

Szent István Egyetem

**HPLC ÉS GC-MS MÓDSZEREK FEJLESZTÉSE A
PARADICSOMBAN ÉS A FŰSZERPAPRIKÁBAN
ELŐFORDULÓ KAROTINOIDOK ÉS
AROMAANYAGOK MEGHATÁROZÁSÁRA**

Doktori (PhD) értekezés

Bori Zsuzsanna

Gödöllő

2016

TARTALOMJEGYZÉK:

1. BEVEZETÉS	1
<hr/>	
2. IRODALMI ÁTTEKINTÉS	3
2.1. A PARADICSOMRA ÉS A FŰSZERPAPRIKÁRA JELLEMZŐ AROMAANYAGOK	3
2.1.1. AROMAANYAGOK METABOLIZMUSA PARADICSOMBAN ÉS FŰSZERPAPRIKÁBAN	4
2.1.2. FŰSTÖS AROMÁT OKOZÓ (AROMA)KOMPONENSEK	10
2.1.3. AROMAANYAGOK DETEKTÁLÁSA	11
2.2. KAROTINOIDOK	12
2.2.1. KAROTINOIDOK FELFEDEZÉSÉNEK RÖVID KRÓNIKÁJA	12
2.2.2. KAROTINOIDOK METABOLIZMUSA A NÖVÉNYEKBE	13
2.2.3. A KAROTINOIDOK ANTIOXIDÁNS TULAJDONSÁGAI	15
2.2.3. A KAROTINOIDOK ANTIOXIDÁNS TULAJDONSÁGAI	15
2.2.4. KAROTINOIDOK DETEKTÁLÁSA	18
2.2.5. KAROTINOK ÉS XANTOFILOK	25
2.2.6. A FŰSZERPAPRIKÁRA ÉS A PARADICSOMRA JELLEMZŐ SZÍNANYAGOK	31
2.3. VIZSGÁLATAIMHOZ ALKALMAZOTT ANALITIKAI MÓDSZEREK	32
2.3.1. GC-MS MÓDSZER	32
2.3.2. HPLC MÓDSZER	34
2.3.3. LC-MS MÓDSZER	37
<hr/>	
3. CÉLKITŰZÉSEK	40
<hr/>	
4. ANYAG ÉS MÓDSZER	41
<hr/>	
4.1. AROMAVIZSGÁLAT	41
4.1.1. FELHASZNÁLT FŰSZERPAPRIKA ÉS PARADICSOM MINTÁK	41
4.1.2. AROMAKOMPONENSEK KINYERÉSE	42
4.1.3. AROMAKOMPONENSEK VIZSGÁLATA	43
4.1.4. AROMAKOMPONENSEK AZONOSÍTÁSA	44
4.1.5. ALKALMAZOTT STATISZTIKAI MÓDSZER	44
4.2. KAROTINOID VIZSGÁLAT	45
4.2.1. FELHASZNÁLT PARADICSOM ÉS FŰSZERPAPRIKA MINTÁK KAROTINOID VIZSGÁLATRA	45
4.2.2. SZÍNANYAGOK KINYERÉSE PARADICSOMBÓL	46
4.2.3. SZÍNANYAGOK KINYERÉSE FŰSZERPAPRIKA ÖRLEMÉNYBŐL	47
4.2.4. HPLC MÉRÉS KÖRÜLMÉNYEI	47
4.2.5. LC-MS MÉRÉS KÖRÜLMÉNYEI	48
4.3. FELHASZNÁLT VEGYSZEREK ÉS STANDAROK	49
<hr/>	
5. EREDMÉNYEK	50
<hr/>	
5.1. GC-MS MÓDSZER VALIDÁLÁSA AROMAKOMPONENSEK ELVÁLASZTÁSÁRA ÉS DETEKTÁLÁSÁRA	50
5.1.1. SPECIFIKUSSÁG	50
5.1.2. PONTOSSÁG	51
5.1.3. VISSZANYERÉS	51
5.1.4. A DETEKTÁLÁSI HATÁR (LOD) ÉS A KIMUTATÁSI HATÁR (LOQ)	52
5.1.5. LINEARITÁS	52
5.2. FŰSZERPAPRIKÁK AROMAVIZSGÁLATÁNAK EREDMÉNYEI	53

5.2.1. MAGYAR FŰSZERPAPRIKÁK	55
5.2.2. KÜLFÖLDI EREDETŰ FŰSZERPAPRIKÁK	57
5.2.2.1. Spanyolországból származó fűszerpaprikák	57
5.2.2.2. Argentínából származó fűszerpaprikák	59
5.2.2.3. Dél-Afrikából származó fűszerpaprika	60
5.2.2.4. Kínából származó fűszerpaprika	62
5.2.3. FÜSTÖLT FŰSZERPAPRIKÁK	63
5.3. PARADICSOMOK AROMAVIZSGÁLATÁNAK EREDMÉNYEI	66
5.3.1. FRISS PARADICSOMOK AROMAVIZSÁLATA	66
5.3.1.1. Heirloom fajták aromavizsgálata	66
5.3.1.2. Piros színű paradicsomok aromaösszetételének vizsgálata	68
5.3.2. PARADICSOMKÉSZÍTMÉNYEK AROMAÖSSZETÉTELE	68
5.4. HPLC MÓDSZEREK FEJLESZTÉSE ÉS VALIDÁLÁSA KAROTINOIDOK MEGHATÁROZÁSÁRA	70
5.4.1. C18 KERESZTKÖTÉSŰ OSZLOP VALIDÁLÁSA	70
5.4.1.1. Pontosság	71
5.4.1.2. Visszanyerés	71
5.4.1.3. A lutein és a β -karotin detektálási határa (LOD) és kimutatási határa (LOQ)	71
5.4.1.4. Linearitás	71
5.4.2. A TÖMÖR MAGVÚ C30 OSZLOP VALIDÁLÁSA PARADICSOMBAN LÉVŐ KAROTINOIDOK MEGHATÁROZÁSÁRA	75
5.4.2.1. Pontosság	80
5.4.2.2. Visszanyerés	80
5.4.2.3. Detektálási és kimutatási határ	81
5.4.2.4. Linearitás	82
5.5. PARADICSOMBAN TALÁLHATÓ ISMERT ÉS ISMERETLEN KAROTINOIDOK AZONOSÍTÁSA LC-MS MÓDSZERREL	83
5.5.1. ISMERETLEN KAROTINOIDOK AZONOSÍTÁSA	84
5.5.2. PARADICSOM ÖSSZETÉTELÉNEK VIZSGÁLATA TÖMÖR MAGVÚ C30-AS OSZLOPPAL	87
5.5.3. PARADICSOMTERMÉKEK KAROTINOIDÖSSZETÉTELE	91
5.5.4. KÜLÖNBÖZŐ MAGYAR ÉS KÜLFÖLDI FŰSZERPAPRIKA-ÖRLEMÉNYEK KAROTINOIDÖSSZETÉTELÉNEK VIZSGÁLATA TÖMÖR MAGVÚ C30 OSZLOPPAL	97
5.6. ÚJ TUDOMÁNYOS EREDMÉNYEK	103
6. KÖVETKEZTETÉSEK ÉS JAVASLATOK	105
7. ÖSSZEFOGLALÁS	107
8. SUMMARY	110
IRODALOMJEGYZÉK	113
MELLÉKLETEK:	135
M1: MAGYAR BIO METEORIT FŰSZERPAPRIKA	135
M2: MAGYAR BIO MIHÁLYTELKI FŰSZERPAPRIKA	139
M3: MAGYAR KONVENCIONÁLIS FŰSZERPAPRIKA	142
M4: SPANYOLORSZÁGBÓL SZÁRMAZÓ FŰSZERPAPRIKA	146
M5: ARGENTÍNÁBÓL SZÁRMAZÓ FŰSZERPAPRIKA	149
M6: DÉL-AFRIKÁBÓL SZÁRMAZÓ FŰSZERPAPRIKA	152
M7: KÍNÁBÓL SZÁRMAZÓ FŰSZERPAPRIKA	156
M8: UNO ROSSO ÉS STROMBOLINO FRISS PARADICSOMOK AROMAÖSSZETÉTELE ÉS KROMATOGRAMJA	159

M9: HEIRLOOM YELLOW BRANDIVINE ÉS HEIRLOOM AUNT RUBY'S PARADICSOMOK AROMAÖSSZETÉTELE ÉS KROMATOGRAMJA	163
M10: HEIRLOOM BLACK OF TULA ÉS HEIRLOOM GERMAN JOHNSON AROMAÖSSZETÉTELE ÉS KROMATOGRAMJA	167
M11: VALENCIAI ÉS ANDALÚZ PARADICSOMOK AROMAÖSSZETÉTELE ÉS KROMATOGRAMJA	170
M12: ARANYFÁCÁN ÉS KECSKEMÉTI PARADICSOMPÜRÉ AROMAÖSSZETÉTELE ÉS KROMATOGRAMJA	173
M13: PÁRMAI ÉS TOSZKÁN PARADICSOMPÜRÉ AROMAÖSSZETÉTELE ÉS KROMATOGRAMJA	177
M14: AMIKO (OLASZ) ÉS SZERB PARADICSOM IVÓLÉ AROMAÖSSZETÉTELE ÉS KROMATOGRAMJA	180
M15: OLASZ EGÉSZ KONZERV PARADICSOM AROMAÖSSZETÉTELE ÉS KROMATOGRAMJA	182

1. BEVEZETÉS

A paradicsom és fűszerpaprika a bennük található bioaktív vegyületeknek köszönhetően – mint például az antioxidáns hatású vitaminok (E-vitamin, C-vitamin), karotinoidok, polifenolok – a táplálkozás során számos, a szervezet számára jótékony, egészségmegőrző tulajdonsággal rendelkeznek. Több tanulmányt is készítettek, ahol a zöldségekkel, gyümölcsökkel a szervezetbe bevitt antioxidánsok mennyiségét és bizonyos betegségek kialakulásának gyakoriságát vizsgálták. Kimutatták, hogy azokban az esetekben, ahol a vizsgált személyek több antioxidánst fogyasztottak, kisebb valószínűséggel alakult ki szív- és érrendszeri, szemészeti, emésztőszervi, neurodegeneratív rendellenesség, illetve rákos megbetegedés. Azokban az esetekben, ahol már jelen voltak ezek a betegségek, az antioxidánsok fogyasztása javított a beteg állapotán. A legtöbb antioxidáns hatású karotinoidot a paradicsomban és a paprikában azonosították. Az ilyen alapú termékek fogyasztása után a humán plazmában megnőtt a karotinoidok koncentrációja, ezáltal aktívabban tudták kifejteni kedvező hatásukat a szervezetben. A paprika és a paradicsom vonzó színét a bennük található sárga és piros karotinoidok szabad illetve zsírsavakkal észterezett mono- és diészter formája alakítja ki. Technológiai szempontból a paradicsom és fűszerpaprika, valamint a belőlük készített termékek stabilitására hatással van a szín intenzitása. A szín mellett a paradicsom és fűszerpaprika esetében is fontos az aromaösszetétel, ami változik az érés folyamán, valamint a feldolgozás során.

A magyar fűszerpaprika világszerte ismert jellegzetes aromája és színe miatt, ezért az élelmiszeripar széles körben alkalmazza az országhatáron túl is. Az egyes termékek aromaprofilját több tényező is befolyásolja, mint a növény genetikai tulajdonsága, a környezeti tényezők és a feldolgozás technológiája. Az utóbbi években számos uniós országban növekedett meg a füstölt fűszerpaprikák fogyasztása mind a háztartásokban, mind különböző technológiákban, például a húsiparban kolbászok gyártásánál. A füstölés hatására a fűszerpaprikák aromaprofilja teljes mértékben megváltozik, új vegyületek jelennek meg, valamint technológiától függően kis vagy nagy mértékben befolyásolják az eredeti fűszerpaprika aromáját.

Ahhoz, hogy tanulmányozni tudjuk a paradicsomok és a fűszerpaprikák kémiai összetételét, számos analitikai módszert fejlesztettek ki, többek között HPLC módszereket. A legtöbb alkalmazott HPLC módszer során a karotinoidok szétválasztása fordított fázison történik gradiens vagy izokratikus elúcióval. A minták kinyerése és a komponések

elválasztásának módja két nagyobb csoportba sorolható. Az egyik típusba a fűszerpaprikák színanyagának lúgos hidrolízissel való kivonása, majd fordított fázison gradiens elúcióval a hidrolizált zsírsavészterek elválasztása (Almela et al., 1991). A másik elterjedt módszer során a hidrolizálatlan extraktumot frakcionálják, és fordított fázison elválasztják szintén gradiens elúcióval (Mínguez-Mosquera és Hornero-Méndez, 1994). A legeredményesebb és legelterjedtebb állófázisok a monomer C8 és a C18 álló fázisok, amelyeknek azonban főként a *cisz* és *transz* izomerek elválasztása esetében gyenge a felbontása. Az izomerek elválasztása érdekében egyre elterjedtebben alkalmazzák a C30-as kromatográfiás oszlopokat, főként a paradicsomban található *cisz* és *transz* izomerek elválasztására. A C30-as oszlopok esetében az ár és az elválasztás hatékonysága egyensúlyban vannak. A C18-as oszlopokkal szemben a C30-as hatékonyabban választja el a karotinokat és xantofillokat szinte bármilyen élelmiszeripari mintából, ám hátrány a C30-as oszlop alkalmazása esetén az elválasztás hosszabb ideje.

Az új kihívások a kromatográfiában a nagyfokú specifikusság, az oszlop fizikai tulajdonságaiból adódó szelektivitás és hatékonyság kihasználása az egyszerű és megfelelő elválasztások érdekében. Emiatt az elmúlt években a legnagyobb figyelmet a térhálós szerkezetű C18-as és a tömör maggal rendelkező C30-as oszlopok kapták.

A világban több helyen termesztenek fűszerpaprikát, például Kínában, Marokkóban, Dél-Afrikában, Spanyolországban, a latin-amerikai országok közül Argentínában, Peruban, Mexikóban, Brazíliában. Ezek az országok többnyire importálják is a termékeiket, így egyre elterjedtebb a különböző termesztési helyről származó fűszerpaprikák keverése. Emiatt vált fontossá egy megbízható analitikai módszer kidolgozása a különböző keverékek vizsgálatára, azok összetételének, eredetének meghatározására.

2. IRODALMI ÁTTEKINTÉS

2.1. A paradicsomra és a fűszerpaprikára jellemző aromaanyagok

Az 1950-es évek óta több mint 11000 illékony vegyületet azonosítottak különböző növényekből (Martínez-Mayorga és Franco, 2014). Napjainkra az élelmiszeripar a növényekből kivont aroma komponenseket mint természetes és funkcionális élelmiszer-összetevőket alkalmazza. Az élelmiszeripar célja ezekkel az összetevőkkel, hogy fokozzák az élelmiszerek egészségre gyakorolt pozitív élettani hatását természetes eredetű alkotókkal (Lopez et al., 2013; Younesi és Ayseli, 2015). A legújabb tanulmányok egyértelműen igazolják, hogy a növényi eredetű aromakomponensek javíthatják az élelmiszerek eltarthatóságát (Ayala-Zavala et al., 2009) és számos egészségügyi előnnyel rendelkeznek (Keiler et al., 2013). Számos illékony aromaanyagot rovarölő és gombaölő szerekhez adagolnak a hatékonyabb védelem érdekében (Boulogne et al., 2012; Hubert et al., 2008; Schwab et al., 2008).

Felvetődik a kérdés, hogy ez a mintegy 11000 illékony molekula milyen funkciót tölt be a növényekben, mivel a bennük található illékony vegyületek csupán 5%-10% -a határozza meg azok jellegzetes illatát, aromáját (Mestdagh et al., 2014; Selli et al., 2014). A kávéban például több, mint 1000 illékony vegyületet azonosítottak 1950 óta, de csak mintegy 25-35 komponens minősül kulcsfontosságúnak a jellegzetes kávéíz kialakulásáért (Mestdagh et al., 2014). Hasonlóképpen több, mint 350 aromavegyületet azonosítottak a paradicsomban, de csupán néhány befolyásolja az érzékszervi tulajdonságokat (Davidovics-Rikanati et al., 2007; Selli et al., 2014; Petró-Turza, 1986).

Számos vizsgálat azt mutatja hogy a növények számára az illékony vegyületeknek fontos szerepe van a védekezésben, akár mikroorganizmusokkal szemben egy sérült területen (Ayala-Zavala et al., 2009). Azonban az antimikrobiális hatás kifejtéséhez nem elég egyetlen vegyület, így több vegyület szinergens hatása adja a megfelelő védelmet a növény számára (Keiler et al., 2013). Ezeket a természet által megalkotott kombinációkat használja fel az élelmiszeripar a mikroorganizmusokkal szembeni védekezésre félkész és minimálisan feldolgozott zöldségek és gyümölcsök esetében. Ez az antimikrobiális hatás főként a fenolos vegyületekre, a terpénekre és az alkaloidokra igaz (Boulogne et al., 2012; Özçelik et al., 2011).

