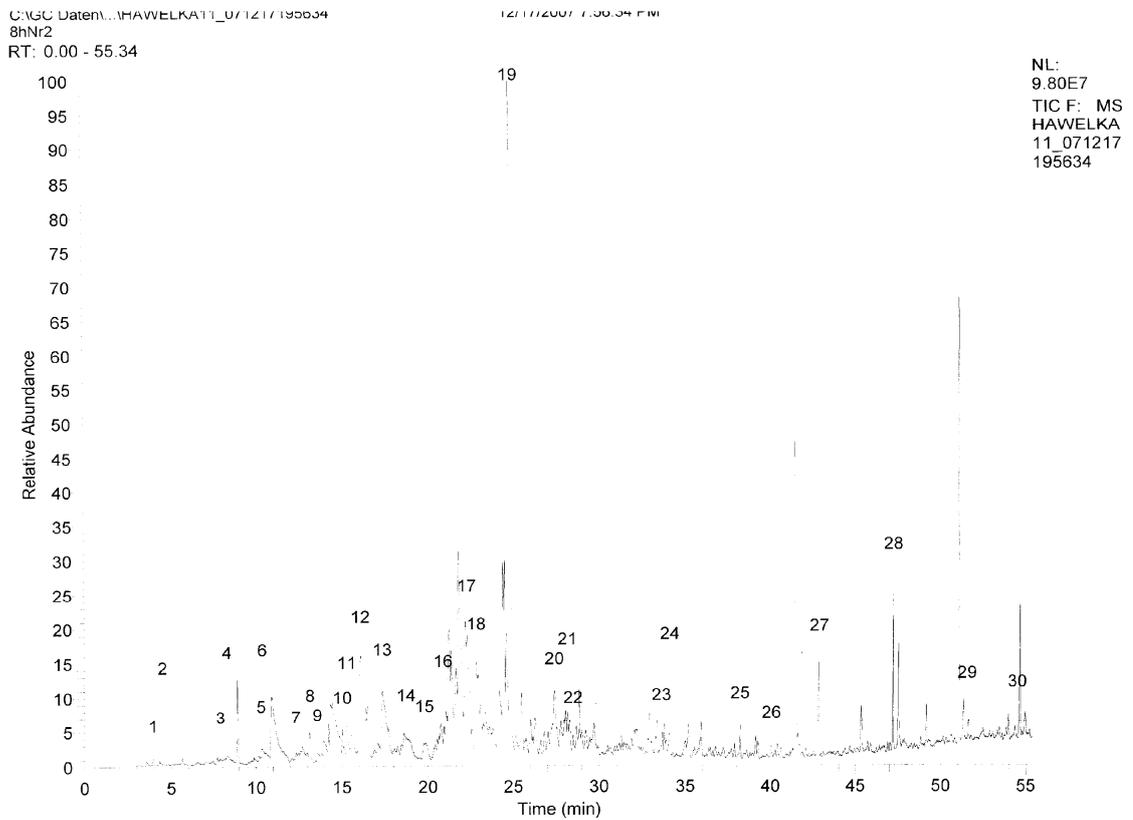
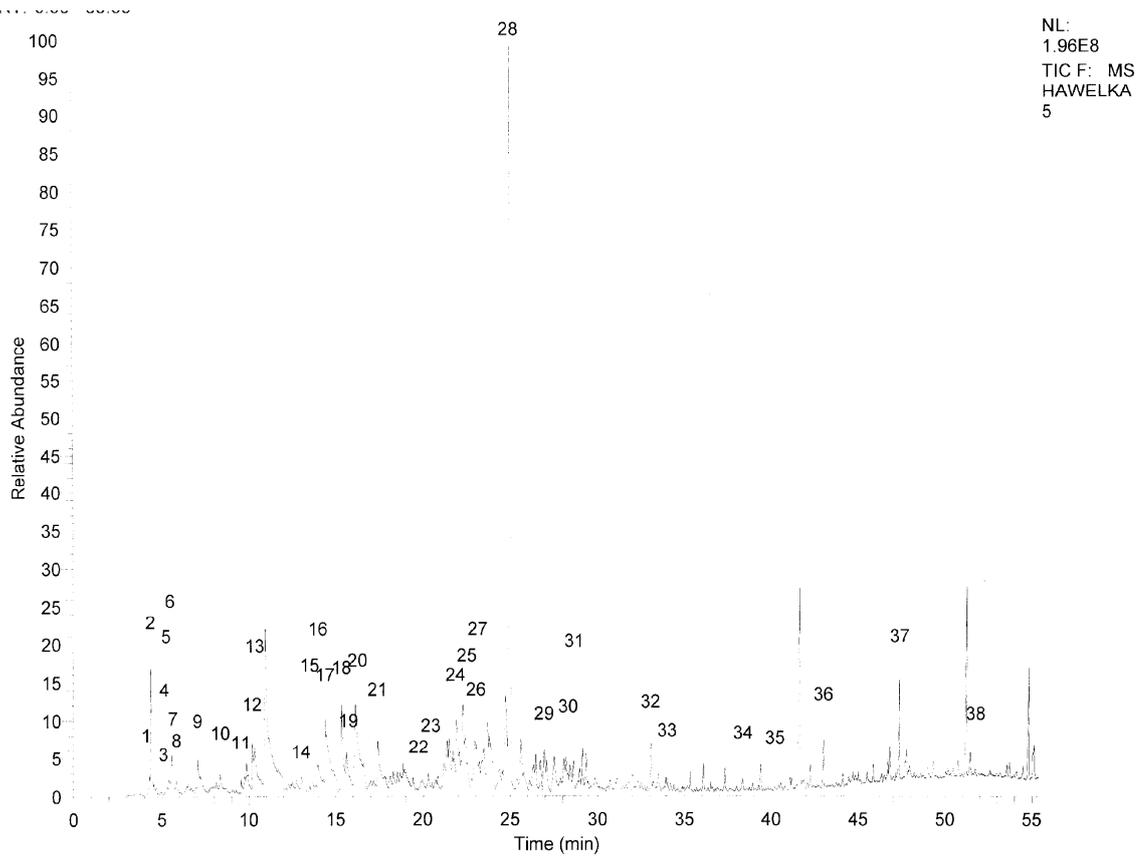
NL:
1.39E8
TIC F: MS
SPERL3



