

---

## Jahresbericht 1990

### Inhaltsverzeichnis

#### 1. Arbeiten zur Analytik

- 1.1. Zum Geschmack von Fleischbrühe
- 1.2. Aromaextraktverdünnungsanalyse handelsüblicher Fleischaromen
- 1.3. Aromastoffe als Indikatoren des oxidativen Fettverderbs
- 1.4. Quantifizierung von Aromastoffen durch Isotopenverdünnungsanalyse
- 1.5. Untersuchungen über die Reifung von Cheddar
- 1.6. Nährwerttabellen

#### 2. Arbeiten zur Chemie, Biochemie und Mikrobiologie

- 2.1. Primäre Aromastoffe von Dillsamen und Dillkraut (*Anethum graveolens*)
- 2.2. Untersuchungen zur Bildung von Röstaromastoffen in Weißbrotkruste
- 2.3. Primäre Aromastoffe der Weißbrotkrume
- 2.4. Weizen während der Reifung: Analyse der Gliadine und Glutenine mittels RP-HPLC
- 2.5. Trennung und quantitative Bestimmung der HMW-Untereinheiten aus Glutenin verschiedener Weizensorten
- 2.6. Fraktionierung und Charakterisierung von reduzierten Gluteninen der Weizensorte Rektor
- 2.7. Klassifizierung der Proteinkomponenten des Weizenklebers
- 2.8. Information über die Form von Süßrezeptoren durch Computer Modellierung

---

### Zusammenfassungen

#### 1. Arbeiten zur Analytik

##### 1.1. Zum Geschmack von Fleischbrühe

**Ausgangslage:** Eine Reihe von Arbeiten berichten über flüchtige und nichtflüchtige Inhaltsstoffe von Fleischbrühe. Es fehlen aber Informationen über ihren Beitrag zum Gesamtgeschmackseindruck.

**Forschungsziel:** Fleischbrühe sollte auf flüchtige und nichtflüchtige Verbindungen analysiert werden mit dem Ziel, die sensorisch relevanten Geruchs- und Geschmacksstoffe zu ermitteln.

**Ergebnis:** Die flüchtige Fraktion aus Fleischbrühe wurde durch Vakuumdestillation und Extraktion mit Pentan/Diethylether erhalten. Verbindungen mit hohen Aromawerten wurden durch Aromaverdünnungsanalyse detektiert und dann identifiziert. Zur Trennung des nichtflüchtigen Anteils wurde gefriergetrocknete Brühe der Gelchromatographie und der RP-HPLC unterworfen. Die erhaltenen Fraktionen wurden auf Proteine, Peptide, Aminosäuren, Nucleotide und Nucleoside analysiert. Ferner wurden im Lyophilisat die organischen Säuren und die Mineralstoffe bestimmt.

Die Ergebnisse der chemischen und sensorischen Analyse erlaubten eine stufenweise Imitation von Fleischbrühe. Ein System, bestehend aus dem Vakuumdestillat und Gelatine, Asparaginsäure, Glutaminsäure, 5'-AMP, 5'-IMP, Carnosin, Anserin, Carnitin, Milchsäure,

Pyroglutaminsäure, Natrium, Kalium, Calcium, Magnesium, Chlorid und Phosphat, erwies sich bei der sensorischen Prüfung als weitgehend identisch mit Fleischbrühe.

## 1.2. Aromaextraktverdünnungsanalyse handelsüblicher Fleischaromen

**Ausgangslage:** Zur Hebung der sensorischen Eigenschaften von Zubereitungen bei denen Fleischgeschmack erwartet wird, dienen Fleischaromakonzentrate, die z.B. durch Erhitzen von Mischungen bestehend u.a. aus Hydrolysaten pflanzlicher Proteine oder Hefe hergestellt werden.