Az aromaaktív komponenseket öt nagy csoportba sorolják, mint a földes/avas, gyümölcsös/virágos, zöld/füves, édes/cukros és állott/kénes kategóriák. A friss

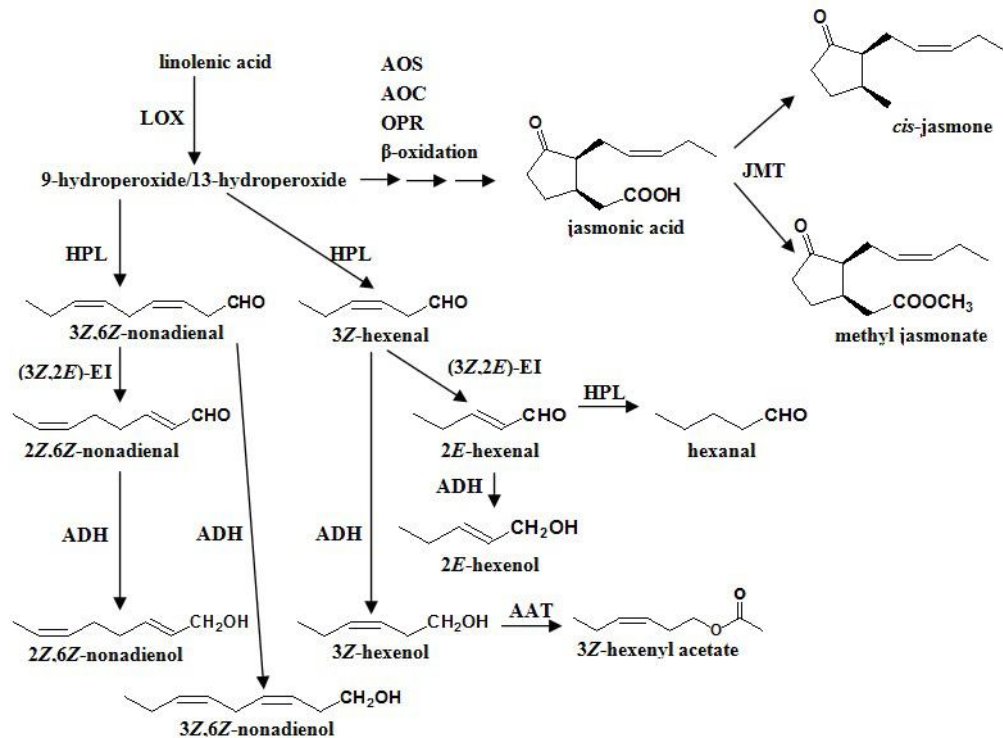
paradicsomban és a fűszerpaprikában a legtöbb aromakomponens a földes/avas jellegeű 1-oktén-3-on, 1-oktén-3-ol, metil-szalicilát, 2-izobutiltiazol, dekanal, 2-heptenal, benzaldehid, pentanal és az 1-nonanol. A második csoport, a gyümölcsös/virágos illatkomponensek az 5-etil-2,5-furanon, linalool, fenilacetaldehid, β -damaszkon, 2-feniletanol. A zöldes/füves jellegű illatkomponensek adják a paradicsom „friss” jellegét, mint a 2-oktenal, 3-hexenal, hexanal, 2,6-nonadiénal, 2-penténal, 2-hexénal, oktanal és a 2,4-dekadiénal. Az édes/cukros jellegű aromakomponensek korrelálnak a termés cukortartalmával. A cukros érzetet a citrál, 6-metil-5-heptén-2-on, geranilaceton és a furfural adja. Az utolsó kategóriába tartoznak az állott/kénes illatot okozó 3-butánsav, hexánsav, 1-pentén-3-on és a 3-metilbutanal. A paradicsom termésekben és a fűszerpaprikában ezeknek a komponenseknek a megfelelő mennyisége egymáshoz viszonyított aránya okozza a jellegzetes aromát, illatot (Kocsis et al., 2002; Csóka et al., 2013; Petró-Turza 1986).

2.1.1. Aromaanyagok metabolizmusa paradicsomban és fűszerpaprikában

A növényekben előforduló fontosabb aromavegyületek közé tartoznak a mono- és szeszkviterpének, a fenolszármazékok, a zsírsav eredetű vegyületek valamint az aminosav, karotinoid származékok, észterek, alkoholok, aldehidek, ketonok, laktonok, kén tartalmú molekulák, savak (Schwab et al., 2008; Song és Forney 2008; Goff és Klee 2006).

Az illékony aromakomponensek fő prekursorainak egyik csoportját a zsírsavak alkotják. A zsírsavakból származó egyenes láncú alkoholok, aldehidek, ketonok, karbonsavak, észterek, laktonok C_1 - C_{20} szénatomszámú formában fordulhatnak elő, meghatározva a friss gyümölcsök és zöldségek illatkarakterisztikáját. Ezek a molekulák háromféleképpen keletkezhetnek a zsírsavakból: α -oxidáció, β -oxidáció és lipoxigenáz által (Schwab és Schreier, 2002). Ép, sértetlen növények esetében a β -oxidáció a jellemző, míg ha megbomlik a szövet szerkezete, lipoxigenáz enzim keletkezik, ami bontja a zsírsavakat (Schreier 1984). Újabb kutatások azonban kimutatták hogy a növény érése során a sejtmembrán áteresztőképessége megváltozik, és a lipoxigenáz enzimet átengedi a még érintetlen, ép szövetek közé, ezzel alternatív lehetőség nyílik a zsírsavak lebontására a β -oxidációs út mellett (Guadagni et al., 1971). A linolsav és a linolénsav oxidatív bomlása által több alifás észter, alkohol, sav és oxovegyület származtatható. A hexanal és a 2,4-dekadiénal a linolénsav elsődleges oxidációs termékeiként származtathatók, míg a linolsav oxidációjából a 2,4-heptadién alakul ki nagy mennyiségben (Chan 1987). Lipoxigenáz

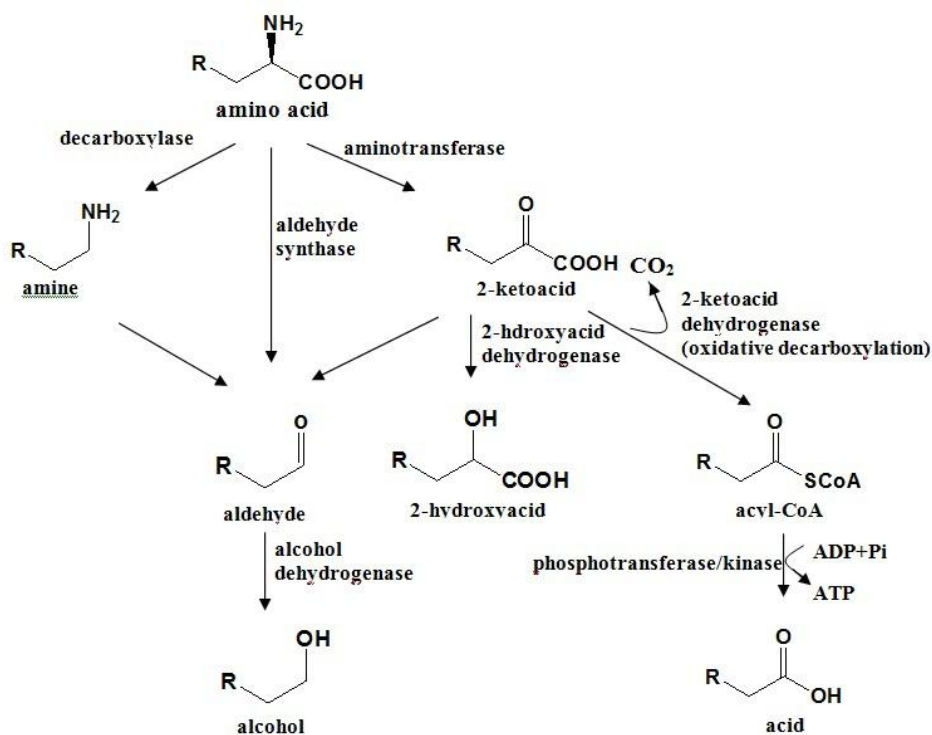
enzim hatására ezekből a zsírsavakból viszont *transz*-2-hexénal, *cisz*-3-hexénol illetve metil-jazmonát keletkezik nagy mennyiségben (1. ábra) (Reineccius 2006).



1. ábra:

A linolénsav bomlástermékei mint aromakomponensek

Az aminosavaknak, mint például az alanin, valin, leucin, izoleucin, fenil-alanin és aszparaginsav, szintén kiemelkedő jelentőségük van az aromaanyagok bioszintézisében. Mint közvetlen prekursorok vesznek részt alkoholok, savak és észterek kialakulásában (2. ábra) (Ibdah et al., 2006).



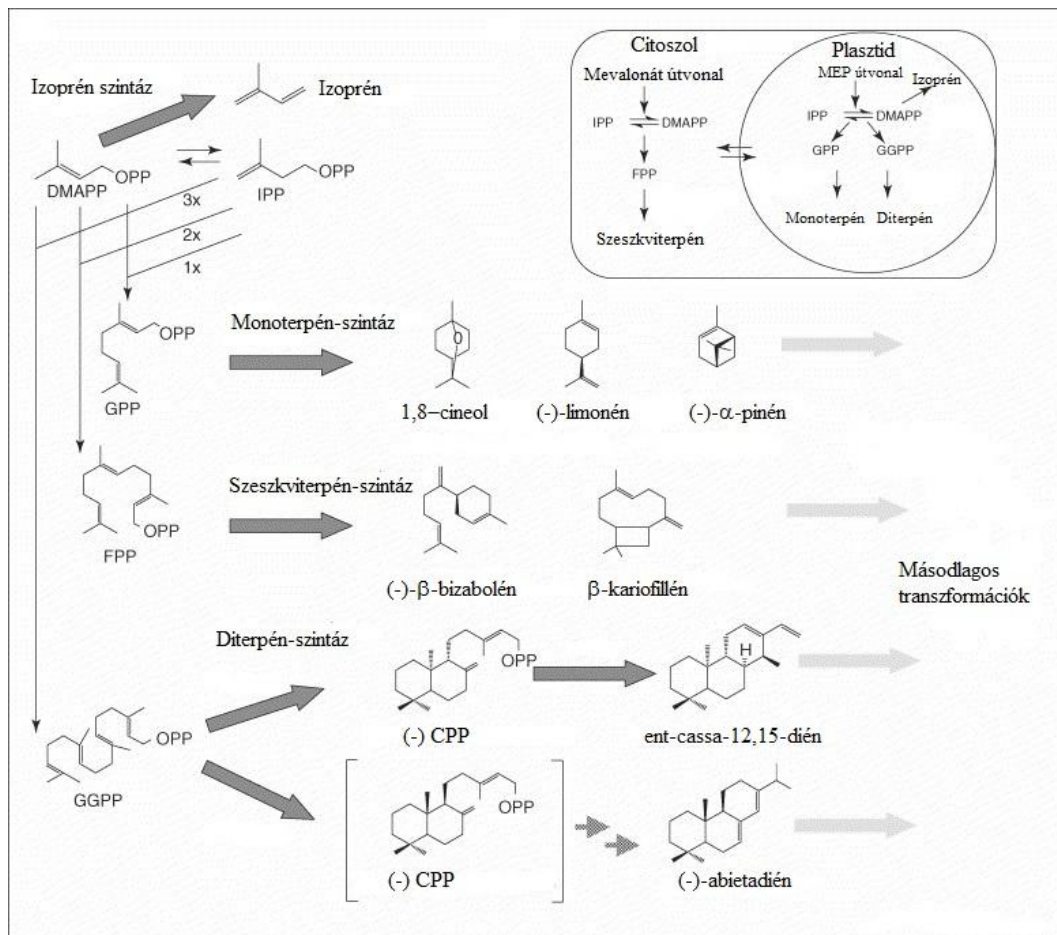
2. ábra:

Az aminosavak bomlástermékei mint aromakomponensek

A valinból, leucinból és izoleucinból elágazó szénláncú alkoholok, aldehidek és észterek keletkeznek, a metionin prekuzora lehet a különböző kéntartalmú vegyületeknek mint a dimetil-diszulfid és az illékony tioészterek.

A terpének természetes, növényi eredetű másodlagos anyagcseretermékek. Elnevezésük a fenyőből kinyert terpentinolajból származik. A növényekben a terpének biológiai szerepe lehet funkcionális (retinol, tokoferol), biológiai védekezés (gyanták) és kommunikáció (hormonok, feromonok). Kiválasztásuk raktározásuk általában különleges, speciális képződményekben történik. Az illóolajok, balzsamok, gyanták tárolása a növényben idioblasztokban, mirigyszőrőkben, váladéktartó sejtekben, járatokban a jellemző (Pichersky és Gershenzon, 2002; Lorento et al., 2004; Sharkey és Yeh 2004).

A több mint 20 000 ismert terpénmolekula formálisan az öt szénatomos izoprén (C₅) egységekből keletkezik. A terpén-bioszintézis prekuzorai a biológiai izoprének: az izopentenil-pirofoszfát (IPP) és izomerje a dimetil-allil-pirofoszfát (DMAPP). Bioszintézisüknek két lehetséges útja van: a citoszolban a mevalonát útvonal és a plasztidban a dezoxi-xilulózból keletkező metileritritol úton keresztül (3. ábra).



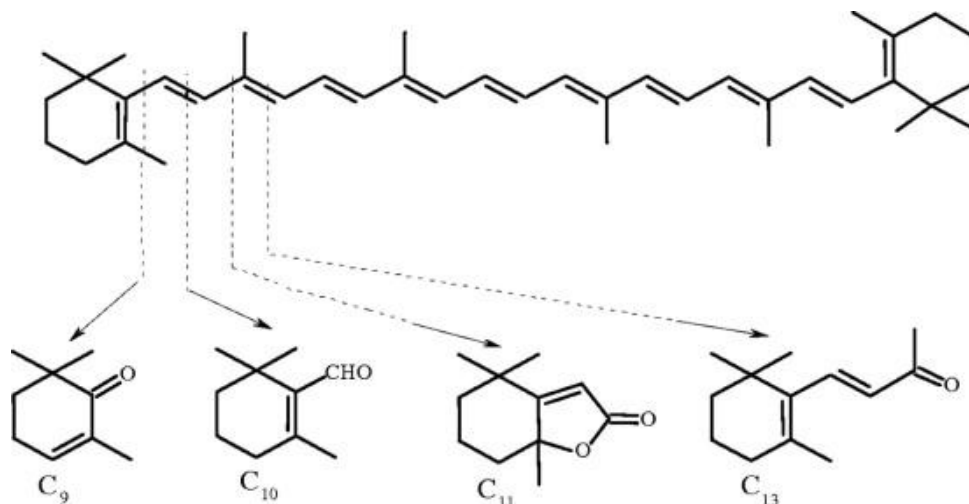
3. ábra:

A terpének bioszintézise

A terpének kialakulásához prenil-transzferáz termelődik, így kialakulnak a lineáris prenil-difoszfátok: geranyl- difoszfát (GPP, C₁₀), farnezil-difoszfát (FPP, C₁₅) és geranylgeranyl difoszfát (GGPP, C₂₀). A továbbiakban ezekből a molekulákból terpén szintetáz (TPS) enzimek katalizálják a hemiterpének (C₅), monoterpének (C₁₀), szeszkviterpének (C₁₅), diterpének (C₂₀), szeszterterpén (C₂₅), triterpén (C₃₀), szteroidok (C₁₈₋₃₀) vagy tetraterpének (C₄₀) kialakulását, ezáltal kialakítva a legnagyobb mennyiségben előforduló, különböző szerkezetű metabolitokat a növényekben. Az evolúció során ezek az enzimek alakították ki a védekező mechanizmust a növényekben a különböző stressz-faktorokkal szemben (Wu et al., 2005; Davis és Croteau 2000).

A karotinoidok konjugált kettős kötésű rendszerüknek köszönhetően igen instabil vegyületek, ezért a növényekben lejátszódó kémiai, fizikai és enzimatis hatások révén ezek a molekulák könnyen bomlanak. Az így keletkező molekuláknak jelentős szerepük

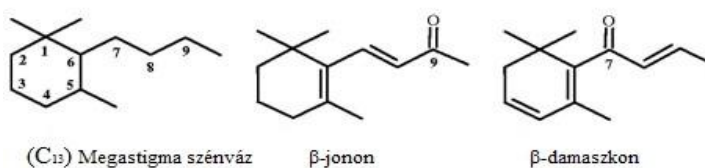
van az íz és az illat kialakításában. Ezek a karotinoid bomlástermékek 13, 11, 10 vagy 9 szénatomot tartalmaznak (4. ábra) (Winterhalter és Rouseff., 2002; Wahlberg et al., 1998; Baumes et al., 2002; Kanasawud és Crouzet, 1990).



4. ábra:

Norizoprenoidok bioszintézise

A C_{13} -as norizoprenoidok közül egyik legerősebb illata a β -jononnak és a β -damaszkonnak van, az illatküszöbük 0,007 ppb, illetve 0,002 ppb. Mindkét molekula alapját a megastigma szénváz adja, csupán a ketocsoport helyzetében különböznek. A β -jonon esetében a ketocsoport a 9. szénatomon található, míg a β -damaszkon esetében a 7. szénatomon (5. ábra).