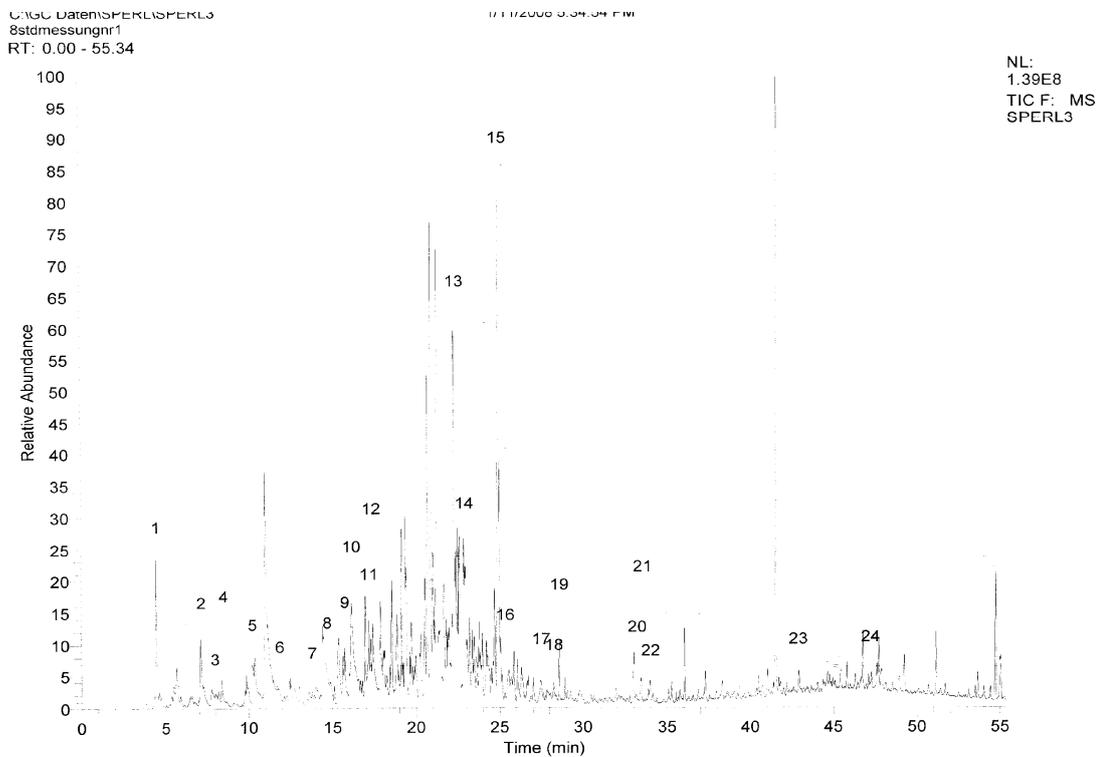
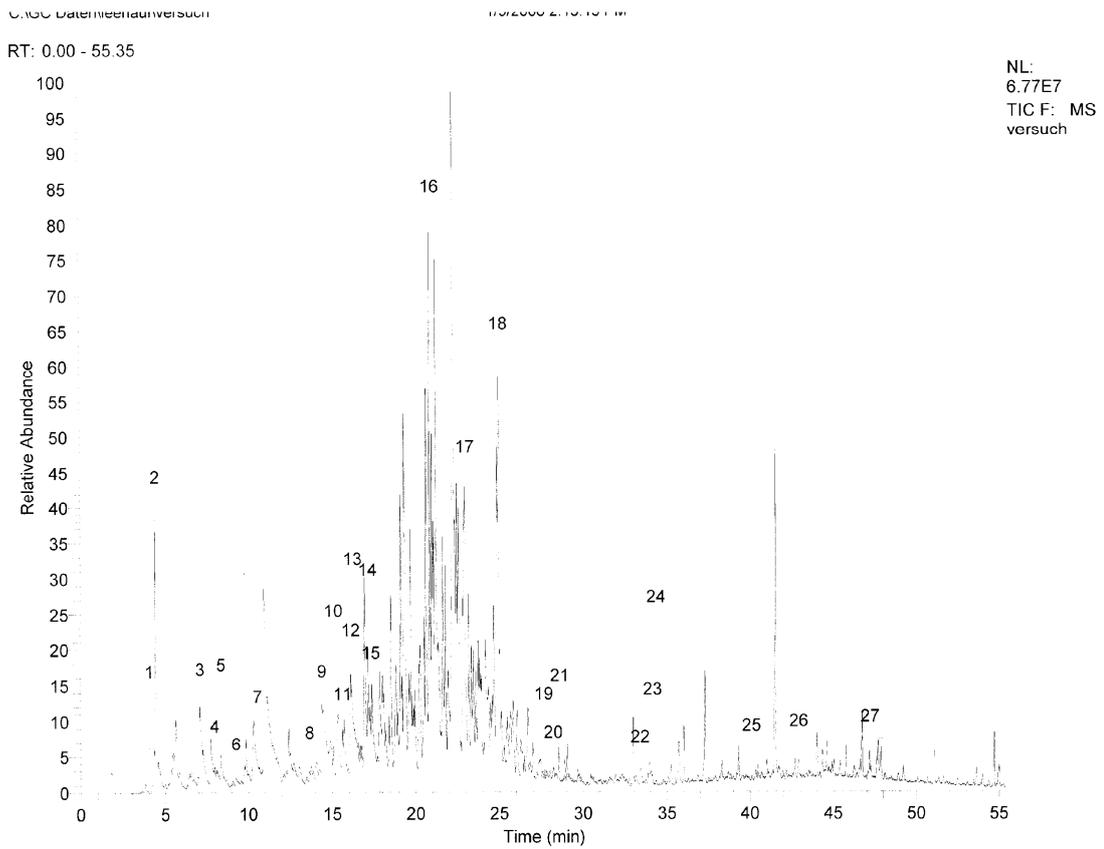
Alle Kaffeearoma-Komponenten der achtstündigen „Sperl-Raumluftmessung“