**Forschungsziel:** Charakterisierung handelsüblicher Fleischaromen mit Hilfe einer Aromaextraktverdünnungsanalyse.

**Ergebnis:** Acht handelsübliche Fleischaromen wurden mit Hilfe einer Aromaextraktverdünnungsanalyse (AEVA) verglichen. Die Anzahl der Geruchsstoffe, die mit einem herausragenden FD-Faktor vorkamen, waren unterschiedlich: 8-33. Einige Geruchsstoffe, die in Aromagrammen von Rind- und Hühnerfleischbrühe hohe FD-Faktoren zeigen, wurden auch in den Aromagrammen der Fleischaromen gefunden, z.B. Bis(2-methyl-3-furyl)disulfid, der typische Aromastoff für die Aromanote nach gekochtem Fleisch. Andere Verbindungen, z.B. 2-Methyl-3-(methylthio)furan, erschienen mit einem hohen FD-Faktor nur in Aromagrammen der Fleischaromen. Die Ergebnisse zeigen, daß eine AEVA zur Charakterisierung handelsüblicher Aromen geeignet ist

## 1.3. Aromastoffe als Indikatoren des oxidativen Fettverderbs

**Ausgangslage:** Durch Autoxidation ungesättigter Acyllipide entstehen Aromastoffe, die in fetthaltigen Lebensmitteln Aromafehler verursachen können.

**Forschungsziel:** Ermittlung flüchtiger Aromastoffe, die aufgrund hoher Aromawerte als Meßgrößen zur Bestimmung des oxidativen Fettverderbs geeignet sind. Für solche Aromastoffe sollen dann Methoden für die quantitative Analyse entwickelt werden.

**Ergebnis:** Für die Bestimmung von Hexanal, (Z)-3-Hexenal, 1-Octen-3-on, (Z)-1,5-Octadien-3-on, 1-Octen-3-hydroperoxid, (E)- und (Z)-2-Nonenal, (E,Z)-2,6-Nonadienal, (E,E)-2,4-Decadienal, trans-4,5-Epoxy-(E)-2-decenal und 3-Methyl-2,4-nonandion wurden Isotopenverdünnungsanalysen ausgearbeitet. Nach Zugabe der entsprechenden deuterierten Standardsubstanzen werden die flüchtigen Verbindungen aus der Ölprobe abdestilliert und nach HPLC-Vortrennung massenchromatographisch bestimmt. Mit diesem Verfahren wurden belichtete und dunkel gelagerte Sojaölproben analysiert. Die Berechnung der Aromawerte auf der Basis von Geschmacksschwellen der Aromastoffe in einem Speiseöl ergab, daß der Aromafehler des Sojaöls, der nach 48 h Lagerung bei Lichteinwirkung auftritt, in erster Linie durch das 3-Methyl-2,4-nonandion verursacht wird.

## 1.4. Quantifizierung von Aromastoffen durch Isotopenverdünnungsanalyse

**Ausgangslage:** Eine Isotopenverdünnungsanalyse ist für die Bestimmung labiler Aromastoffe (ungesättigte Carbonylverbindungen, Thiole, Hydroperoxide) und für Aromastoffe, die sich aus dem Lebensmittel schwer abtrennen lassen, besonders geeignet. Für ihre Durchführung sind die mit einem stabilen Isotop (meist Deuterium) markierten Aromastoffe als interne Standardsubstanzen erforderlich. Die Synthese dieser Verbindungen ist der entscheidende Schritt bei der Entwicklung der Methode.

**Forschungsziel:** Entwicklung von Verfahren für die quantitative Analyse labiler Aromastoffe.

**Ergebnis:** Die Arbeiten wurden fortgesetzt mit der Entwicklung von Isotopenverdünnungsanalysen für beta-Damascenon, 2,5-Dimethyl-4-hydroxy-3(2H)-furanon (DHF; Furaneol) und 4-Methoxy-2,5-dimethyl-3(2H)-furanon (MDF). Bei der Erprobung der Methode für beta-Damascenon wurde u.a. gezeigt, daß von den im Röstkaffee vorkommenden Mengen (293 µg/kg in einem Robustakaffee) etwa 18 % in das Getränk übergehen. Das Bestimmungsverfahren für DHF ist so empfindlich, daß die Verteilung des Aromastoffes innerhalb einer Erdbeerfrucht gemessen werden kann. Eine hohe MDF-Konzentration wurde in einem Erdbeersaft aus dem Handel gefunden, der offensichtlich aus überreifen Früchten hergestellt worden war.