5. ábra:

Jelentősebb norizoprenoidok (β -jonon, β -damaszkon)

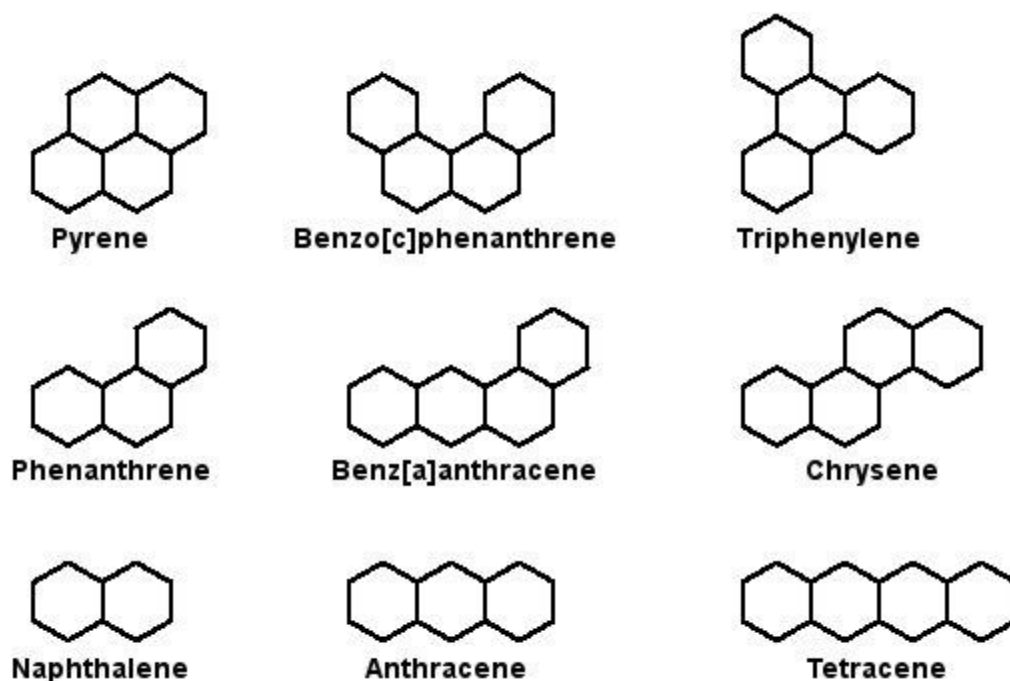
A norizoprenoidok háromféle módon keletkezhetnek a növényekben. Az aromaanyagok kialakulásának szempontjából a dioxigenázok hasítása révén keletkező molekuláknak van jelentőségük, mint például a neoxantinből keletkező β -damaszkon. A

további enzimreakcióknak, valamint a savas hidrolízis által keletkező intermediereknek nincs hatása az aroma kialakulására (Winterhalter és Rouseff., 2002).

A növényekben kialakuló aromakomponenseket a genetikai tulajdonságok mellett befolyásolják a különböző környezeti tényezők, mint az éghajlat, talaj, termesztési körülmények. Így az idők során az egyes tájegységekre jellegzetes aromakomponensek alakultak ki a növényekben. Ezeknek a jellegzetes komponenseknek meghatározásával lehetőség nyílt azonosítani a különböző eredetű termékeket.

2.1.2. Füstös aromát okozó (aroma)komponensek

A policiklusos aromás szénhidrogének (PAH) két vagy több kondenzált aromás gyűrűből állnak. Általában tökéletlen égések során égéstermékekben jelennek meg a PAH molekulák keverékei (Agerstad és Skog, 2005). Nagyon sokfélék lehetnek, számuk a 100-at is meghaladja. A molekulák karcinogenitása a molekulákban található gyűrűk számától függ. Az ötnél kevesebb gyűrűt tartalmazó molekulák mint például a benz[*a*]antracén és krizén, gyengén karcinogén vegyületek. Azok a PAH molekulák melyek öt vagy több gyűrűt tartalmaznak, mint például a dibenz[*a,h*]antracén, benzo[*a*]pirén, indeno[1,2,3-*c,d*]pirén, benzo[*b,k*]fluorantén és benzo[*g,h,i*]perilén potenciálisan genotoxikus rákkeltő hatásúak az emberi szervezetre (European Commission Scientific Committee on Foods, 2002, FAO / WHO, 2005; Nisbet és LaGoy, 1992) (6. ábra).



6. ábra:

PAH molekulák és alapvázak

A PAH-ok származhatnak természetes és antropogén forrásokból, képződhetnek élelmiszeripari feldolgozások során, mint szárítás (füstgázzal gabonákat) és füstölési eljárások, füstoldatok, füstaromák (30 mg/kg), csomagolótechnikák és bizonyos főzési eljárások mint a grillezés (húsok, zöldségek), pörkölés (kávé), és sütés folyamatok. A technológiai eljárások során képződött molekulák mellett a természetből is a szervezetbe

kerülhet akár a szennyezett talajból, levegőből (dízelmotorok), felszíni vizekből (Fromberg et al., 2007; Guillén és Sopelana, 2003). Az átlagos európai fogyasztók számára a PAH-ok fogyasztásának becsült határértéke 1,73 µg/nap (EFSA, 2008). Bár a magas koncentrációban nem találtak PAH-okat nyers élelmiszerek esetében, grillezett ételek vizsgálatakor viszont a policiklikus aromás szénhidrogének koncentrációja elérhette a 130 ng/kg-os koncentrációt (Farhadian et al., 2010). A vizsgálatok során tapasztalt, néha ellentmondásos PAH koncentráció az élelmiszerek jellegéből adódik. Lényeges szempontok, hogy az adott ételnek milyen a zsírtartalma, hogyan lett elkészítve (sült, grillezett, sült, főtt és füstölt), milyen hőmérsékleten és mennyi ideig tartott a főzés, és milyen eszközzel történt (elektromos, gáz, fa és szén) (Akpambanga et al., 2009, Center for Food Safety (CFS), 2004; Farhadian et al., 2010; Knize et al. 1999; Perelló et al., 2009).

A füstölt fűszerpaprikák alkalmazása egyre elterjedtebb a gasztronómiában, ám a kellemes íz mellett veszélyeket is rejt magában.

2.1.3. Aromaanyagok detektálása

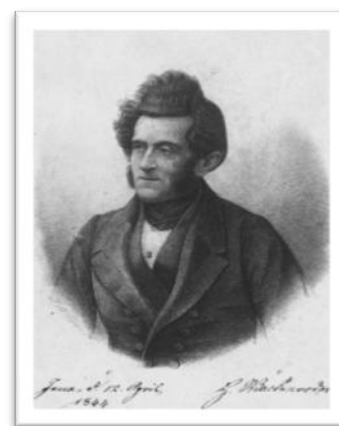
Az analitikai módszerek fejlődésének köszönhetően több típusú vizsgálat is elterjedt az aromaanyagok detektálására és azonosítására. Az egyik legelterjedtebb módszer a GC-MS alapú elválasztás és detektálás. A GC-MS alapú meghatározáshoz különféle mintaelőkészítési módszerek léteznek. Az irodalom alapján a vízgőzdesztilláció és a szilárd fázisú mikroextrakciós módszerek (SPME) terjedtek el. Mindkét módszernek megvannak az előnyei és a hátrányai is. Vízgőzdesztilláció során több komponens kinyerése lehetséges, mint a különféle SPME módszerekkel, ám sokkal időigényesebb, mint az SPME szálak használata. A vízgőzdesztilláció során a hőkezelés hatására az aromaanyagok szerkezete megváltozhat, akár új molekulák keletkezhetnek, míg az SPME szálak használatakor a mátrix és a felette kialakult légtér egyensúlyáról kaphatunk információkat. Széles körben alkalmazzák a gázkromatográfhoz csatlakoztatott olfaktométert (GC-O), amikor egyidejűleg vizsgálják az aromakomponenseket műszeresen GC-vel ill. humán szaglás által. Emellett az elektronikus orr alkalmazása is igen elterjedt komplex étel-mátrixok aromaösszetételének azonosítására (Sousa et al., 2006; Pino et al., 2006; Liou, 1986; . Guadayol et al., 1997).

2.2. Karotinoidok

2.2.1. Karotinoidok felfedezésének rövid krónikája

1831-ben jelent meg Heinrich Wilhelm Ferdinand Wackenroder publikációja, melyben arról írt, hogyan tisztított „karotint” sárgarépből. Kísérleteinek elsődleges célja az volt, hogy sárgarépből authelminikumot izoláljon. Részletesen leírja, hogyan készített répalevet, amit hígított majd extrahált éterrel. A kísérlet végeredményeként elsőként állított elő kristályos „karotint” sárgarépa extraktumból.

Halála után 1849-ben William Christopher Zeise folytatta a kutatásokat. A répalevet kénsavval kezelte, így a fehérjéket és olajos anyagokat kicsapatta a mintából. Megállapította az így kapott kristályos anyag olvadáspontját, valamint megpróbálta felírni a molekula konstitúciós képletét, de túl kevés ismerete volt a pontos képlet megadásához.



Néhány évvel később, az 1860-as években August Husemann publikált egy cikket, melyben elismeri, hogy a karotin telítetlen molekula, és elkészítette halogénezett származékát, továbbá azt is megfigyelte, hogy szabad levegőn a színanyagok elfehérednek.

A századfordulón Albert Léon Arnaud szintén répaléből izolált karotint vizsgált, és megállapította, hogy a molekulát szén- és hidrogénatomok alkotják. Ő is megpróbálta felírni az összegképletet, de az általa megadott $C_{26}H_{38}$ sem volt helyes. Ezen eredmények mellett Arnaud kifejlesztett egy színmérésen alapuló módszert, melynek segítségével harminc különböző növényt vizsgált. Úgy vélte, a karotinnak éppolyan szerepe van az oxigénszállításban a növényekben, mint a vérben a hemoglobinnak. 1868-ban J. Thudichum megjelent tanulmányában 42 különböző növényt, valamint Wackenroder karotinját és állati eredetű sárgatestet is vizsgált spektroszkópiás módszerrel. A sárgatestből izolált kristályos sárga anyagot elnevezte luteinnek, és egy új szerves kémiai csoportba sorolta. Az 1900-as évek elején Richard Martin Willstätter megállapította az 1831-ben Wackenroder által sárgarépből izolált karotin és a paradicsomból kinyert likopin helyes összegképletét. 1923 márciusában Amerikában megjelent egy könyv a karotinokról mint kromolipidekről. A könyv célja egy összefoglaló segédlet volt vegyészek, tanárok részére (Palmer, 1923). Moore 1932-ben megjelent cikke a karotint

mint az A-vitamin provitaminját említi. Kutatása során az emberi szervezetre, azon belül a májra gyakorolt hatását vizsgálta. Több mint 300 mintán keresztül vizsgálta a szervezet számára szükséges A-vitamin mennyiségét, a májban való raktározását, valamint a cukorbetegség esetén jelentkező kedvező hatását.

A kezdeti nehézségek leküzdése után a rohamosan fejlődő analitikai módszereknek köszönhetően kutatók napjainkra több mint 750 természetes eredetű karotinoidot azonosítottak az élővilágban.

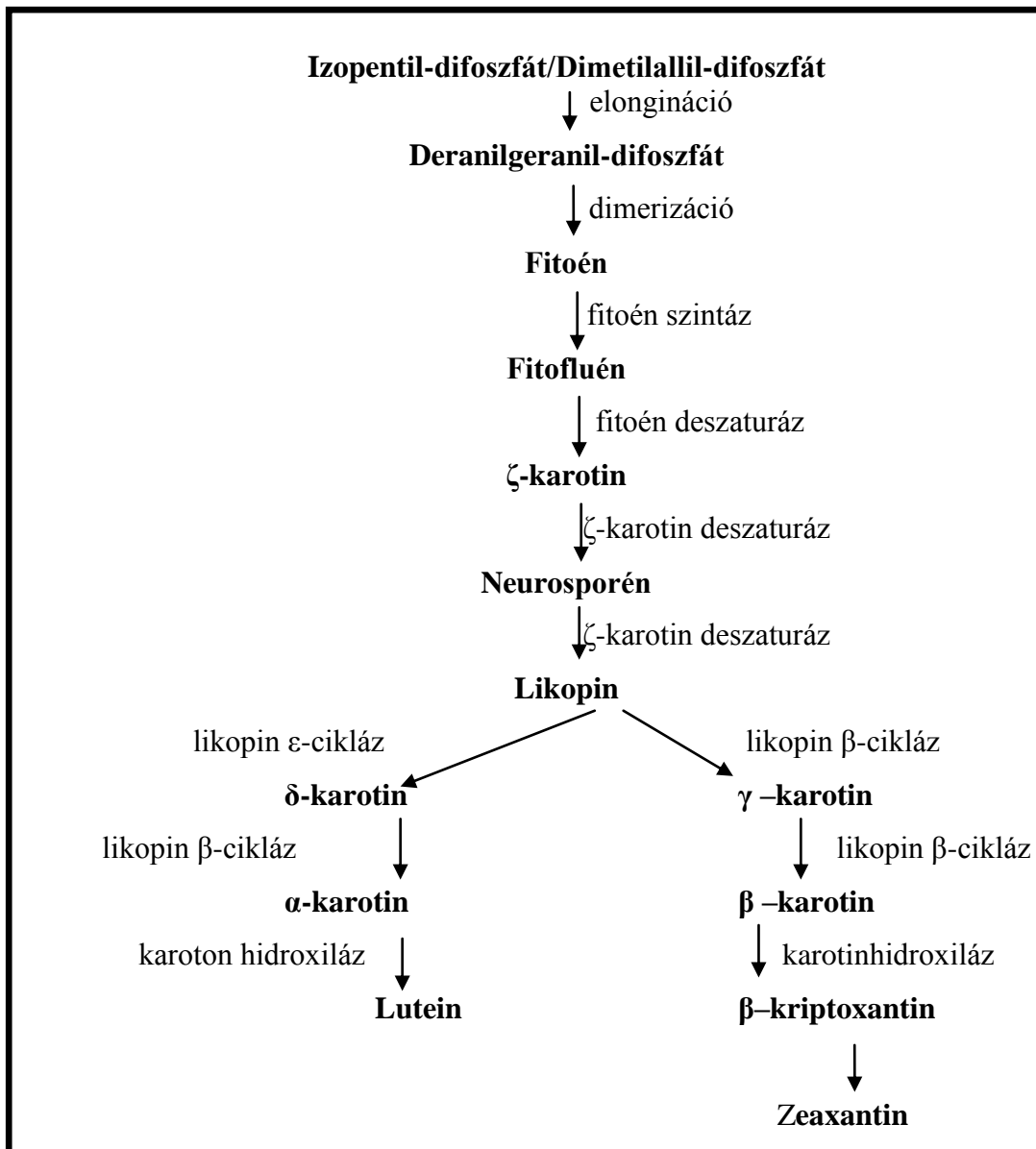
2.2.2. Karotinoidok metabolizmusa a növényekben

A karotinoidok olyan természetes lipofil színyanyagok, melyek bioszintézisére csak egyes baktériumtörzsek, algák, gombafajok és magasabbrendű növények képesek (Sugawara et al., 2009), így az emberi és állati szervezet csak raktározni képes természetes vagy módosított formában (Basu et al., 2001; Rock 1997). Ezek a színyanyagok biztosítják a kellemes sárga, narancssárga vagy piros színt számos gyümölcsben és zöldségben, rákfélékben, halakban és a tojássárgájában (Mattea et al., 2009; Okada et al., 2008).

A karotinoidok kialakulásának kiinduló vegyületei az izopentenil-difoszfát és izomer molekulája a dimetilallil-difoszfát, melyekből geranilgeranil szintáz segítségével geranilgeranil-difoszfát molekula jön létre. Több vegyület, mint a tokoferolok, klorofilok, fillokinonok, gibberellinek, monoterpének is ezekből a izoprén prekursorokból alakulnak ki (Rodriguez-Concepcion és Boronat, 2002; Eisenreich et al., 2004). A növényekben a karotin bioszintézishez termelődő izopentil-difoszfát és dimetilallil-difoszfát mevalonsav úton képződik (Eisenreich et al., 2001; Rodriguez-Concepcion és Boronat, 2002).

A geranilgeranil-foszfátot a fitoin szintáz fitoinná alakít, így létrehozva az első negyven szénatomos szintelen karotint (Kato et al., 2004; Yano et al., 2005; Diretto et al., 2006; Kato et al., 2007; Yamamizo et al., 2008; Apel és Bock, 2009). A kialakult tetraterpén alapvázból keletkeznek a különböző karotinoidok, mint például dehidrogenézéssel a likopin, a láncvégek gyűrűvé záródásával a karotinok (Aizawa és Inakuma, 2007), oxigénatom beépülésével pedig a xantofilok (Pérez-Rodríguez, 2009; Britton, 1995). Az oxigén szubsztituens előfordulhat hidroxilcsoportként mint a β -kriptoxantinban, ketocsoportként mint a kantaxantinban, epoxicssoportként mint a viloxantinban, és aldehidcsoportként mint a β -apo-8'-karotenalban (Basu et al., 2001; deQuiros és Costa, 2006). Ezek a funkciós csoportok felelősek a molekulák polarizációs fokáért és oldhatóságáért (Umeno et al., 2005). A lánc rövidülése, megnyúlása; vagy ezek

kombinációjából, láncon belüli átrendeződésének köszönhetően a variációk tárháza szinte végtelen (7. ábra) (Yano et al., 2005).



7. ábra:

Karotinoidok metabolizmusa növényekben

2.2.3. A karotinoidok antioxidáns tulajdonságai

Az antioxidáns szó görög-latin eredetű, jelentése oxidációt gátló, lassító. Az antioxidánsok olyan molekulák, melyek az oxidálandó szubsztráthoz képest kisebb mennyiségben vannak jelen, és lassítják, vagy teljesen megakadályozzák annak oxidációját. Az antioxidánsok szubsztrátjai a szabad gyökök. Minden olyan molekula szabad gyöknek tekinthető, melynek külső elektronhéján párosítatlan szabad elektron található. Ezek a molekulák a sejtek anyagcsereje és biokémiai folyamatai során végbemenő oxidációs folyamatok során is keletkeznek. Egyrészt fontos szerepük van a sejtek normális működésében, különböző szabályozó folyamatokban, védekező mechanizmusban, másrészt viszont különböző módon és formában károsítják a szervezetet. A szabad gyökök párosítatlan elektronnal rendelkező reakcióképes oxigén-, nitrogén-, szén- vagy kéntartalmú molekulák, melyek elektronszerzés céljából gyorsan reakcióba lépve más vegyületekkel károsítják azokat. A legfontosabb szabad gyökök a szinglet oxigén, szuperoxid gyök, hidroxil gyök, peroxil gyök, alkoxil gyök, az atomos klór stb. A szabad gyökök képződésért külső és belső tényezők egyaránt felelősek lehetnek. Belső forrás lehet például a riboflavin, hemoglobin és az átmenetifém-ionok. Külső tényezők elsődlegesen a Napból érkező sugárzások, a környezetszennyezésből adódó füst, szmog, vegyi anyagok, toxinok, valamint a túlzott alkohol fogyasztás és a mindennapi stressz. Az antioxidáns hatású molekulák feladata, hogy reakcióba lépjenek a szabad gyökökkel, megszüntetik a láncreakciót, mielőtt a létfontosságú molekulák megsérülnének (Yeum et al., 2009; Tian et al., 2007).