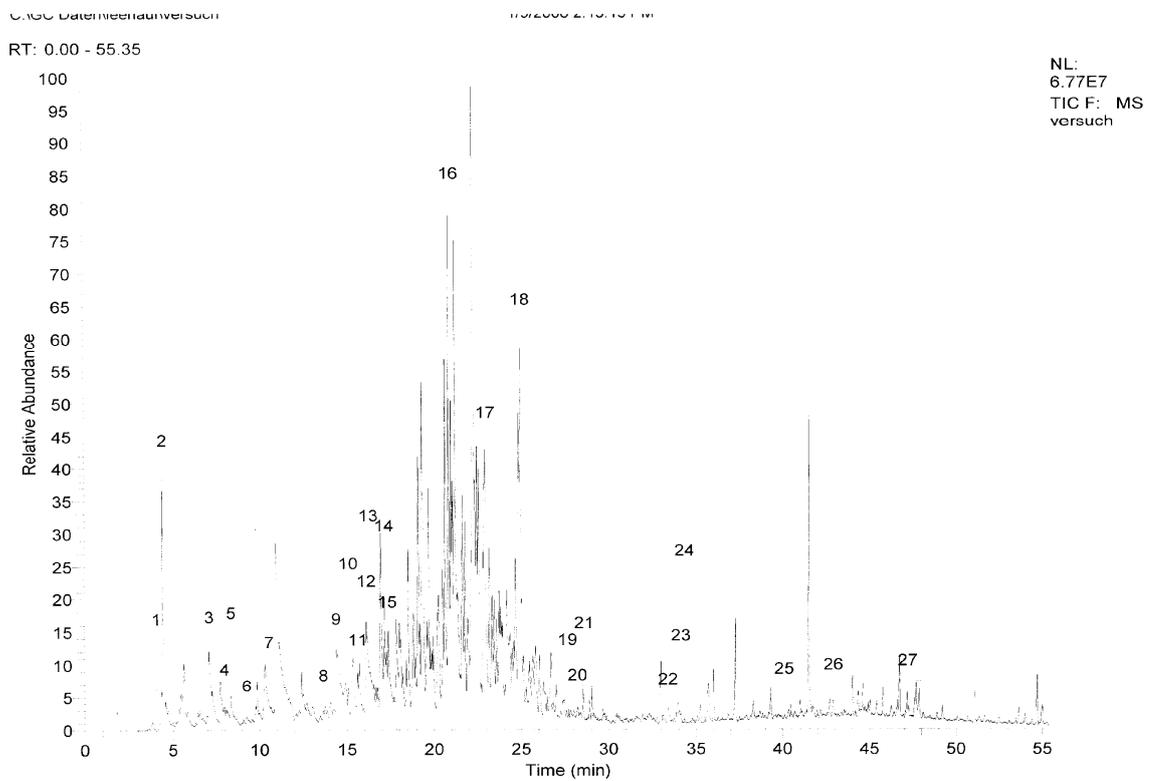
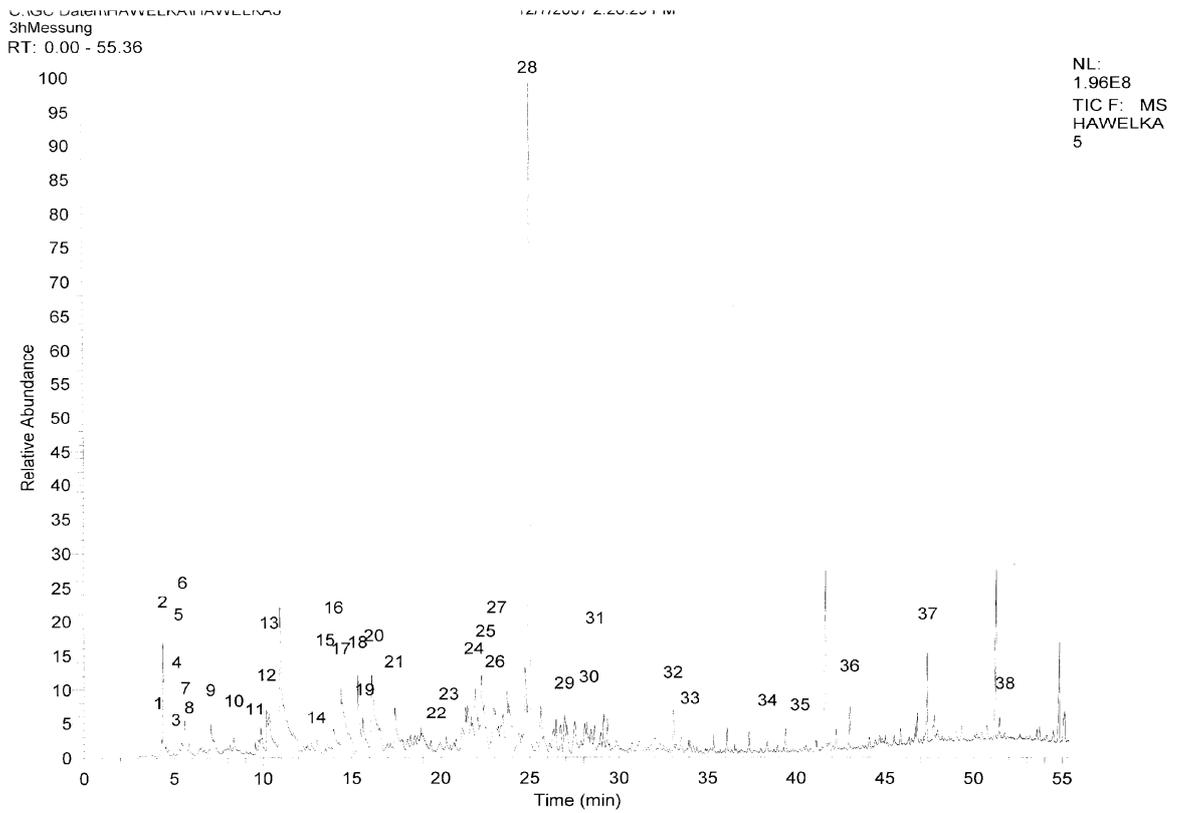
Alle Kaffearomabestandteile der 3 (o)- und 8 (u)-Stunden-Messung im „Hawelka“