### 1.5. Untersuchungen über die Reifung von Cheddar

**Ausgangslage:** Analytische Methoden, die Aussagen über den Reifezustand von Käsen liefern, ermöglichen nicht nur eine Verfolgung und Kontrolle von Herstellungsprozessen, sondern auch eine Weiterverarbeitung der Käse zum optimalen Zeitpunkt. Als Meßgröße bietet sich der Proteinabbau an, der z.B. über den in Citratpuffer pH 4,6 (Reifungsumfang) oder 12 %iger Trichloressigsäure löslichen Stickstoff (Reifungstiefe) zu erfassen ist. Die Aussagekraft solcher einfacher Methoden ist aber begrenzt, da sie keine Informationen über die vorliegenden Abbauprodukte liefern.

**Forschungsziel:** Am Beispiel von Cheddarkäse sollen die während der Reifung auftretenden Proteinabbauprodukte mit elektrophoretischen und chromatographischen Methoden erfaßt, weitgehend charakterisiert und auf ihre Eignung als spezifische Kenngrößen für den Reifungszustand geprüft werden. Solche Kenngrößen sollen schließlich in Beziehung zu den genannten, über einfache Methoden zu ermittelnden Meßgrößen gesetzt werden.

**Ergebnis:** Durch Extraktion der Käse mit Wasser oder Citratpuffer und anschließende Fällung bei pH 4,6 oder mit TCE bzw. Ethanol ließen sich die Proteine und Peptide in mehrere Fraktionen zerlegen, die durch RP-HPLC und durch elektrophoretische Verfahren weiter aufgetrennt wurden. Es standen Käse deutscher und englischer Herstellung zur Verfügung, die bei 4°C und 10°C gereift waren. Proben wurden zwischen 3 und 36 Wochen entnommen. Der gesamte lösliche Stickstoff, erfaßt nach Kjeldahl und der lösliche freie Aminostickstoff, erfaßt durch Anfärbung mit o-Phthaldialdehyd stiegen praktisch linear mit der Reifungszeit an. Die Erhöhung der Reifungstemperatur von 4°C auf 10°C führte zu einem Anstieg des löslichen Stickstoffs um den Faktor 1,3. Der englische Käse enthielt auf allen Reifungsstufen ca. 20 % weniger löslichen Stickstoff als der deutsche Käse. Die unterschiedlichen mittleren Kettenlängen der Peptide, sowohl in den bei pH 4,6 als auch in den TCE-löslichen Fraktionen lassen auf unterschiedliche Peptidmuster bei den beiden Käsetypen schließen.

Die Trennung der bei pH 4,6 löslichen Stickstoffverbindungen durch RP-HPLC ergab charakteristische Peptidmuster und einen deutlichen Anstieg der Peptide mit zunehmender Reifungszeit. Einige Peptide erreichten ein Plateau, andere durchliefen ein Maximum. Englischer und deutscher Cheddar zeigten deutlich differente Peptidmuster. Eine Unterscheidung zwischen den englischen und deutschen Käsen scheint über einige charakteristische Peptide möglich zu sein. Die Isolierung einer Reihe von markanten Peptiden und ihre Zuordnung zu den Caseinsequenzen ist im Gange.

## 1.6. Nährwerttabellen

**Ausgangslage:** Dem jeweiligen Wissensstand entsprechende Tabellen über die Zusammensetzung von Lebensmitteln sind für Administration, Ernährungsberatung, Wirtschaft und Wissenschaft unentbehrlich.

**Forschungsziel:** Das von SOUCI, FACHMANN und KRAUT begründete Tabellenwert (SFK-Tabelle) ist durch Erfassung der gesamten einschlägigen Literatur und durch eigene analytische Tätigkeit mit Hilfe der Datenbank LINDAS ständig auf dem aktuellen wissenschaftlichen Kenntnisstand zu halten. Das gilt auch für die davon abgeleitete kleine Lebensmitteltabelle.

