

The Detection and Characterization of Free Radicals generated during the Decomposition of Solutions of the Coffee Flavour Compound Furfuryl Mercaptan

E.C. PASCUAL¹, I. BLANK², B. A. GOODMAN¹, C. YERETZIAN²

¹Scottish Crop Research Institute, Invergowrie, Dundee DD2 5DA, Scotland U.K.

²Nestlé Research Center, Vers-chez-les-Blanc, P.O. Box 44,
CH-1000 Lausanne 26, Switzerland

SUMMARY

The generation of free radicals during the decomposition of a coffee model solution containing the flavour compound finfuryl mercaptan (Fur-SH) has been investigated by EPR spectroscopy. By using the chemical spin traps DEPMPO and POBN, adducts of $\cdot\text{OH}$ and $\cdot\text{C}$ -centred radicals could be detected. The $\cdot\text{OH}$ radical was generated by Fenton chemistry, but the origin of the $\cdot\text{C}$ -centred radical was more complex. No $\cdot\text{S}$ -centred radicals were seen in the spin-trapping experiments, despite a strong indication in previous work that they are intermediates in the formation of volatile compounds following the decomposition of Fur-SH. However, short-lived radicals of the type $\text{RSSR}^{\cdot+}$ were detected in model solutions at 77K.

RÉSUMÉ

La formation de radicaux libres a été étudiée par spectroscopie RPE, sur une solution modèle contenant le furfuryl mercaptan (Fur-SH), composé clé de l'arôme de café. En utilisant les "spin trap" DEPMPO et POBN, des produits d'adjonctions du radical $\cdot\text{OH}$ et de radicaux centrés sur le carbone ont été observés. Le radical $\cdot\text{OH}$ a été généré par la réaction Fenton. Par contre l'origine des radicaux centrés sur le carbone est plus complexe. Aucun radical centré sur le soufre n'a été observé. Ceci, malgré une forte présomption de leur présence lors d'une étude précédente. Lors de cette étude, la formation de composés volatiles générés par la décomposition de Fur-SH a été observée, indiquant la présence de radicaux centrés sur le soufre comme intermédiaires. Cependant des radicaux à très courtes durée de vie de type $\text{RSSR}^{\cdot+}$ ont été observés dans des solutions modèles à 77K.