Alle Kaffeearomabestandteile der 3 (o)- und 8 (u)-Stunden-Messung im „Sperl“

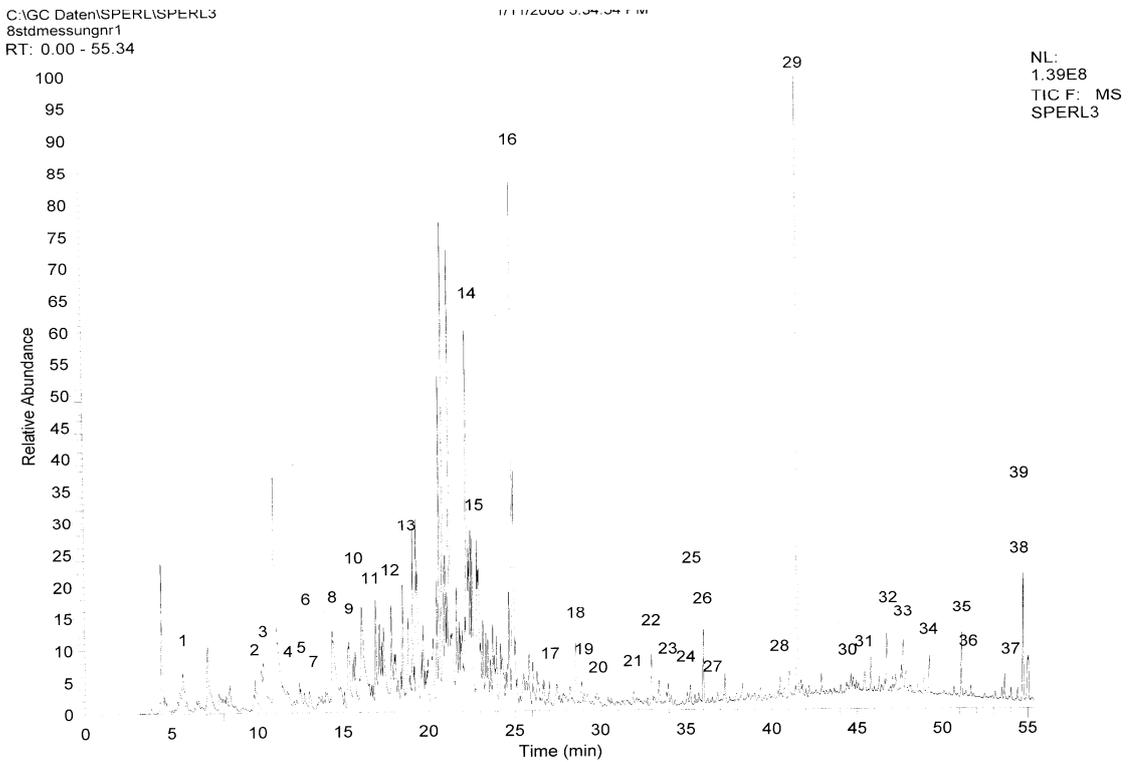
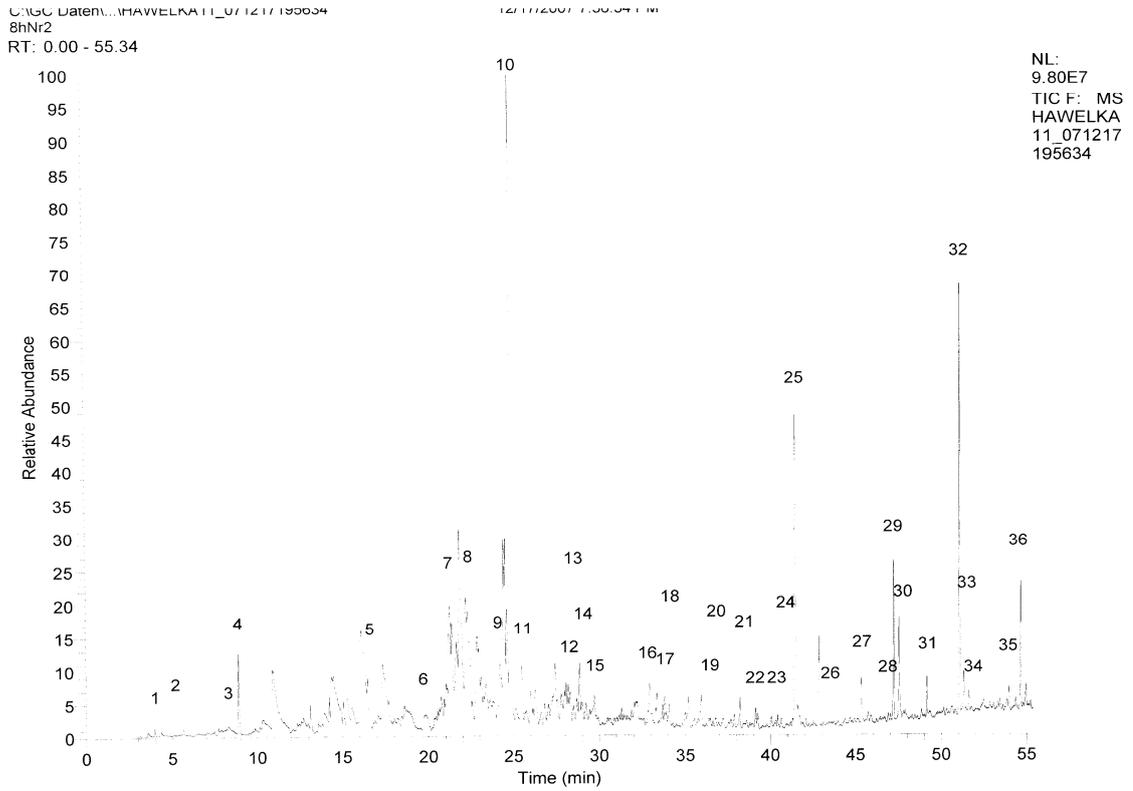


Kaffeearoma-Komponenten: 3-Stunden-Messungen im Vergleich:
 „Hawelka“ (o) und „Sperl“ (u)