A szabad gyökös reakciók nem csak az élő szervezetben okozhatnak károsodást. Ezek a molekulák felelősek többek között az élelmiszerek romlásáért. Az egyik legismertebb szabad gyökös reakció eredménye a zsírok avasodása, de más esetekben keletkezhetnek negatív hatású ketonok és aldehidek, valamint akár vitaminok szerkezetét is megváltoztathatják, ezáltal elveszthetik eredeti funkciójukat (Tang és Russell, 2009).

A szervezetben több védelmi rendszer is működik a szabad gyökökkel szemben. A vitaminok közül az A-vitaminnak, a C-vitaminnak, és az E-vitaminnak, niacinnak és a riboflavinnak van fontos szerepe a védekezési folyamatokban, de emellett a zsírsavak közül az omega-3 és az omega-6 zsírsavak jelenléte a szervezetben is fontos védelmi vonal. Fontos megemlíteni az aminosavak közül a hisztidint, fehérjék közül az albuminokat és enzimeket, különböző növényi metabolitokat, ásványi anyagokat, anyagcseretermékeket, amelyeknek fontos szerepük van a szabad gyökök semlegesítésében (Park et al., 2009).

A szabad gyökök semlegesítésének három jellemző módja van: az addíció, az elektron transzfer és a hidrogén transzfer.



(El-Agamey és Mc Garvey, 2008).

Az emberi szervezetben a karotinoidok részét képezik az antioxidáns védelmi rendszernek (Stahl és Sies, 2003). A karotinoidok A-provitamin aktivitása régóta ismert (Rodríguez-Amaya, 1997). Képesek semlegesíteni a fotooxidatív stressz során keletkező szinglet oxigént, akár csak a tokoferolok (Stahl et al., 2000). A természetben található mintegy 700 ismert karotinoid közül csupán ötven karotinoidnak van A-provitamin aktivitása, és ezek közül is csupán háromnak van kiemelkedő jelentősége a humán szervezetben (Rodríguez-Amaya, 1997; Okada et al., 2008). Ezek a vegyületek az α -karotin, β -karotin és a β -kriptoxantin (Thane és Reddy, 1997; Carrillo-Lopez et al., 2010) amelyek A-vitaminná vagy retinollá alakulnak az emberi szervezetben (Zeb és Mehmood, 2004). A legnagyobb A-provitamin aktivitást mutató karotint a zöldségek és gyümölcsök tartalmazzák a legnagyobb mennyiségben (Imamura et al., 2006). Fontos, hogy az emberi emésztőrendszer megfelelően működjön, és a táplálékkal bevitt A-provitaminokat fel tudja szívni a bonyolult élelmiszer-mátrixokból. Mint ismeretes, az A-vitaminnak antioxidáns tulajdonsága mellett fontos szerepe van a súlyos szembetegségek elkerülésében, mint például a farkasvakság (Takahasi et al., 2006; Carrillo-Lopez et al., 2010).

Az alábbi táblázat néhány gyümölcs és zöldség fő karotinoid-összetételét mutatja (1. táblázat).

1. táblázat: Néhány zöldség és gyümölcs karotinoidtartalma

Hivatkozás	Minta	A-provitamin hatású karotinoid	Nem A-provitamin hatású karotinoid
Khachik et al., (1992)	Brokkoli	β -karotin	neoxantin violaxantin lutein-5,6-epoxid lutein
Willis és Rangga (1996)	Káposzta	β -karotin	zeaxantin lutein violaxantin neoxantin
Khachik et al., (1989)	Kajsziabarack	β -karotin	-
Rouseff et al., (1992)	Grapefruit	β -karotin	likopin fitoén fitofluén
Kimura et al., (1991)	Papaja	β -karotin β -kriptoxantin	likopin ζ -karotin
Hart és Scott (1995)	Paradicsom	β -karotin	lutein likopin
Hart és Scott (1995)	Paprika	α -karotin β -karotin <i>cisz</i> - β -karotin kriptoxantin	lutein zeaxantin

2.2.4. Karotinoidok detektálása

Az analitikai módszerek fejlődésének köszönhetően több típusú vizsgálat is elterjedt karotinoidok azonosítására és mennyiségi meghatározására különböző élelmiszer-mátrixokból. Gyakran alkalmazzák a kolorimetriás, spektrofotometriás, fluorimetriás, papír- és vékonyréteg-kromatográfiás módszereket, illetve a HPLC és kapilláris elektroforézises elválasztást. A pontosabb azonosítás érdekében egyre inkább elterjedtek a kapcsolt analitikai rendszerek, mint például a HPLC-MS, HPLC-NMR, vagy HPLC-NMR-MS (Gupta et al., 2015).

Az élővilágban előforduló karotinoidok sokfélesége miatt azok azonosítása és mennyiségi meghatározása nagy kihívást jelent. A minták közötti minőségi és mennyiségi különbségeket fokozza, hogy egy fajtán vagy akár egy növényen belül is mérhetünk különböző mennyiségeket (Kimura és Rodríguez-Amaya 2002). A karotinoidok kinyerése körültekintő munkát igényel. A jellemző konjugált kettős kötésű szerkezetnek köszönhetően a molekulák instabilak, könnyen bomlanak fény és magasabb hőmérséklet hatására, ezért különböző módszereket dolgoztak ki hogy a veszteség a lehető legkisebb legyen a vizsgálatok során (Oliver és Palou 2000; deQuiros és Costa 2006). Az egyik lehetséges megoldást a halvány sárga vagy halvány vörös fényben történő, 40°C alatti mintaelőkészítés jelentheti, valamint az extraktumok -20°C körüli hőmérsékleten való tárolása (Ladislav et al., 2005).

A karotinoidok lipofil típusú vegyületek, ezért a biomolekulák kinyerését erre alkalmas oldószerben kell elvégezni. A karotinoidok kinyerésére legalkalmasabb oldószer a kloroform, diklór-metán és tetrahydrofuran, amelyben azok oldhatósága elérheti az 1000-10000 mg/l-t. A kevésbé poláros szerves oldószereket, mint a hexánt, petrolétert, dietil-étert, diklór-etánt, acetont, etil-acetátot, izopropanolt, metanolt önmagukban vagy elegyként alkalmazzák például fűszerpaprika minták esetében. Nagy nedvességtartalmú mintáknál a kinyerésre főként hidrofil oldószereket alkalmaznak, mint például metanol, etanol, acetont, hogy eltávolítsa a nedvességet, majd a további lépésekhez kevésbé poláris oldószereket (Markus et al., 1999; Ranjith et al., 2006). Abban az esetben, ha a mintánk a karotinoidok mellett sok poláris vegyület is tartalmaz, a poláris vegyületeket először eltávolítják hagyományos vizes, vagy vizes-sós oldat segítségével (Cacciola et al., 2012; Giuffrida et al., 2013; Guil-Guerrero et al., 2006).

A hagyományos lipid kinyerési módszereket, mint a Soxhlet-módszer és az ultrahangos módszereket gyakran felváltják a mikrohullámal segített extrakció (MAE) valamint a szuperkritikus fluid extrakció (SFE) technika. A mikrohullámú technika

lerövidíti az extrakció idejét, csökkenti a szükséges oldószer mennyiségét és javítja a kinyerést. A módszer hatékonysága és szelektivitása függ az extrakciós közeg dielektromos állandójától (Kiss et al., 2000). Az SFE technikát is a karotinoid extrakcióra alkalmas alternatív módszerként említi az irodalom. Előnye, hogy fokozza a kinyerés sebességét és hatékonyságát, valamint kiküszöböli a koncentrációkülönbségeket a lépéseket követően (Turner et al., 2001). A szuperkritikus szén-dioxid (SC-CO₂) a leggyakrabban alkalmazott extrakciós oldószer, mivel nem toxikus, nem káros az egészségre, ezért jól alkalmazható gyógyszerek, élelmiszerek és élvezeti cikkek előállításánál, kémiailag semleges, nagy a sűrűsége, így viszonylag sok anyagot tud oldani, valamint alacsony költségű és könnyen rendelkezésre áll. Ezeken túlmenően a CO₂-nak alacsony a kritikus hőmérséklete (31,8°C) és kritikus nyomása (73 bar), ezért alacsony hőmérsékleten lehet vele dolgozni úgy, hogy nem károsodik a kezelt anyag, így ideális a termikusan labilis vegyületek esetében mint például a karotinoidok. A SC-CO₂ módszert karotinoid extrakcióra több kutatócsoport is eredményesen alkalmazta gyümölcsök, zöldségek esetében (Illés et al., 1999; Uquiche et al., 2004; Arimboor et al., 2006). Amennyiben SC-CO₂ extrakció mellett oldószerként használtak etanolt vagy acetont, nagyobb hozammal tudták kivonni fűszerpaprikából a színyanyagokat (Jaren-Galan et al., 1999; Ambrogi et al., 2002; Uquiche et al., 2004; Tepic et al., 2009). Emellett azt is kimutatták, hogy a piros karotinoidok aránya, például a kapszorubin, kapszantin és a zeaxantin extrakciója eredményesebb nagyobb nyomás mellett (Jaren-Galan et al., 1999).

A karotinoidok sokfélesége és az ebből eredő tisztasági bizonytalanság korlátozza a kereskedelmi hozzáférhetőséget egyes karotinoidok esetében. A rendelkezésre álló karotinoidok tisztaságát ellenőrizni kell, főként ha analitikai standardként szeretnénk alkalmazni. A karotinoidokat a lehető legjobb forrásból kell kivonni és tisztítani. A tisztítás történhet oszlop-, vagy vékonyréteg-kromatográfiás módszerrel is (Oliver és Palou 2000; Ladislav et al., 2005). A preparatív HPLC technikák lehetővé teszik a karotinoidok gyors, megbízható és reprodukálható izolálását és tisztítását növényi forrásokból. A polién lánc kromofor fényelnyelő tulajdonsággal rendelkezik, aminek köszönheti a vonzó színét valamint speciális abszorpciós tulajdonságait (2. táblázat). A természetben főként *transz* formában vannak jelen karotinoidok, bár kis mennyiségben detektáltak hőkezelt, vagy fényhatásnak kitett élelmiszerekben *cisz* formát is (Demmig-Adams és Adams, 2002). Van egy kivétel, a bixtin, ami a természetben előfordul anattoban *cisz* formában (Bramley, 2003).

2. táblázat: Néhány karotinoid abszorpciós maximuma (Hurst, 2008)

Karotinoid	Abszorpciós maximum λ_{\max} (nm)	Karotinoid	Abszorpciós maximum λ_{\max} (nm)
α -karotin	422	Lutein	421
	444		445
	473		474
β -karotin	425	Likopin	444
	449		470
	476		502
δ -karotin	431	Neoxantin	416
	456		438
	489		467
γ -karotin	437	Violaxantin	416
	462		440
	494		465
β -kriptoxantin	425	Zeaxantin	424
	449		449
	476		476

A szerkezeti sokféleségnek, izomereknek köszönhetően a fűszerpaprikában és a paradicsomban található karotinoidok és származékaik azonosítása nehéz feladat. Az irodalomban található és az azonosítást szolgáló elterjedt vizsgálati módszerek összefoglalását a 3. táblázat tartalmazza.

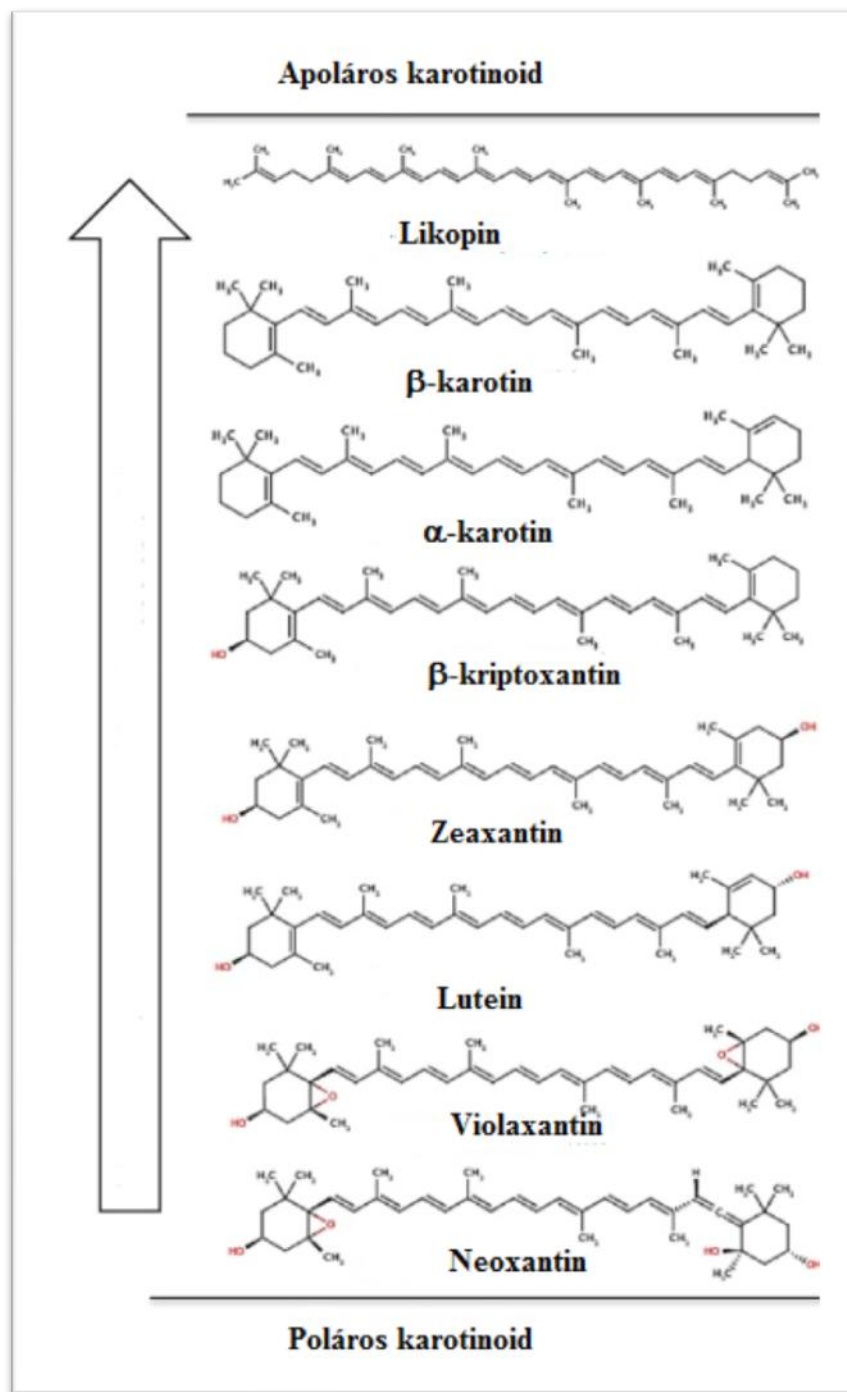
3. táblázat: Karotinoidok elválasztása folyadékkromatográfias módszerekkel

Hivatkozás	(A) Extrakció (B) Tisztítás (C) Elszáppanosítás	Analitikai műszer	Álló fázis	Mozgó fázis
Cervantes-Paz et al., (2014)	(A) CaCO ₃ -Metanol-Aceton- <i>n</i> -hexán (C) 40% KOH metanolban	HPLC-DAD-APCI-TOF	C ₃₀ , 3 μm, 4.6 × 250 mm	Víz-Metanol-Metil- <i>terc</i> -butil-éter (Gradiens elúció)
Giuffrida et al., (2013)	(A) Aceton-NaHCO ₃ (B) Dietil-éter-10% NaCl	HPLC-DAD-APCI-MS	C ₃₀ , 5 μm, 3.0 × 250 mm	A: Metanol-Metil- <i>terc</i> -butil-éter - Víz (82:16:2) B: Metanol-Metil- <i>terc</i> -butil-éter - Víz (10:88:2) (Gradiens elúció)
Cacciola et al., (2012)	(A) Metanol-Etil-acetát-Petroléter (1:1:1)	LC x LC-PDA, LC-MS (APCI)-IT-TOF	(1) Cyano, 5 μm, 10 × 250 mm	A: <i>n</i> -hexán B: <i>n</i> -hexán-Butilacetát-Aceton (80:15:5) (Gradiens elúció)
			(2) C ₁₈ , 2.7 μm, 30 × 4.6 mm	A: Víz/Acetonitril (10:90) B: Izopropanol (Gradiens elúció)
de Azevedo-Meleiro és Rodríguez-Amaya (2009)	(A) Aceton (C) 10% KOH	HPLC-DAD, HPLC-MS	C ₁₈ , 3 μm, 3.0 × 150 mm	0.05% Trietilamin Acetonitril/Metanol/Etil-acetátban (Gradiens elúció)
Perez López et al., (2007)	(A) Aceton (B) Dietil-éter-10% NaCl (C) 20% KOH metanolban	HPLC-DAD	C ₃₀ , 5 μm, 4.6 × 250 mm	A: Metanol-Metil- <i>terc</i> -butil-éter-Víz (81:15:4) B: Metil- <i>terc</i> -butil-éter-Víz (91:9) (Gradiens elúció)