**Ergebnis:** Die 4. Auflage der großen Tabelle erschien im November 1989. Die Arbeiten an der 5. Auflage sind im Gange und betreffen insbesondere Daten für Ballaststoffe, Fettsäuren, Cholesterin, Tokopherole, Jod, Natrium und Kalium. Das Manuskript für die 2. Auflage der kleinen Tabelle wurde im Mai 1990 abgeschlossen und befindet sich im Druck. Im April 1990 erschien eine italienische Version der kleinen Tabelle.

## 2. Arbeiten zur Chemie, Biochemie und Mikrobiologie

### 2.1. Primäre Aromastoffe von Dillsamen und Dillkraut (*Anethum graveolens*)

**Ausgangslage:** In der Literatur werden Carvon und Limonen sowie (3R,4S,8R)-3,9-Epoxy-1-p-menthen (Dillether), alpha-Phellandren, Myristicin und Limonen als primäre Aromastoffe von Dillsamen und -kraut angegeben.

**Forschungsziel:** Überprüfung dieser Angaben mit Hilfe einer Aromaextraktverdünnungsanalyse.

**Ergebnis:** (+)-S-Carvon wurde als primärer Aromastoff von Dillsamen identifiziert; (+)-(R)-Limonen folgt mit einem 35-mal niedrigeren Aromawert. Dieses Ergebnis entspricht Literaturangaben wonach der Geruch von zerkleinertem Dillsamen stark an Kümmel erinnert. Die Bedeutung von Dillether, (+)-(S)-alpha-Phellandren und Myristicin wurde für das Aroma von Dillkraut bestätigt, nicht aber die von (+)-(R)-Limonen. Zusätzlich wurde 2-Methylbuttersäuremethylester als primärer Aromastoff identifiziert.

### 2.2. Untersuchungen zur Bildung von Röstaromastoffen in Weißbrotkruste

**Ausgangslage:** 2-Acetyl-1-pyrrolin (ACPY) ist der wichtigste Röstaromastoff der Weißbrotkruste. In der Literatur wird berichtet, daß in der Kruste von Broten, die aus Teig ohne Hefezusatz hergestellt worden waren, insbesondere die röstige Note fehlte; andererseits trat bereits beim Erhitzen von Hefezellen in Gegenwart von Glucose ein röstiger Geruch auf.

**Forschungsziel:** Bewertung des Einflusses der Hefe auf den Aromawert des ACPY in der Weißbrotkruste; Identifizierung von Aromastoffvorläufern sowie Klärung von Reaktionswegen, die zur Bildung des ACPY führen.

**Ergebnis:** In einem Extrakt flüchtiger Verbindungen aus der Kruste eines Modellbrottes, das ohne Hefezusatz hergestellt worden war, wurden die Aromastoffe über eine Aromastoffverdünnungsanalyse erkannt und auf der Basis ihrer FD-Faktoren, d.h. ihrer Aromawerte, mit den Krustenaromastoffen eines Brotes aus Hefeteig verglichen. Der herausragendste Unterschied war, daß beim Fehlen von Hefe der Aromawert von ACPY um den Faktor 30 abnahm.

In der Fraktion flüchtiger Verbindungen aus einem erhitzten Bäckerhefe/Saccharose-Homogenat wies das ACPY den höchsten Aromawert auf. Die Hefe kann somit als entscheidende Quelle von Vorläufern des ACPY angesehen werden. Quantitative Untersuchungen an verschiedenen Hefe/Kohlenhydratmodellen ergaben, daß ein Zuckerabbau durch hefeeigene Enzyme vor der Erhitzung die Ausbeute an ACPY steigert, wobei aus Hefehomogenat/Fructose etwa fünfmal mehr ACPY freigesetzt wurde als aus Hefehomogenat/Glucose.

Die verwendete Hefe enthielt 890 mg/kg freies Prolin. Modelluntersuchungen an verschiedenen Mischungen von Prolin und Zuckern bzw. Metaboliten des Kohlenhydratabbaus in Hefe ergaben, daß Prolin und Dihydroxyacetonphosphat wichtige Vorläufer zur Bildung des ACPY beim Backen sind.