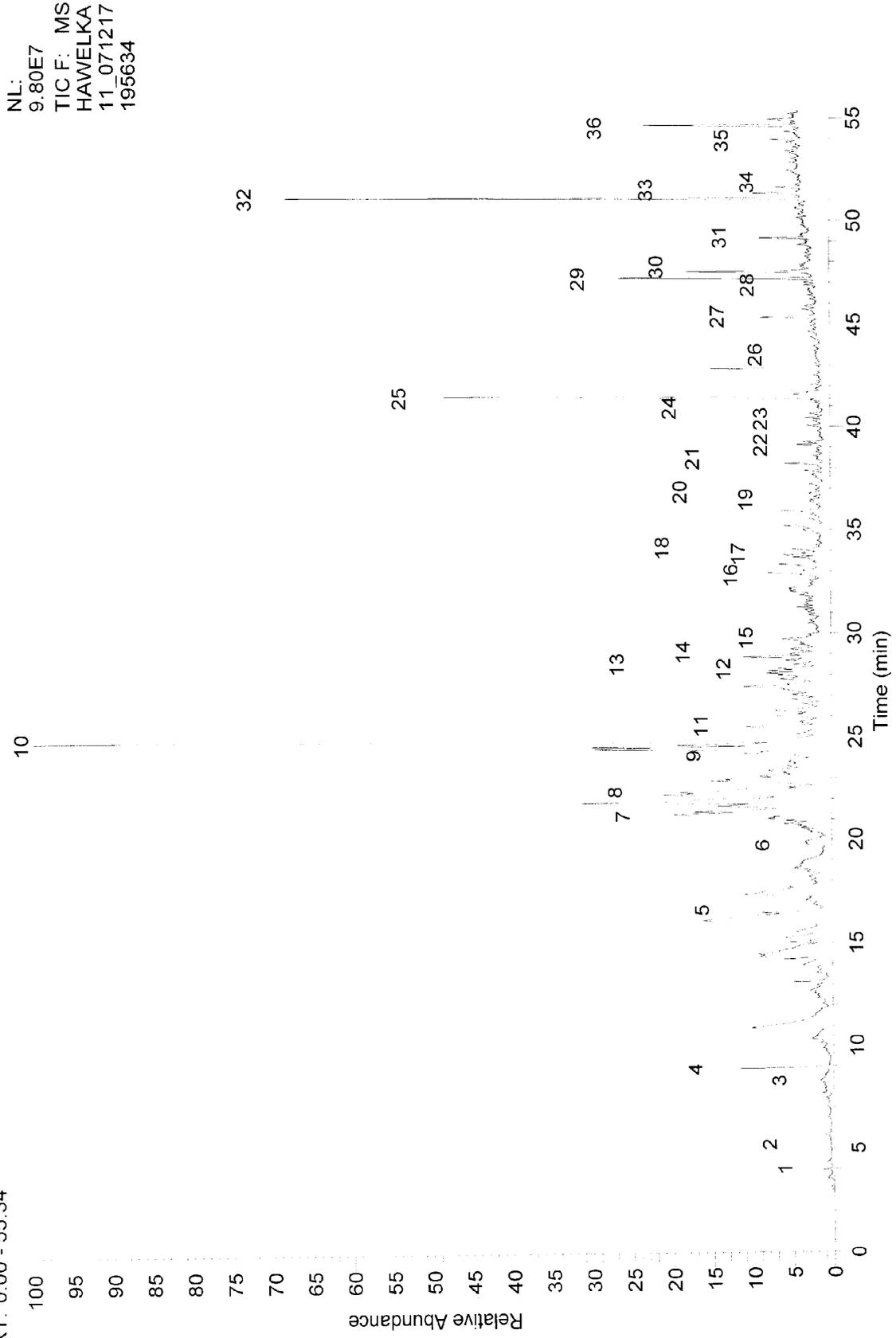
Kaffeearoma-Komponenten: 8-Stunden-Messungen im Vergleich:

„Hawelka“ (o) und „Sperl“ (u)

