

Fatty Acid Esters of the 16-O-Methylcafestol

K. SPEER

Institut für Lebensmittelchemie, Technische Universität Dresden,
MommSENstr. 13, D-01062 Dresden, Germany

SUMMARY

The diterpene 16-OMC occurs in Robusta coffees. There are only small concentrations in free form, the greatest part is esterified with fatty acids – as it is already known for the two other diterpenes kahweol and cafestol occurring in coffee.

Using gel permeation chromatography equipped with a Bio Beads S-X3 column and subsequent chromatography on silica cartridges, it is possible to separate various 16-OMC fatty acid esters from Robusta coffee oil. 12 fatty acid esters were isolated by semipreparative RP-HPLC and identified by solid-probe mass spectrometry.

The 16-OMC esters detected in coffee oil can be won as standard matters by synthesis and separated on a Nucleosil-C₁₈ analytical column. Thus, for the first time, the behaviour of individual esters could be investigated directly. In a coffee roasted at various temperatures it was proved that the proportional ester distribution is not changed by roasting.

ZUSAMMENFASSUNG

Das Diterpen 16-O-Methylcafestol kommt in Robusta-Kaffees vor. Nur geringe Anteile liegen in freier Form vor, der größte Teil ist hingegen – wie schon für die beiden anderen im Kaffee vorkommenden Diterpene Kahweol und Cafestol bekannt ist – mit Fettsäuren verestert.

Durch Gelpermeationschromatographie an Bio Beads S-X3 und anschließender Säulenchromatographie an Kieselgel Einmaltrennsäulen gelingt es, aus Robusta-Kaffeeöl verschiedene Fettsäureester des 16-O-Methylcafestols zu isolieren. Eine Trennung der einzelnen Ester erreicht man mit HPLC an RP-18-Säulen. Durch halbpräparative HPLC konnten 12 Fettsäureester isoliert und ihre Identität über Schabstangen-Massenspektrometrie abgesichert werden.

Durch Synthese lassen sich die im Kaffeeöl nachgewiesenen 16-O-Methylcafestolester als Standardsubstanzen gewinnen. Damit war es möglich, das Verhalten der einzelnen Ester erstmals direkt zu verfolgen. In einem bei unterschiedlichen Temperaturen gerösteten Kaffee konnte nachgewiesen werden, daß die prozentuale Esterverteilung durch die Röstung keine Veränderung erfährt.