In der Fraktion saurer Aromastoffe aus Weißbrotkruste wurden 2-Methyl- und 3-Methylbuttersäure sowie 2,5-Dimethyl-4-hydroxy-(5H)-dihydrofuran-3-on (Furaneol) als wichtigste Aromastoffe identifiziert. Vergleichende Untersuchungen zeigten, daß diese Aromastoffe auch in der Fraktion saurer Verbindungen aus Hefe dominieren. Es ist somit anzunehmen, daß diese Krustenaromastoffe beim Backprozeß direkt aus der Hefe freigesetzt werden.

### 2.3. Primäre Aromastoffe der Weißbrotkrume

**Ausgangslage:** Obwohl bisher eine große Anzahl flüchtiger Verbindungen identifiziert worden sind, blieb unklar, welche davon zum Aroma der Weißbrotkrume einen wesentlichen Beitrag leisten.

**Forschungsziel:** Identifizierung der flüchtigen Aromastoffe, die primär zum Aroma der Weißbrotkrume beitragen; Vergleich mit den Aromastoffen der Weißbrotkruste. Untersuchungen über den Einfluß einer verlängerten Teigfermentation auf das Aroma der Krume.

**Ergebnis:** Durch eine Aromaextraktverdünnungsanalyse wurden Diacetyl, Methional, 1-Octen-3-on, (Z)- und (E)-2-Nonenal, (E,E)-2,4-Decadienal und trans-4,5-Epoxy-(E)-2-decenal als intensivste Geruchsstoffe der Weißbrotkrume ermittelt. In der homologen Reihe der trans-4,5-Epoxy-(E)-2-alkenale C7-C11 hatte das Epoxydecenal die niedrigste Geruchsschwelle (1,5 pg/l, Luft). Bei einer Verlängerung der Fermentation des Teigs veränderte sich das Aroma der Krume durch einen Anstieg der Konzentrationen von 3-Methylbutanol und 2-Phenylethanol. Isotopenverdünnungsanalysen ergaben für die  $\pm$ röstig $\pm$  riechenden Aromastoffe 2-Acetyl-1-pyrrolin und 2-Acetyltetrahydropyridin 30-mal niedrigere Konzentrationen in der Krume als in der Kruste. (E)-2-Nonenal, das schon im Mehl vorkommt, nimmt beim Backen stark zu.

### 2.4. Weizen während der Reifung: Analyse der Gliadine und Glutenine mittels RP-HPLC

**Ausgangslage:** Chemische Zusammensetzung, rheologische Eigenschaften und Backeigenschaften von Weizen sind im Verlauf der Reifung großen Veränderungen unterworfen.

**Forschungsziel:** In Fortführung einer früheren Arbeit über chemische Veränderungen an der Weizensorte Schirokko während der Reifung sollten die Gliadine und Glutenine mit Hilfe der RP-HPLC näher untersucht werden.

**Ergebnis:** Für die Gliadinfraktion konnte gezeigt werden, daß im Reifungsverlauf die  $\alpha$ -Gliadine zuerst und die  $\gamma$ -Gliadine zuletzt auftreten. Zur Entwicklung des  $\pm$ reifen $\pm$ , stark differenzierten

$\alpha$ -Gliadinmusters wird ein relativ langer Zeitraum von ca. vier Wochen nach der Blüte benötigt. Die Chromatogramme der Gluteninfraktion zeigen bei den HMW-Untereinheiten nur qualitative Unterschiede, während bei den LMW-Untereinheiten eine stärkere Differenzierung im Laufe der Reifung zu beobachten ist. Der Anteil der HMW-Untereinheiten am Gesamtglutenin nimmt von ca. 15 % auf ca. 30 % zu und der der LMW-Untereinheiten von ca. 75 % auf ca. 60 % ab. Die MMW-Fraktion bleibt mit ca. 10 % relativ konstant. Innerhalb der HMW-Fraktion kommt es infolge unterschiedlicher Zunahme der einzelnen Komponenten zu stärkeren Verschiebungen. Während in frühen Reifungsstadien die HMW-Untereinheiten 3 und 10 deutlich stärker vertreten sind als die Untereinheiten 5, 1 und 9 [Bezeichnung nach Moonen], dominiert in reifem Schirokko die Untereinheit 5, gefolgt von den Komponenten 3 und 10, während die Untereinheiten 1 und 9 in deutlich geringerer Menge vertreten sind.

