

The Free Radical Scavenging Activity of Caffeine in Coffee Exposed To Fenton-Type Oxidation

R. H. STADLER, J. RICHOSZ, L. B. FAY

Nestec Ltd, Nestlé Research Centre, Vers-chez-les-Blanc, P.O. Box 44,
CH-1000 Lausanne 26, Switzerland

SUMMARY

Caffeine subjected to a Fenton-type reaction with Fe^{3+} /EDTA/vitamin C results in the formation of one major product, namely 8-oxocaffeine (1,3,7-trimethyluric acid). This C-8 hydroxylated purine base was detected in roast and grounds and in instant coffee using HPLC with electrochemical detection (ECD) and liquid chromatography-tandem mass spectrometry (LC-MS/MS) techniques. Levels of 8-oxocaffeine in coffee ranged between 4 and 35 ppm. Exposure of coffee brew to oxidation by addition of Fe^{3+} and hydrogen peroxide resulted in a significant increase in the 8-oxocaffeine level (18-fold vs. the control). Results show that the formation of this compound reflects the free radical scavenging activity of caffeine *in situ*, and its formation is dependent on oxygen tension, hydrogen peroxide and transition metal availability.

RÉSUMÉ

La caféine réagissant avec le mélange Fe^{3+} /EDTA/vitamine C selon une réaction de type Fenton conduit majoritairement à la formation de 8-oxocafféine (acide 1,3,7-triméthylurique). Cette purine hydroxylée sur la position 8 a été détectée dans le café moulu rôti et dans le café instantané par HPLC avec détection électrochimique (ECD), et par chromatographie liquide couplée à la spectrométrie de masse en tandem (LC-MS/MS). Les niveaux de 8-oxocafféine dans le café se situent entre 4 et 35 ppm. L'exposition de l'infusion de café à l'oxydation par addition de Fe^{3+} et de peroxyde d'hydrogène conduit à une augmentation significative des niveaux de 8-oxocafféine (18 fois le contrôle). Ces résultats montrent que la formation de ce composé traduit la capacité de la caféine à piéger *in situ* les radicaux libres et que la formation de 8-oxocafféine est dépendante de la disponibilité de l'oxygène, du peroxyde d'hydrogène et des métaux de transition.