Topuz és Ozdemir (2007)	(A) Aceton (B) Dietil-éter-10% NaCl (C) 10% KOH metanolban	HPLC-UV	C ₁₈ , 5 µm, 4.0 × 250 mm	Aceton-Víz (Gradiens elúció)
Guil-Guerrero et al., (2006)	(A) Aceton (B) Dietil-éter-Víz (C) KOH metanolban	HPLC-MS	C ₃₀ , 5 µm, 3.0 × 250 mm	A: Metanol B: Metil- <i>terc</i> -butil-éter (Gradiens elúció)
Daood és Biacs. (2005)	(A) Metanol-Aceton-Diklórmétán (2:2:1)	HPLC-PDA	C ₁₈ , 3 µm, 4.6 × 250 mm	A: Víz-Metanol (9:91), B: Metanol-Acetonitril-Izopropanol (10:35:55), C: Metanol (Gradiens elúció)
Collera-Zúniga et al., (2005)	(A) Aceton (B) Dietil-éter-10% NaCl (C) 20% KOH metanolban	HPLC-UV	µ-Porasil 125 A ⁰ , 3.9 × 150 mm	<i>n</i> -hexán/Aceton (Gradiens elúció)
			C ₁₈ , 5 µm, 3.9 × 150 mm	Víz-Metanol (Gradiens elúció)
Kim et al., (2004)	(A) Aceton (B) Dietil-éter-10% NaCl (C) 30% KOH metanolban	HPLC-UV HPLC-APCI-MS	C ₁₈ , 10 µm, 3.0 × 200 mm	Acetonitril-Metanol (95:5) (Izokratikus elúció)
		HPLC-APCI-MS	C ₁₈ , 10 µm, 3.0 × 200 mm	A: Metanol-Metil- <i>terc</i> -butil-éter – Víz (81:15:4) B: Metanol-Metil- <i>terc</i> -butil-éter – Víz (6:90:4) (Gradiens elúció)
Perez-Galvez és Minguez-Mosquera (2004)	(A) Aceton (B) Dietil-éter-10% NaCl (C) 20% KOH metanolban	HPLC-DAD	C ₁₈ , 5 µm, 4.0 × 250 mm	Aceton/Víz (Gradiens elúció)
Cserhati et al., (2000)	(A) Aceton	HPLC-DAD	C ₁₈ , 5 µm, 4 × 150 mm	A: Víz B: Metanol-Acetonitril (8:2) (Gradiens elúció)
Hornero-Méndez et al., (2000)	(A) Aceton (B) Dietil-éter-10% NaCl (C) 20% KOH metanolban	HPLC-DAD	C ₁₈ , 5 µm, 4.6 × 250 mm	A: Aceton B: Víz (Gradiens elúció)

Kosa et al., (2001)	(A) Aceton	HPLC-DAD	C ₁₈ , 5 μm, 2 × 150 mm	A: Metanol-Acetonitril (8:2) B: Víz (Gradiens elúció)
Illés et al., (1999)	(A) Szuperkritikus CO ₂ , Dietil-éter-Aceton-Metanol (2:1:1)	HPLC-UV	C ₁₈ , 5 μm, 4.6 × 250 mm	Acetonitril-Izopropanol-Metanol (2:1.75:1.25) (Izokratikus elúció)
Jaren-Galan et al., (1999)	(A) Szuperkritikus CO ₂ (C) 15% KOH metanolban	HPLC-DAD	C ₁₈ , 5 μm, 4.6 × 250 mm	A: aceton B: Metanol-Víz(1:1) (Gradiens elúció)
Weissenberg et al., (1997)	(A) Dietil-éter, Metanol (C) 5% KOH metanolban	HPLC-UV	C ₁₈ , 5 μm, 4 × 250 mm; C _{18,4} μm, 4 × 125 mm	acetonitril-Izopropanol-Etil-acetát (80:10:10) (Izokratikus elúció)
Deli et al. (1996)	(A) Metanol-Dietil-éter (C) 30% KOH metanolban	HPLC-DAD	C ₁₈ , 6 μm, 4.6 × 250 mm	A: 12% Víz-Metanol B: Metanol C: 50% Aceton-Metanol (Gradiens elúció)

A mintában található karotinoidek szerkezete és polaritása határozza meg, hogy a komplex mátrixokban található vegyületek milyen sorrendben fognak szétválni egymástól az álló fázison. A 2. ábrán látható, hogy a különböző zöldségekben és gyümölcsökben található karotinoidek milyen sorrendben válnak szét fordított fázisú C30-as hidrofób oszlopon. Az első csúcs általában neoxanthin és violaxantin, majd a lutein, zeaxantin, β-kriptoxantin, α-karotin és β-karotin következik. Minden esetben a kisebb polaritású *cisz*-izomerek eluálódnak először, majd a *transz*-izomerek, utánuk a magasabb polaritású *cisz*, majd a *transz*-izomerek (Pendon et al., 2005). Azonban ez a sorrend megfordul C18 fordított fázisú monomer vagy polimer oszlopok alkalmazása esetén. Rivera és Canela-Garayoa (2012) vizsgálták a karotinoidek elválasztási technikáit minőségi és mennyiségi szempontokból. A szerzők összehasonlították a *cisz* és *transz* izomerek elválasztásának hatásfokát mind a C30-as, mind a C18-as oszlopok esetében, és arra a megállapításra jutottak, hogy mind a két típusú stacioner fázis alkalmas a hasonló polaritású geometriai izomerek szétválasztására (8. ábra).



8. ábra:

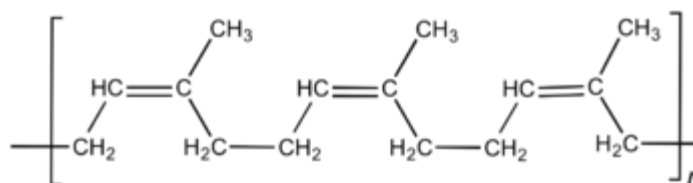
Karotinoidok elválasztása fordított fázisú C30-as oszlopon

Az atmoszférikus nyomású kémiai ionizációs (APCI) -tandem tömegspektrometriás (MS/MS) pozitív ion módú módszer a leginkább elterjedt különböző karotinoidok azonosítására és jellemzésére. Ez a módszer alkalmas a különböző epoxi-, hidroxil- és ketocsoportokat tartalmazó karotinoidok megkülönböztetésére, azonosítására (Rivera et al., 2014).

Tömegspektrometria segítségével új, nagyon hasonló szerkezetű vegyületeket, pigmenteket is meg lehet különböztetni a tömegfragmensek alapján. Az esetleges tömegspektrometriás szerkezeti bizonytalanságot a proton mag-mágneses rezonancia ($^1\text{H-NMR}$) segítségével oldhatjuk meg. Ezzel a módszerrel a nagyon hasonló izomerek is azonosíthatóak, így mintegy megerősítő módszer a tömegspektrometria mellett (Qiu et al., 2014).

2.2.5. Karotinok és xantofilok

A karotinoidok általában 40 szénatomból álló tetraterpének. A váz nyolc C_5 -ös izoprén egységekből épül fel fej-láb kapcsolattal, kivéve a molekula középső részét, ahol is láb-láb kötéssel kapcsolódnak egymáshoz az egységek (9. ábra) (Mattea et al., 2009).



9. ábra:

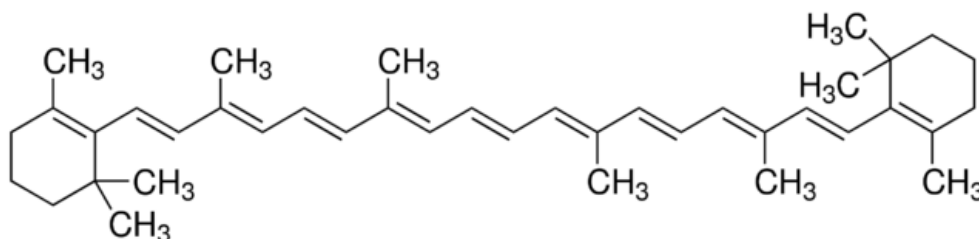
Izoprén egységek összekapcsolódása

A karotinoidok két nagy csoportra oszthatók, karotinokra, és xantofilokra. A xantofilok oxigén tartalmú karotinoidok, mint például a lutein és a zeaxantin. A karotinokat csupán szén és hidrogén atomok alkotják, például az α -karotint, β -karotint és a likopint. A karotinoidok tartalmazhatnak különböző poláros csoportokat mint az epoxi-, hidroxil- vagy ketocsoportok, melyek befolyásolják a molekula polaritását, ezáltal a biológiai funkciójukat (Britton et al., 2008).

A gyümölcsökben és zöldségekben található karotinoidok (más típusú színanyagok mellett) határozzák meg a zöldségek és gyümölcsök színét. A gyümölcsök és zöldségek sárga-narancssárga színének kialakulásáért általában a β -karotin és a α -karotin. α -kriptoxantin és zeaxantin a felelős, például mandarin, narancs és papaya esetében. Hasonlóképpen, a likopin, mint piros színű karotin felelős a paradicsom piros színének kialakulásáért. A zöld színű levélzöldségekben a karotinoidok megoszlása általában a következő: lutein közel 45%, β -karotin 25-30%, violaxantin 10-15%, valamint neoxanthin 10-15% (Lakshminarayana et al., 2005). A legtöbb zöldség és gyümölcs esetében a β -

karotin dominál, de geometriai izomerje, az α -karotin mennyisége sem elhanyagolható. Magas az α -karotin tartalma például az édes burgonyának, sárgarépanak, sütőtöknek, a sötétzöld színű zöldségeknek, mint például a zöldbab, a spenót és brokkoli. A magas karotinoidtartalmú növényeket előszeretettel alkalmazzák a gyógyászatban az egészség megőrzése érdekében, vagy gyógyszeres kezelések kiegészítésére (Khoo et al., 2011)

A β -karotin egy $C_{40}H_{56}$ összegképletű molekula, mindkét végén β -jonon gyűrűvel. 11 kettős kötést tartalmaz, ebből kettő a β -gyűrűkben található (10. ábra).



10. ábra:
 β -karotin

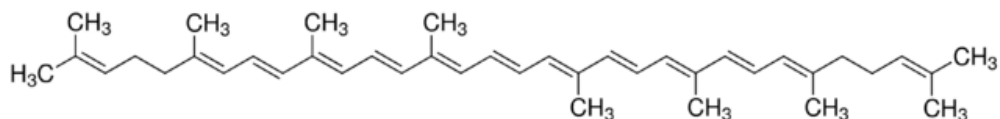
A β -karotin az egyik legelterjedtebb karotin az élelmiszerekben, kisebb vagy nagyobb mennyiségben szinte minden élelmiszer tartalmazza (Rodríguez-Amaya et al. 2008). Mint közsímet, a legfőbb β -karotin források a sárgarépa, a vöröspálma-olaj (Porcu és Rodríguez-Amaya, 2006), sárgabarack (Dragovic-Uzelac et al., 2007), édesburgonya (van Jaarsveld et al., 2006), a tök és a sütőtök (Azevedo-Meleiro és Rodríguez-Amaya, 2007). A levélzöldségek és a brokkoli fő karotinoidja a lutein, a második fő karotinoid pedig a β -karotin (Rodríguez-Amaya et al., 2008).

Öt karotinoidot, a likopint, a β -karotint, a zeaxantint, a kantaxantint és az asztaxantint szintetikus ipari méretekben is előállítják. Ezeket a „természetazonos” karotinoidokat főként állateledelek dúsításához alkalmazzák, csirkefarmokon és a vízkultúrákban, de a likopin, β -karotin és a zeaxantin megtalálható különböző táplálékkiegészítők összetevőjeként is (Ernst, 2002). Az élelmiszeripar a β -karotint előszeretettel alkalmazza az élelmiszerek színezésére. Mennyiségétől függően sárgától a narancssárgáig terjedő színskálán alkalmazható. Színezésre használják a tejiparban, margarinok színezésére, levesporokban és különböző cukrászati termékekben (Sajilata és Singhal, 2006).

A β -karotint a humán gyógyászatban főként szinglet oxigén semlegesítőként alkalmazzák, hatékonyak bizonyult a kezelés az eritropoetikus profiriában szenvedő betegek esetében (Mathews-Roth, 1993, 1997).

A β -karotin volt az első karotinoid, melynek egészségvédő tulajdonságát is felismerték az A-provitamin hatás mellett. Az 1980-as és a korai 1990-es években számos epidemiológiai tanulmány született, ahol a β -karotin hatását vizsgálták a rákos megbetegedésekkel szemben, és alá is támasztották *in vitro* és állatkísérletekkel. Egymástól függetlenül, különböző országokban végzett kísérletek igazolják a fordított arányosságot a nagy karotinoidtartalmú (főként β -karotin) zöldségek és gyümölcsök fogyasztása vagy a vérszérum magas β -karotin tartalma, és a rák kialakulása között.

A likopin aciklikus, $C_{40}H_{56}$ összegképletű karotinoid. A molekula 11 konjugált, és 2 nem konjugált kettős kötést tartalmaz (11. ábra).



11. ábra:

Likopin

A likopin elsősorban a piros húsú gyümölcsökben, mint a görögdinnye (Perkins-Veazie et al., 2001), a rózsaszín húsú guáva (Rodríguez-Amaya et al., 2008), a piros húsú papaja (Wall et al., 2006), és a piros grapefruit (Rouseff et al., 1992) fordul elő nagy mennyiségben. A zöldségek között a paradicsom a legjelentősebb likopinforrás (Sajilata és Singhal, 2006).

A kiterjedt konjugált kettős kötéses rendszerének és aciklikus formájának köszönhetően a likopin a leghatásosabb antioxidáns a karotinoidok között. A likopin szinglet oxigén semlegesítő képessége kétszer akkora, mint a β -karotiné, és tízszer nagyobb, mint az α -tokoferolnak, valamint a nitrogén-dioxid gyökökkel szemben is kétszer hatékonyabb a β -karotinnál (Di Mascio et al., 1989).

A likopin antioxidáns tulajdonságainak vizsgálata céljából több *in vivo* kísérletet is végeztek önkénteseken.

Egy 14 napos kísérlet során az önkéntesek likopinban gazdag élelmiszereket fogyasztottak a normál étkezési szokásaik mellett. A vérszérumukat vizsgálva a humán

limfociták ellenállóbbak voltak a nitogén-dioxid gyökkel és a szinglet oxigénnel szemben (Böhm et al., 2001).

Egy másik kísérletben kilenc nőt vizsgáltak. Két héten keresztül minden nap elfogyasztottak 25 g paradicsomsűrítményt, mely átlagosan 7 mg likopint tartalmazott. A második hét végén kapcsolatot kerestek a vér és a limfociták likopin tartalma és a DNS oxidatív károsodása között. A vizsgálatok kimutatták, hogy ilyen kevés paradicsomsűrítmény ilyen rövid ideig való fogyasztása jelentősen megemelte a szérum likopinkoncentrációját, és a limfociták is ellenállóbbak lettek az oxidatív stresszel szemben (Porrini és Riso, 2000). Hasonlóképpen egy másik kísérletben 26 egészséges embert vizsgáltak. Ők 250 ml Lyc-O-Mato nevű készítményt fogyasztottak. Ez a készítmény természetes paradicsom eredetű 6 mg/250 ml likopin tartalmú kereskedelmi forgalomban kapható termék. Ebben az esetben is kimutatták a likopin jótékony hatását. A DNS károsodása jelentősen csökkent, és a limfociták ebben az esetben is ellenállóbbak voltak az oxidatív stresszel szemben (Porrini et al., 2005).

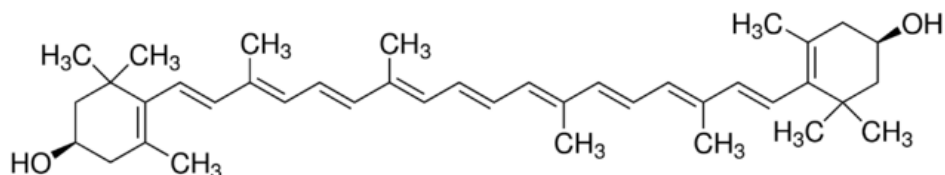
Egy másik tanulmányban hatvan, 50-60 év közötti nőt vizsgáltak. Négy hónapon keresztül minden nap likopinkapszulát vagy ivólevet fogyasztottak. Az időszak végére az összes antioxidánskapacitásuk nőtt, míg a lipidperoxidáció, a fehérjeoxidáció mértéke jelentősen csökkent a szervezetükben (Mackinnon et al., 2011).

A likopin hatását vizsgálták különböző rákos megbetegedések esetében is. 32 prosztata adenokarcinómában szenvedő betegnek három héten keresztül adtak sűrített paradicsomot. A kísérlet végére a prosztata szöveteiben található likopin koncentráció megnövekedett, és ezzel arányosan csökkent a DNS károsodás mértéke, és a leukocita szint növekedett (Bowen et al., 2002).

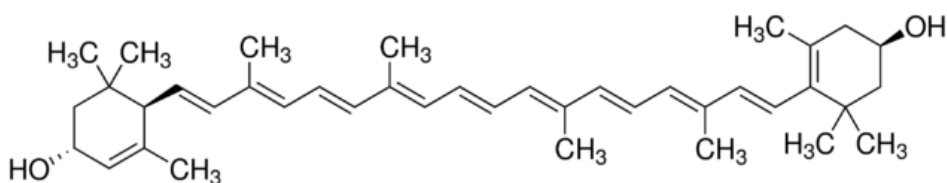
A biciklikus α -karotin és a monociklikus γ -karotin kísérői a β -karotinnak az élelmiszerekben, de jóval kisebb koncentrációban vannak jelen, mint a β -karotin. Az α -karotin optikailag aktív molekula. Jelentősebb mennyiségű α -karotin található a sárgarépában és a tökfélékben, A-vitamin hatású vegyület. Az aciklikus karotinoidok közül a likopin mellett előfordul még a három konjugált kettős kötést tartalmazó fitoén, az öt konjugált kettőskötést tartalmazó fitofluén, a hét konjugált kettős kötést tartalmazó ζ -karotin és a kilenc konjugált kettős kötést tartalmazó neurosporén, amik általában csak kis mennyiségben vannak jelen a zöldségekben és gyümölcsökben (Azevedo-Meleiro és Rodríguez-Amaya, 2007).