## 2.5. Trennung und quantitative Bestimmung der HMW-Untereinheiten aus Glutenin verschiedener Weizensorten

**Ausgangslage:** Aus der Literatur ist für eine größere Zahl von Weizensorten bekannt, daß die durch SDS-PAGE erhaltenen Muster der HMW-Untereinheiten von Glutenin qualitativ mit den technologischen Eigenschaften korreliert sind. In früheren Untersuchungen erfolgte die Trennung von Gesamtglutenin durch RP-HPLC mit einem harnstoffhaltigen Gradienten. Die HMW-Untereinheiten wurden in drei Fraktionen x-z aufgelöst, deren Verhältnis mit der Backqualität korreliert war.

**Forschungsziel:** Da die Auflösung des genannten Trennsystems für eine quantitative Bewertung einzelner HMW-Untereinheiten nicht ausreichte, war ein besseres System zu entwickeln.

**Ergebnis:** Die RP-HPLC mit einem harnstoffhaltigen System und einem extrem flachen Gradienten führte zu sehr guten Trennergebnissen und erlaubte eine befriedigende quantitative Auswertung der Chromatogramme. 24 Weizensorten mit unterschiedlichen technologischen Eigenschaften wurden mit dieser Methode quantitativ auf HMW-Untereinheiten von Glutenin analysiert. Die erhaltenen Werte wurden mit physikalischen Parametern zur Kennzeichnung von Mehlen und Teigen, wie SDS-Sedimentationsvolumen und Dehnwiderstand korreliert. Die Ergebnisse lassen erkennen, daß Art und Menge der anwesenden HMW-Untereinheiten die technologischen Eigenschaften beeinflussen.

## 2.6. Fraktionierung und Charakterisierung von reduzierten Gluteninen der Weizensorte Rektor

**Ausgangslage:** Es ist bekannt, daß die Glutenine für die funktionellen Eigenschaften von Weizensorten besondere Bedeutung haben. Wegen der Komplexität und der schlechten Löslichkeit dieser Proteinfraction, ist eine Trennung in die Komponenten schwierig.

**Forschungsziel:** Aus einer Weizensorte mit guten Backeigenschaften (Rektor) sollten die monomeren Glutenine durch Kombination geeigneter Verfahren isoliert, weitgehend getrennt und charakterisiert werden.

**Ergebnis:** Weizenmehl der Sorte Rektor wurde entfettet und stufenweise mit gepufferter 0,4 mol/l NaCl-Lösung und 70 %-igem (v/v) wässrigem Ethanol extrahiert. Der gluteninhaltige Rückstand wurde dann mit gepuffertem wässrigem Ethanol/DTE bei pH 7,5 und 4°C extrahiert. Der Extrakt (E1) wurde durch präparative RP-HPLC an C18-Silicagel in 25 Komponenten aufgetrennt, die anhand der Aminosäurezusammensetzung und der Retentionszeit fünf Gruppen zugeordnet wurden. Bei den Gruppen 1-3 (Peaks 2-4 und 5-7) mit Glx, Pro und Phe handelte es sich um  $\omega$ 5- und  $\omega$ 1,2-Gliadine. Die dominierende Gruppe 3 (Peaks 8-17) enthielt die

niedermolekularen (LMW) Untereinheiten von Glutenin, die in ihrer Aminosäurezusammensetzung den  $\alpha$ - und  $\gamma$ -Gliadinen ähnlich sind, aber mehr Ser und weniger Asx und Ala enthalten. Die letzten beiden kleinen Gruppen (Peaks 20, 21 und 22-256) erwiesen sich als  $\gamma$ -Gliadine oder nah verwandte Proteine. Die N-terminalen Sequenzen von vier Hauptkomponenten der LMW-Untereinheiten waren identisch und kommen nicht in anderen Gluteninen vor.