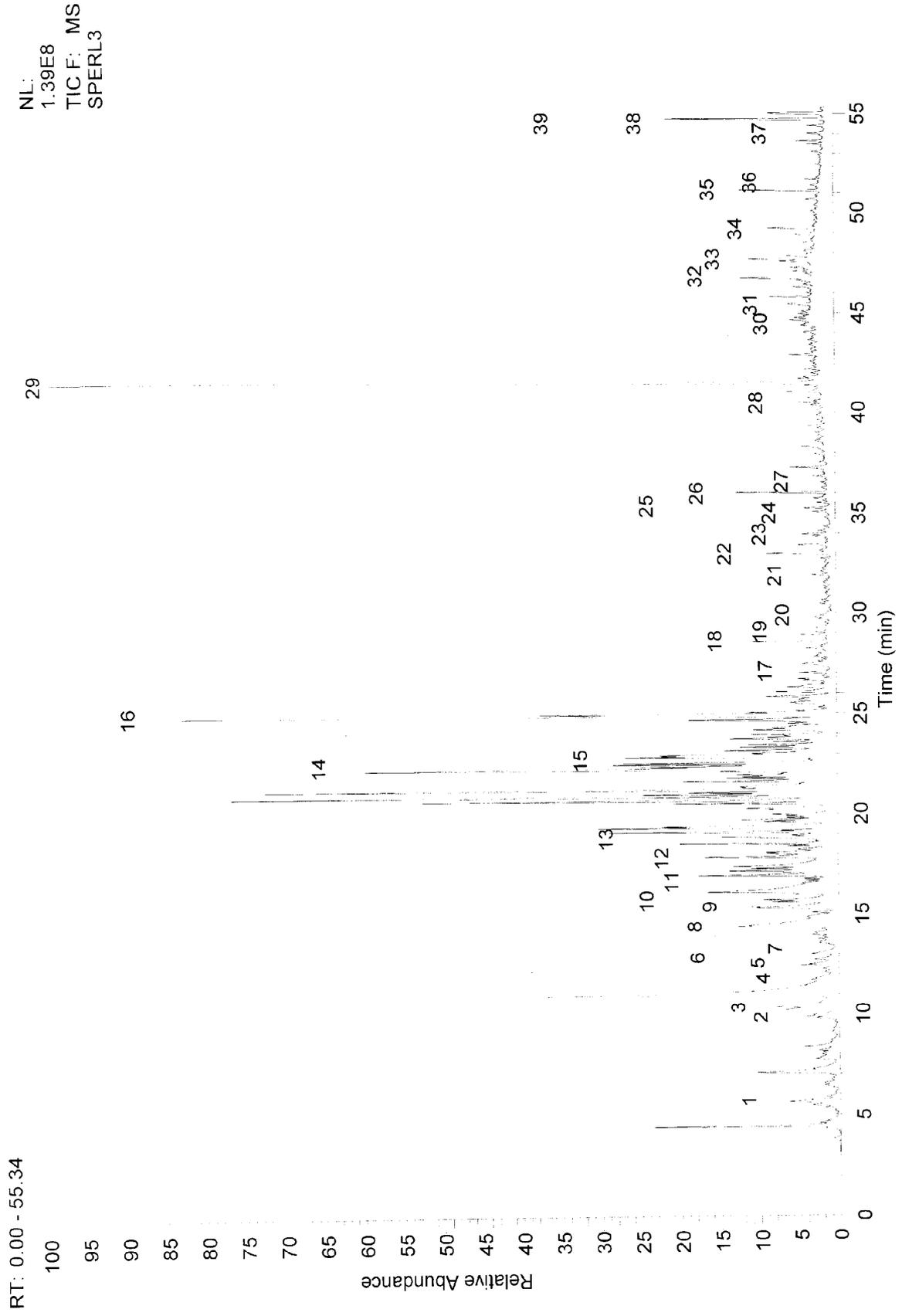


Alle übrigen Substanzen der achtstündigen „Hawelka-Messung“

