

## Metabolomics

# Umfassender Schutz vor Weinfälschungen?

Weinfälschungen sind so alt wie der Wein selbst. Zu Zeiten der Römer wurden Fälscher in die Zirkusarenen geschickt. Heute sind die Strafen zwar weniger drakonisch, aber nach Meinung vieler werden in Deutschland Verstöße gegen das Weingesetz unverhältnismäßig streng bestraft. In naher Zukunft könnte eine ungeahnte Welle von Verfahren auf Erzeuger, Abfüller und „Inverkehrbringer“ zurollen.

Eine Welle von Verfahren kann in naher Zukunft auf die Weinbranche zurollen, wenn es der Wissenschaft gelingt, gerichtsfest und justiziabel nachzuweisen, aus welcher Region ein Wein stammt und aus welchen Rebsorten er komponiert ist. Das soll nicht heißen, dass es Grund zur Annahme geben würde, hierzulande verkaufte Weine seien in großem Stil gefälscht. Aber die Diskussion um das Thema Verschleppung von Aromastoffen hat der Branche gezeigt, welche Fallstricke die moderne, extrem leistungsfähige Analysetechnik bereithält. Nun ist es sicher keiner der großen Träume der Menschheit, aber ganz bestimmt ein uralter großer Traum der internationalen Weineinkäufer, der Weinkontrolleure und der Gralshüter des redlichen Weinbaus, eine einfache und schnelle Methode zur Bestimmung der Herkunft und der Rebsortenzusammensetzung eines Weins zu besitzen.

Wie es scheint, steht die Wissenschaft jetzt kurz vor dem Durchbruch. Das weltweit mit 6.000 Mitarbeitern an 90 Standorten agierende Messtechnikunternehmen Bruker hat eine Methode entwickelt, mit der ein chemischer Fingerabdruck eines Weins mittels datenbasierter statistischer Verfahren zum Beispiel einer Weinbauregion zugeordnet werden kann. So schreibt die Firma Bruker auf ihrer Website zum Stichwort Wine-Profiling™: „Basierend auf hochauflösender Kernresonanzspektroskopie (NMR) wurde von Bruker BioSpin GmbH mit Hilfe von WineSpin Analytics eine innovative Lösung für die Weinanalytik entwickelt. Das Prinzip der Methode basiert auf der Erfassung eines hochspezifischen NMR-spektroskopischen Fingerabdrucks zu jeder einzelnen Probe. Diese Profile werden mit Hilfe multivariater statistischer Verfahren mit einer umfangreichen Spektrendatenbank aus authentischen Weinen verglichen. Das NMR-Wine-Profiling™ kombiniert Qualitätskontrolle mit dem Test von Sicherheitsaspekten und Authentizität auf eine einzigartige, mit konventioneller Analytik nicht erreichbare Weise.“

Nicht zuletzt erfüllt sich dadurch der große Traum aller Weinanalytiker, denen sich ein neues und vor allem riesiges Geschäftsfeld öffnen wird. Nun ist Bruker aber nicht allein. Auch am Max-Planck-Institut für Molekulare Pflanzenphysiologie in Potsdam wird daran gearbeitet.