A zeaxantin (12. ábra) és a lutein (13. ábra) molekulák az α - és β -karotinból származtatható hidroxilcsoportot tartalmazó formák. A molekulák közti különbséget a

gyűrűkben található kettős kötések helyzete adja. Míg a lutein egy β - és egy ε - gyűrűt tartalmaz, addig a zeaxantinban két β -gyűrű található. Ennek következtében a lutein halványsárga színű, a zeaxantin a luteinnél sötétebb sárga színű molekula. A lutein főként a zöld színű zöldségekben fordul elő mint például a brokkoli és a tökfélék, valamint a tojás és kukorica fő karotinoid jellegű alkotóeleme (Perry et al, 2009; Rasmussen et al., 2012).



12.ábra:
Zeaxantin



13. ábra:
Lutein

A kereskedelem szempontjából a legfőbb luteinforrás a bársonyvirág friss szirmaiból származó kivonat, vagy a szárított szirmokból származó por. A bársonyvirágból származó luteint alkalmazzák élelmiszerek színezésére, valamint baromfieledelel kiegészítőjeként. Ezzel az adalékkal segítik elő a madarak zsírájának, bőrének, és tojásuk sárgájának erősebb sárgás színeződését. Nagy mennyiségben Mexikóban és Amerika melegebb trópusi és szubtrópusi tájain termesztik (Khalil et al., 2012).

A zeaxantint az élelmiszeripar szintetikus formában alkalmazza főként a szárnyasok és halak pigmentációjának fokozására, mivel a zeaxantint az állatok húsa és a tojás egyenletes mennyiségben képes raktározni (Sajilata et al., 2008).

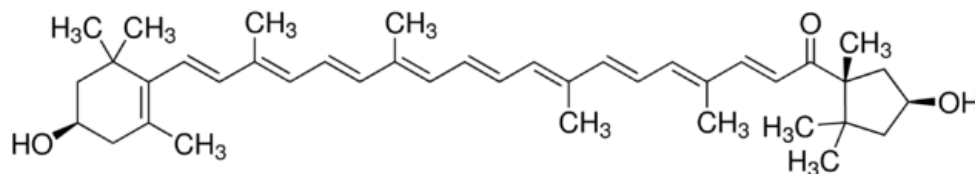
A lutein és zeaxantin a szabad gyökökkel szembeni védekezésben is fontos szerepet játszik. Mindkét karotinoid a lipid-membránok védelmében vesz részt azáltal, hogy mint fotoreceptorok lassítják az UV által keletkezett szabad gyökök hatását (Sujak et al., 1999).

Antioxidáns tulajdonságaik mellett felelősek az emberi látásért. A retinán található sárgafolt luteint és zeaxantint tartalmaz nagy mennyiségben, amelyek a színlátásért felelősek (Landrum és Bone, 2001) Több vizsgálatot is végeztek, és kimutatták, hogy napi 10 mg/nap lutein és zeaxantin fogyasztása növeli a sárgafolt pigmentkoncentrációját, ezáltal javítja a látást (Ma et al., 2012).

Több epidemiológiai tanulmány készült a luteinról és zeaxantinról. Dwyer és munkatársai (2001) 560, 40 és 60 év közötti férfit és nőt vizsgáltak. Ezek az emberek luteinben gazdag élelmiszereket fogyasztottak, és vizsgálták a vérérumukban a luteinkoncentrációt. Megfigyelték, hogy az emelt luteintartalmú élelmiszerek hatására a vérben megnövekedett luteinszint csökkentette az érszűkület kialakulását, és megakadályozta a korai szakaszban a beteg állapotának súlyosbodását. Xu és munkatársai (2012) megfigyelték 40 feletti érszűkületben szenvedő betegeket, akiket luteinben és zeaxantinban gazdag élelmiszerekkel tápláltak, valamint egy kontrollcsoportot. A vizsgálat 16 ország betegeire terjedt ki. Megállapították, hogy az emelt mennyiségű luteinnek és zeaxantinnak köszönhetően javult az érszűkületes betegek állapota, viszont a kontrollcsoportok esetében megnövekedett a szívinfarktus esélye. Ez főként Közép- és Kelet-Európára volt a jellemző.

A keringési problémák javítása mellett az agyra is kedvező hatást gyakorolnak ezek a karotinoidok. Kimutatták hogy a vér lutein koncentrációjának emelkedése pozitív hatást gyakorol az idegi működésekre, és javítja a kognitív funkciókat (Johnson, 2012).

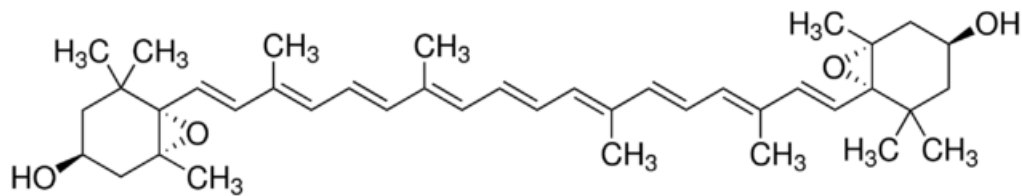
Kapszantint (14. ábra) legnagyobb mennyiségben a piros színű paprika tartalmaz (Kim et al., 2008).



14. ábra:
Kapszantin

A kapszantin molekula egyik végét egy β -gyűrű zárja, a lánc másik végét viszont egy öt szénatomos κ -gyűrű. A κ -gyűrű tartalmaz három metil- és egy hidroxilcsoportot. A kapszantin molekulának az A-vitamin kialakításában nincs szerepe (Matusfuji et al., 1998).

Ipari méretekben a violaxantint (15. ábra) violafélékből, *Viola sp.* szirmaiból állítják elő. Sárga színe miatt élelmiszerek színezésére alkalmazzák.



15. ábra:
Violaxantin

2.2.6. A fűszerpaprikára és a paradicsomra jellemző színanyagok

A fűszerpaprika és a paradicsom vonzó piros színét főként a bennük található piros és sárga színű karotinoidok határozzák meg. A paradicsom és paprika növekedése során a bennük lévő színanyagok folyamatosan változnak, a bioszintézisük során mind az érettségi állapotra, mind a fajtára jellemző karotinoidok alakulnak ki (Mínguez-Mosquera és Hornero-Méndez, 1994).

A piros színű fűszerpaprikák (*Capsicum sp.*) érésének első szakaszában a pigmentek diészterezett formában vannak jelen, mint zeaxantin-diészter, α -kriptoxantin-diészter, kapszantin-diészter és kapszorubin-diészter. Ezek a karotinoidok teszik ki a színanyagok mintegy 50%-át. Az érés további szakaszában a diészterek fokozatosan monoészterekké és szabad formákká alakulnak, míg be nem áll egyfajta egyensúly a molekulák között. A fűszerpaprika átlagosan 100,0 g száraz tömegre vonatkoztatva 37% zeaxantint, 7% kapszorubint, 9% β -karotint tartalmaz, valamint violaxantint, anteraxantint, epoxidokat, és *cisz* izomereket.

A paradicsomban a fő karotinvegyület a likopin. Paradicsom esetében 100,0 g száraz tömegre vonatkoztatva mintegy 60%-ban fordul elő likopin, 10%-ban γ -karotin és fitoén, 7%-ban neurosporén. Kis mennyiségben előfordul még β -karotin, δ -karotin és lutein is a bogyókban. A paradicsom érése során folyamatosan egyre több likopin termelődik, végül a

teljes érettségben eléri a maximális koncentrációt. β -Karotin esetében a koncentráció a paradicsom rózsaszín színéig emelkedik, majd fokozatosan csökken a termésben (Cano et al., 2003).

2.3. Vizsgálataimhoz alkalmazott analitikai módszerek

A kromatográfiás vizsgálatok célja összetett elegyek, hasonló kémiai-fizikai tulajdonságú komponenseinek elválasztása. A komponensek elválasztása két fázis: egy mozgó és egy álló fázis közti megoszláson alapul. A kromatográfiás módszerek előnye, hogy összetett minták komponenseit megfelelő körülmények között el tudjuk választani és azonosítani.

Vizsgálataim során a paradicsom és paprika mintákban található színanyagok detektálására és azonosítására HPLC módszereket fejlesztettem és alkalmaztam, míg az aromakomponensek detektálásához és azonosításához GC-MS módszert fejlesztettem.

2.3.1. GC-MS módszer

A klasszikus gázkromatográfiás detektorok pontosan megmutatják egy-egy komponens detektorba érkezésének idejét, ugyanakkor a pontos azonosítást megnehezíti, hogy a molekula szerkezetéről nem adnak információt. A gázkromatográfhoz kapcsolt tömegspektrométer segítségével pontos szerkezeti információt kaphatunk, ezzel megkönnyítve ismeretlen mintákban a komponensek azonosítását. A kapcsolt rendszer első egysége a gázkromatográf. A gázkromatográf minden olyan szerves és szervetlen molekula vizsgálatára, elválasztására alkalmas, ami illékony, és el tudjuk párologtatni az injektorban. A mozgófázis gáz, GC-MS technika esetén hélium, inert tulajdonsága miatt. Az állófázisként általában töltetes oszlopok helyett a kapilláris oszlopok az elterjedtebbek aromavizsgálatokra. A rendszerben működés közben állandóan áramlik a vivőgáz, amely képes a gőz állapotú komponenseket áthajtani az oszlopon, ahol megtörténik az elválasztás, majd átjuttatni az oszlop végéhez csatlakozó tömegspektrométerbe. Ha megfelelően választjuk meg a kromatográfiás körülményeket, a minta komponensei időben elkülönülnek a mozgófázisban, és a szétválasztott komponensek az állófázissal történő kölcsönhatásuk erősségének fordított sorrendjében fogják elhagyni a rendszert. Az elválasztást több tényező is befolyásolhatja, mint a vivőgáz minősége, áramlási sebessége, a hőmérséklet, az oszlop hossza és belső átmérője, az állófázis típusa és vastagsága. A gázkromatográf fő részei a gázrendszer, injektor, termosztát és az oszlop. A gázrendszer

tartalmazza a nagy tisztaságú mozgófázist valamint ezek szabályozó egységeit. Az injektor feladata a minta elpárologtatása, továbbá az analitikai oszlopra való juttatása az itt belépő vivőgáz segítségével. Az elválasztás a kromatográfiás oszlopon történik, ami egy programozható légtermosztátban helyezkedik el (Selli et al., 2014).

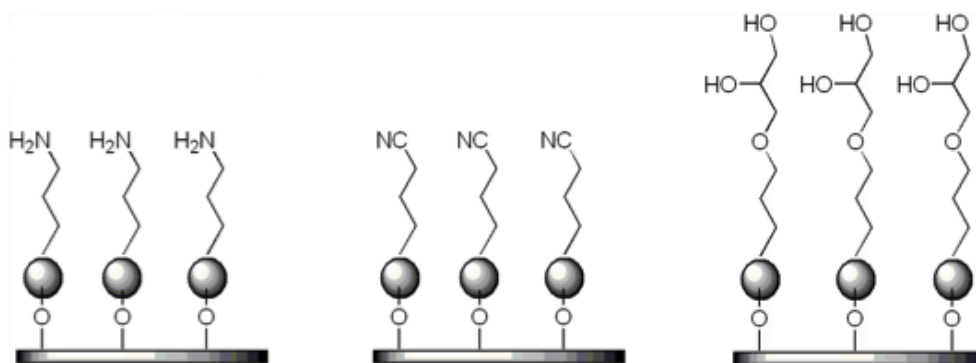
Az oszlopról az elválasztás sorrendjében a tömegspektrométerbe kerülnek a molekulák. A tömegspektrometria olyan analitikai módszer, melynek segítségével atomok, molekulák vagy molekulatöredékek tömegét tudjuk megmérni. Semleges részecskékből ionokat állítunk elő, majd ezeket az ionokat elektromágneses terek segítségével tömeg/töltés (m/z) arányuk szerint elválasztjuk. Az ionforrásban a vizsgálandó molekulákból/atomokból valamilyen gerjesztő energia segítségével ionokat hozunk létre. Az ionoptika biztosítja, hogy ezek az ionok lehetőleg azonos kinetikus energiával, egy nyalábban mozgatva jussanak az analizátorba. A tömeganalizátor válogatja szét őket tömeg/töltés hányadosuk (m/z) alapján. Az elválasztott ionok intenzitását a detektor méri, így egy ionáram intenzitás - fajlagos tömeg függvénykapcsolathoz, a tömegspektrumhoz jutunk. Az ionforrás az oszlopról érkező molekulák ionizációját végzi. GC-MS technikában leggyakrabban elektronütköztetési ionizációt (EI) alkalmaznak. A molekula elektronokkal ütközve ionizálódik, miközben páratlan elektronszámú gyökkation (M^+) képződik belőle. Ezt nevezzük molekulaionnak, melynek tömege gyakorlatilag megegyezik a molekuláéval, a különbség $1 e^-$ tömegének felel meg. Az elektronokat egy fémszál hevítésével ún. izzó katódból nyerjük, számukat az izzószál hőmérsékletével, energiájukat az alkalmazott gyorsító feszültség változtatásával befolyásolhatjuk. A gyakorlatban általában 70 eV kinetikus energiájú elektronokkal ütköztetik a mintát, ekkor jól reprodukálható, informatív EI(+) tömegspektrumokat kapunk. Az ionizálás után az ionizált molekulák a tömeganalizátorba kerülnek (Hubert et al., 2008). Gyakran alkalmazzák a kvadrupól tömeganalizátort, ami négy párhuzamosan elhelyezkedő, elektromosan vezető fémrúdból, elektródból áll. A rudakra egyen- és váltófeszültséget kapcsolunk úgy, hogy az átlósan egymással szemben elhelyezkedő elektródok potenciálja megegyezzen, az egymás melletti rudak potenciálja pedig ellentétes előjelű legyen. Az ionforrásból kilépő ionok a gyorsító feszültség hatására hosszanti irányból belépnek a rudak közti térrészbe, majd az analizátorban a folyamatosan változó kvadrupólus elektromágneses tér hatására fajlagos tömegüktől függő pályára állnak. A pozitív töltésű ionokat az éppen pozitív töltésű rudak taszítani, míg a negatív töltésűek vonzani fogják. Miközben a váltófeszültség hatására az elektródok relatív töltése folyamatosan változik, az ionok oszcillációs mozgást végezve haladnak a rudak között. A rudakra kapcsolt váltó- és egyenfeszültség megfelelő

megválasztásával elérhető, hogy az analizátoron csak egy kiválasztott m/z értékkel rendelkező ionok juthassanak át, az összes többi ion – a kisebbek és a nagyobbak is – a rudakba ütközve semlegesítődnek. Emiatt tömegszűrőnek is hívják a kvadrupól analizátort. A mérés történhet folytonos pásztázással, a teljes tömegspektrumok rögzítésével (Scan módban) vagy úgynevezett SIM (Single Ion Monitoring – egyedi ion detektálás) módszerrel, amikor kizárólag egy kiválasztott m/z értékkel rendelkező ionokat detektálunk. A detektor feladata az analizátoron áthaladó ionokat minél jobb hatásfokkal kimutatni. Ahhoz, hogy a detektor jelét hagyományos elektronikai eszközökkel erősíteni tudjuk, sok nagyságrendnyi áramerősítést kell elérni. Ugyanakkor ahhoz, hogy az egyes mért ioncsúcsok relatív intenzitása megegyezzen a megfelelő ionok mennyiségarányával, az erősített jelnek a becsapódó ionok számával arányosnak kell lennie. A detektorok két legfontosabb tulajdonsága tehát az erősítés, ami végső soron az érzékenységet határozza meg, és a linearitás, ami a spektrum „hűségét” illetve a torzulását befolyásolja (Mestdagh et al., 2014).

2.3.2. HPLC módszer

A HPLC az oszlopkromatográfiás elválasztások speciális formája. Általában biokémiai elválasztáshoz, azonosításhoz, mennyiségi meghatározáshoz alkalmazzák. A komponensek elválasztása a fizikai és kémiai tulajdonságuk alapján mozgó és álló fázis közti megoszláson alapul (Martin és Guiochon, 2005). Ahhoz, hogy meg tudjuk valósítani az elválasztást, első lépésként ki kell választani az erre alkalmas álló fázist, vagyis az oszlopot, és a megfelelő mozgó fázist. A mintát és a mozgó fázist pumpa segítségével áramoltatjuk át az oszlopon, majd az elválasztott komponensek különböző retenciós időkben megérkeznek a detektorba. A retenciós idő függ a molekulák kölcsönhatásától az álló és mozgó fázis között (Liu és Lee, 2006). Az általánosan alkalmazott HPLC rendszerek többféle kromatográfiás típusba sorolhatóak, mint például a normál fázisú, fordított fázisú, méretkizáráson alapuló, illetve ioncserén valamint bioaffinitáson alapuló elválasztást.