RT: 0.00 - 55.34



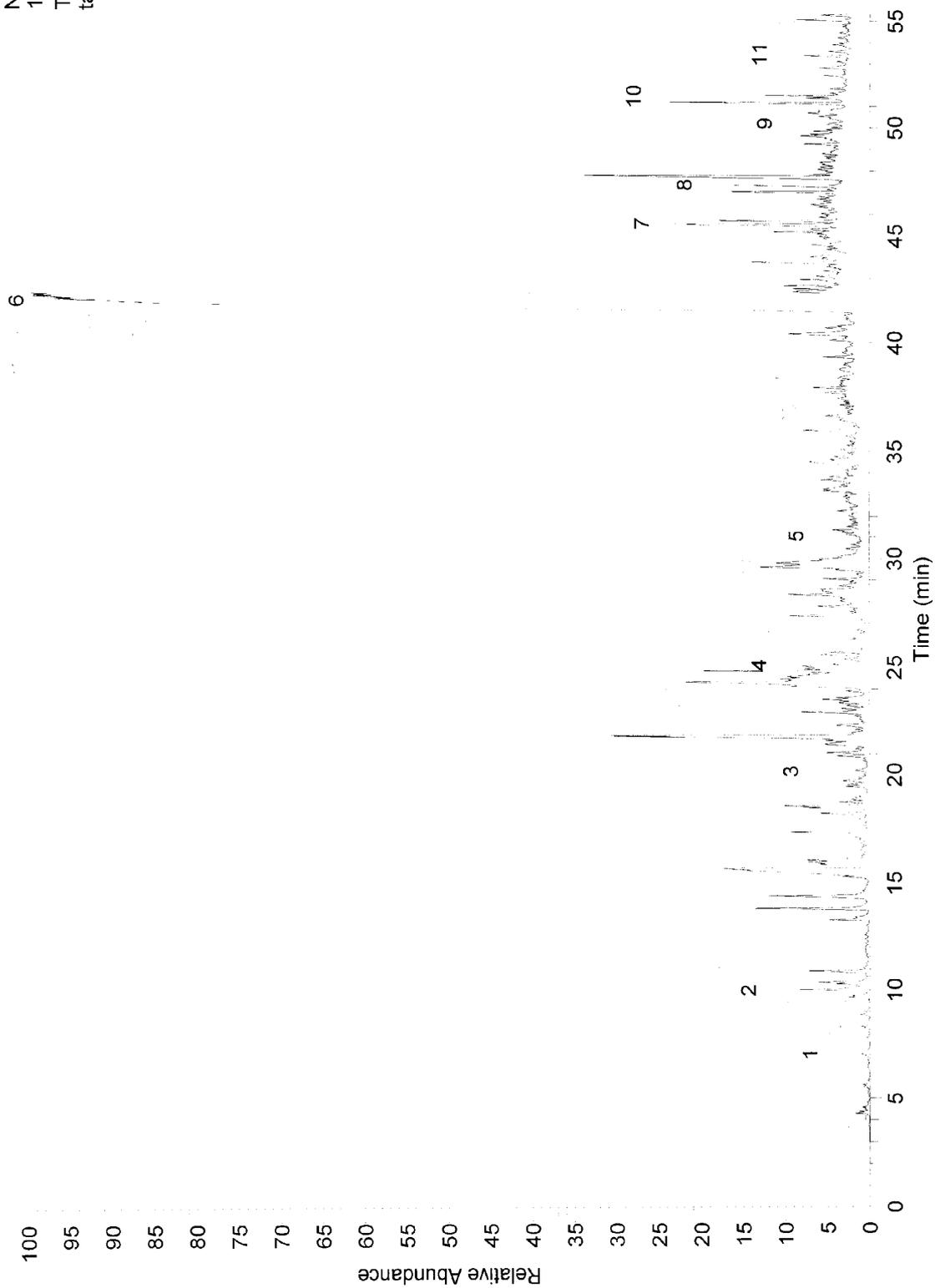
Alle übrigen Substanzen der achtstündigen „Sperl-Messung“