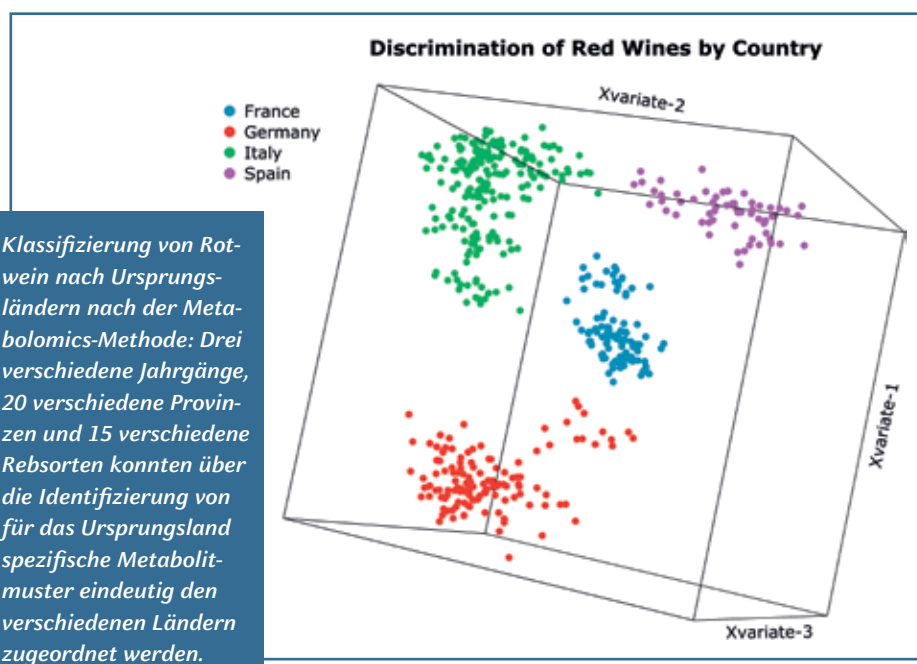
Die Deutsche Landwirtschafts-Gesellschaft, Frankfurt, hat WEIN+MARKT gestattet, einen kürzlich erschienenen Beitrag zu diesem Thema aus erster Hand abzudrucken.

Klaus Herrmann

## Metabolomics – eine breit einsetzbare Methode zur Authentizitätsprüfung am Beispiel von Wein

Der Verbraucher erwartet heute vom Lebensmittelhandel im zunehmenden Maße eine Sicherstellung und Garantie der Authentizität der Ware. Moderne Verfahren, die im Rahmen der funktionellen Genomforschung entwickelt worden und allgemein als „OMICS“ Technologien kategorisiert werden, eröffnen völlig neue und in ihrer Präzision und Robustheit beeindruckende Ansätze. Neben bereits breit eingesetzten DANN-basierten Verfahren (Identifikation des Organismus über seine Erbinformation) erfährt insbesondere der so genannte metabolomische Ansatz, der auf der im akademischen Bereich entwickelten „Metabolomics“-Technologie beruht, zunehmende Aufmerksamkeit.

Mit „Metabolomics“ ist ein Verfahren gekennzeichnet, das das Ziel hat, alle in einer biologischen Probe enthaltenen Inhaltsstoffe (Metabolite) wie z. B. Aminosäuren, Fette, Zucker, Vitamine, Antioxidantien, organische Säuren usw. zu bestimmen und idealerweise zu identifizieren. Konzeptionell ist dieser Ansatz der klassischen chemischen Analyse vergleichbar; der entscheidende Unterschied besteht darin, dass klassische chemische Analysen in der Regel eine kleine Zahl von Inhaltsstoffen bestimmen (zwischen 20 und 150). Metabolomics-Technologien hingegen haben zum Ziel, ein möglichst umfassendes Bild über alle Inhaltsstoffe zu erhalten, und sind bei Massenspektro-



skopie-basierten Verfahren in der Lage, mehrere tausend unterschiedliche Inhaltsstoffe zu detektieren. Es ist offensichtlich, dass diese massiv erhöhte Anzahl an gemessenen metabolischen Parametern in Kombination mit neuen mathematischen Auswertemethoden zu einer deutlich verbesserten Klassifizierung von Lebensmitteln führt.

Im Rahmen von Forschungsarbeiten am Max-Planck-Institut für Molekulare Pflanzenphysiologie, Potsdam, wurde Ende der neunziger Jahre mit der Etablierung der Massenspektroskopie-basierten Metabolomics-Technologie begonnen. [...] Im Ergebnis können mit Hilfe der Metabolomics-Analytik mehrere tausend unterschiedliche Metaboliten (Inhaltsstoffe) mit hoher Präzision und Reproduzierbarkeit vermessen werden. Diese hohe Anzahl von chemischen Parametern einer biologischen Probe oder eines Lebensmittels erlauben eine unübertroffene Präzision und Auflösung in Bezug auf Authentizitätsprüfungen.