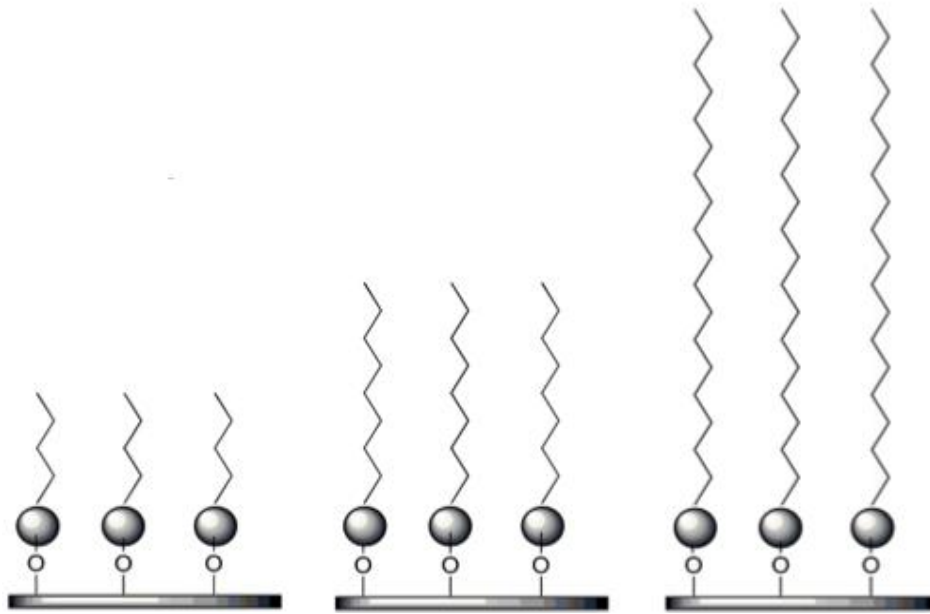
A normál fázisú elválasztás az elválasztandó molekulák polaritásán alapszik. Normál fázisú elválasztás esetében az álló fázis poláris, míg a mozgó fázis apoláris tulajdonságokkal rendelkezik. Az álló fázis többnyire szilikagél vagy módosított szilikagél, illetve alumínium-oxid (16. ábra).



16. ábra: Módosított szilika-normál fázis

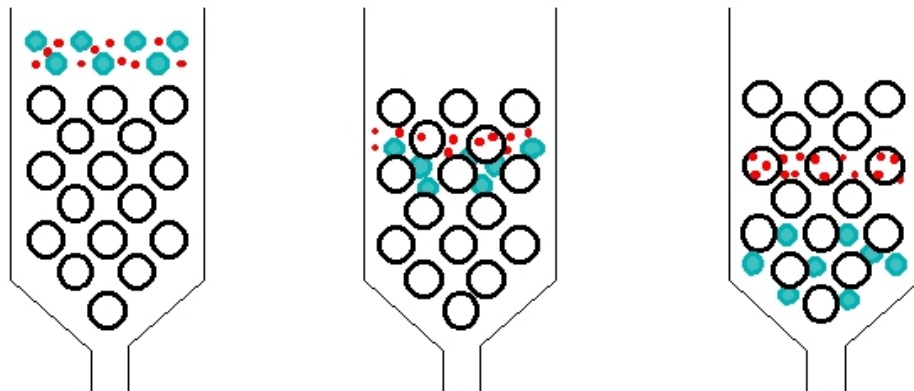
Általában poláros vegyületek, molekulák elválasztására alkalmazzák. Az első kromatográfiás elválasztások is ilyen módon történtek, amikor is Cvet kréta-ponon választott el klorofilokat petroléter segítségével.

Fordított fázisú elválasztás során – ahogy a nevéből is adódik – az álló fázis apolárosabb, míg a mozgó fázis polárosabb. A gyakorlatban alkalmazott álló fázisok nagy része módosított szilika. Az elválasztás alapjai fordított fázis esetén azok a hidrofób kölcsönhatások, amik a poláris eluens, a viszonylagosan apoláris elválasztandó molekula, és az apoláris álló fázis között történnek (17. ábra). A fordított fázist az 1970-es évek óta elterjedten használják karotinoidok elválasztására és mennyiségi meghatározására. Az irodalmi adatok alapján széles körben alkalmazzák a különböző szemcseméretű C18-as fázist. A C18-as fázisok mellett az elmúlt 15 évben az irodalmi adatok alapján egyre inkább elterjedt a C30-as kromatográfiás töltetek használata a paradicsomból és elszappanosított fűszerpaprikából kinyert karotinoidok és izomerjeik nagy hatékonyságú és kiváló felbontású elválasztására (Rodríguez-Amaya, 2007; Sander et al., 2000; Lin és Chen 2003).



17. ábra: Fordított fázisú elválasztás

A méretkizárásos vagy gélszűrési kromatográfia alapja a méret szerinti elválasztás. Ez a technika kiválóan alkalmas különböző fehérjék harmadlagos és negyedleges szerkezetének megállapításához, aminosavak azonosításához. Emellett elterjedt módszer poliszacharidok tömegének megállapítására (18. ábra).



18. ábra: Gélszűrési elválasztás

Az ioncserélő kromatográfia alapja a töltéssel rendelkező álló fázis és a vizsgálandó ionok kölcsönhatásán alapul. Ezt a kromatográfiai módszert széles körben használják

többek között víztisztításra, ligandumcserélőként, fehérjék esetében ioncserés eljárásra, valamint magas pH-jú anioncserélőként szénhidrátok esetében.

2.3.3. LC-MS módszer

A folyadékkromatográfia és tömegspektrometria kombinálása révén új lehetőségek nyíltak a megbízhatóbb minőségi és mennyiségi azonosításokra. Míg a folyadékkromatográfias elválasztás során a retenció idő és a spektrum állt a rendelkezésre a komponensek azonosítására, addig a tömegspektrométerrel való összecsatolása lehetőséget nyújt a molekulák szerkezetének megbízhatóbb meghatározására. A két elválasztási módszer kapcsolása két nagy problémát vetett fel. Az egyik problémát az oldószerben található esetlegesen nagy mennyiségű víz jelentheti, amely elpárologtatása hatalmas térfogatnövekedéssel jár. A másik problémát a molekulák tulajdonságai jelenthetik. Míg egyes molekulák folyadékkromatográfias módszerekkel elválaszthatók, hőérzékenyek vagy kevésbé illékonyak lehetnek, így az elterjedt elektronütköztetési ionizációval vagy kémiai ionizációval sem ionizálhatóak. Napjainkra az LC-MS kapcsolat már nem igényel bonyolult illesztőegységeket, az atmoszférikus nyomáson működő ionizációs technikák (pl. ESI, APCI, APPI) megjelenésével közvetlenül össze lehet kapcsolni a két műszert. A folyadékkromatográfias oszlopról érkező mintát közvetlenül be lehet vezetni az MS ionforrásba. Nincs univerzális technika, a feladat megoldásához meg kell találni az alkalmas ionforrás-analizátor kombinációt (Long et al., 2006; Pattenden és Robson, 2006).

Az elektropray ionizációs technika (Electrospray Ionization, ESI) a folyadékkromatográfias módszerekkel együtt vált népszerűvé az elmúlt évtizedekben. A vizsgálandó nem illékony, ionos vagy poláris vegyületet valamilyen viszonylag illékony, poláris oldószerben oldjuk. A mintaoldatot egy nagyfeszültségű kapillárison keresztül juttatjuk a légtérbe, ahol az elektrosztatikus tér hatására a kapilláris végén lévő folyadék felszínén töltéstöbblet képződik, így a kapillárisból kilépő folyadék kúpszerűen kicsúcsosodik, s a csúcstól töltéssel rendelkező folyadékcseppek szakadnak le. Az ESI technika a könnyen protonálódó, bázikus csoportokat tartalmazó vegyületek vizsgálatára alkalmas leginkább és valamennyi analizátor típusal kombinálható.

Atmoszférikus nyomású kémiai ionizáció (Atmospheric Pressure Chemical Ionization, APCI) alkalmazása során porlasztással hozzuk létre a cseppeket, viszont a fémkapillárison nincs nagyfeszültség. Az APCI ionizációban az ionok koronakisülés révén jönnek létre. A koronakisülés hatására a víz- vagy más oldószer-molekulák ionizálódnak, majd ezek lépnek

reakcióba a mintamolekulákkal, miközben molekulaionok ($[M+H]^+$, $[M-H]^-$) képződnek. Az APCI kisebb, poláris, de nem feltétlenül ionos molekulák vizsgálatára alkalmas.

Atmoszférikus nyomású fotoionizáció (Atmospheric Pressure Photoionization, APPI) során a mintához olyan anyagot adnak, aminek az UV-tartományban jelentős elnyelése van. A mintát porlasztás közben UV-fénnyel besugározzuk és a mintamolekulákat végül a gerjesztett adalékmolekulák ionizálják. Ezzel a módszerrel kis, apoláris molekulák vizsgálhatók.

A mátrixsegített lézer deszorpció és ionizáció (Matrix-Assisted Laser Desorption/Ionization, MALDI) módszer alapja, hogy a mintát olyan mátrixszal kell elegyíteni, mely az alkalmazott lézer hullámhosszánál fényelnyelést mutat. Ezt a mátrix-minta oldatot rászárítjuk a mintatartóra, majd ezt követően a szilárd mikrokristályokat besugározzuk lézerfénnyel. A fotonok többségét a mátrix molekulák abszorbeálják, gerjesztődnek, így a mintát a gerjesztett, ionizált mátrixmolekulák fogják ionizálni, miközben egy lépésben végbemegy a lézer deszorpció és ionizáció, ennek eredményeképpen molekulaionok képződnek. Ezzel az igen érzékeny módszerrel nagy molekulatömegű, poláris vagy könnyen polarizálható minták vizsgálhatóak.

Az ionsapda tömeganalizátor három hengeresen szimmetrikus elektródból áll, melyekre egyen- és váltófeszültséget kapcsolunk. Az ionsapda belsejében egy háromdimenziós kvadrupólus tér alakul ki, mely hatására az ionok fajlagos tömegüktől függően különböző periodikus pályákra állnak. A csapdázást követően változtatjuk a kvadrupólus teret, mely hatására az ionok növekvő m/z arány sorrendben kilépnek az analizátorból. Az ionsapda analizátorok gyakori alkalmazásának oka a tandem tömegspektrometria (MS/MS és MS^n kísérletek) és a többszörös tömeganalízis lehetősége. Az ionsapda előnyei a kvadrupól analizátorral szemben a nagyobb érzékenység, gyorsabb pásztázási sebesség, szélesebb méréstartomány, nagyobb tömegfelbontás, viszont hátránya a gyengébb mennyiségi meghatározási lehetőség elsősorban a minta mennyiségétől függő effektusok miatt.

A repülési idő analizátor (TOF) az ionforrásban előállított ionokat egy gyorsító feszültség hatására elindítja az analizátor felé. Ezek a töltéssel rendelkező részecskék az elektrosztatikus térben a töltésükkel arányos kinetikus energiát vesznek fel. Amennyiben azonos töltésű ionokról van szó, ezek az elektrosztatikus gyorsítást követően azonos kinetikus energiával rendelkeznek. Mikor az ionok belépnek az analizátorba, egy úgynevezett repülési csőbe kerülnek. Az azonos kinetikus energiával rendelkező, de különböző tömegű ionok különböző sebességgel repülnek ami alapján a repülési csőben

elkülönülnek, majd különböző időben érik el a detektort. A repülési idő az adott ionforrás-detektor távolság és gyorsító feszültség mellett csak a fajlagos tömegtől függ. A pontos tömegméréshez az szükséges, hogy az ionok egyszerre, impulzusszerűen lépjenek be a repülési csőbe, és repülési idejüket pontosan tudjuk mérni.

3. CÉLKITŰZÉSEK

Kutatásaim során a következőket tűztem ki célul:

1. Hatékony GC-MS módszer fejlesztése aromakomponensek elválasztására fűszerpaprika, paradicsom, és paradicsomkészítmények esetében.
2. Magyar, külföldi, valamint füstölt fűszerpaprikák egyedi, megkülönböztetést szolgáló komponenseinek meghatározása.
3. HPLC módszer fejlesztése és megfelelő elúció kidolgozása a szappanosított fűszerpaprikában található karotinoidok elválasztására kereszt kötésű C18-as oszlop alkalmazásával.
4. Hatékony elúciós rendszer kidolgozása a paradicsomban található karotinoidok és geometriai izomerjeik elválasztására az új típusú tömör magvú (core) C30-as oszlop alkalmazásával.
5. A tömör magvú C30-as oszloppal elválasztott azonosítatlan karotinoidok meghatározása LC-MS technikával.
6. A kifejlesztett módszerek alkalmazása különböző hazai és külföldi paradicsomkészítmények és fűszerpaprikák karotinoidösszetételének meghatározására.

4. ANYAG ÉS MÓDSZER

4.1. Aromavizsgálat

4.1.1. Felhasznált fűszerpaprika és paradicsom minták

Fűszerpaprika minták:

A hazai eredetű fűszerpaprika mintákat a Rubin Kft. bocsátotta a rendelkezésemre.

A vizsgált minták:

Magyar konvencionális termesztésű (450)	Magyar bio Meteorit (098)
Magyar konvencionális termesztésű (461)	Magyar füstölés nélküli kontroll
Magyar bio termesztésű Mihálytelki (095)	Magyar füstölt paprika
Magyar bio Meteorit (097)	Spanyol eredetű fűszerpaprikák
	Dél-afrikai eredetű fűszerpaprika
	Argentín eredetű fűszerpaprikák
	Kínai eredetű fűszerpaprikák

Friss paradicsom minták:

Az aromavizsgálatokhoz a Szent István Egyetem Kertészeti Technológiai Tanszékének Oktatási, Bemutató és Kísérleti Telepén 2014-ben termesztett Heirloom típusú, Uno Rosso és Strombolino paradicsomokat, valamint kereskedelmi forgalomból beszerezhető 2015-ben termesztett andalúz és valenciai paradicsomokat használtam fel.

- Heirloom Aunt Ruby's German Green
- Heirloom Yellow Brandyvine
- Heirloom Black from Tula
- Heirloom German Johnson
- Heirloom Cherokee Purple
- Uno Rosso

- Strombolino
- Spanyol koktélpáradicsom (Andalúzia)
- Spanyol koktélpáradicsom (Valencia)

A friss páradicsomok mellett feldolgozott, kereskedelmi piacról beszerezhető páradicsomtermékeket is vizsgáltam (4. táblázat).

4. táblázat: Páradicsomkészítmények:

Márka	Típus	Ref%	Szavatossági idő	Származási hely
Aranyfácán	sűrített	22-24	2017. 08. 11.	Magyarország
Kecskeméti	sűrített	18-20	2016. 10. 14.	Magyarország
Kecskeméti	ivólé	8	2016. 10. 08.	Magyarország
Spar	hámozott egész	-	2018. 07. 10.	Olaszország
S-budget	ivólé	8	2017. 09. 17.	Olaszország
Mutti-Parma	sűrített	28	2018. 02. 12.	Olaszország
Amiko	ivólé	8	2016. 12. 11.	Olaszország
Lecker	ivólé	7	2016. 07. 31.	Szerbia

4.1.2. Aromakomponensek kinyerése

Az aromakomponensek kinyerésére irodalmi adatok és előkísérletek alapján a leghatékonyabb módszernek a hagyományos vízgőzdesztillálás bizonyult (Kocsis et al.; 2002). A mintaelőkészítés során 2 l-es gömblombikba bemértem 30,0 g őrölt fűszerpaprika vagy páradicsom mintát, 100,0 g konyhasót, 100 µl 1 mg/ml-es koncentrációjú 1-undekanol belső standard oldatot és 500,0 ml desztillált vizet. A rendszert feltöltöttem desztillált vízzel és a tetejére 5,0 ml hexánt rétegeztem. A másfél órán át tartó desztillálás során az aroma komponensek a hexánrétegbe összegyűltek. Az extraktumból 1 µl-t injektáltam GC-MS készülékbe. A desztilláló berendezés a 19. ábrán látható.



19. ábra:
Desztilláló berendezés

4.1.3. Aromakomponensek vizsgálata

A vízgőzdesztilláció segítségével előállított extraktumokban található aromakomponensek elválasztása és azonosítása Thermo Trace 1300 Series Single Quadropole GC-MS segítségével történt.

A GC-MS vizsgálat körülményei:

- Oszlop: SLBTM-5ms fused silica kapilláris oszlop, 30 m x 0,25 mm x 0,25 μ m
- Injektor hőmérséklete: 200°C
- Injektált mennyiség: 1 μ l
- Injektor mód: split
- Lefúvási sebesség: 20 ml/min
- Vivőgáz: He (4.6), 1 ml/min

A kemence felfűtési programja:

Lépések	Felfűtési sebesség [°C/min]	Hőmérséklet [°C]	Hőmérsékleten tartás ideje [min]
Kezdő	-	50	4
1.	10	150	3
2.	10	230	7

- Tömegtartomány: 35-350 Da
- Scan idő: 0,1 s
- Detektor hőmérséklete: 260°C
- Ionforrás hőmérséklete: 240°C

4.1.4. Aromakomponensek azonosítása

A mintákból vízgőzdesztillációs eljárással készített extraktumokból több mint 200 komponenst azonosítottam. Az azonosítás NIST tömegspektrum könyvtárral illetve standard anyagok segítségével történt. A mérések közti retenciós idő-eltolódások kiküszöbölésére az irodalomban található Kováts index használata nem volt megfelelő, mivel a felfűtés sebessége nem volt egyenletes, valamint az egyéb, mások által számított retenciós indexek használata sem lett volna pontos, mivel az alkalmazott módszert én fejlesztettem és validáltam. Így a retenciós idő eltolódásának kiküszöbölésére *n*-alkánokból álló standard oldatot injektáltam ami tartalmazta az 1-undekanol belső standardot is. A standardok és a belső standard esetében mért retenciós értékekkel tudtam korrigálni a minták mérése során jelentkező esetleges retenciós idő-csúszást. Így minden azonosított molekulához a holt idő és a retenciós idők változásának figyelembevételével tudtam társítani egy számított retenciós indexet (RI).