Aus dem Rückstand von Extrakt E1 wurden durch extrahieren mit 70 %-igem wässrigen Ethanol/DTE bei pH 3,5 und 60°C die vier hochmolekularen (HMW) Untereinheiten von Glutenin isoliert (E4), durch RP-HPLC getrennt und charakterisiert. Die Untereinheiten hatten durchweg eine sehr ähnliche Aminosäurezusammensetzung und zeichneten sich von allen Kleberproteinen durch die höchsten Werte für Gly (18,2-19,8 mol-%), Typ (5,1-6,3 mol-%) und Thr (3,2-3,8 mol-%) aus.

Neuen Edmanzyklen ergaben identische N-Termini, mit Ausnahme von Position 6, die durch Glu, Gly oder Arg besetzt war. Die Ergebnisse stimmen mit Literaturdaten für HMW-Untereinheiten anderer Weizensorten überein.

## 2.7. Klassifizierung der Proteinkomponenten des Weizenklebers

**Ausgangslage und Forschungsziel:** Die wichtigsten Proteinkomponenten des Weizenklebers sind aus der Literatur und aus eigenen Arbeiten bekannt, so daß nun eine Klassifizierung anhand der vorliegenden Daten möglich ist.

**Ergebnis:** Die Kleberproteine des Weizens lassen sich in drei Hauptgruppen einordnen: Eine hochmolekulare Gruppe, die die HMW-Untereinheiten von Glutenin umfaßt, eine Gruppe mittleren Molekulargewichts, die aus den Untergruppen  $\omega$ 5-Gliadine und  $\omega$ 1,2-Gliadine besteht, und eine niedermolekulare Gruppe, die drei Untergruppen ( $\alpha$ -Gliadine,  $\gamma$ -Gliadine, LMW-Untereinheiten von Glutenin) enthält. Die Gruppierung folgt der Klassifizierung von Shewry et al. ( $\pm$ HMW prolamins, S-poor prolamins, S-rich prolamins $\pm$ ), verwendet aber nicht den Begriff  $\pm$ Prolamine $\pm$ , mit dem nach klassischer Osborne-Nomenklatur die ohne Reduktion bei neutralem pH-Wert durch kalte, wässrige Alkohollösungen extrahierbaren Endospermproteinen von Cerealien bezeichnet werden.

Aus allen bisher bekannten Daten kann geschlossen werden, daß die Kleberproteinkomponenten innerhalb einer Gruppe bzw. Untergruppe in der Zusammensetzung nur wenig differieren. Die Unterschiede gehen in fast allen Fällen auf Substitution, Deletion und/oder Insertion einzelner Aminosäuren und/oder Oligopeptide zurück.

## 2.8. Information über die Form von Süßrezeptoren durch Computer Modellierung

**Ausgangslage:** Süßer und bitterer Geschmack werden von vielen sehr verschiedenartigen Verbindungen hervorgerufen. Es ist deshalb interessant, nach strukturellen Gemeinsamkeiten zu suchen und allgemein gültige Modelle für süße und bittere Verbindungen zu entwickeln. Solche Modelle können sowohl für die Entwicklung von Süßstoffen als auch für die Erkennung von Bitterstoffen nützlich sein.

**Forschungsziel:** Aufbauend auf frühere Arbeiten (cf. Bericht 1986, S. 151) sollten mit verbesserten Computerprogrammen die Grundmodelle für süße Verbindungen weiterentwickelt werden.

**Ergebnis:** Zwei Grundmodelle für süße Verbindungen wurden mit Hilfe eines Molekülbauprogramms durch Überlagerung der e/n-Systeme süßer und nicht-süßer Moleküle aus den verschiedensten Strukturklassen entwickelt. Die Modelle basieren auf psychophysikalischen Daten (Geschmacksschwellenwerte) und lassen die erlaubten Dimensionen süßer Moleküle deutlich erkennen. Die Süßstärke einer Verbindung hängt stark von der Lokalisierung hydrophober Gruppen im vorgegebenen Süßraum ab. Die Modelle umfassen Aminosäuren, Oxathiazinondioxide, Benzisothiazolondioxide, Carboxyalkylbenzamide, Naphthoimidazole und verwandte Verbindungen.