Die Firma metaSysX GmbH in Potsdam, eine Ausgründung aus dem Max-Planck-Institut für Molekulare Pflanzenphysiologie, setzt in zunehmendem Maß Metabolomics-Technologien für Authentizitätsprüfungen ein und hat damit bereits beeindruckende Erfolge erzielt. In einem gemeinsam mit der DLG TestService GmbH, Gau-Bickelheim, durchgeführten Projekt wurde die Anwendbarkeit dieser Technologie auf die Authentizitätsprüfung bei Weinen untersucht. Dazu wurden bei der metaSysX 1.400 Weinproben mittels der Metabolomics-Technologie vermessen. Diese 1.400 Weine umfassten ca. 600 Rot-, 600 Weiß- und eine Reihe von Roséweinen. Sie stammten aus 15 unterschiedlichen Ländern aus unterschiedlichen Anbaugebieten, umfassten über 30 verschiedene Sorten und zwischen zwei und drei verschiedene Jahrgänge.

Aufgabe war es, unter Verwendung der Metabolomics-Daten mathematische Modelle zu entwickeln, die es gestatten, das Ursprungsland, das Anbaugebiet, die Sorte sowie den Jahrgang zu identifizieren. Die Vermessung der Weine mittels der Metabolomics-Plattformen führte zur Detektion von mehr als 40.000 Inhaltsstoffen, von denen nach Anwendung verschiedener Filter [...] 5.600 Moleküle für die Entwicklung von Klassifizierungs- und damit Authentifizierungsalgorithmen verwendet wurden.

Zwei mathematisch-statistische Verfahren wurden auf ihre Eignung zur Authentifizierung untersucht. [...]

Die Ergebnisse waren in beiden Fällen von herausragender Qualität. So konnten Ursprungsland, Rebsorte und Anbaugebiet bei Verwendung des „Nearest Prototype Classifiers“ mit einer Präzision von 95%, bei Verwendung des Regressionsansatzes sogar mit einer Genauigkeit von 98 bis 99% (basierend auf fünffacher Kreuzvalidierung) differenziert werden. Dies bedeutet, dass die Fehlerquote beim Regressionsansatz in der Regel nicht höher als bei 1% liegt. [...]

Ein weiterer wichtiger Parameter für die Anwendbarkeit von Analysemethoden ist die erforderliche Analyse- und Auswertzeit. Authentizitätsprüfungen mittels der hier beschriebenen Metabolomics-Methode erfordern z. B. beim Wein reine Analysezeiten von 20 bis 40 Minuten, einschließlich der Datenauswertung sind „Turn-around“-Zeiten innerhalb von maximal 24 Stunden problemlos machbar.

Durch die erzielten Resultate der Machbarkeitsstudie wurde die Anwendbarkeit der Methode über den Wein hinaus gezeigt. Grundsätzlich ist die Methode zur Authentifizierung bei biologischen und nicht-biologischen Produkten einsetzbar, bei denen die Zusammensetzung der Inhaltsstoffe des Produktes durch den Herstellungsprozess in reproduzierbarer und signifikanter Art und Weise beeinflusst sind. [...] Ein mögliches Einsatzgebiet der Metabolomics ist die Diskriminierung von synthetischen und natürlichen Aromastoffen, ein Gebiet mit hoher Brisanz wie die kürzlich geführte Diskussion zum Ursprung von Piperonal bei der Schokoladenherstellung zeigt.

Die einzigartige Stärke der Metabolomics-Ansätze ist die hohe Zahl der für die Authentizitätsprüfung zur Verfügung stehenden Inhaltsstoffdaten einer Probe, in der Regel werden mehrere tausend Inhaltsstoffe gemessen. In Kombination mit neuen Algorithmen und mathematischen Modellierungsverfahren hat dieser Ansatz das Potenzial, die Authentifizierungsgenauigkeit auf eine neue Stufe zu heben.

*Prof. Dr. Lothar Willmitzer,  
Max-Planck-Institut für Molekulare  
Pflanzenphysiologie, Potsdam;  
Dr. Michael Meret,  
metasysX GmbH, Potsdam*