„Tabakrauch“-Messung

RT: 0.00 - 55.34

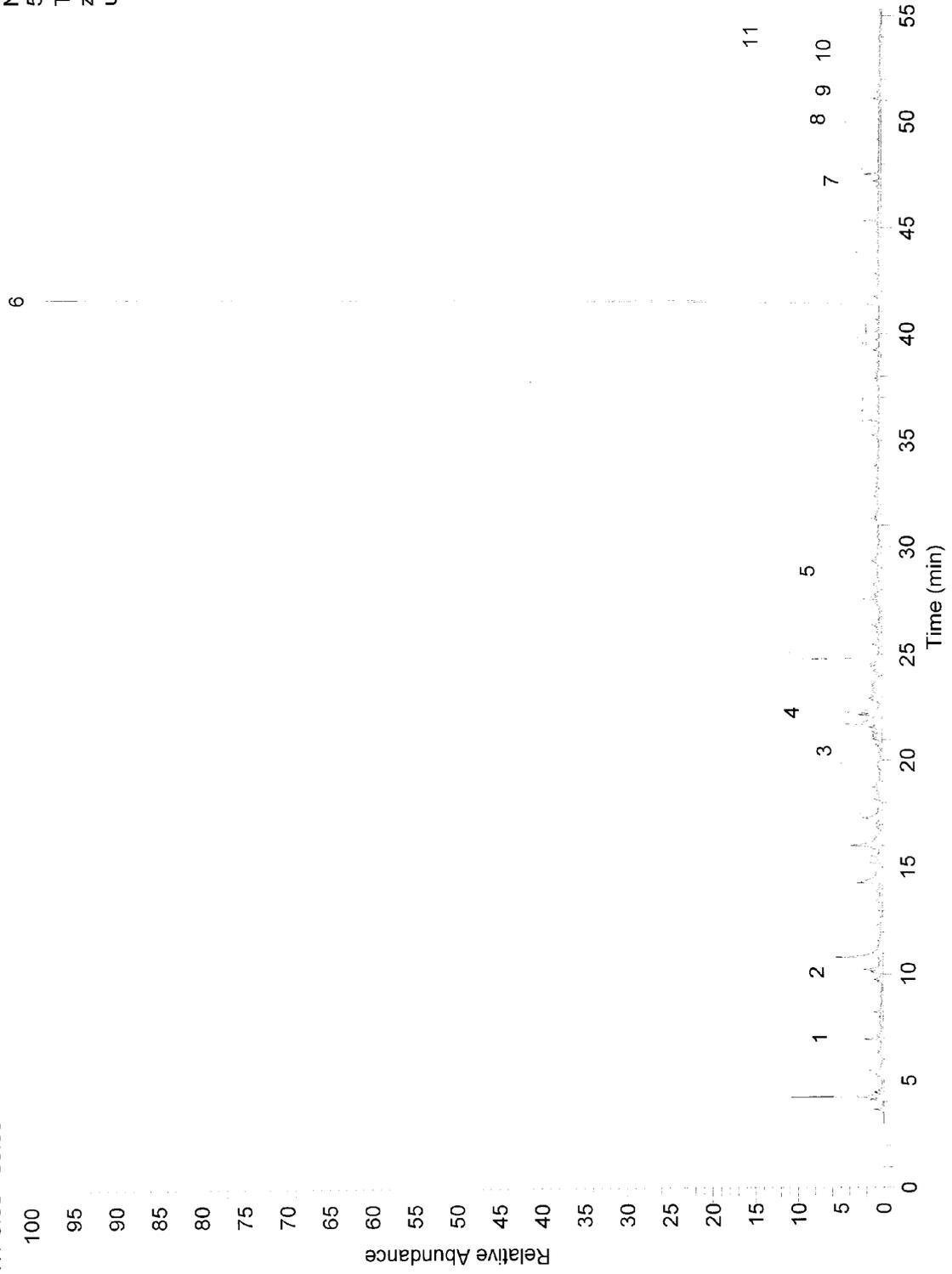
NL:
1.32E9
TIC F: MS
tabakrauch



„Zigarettenrauch“-Messung

RT: 0.00 - 55.35

NL:
5.72E8
TIC F: MS
zigarettenra
uch



Lebenslauf

Name: Marianne Pestitschek
Geboren am: 04. November 1983, Wien
Familienstand: ledig
Wohnhaft in: 2231 Strasshof, Sillerstr. 126; österr. Staatsbürgerschaft

Schulbildung

09/94 – 07/99 Bundesgymnasium Gänserndorf
09/99 – 07/02 Bundesgymnasium Franklinstr. 26
Okt. 2002 Immatrikulation des Diplomstudiums
Ernährungswissenschaften an der Universität Wien

Berufserfahrung und Praktika

07/02 – 08/02 Ferialpraxis bei der Ersten Bank
06/03 – 08/03 Ferialpraxis bei Anker Snack & Coffee,
Gastronomiebetriebs GmbH
06/04 – 08/04 Ferialpraxis bei Anker Snack & Coffee, Gastr.betr.GmbH
09/07 – 10/07 Ferialpraxis bei MA38-Lebensmitteluntersuchungsanstalt
der Stadt Wien
08/07 – 06/08 Mitarbeit am Projekt des WWTF „Haptic and Olfactory
Design“ im Rahmen der Diplomarbeit

Weitere Qualifikationen

Sprachen: Englisch, Französisch
EDV: MS Office 2007 (Excel, Word, Power Point)

Weitere Ausbildung:

Mai 08 Diplom-Ausbildung zur Kaffee-Expertin an der VHS
Hietzing

Wien, am 12. August 2008

.....