4.1.5. Alkalmazott statisztikai módszer

A vizsgálatok elvégzése után a kapott adathalmaz kezelhetősége, átláthatósága, és az általában több mint 200 komponens közti összefüggések vizsgálatára a főkomponens-analízist (PCA) választottam.

A főkomponens-analízis a faktoranalízis speciális esete, ahol olyan új halmazokat keresünk, melyek jobban tükrözik a variabilitást. Az első változónak azt a komponenst választjuk, amelyik a legnagyobb variabilitást hordozza, a második az erre az egyenesre merőleges irányok mentén tovább haladva határozzuk meg a további főkomponenst. A főkomponenseink száma függ a változók számától, és egymásra merőlegesek. A főkomponens-analízis segítségével könnyebb megtalálni az adathalmazra leginkább jellemző mintázatot, valamint ezzel a módszerrel az adatok nagy mértékben tömöríthetőek az információtartalom számottevő csökkenése nélkül. A módszer másik előnye, hogy az adathalmazban található „zaj” a dimenziócsökkenés segítségével kiküszöbölhető. Végeredményben ábrázolni tudjuk egy koordinátarendszerben a sokdimenziós adathalmazunkat egy pontfelhőben (Abdi és Williams, 2010).

A statisztikai kiértékeléseket Past3 programmal végeztem el.

4.2. Karotinoid vizsgálat

4.2.1. Felhasznált paradicsom és fűszerpaprika minták karotinoid vizsgálatra

A karotinoid vizsgálatokhoz a Szent István Egyetem Kertészeti Technológiai Tanszékének Oktatási, Bemutató és Kísérleti Telepén 2014-ben termesztett Heirloom típusú paradicsomokat használtam fel.

Friss paradicsomok:

- Heirloom Yellow Brandyvine
- Heirloom Kellogg's Breakfast
- Heirloom German Johnson
- Heirloom Cherokee Purple

Paradicsom készítmények:

Kereskedelmi forgalomból különböző ivóleveket, sűrített paradicsomokat, és paradicsompüréket szereztem be (5. táblázat).

5. táblázat: Karotinoid vizsgálatra felhasznált paradicsomkészítmények

Márka	Típus	Ref%	Szavatossági idő	Származási hely
Aranyfácán	sűrített	22-24	2017. 08. 11.	Magyarország
Kecskeméti	sűrített	18-20	2016. 10. 14.	Magyarország
Kecskeméti	ivólé	8	2016. 10. 08.	Magyarország
Univer	ketchup	28	2018. 07. 10.	Magyarország
Globus	ketchup	28	2017. 09. 17.	Magyarország
Heinz	ketchup	30	2017. 09. 17.	Magyarország
Mutti-Parma	püré	28	2018. 02. 12.	Olaszország
Szobi	ivólé	9	2018. 03. 14.	Magyarország
Amiko	ivólé	8	2016. 12. 11.	Olaszország
Tesco	püré	22	2016. 12. 17.	Magyarország
Chumak-tom	ketchup	28-30	2017. 11. 20.	Olaszország
Chumak-chil	ketchup	28-30	2017. 11. 11.	Olaszország
Carloni	sűrített	36	2016. 12. 31.	Olaszország
CBA	ivólé	7,5	2017. 09. 15.	Olaszország
Cirio	ivólé	8	2017. 05. 04.	Olaszország
Isabel	püré	18-20	2017. 10. 22.	Olaszország
Vita Food	sűrített	36	2016. 12. 31.	Olaszország
LS Pomil	ivólé	7,5	2017. 09. 15.	Olaszország
MPM Kiskun	ivólé	8	2017. 05. 04.	Magyarország
Happy Fruch	püré	18-20	2017. 10. 22.	Olaszország

4.2.2. Színanyagok kinyerése paradicsomból

A színanyagok kinyerésének első lépéseként bemértem a mintából 5,0 g-ot friss minta esetén, ivóléből 2,5 g-ot, míg sűrített paradicsomból 1,0-2,0 g-ot színétől függően. A mintát kvarchomokkal porcelán mozsárban homogenizáltam, majd 20,0 ml analitikai tisztaságú metanolt adtam hozzá. A felülúszót átöntöttem egy Erlenmeyer lombikba. A mozsárban maradt mintát 3 lépésben átöntöttem a lombikba 10,0 ml metanol és 50,0 ml diklór-etán segítségével. Pár csepp víz hozzáadása után a rétegek szépen szétválnak. Pár perc pihentetés után elválasztó tölcserbe töltöttem a mintát, majd lassan átcepegtettem

vízmentes nátrium-szulfáton gömblombikba. Az átcepegetett mintát bepároltam, majd 10,0 ml HPLC tisztaságú acetonban feloldottam és HPLC szűrőn átszűrtem.

4.2.3. Színanyagok kinyerése fűszerpaprika örleményből

Fűszerpaprika örleményből 0,50 g-ot bemértem Erlenmeyer lombikba, majd 50,0 ml diklór-etán, metanol és aceton 2:1:1 arányú keverékét öntöttem rá. A mintákat 4 percre ultrahang fürdőbe raktam, majd 20 percig rázógépen rázattam. Az így kapott mintákat szűrőpapíron átszűrtem, majd bepároltam. A mintákat 5,0 ml HPLC tisztaságú metanolban és 5,0 ml HPLC eluensben (10% metanol, 35% aceton, 55% izopropanol) feloldottam, és HPLC szűrőn átszűrtem.

Szappanosított minták készítéséhez bemértem 0,50 g fűszerpaprikát, hozzáadtam 20,0 ml analitikai minőségű metanolt, 1,50 g aszkorbinsavat és 5,5 ml metanolban oldott 30%-os KOH oldatot, majd 30-35 percig forraltam. Forralás után folyó víz alatt lehűtöttem a lombikot, és 15,0 ml 20%-os NaCl oldatot adtam hozzá. Ezt követően választó tölcserbe átöntöttem, és 60,0 ml etil-acetátot adtam hozzá, és óvatosan összeráztam. A metanolos fázist leengedtem, és a felső fázist vízzel háromszor átmostam, majd vízmentes nátrium-szulfáton átcepegettem. A szappanosított mintát bepároltam, és 10,0 ml HPLC tisztaságú acetonban feloldottam.

4.2.4. HPLC mérés körülményei

A HPLC vizsgálatokat Hitachi Chromaster készülékkel végeztem, a detektálás Model 5430-as diódasoros detektorral történt. Model 5210 automata mintaadagolóval injektáltam, az eluens áramoltatását Model 5110 típusú gradiens pumpa végezte. A berendezést az EZchrom Elite software (3.3.2. SP2) segítségével kezeltem.

A fűszerpaprika karotinoidjainak elválasztást kereszt kötésű UHPLC oszlopon (5 cm, 1,8 μm) végeztem. Az elválasztás gradiens elúcióval történt (A) aceton- (B) víz segítségével. Az elúció kezdetben 20% B A-ban, majd 25 perc alatt 100% A-ra, végül 5 perc alatt visszatért a kezdeti 20% B A-ban. Az áramlási sebesség 0,7 ml/perc volt.

A paradicsom és a szappanosított fűszerpaprika elválasztására tömör magvú C30 (15 cm, 2,6 μm) oszlopot alkalmaztam. A gradiens elúció (A) metanol- (B) *terc*-butil-metil-éterben történt. A gradiens 100% A-val kezdődik, és 30 perc alatt 30% B A-ban, végül 5 perc alatt visszatér 100% A-ra. Az áramlási sebesség 0,7 ml/perc volt.

A minőségi meghatározás mindkét elválasztás esetében diódasoros detektorral (DAD, 190-600 nm) történt a spektrális tulajdonságok, a retenciós idő, különböző standardok

(lutein, β -karotin, likopin) és irodalmi adatok alapján (Rodriguez-Amaya, 2001; Lee et al., 2001; Lin és Chen, 2003; de Rosso és Mercadante., 2007; de Faria et al., 2009).

4.2.5. LC-MS mérés körülményei

Az LC-MS vizsgálatokat a NÉBIH élelmiszeranalitika laboratóriumában végeztem Velencén.

Az eddig azonosított és az ismeretlen karotinoidok azonosítására Thermo Surveyor HPLC rendszerrel kapcsolt Thermo TSQ Quantum tömegspektrométert alkalmaztam elektroporlasztásos ionforrással. A mintakomponensek elválasztására Accucore C30 150x4,6 mm-es, 2,6 μ m-es szemcseméretű oszlopot használtam.

Az oszlopon az elválasztás gradiens elúcióval történt 4% víz/metanol és *terc*-butil-metil-éter alkalmazásával. Az elválasztás 100% metanol/víz eleggyel kezdődött, ami 25 perc alatt lecsökkent 65%-ra, és a *terc*-butil-metil-éter koncentrációja megemelkedett 35%-ra. Ezeket a körülményeket 10 percig tartotta, majd 5 perc alatt újra elérte a 100%-ban a 4% víz/metanol.

Az oszlopon a folyadék áramlása 700 μ l/perc volt, majd az oszlop után két részre oszlott a minta. 100 μ l/perc áramlási sebességgel a tömegspektrométerbe, 600 μ l/perc áramlási sebességgel a diódasoros detektorhoz jutott a minta. A diódasoros detektort és a tömegspektrométert párhuzamosan használtam fel az adatfelvételre.

A tömegspektrométert Full Scan és SRM (Selected Reaction Monitoring-Kiválasztott Átmenet Monitorozás) módban alkalmaztam pozitív módban. A Full Scan lényege, hogy a három kvadrupol közül az egyik teljes pásztázási módban működik, míg a másik két kvadrupol tömegszűrés nélkül működik. Ezzel a módszerrel az extraktumban található karotinoidokat választottam el, és azonosítottam az ismerteket. Az SRM mód során az első kvadrupol a kiválasztott pozitív módú molekulaiont engedi a detektorba, míg a második kvadrupol a N₂ gázzal való ütköztetés után az így keletkezett fragmensionokat engedi a detektorba, a harmadik kvadrupol pedig az általam kiválasztott ionokat engedi a detektorba. Így a kapott kromatogramok alapján nagy biztonsággal meghatározhatjuk az ismeretlen komponenseket.

4.3. Felhasznált vegyszerek és standarok

Vegyszerek

- Hexán (Merck, HPLC tisztaságú)
- Metanol (Merck, analitikai és HPLC tisztaságú)
- Diklór-etán (Merck, analitikai tisztaságú)
- Vízmentes nátrium-szulfát (Merck)
- Aceton (Merck, HPLC tisztaságú)
- *terc*-Butil-metil-éter (Merck, HPLC tisztaságú)
- Propanol (Merck, HPLC tisztaságú)

Standardok

- Hexanal (Sigma-Aldrich, >97% tisztaságú)
- β -Linalool (Sigma-Aldrich, >95% tisztaságú)
- 2-Izobutil-3-metoxipirazin (Sigma-Aldrich, >95% tisztaságú)
- Metil-szalicilát (Sigma-Aldrich, >99% tisztaságú)
- β -Citronellol (Sigma-Aldrich, >97% tisztaságú)
- Eugenol (Sigma-Aldrich, >95% tisztaságú)
- Dihidro- α -jonon (Sigma-Aldrich, >95% tisztaságú)
- α -Humulén (Sigma-Aldrich, >95% tisztaságú)
- Acetil-eugenol (Sigma-Aldrich, >95% tisztaságú)
- *n*-alkánok (C₁₀, C₁₂, C₁₄, C₁₆, C₁₈, C₂₀) (Sigma-Aldrich, >95% tisztaságú)
- 1-Undekanol (Sigma-Aldrich, >97% tisztaságú)
- Likopin (Sigma-Aldrich, >95% tisztaságú)
- Lutein (Sigma-Aldrich, >95% tisztaságú)
- Apo-karotinal (Sigma-Aldrich, >95% tisztaságú)
- β -karotin (Sigma-Aldrich, >95% tisztaságú)

5. EREDMÉNYEK

5.1. GC-MS módszer validálása aromakomponensek elválasztására és detektálására

Az aromavizsgálatokat 22 mintából végeztem, minden mérést három ismétléssel. Fűszerpaprika vizsgálatok esetében mintegy 150-200 komponenst azonosítottam.

A megfelelő minőségi és mennyiségi vizsgálatok elvégzéséhez validáltam az általam kifejlesztett módszert. Meghatároztam a módszer specifikusságát, pontosságát, helyességét, standardok alapján a legkisebb vizsgálható mennyiséget, a komponensek linearitását, valamint a módszer robusztusságát.

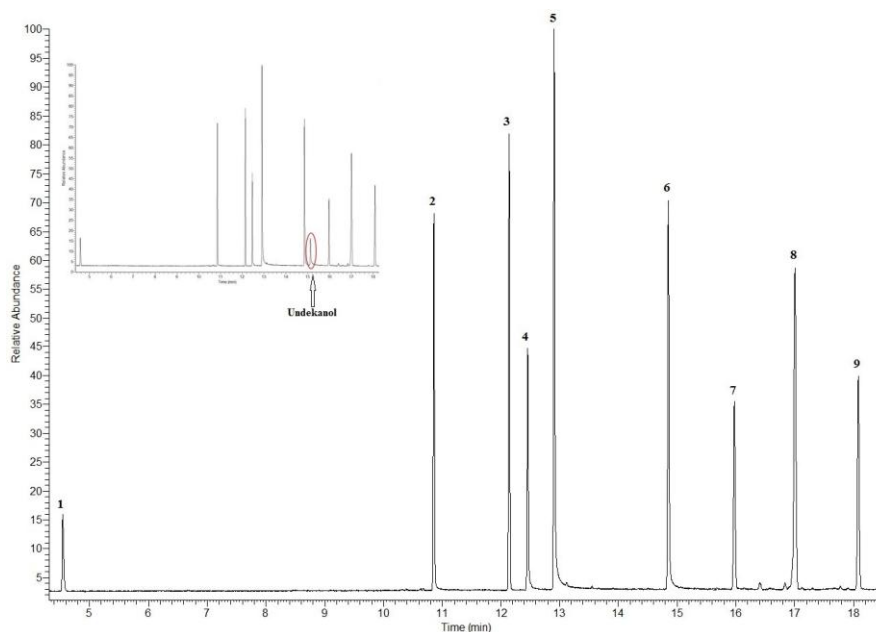
5.1.1. Specifikusság

A módszer specifikusságának megállapításához megvizsgáltam, hogy a módszer képes-e elválasztani a keresett komponenst zavaró, egyéb komponensek jelenlétében. Amennyiben a módszer szelektív, specifikusnak nevezhetjük.

A vizsgálatokhoz olyan standard anyagokat választottam, amiket tartalmaznak a paradicsom és fűszerpaprika minták. 1-undekanolt a vizsgálatokhoz belső standardként is tudtam alkalmazni, mivel a mintákban nem volt jelen, viszont hasonló tulajdonságai vannak mint az általam detektált aromakomponenseknek. Az oldatokat 500 ng/ml-es koncentrációban injektáltam (20. ábra).

Felhasznált standardok:

1. Hexanal
2. β -Linalool
3. 2-Izobutil-3-metoxipirazin
4. Metil-szalicilát
5. β -Citronellol
6. Eugenol
7. Dihidro- α -jonon
8. α -Humulén
9. Acetil-eugenol



20. ábra:

Specifikusság vizsgálat, standardok elválasztása

1. Hexanal, 2. β -linalool, 3. 2-izobutil-3-metoxipirazin, 4. metil-szalicilát,

5. β -citronellol, 6. eugenol, 7. dihidro- α -jonon, 8. α -humulén, 9. acetyl-eugenol

5.1.2. Pontosság

A módszer pontosságának igazolásához 500 ng/ml-es 1-undekanol oldatot használtam. Egy napon keresztül óránként injektáltam az 500 ng/ml-es oldatból. A 24 mérésből származó csúcsterület relatív standard deviációja (RSD) 0,22% volt, míg a retenciós idő relatív standard deviációja 0,38%.

5.1.3. Visszanyerés

A visszanyerésvizsgálatot a belső standardként is alkalmazott 1-undekanol oldattal végeztem. A desztillálás megkezdése előtt a mintát, sót és vizet tartalmazó lombikba 200 ml, 1 mg/ml koncentrációjú undekanol oldatot adtam. A visszanyerés vizsgálatához kilenc párhuzamos vizsgálatot végeztem, a visszanyerés 95,2% volt 2,77%-os szórás mellett.

5.1.4. A detektálási határ (LOD) és a kimutatási határ (LOQ)

A detektálási határnak tekintjük a gyakorlatban a zaj háromszorosát, míg a kimutatás alsó határának a zaj tízszeresét. Meghatároztam a kiválasztott standard oldatok detektálási és kimutatási határát kilenc párhuzamos vizsgálattal, amit a 6. táblázatban foglaltam össze.

6. táblázat. Standardok detektálási és kimutatási határai

Standardok	LOD (S/N=3) (ng/ml)	SD (n=9)	LOQ (S/N=10) (ng/ml)	SD (n=9)
Hexanal	4,7	0,02	12,3	0,2
β-Linalool	2,9	0,1	10,6	0,09
2-Izobutil-3-metoxipirazin	5,5	0,04	11,9	0,1
Metil-szalicilát	6,2	0,1	14,5	0,07
β-Citronellol	3,7	0,2	11,6	0,01
Eugenol	5,8	0,1	14,2	0,08
Dihidro-α-jonon	3,1	0,05	10,9	0,1
α-Humulén	3,6	0,1	10,1	0,04
Acetil-eugenol	5,2	0,03	13,2	0,07

5.1.5. Linearitás

A módszer linearitásának meghatározásához a standard anyagokból 500-15,625 ng/ml-es oldatokat készítettem, majd injektáltam.

A kapott csúcsterületek és a koncentráció közötti összefüggések az alábbi egyenletekkel írhatóak le, ahol is az y a csúcsterület, x a ng/ml-ben kifejezett koncentráció (7. táblázat).

7. táblázat: Standardok linearitása

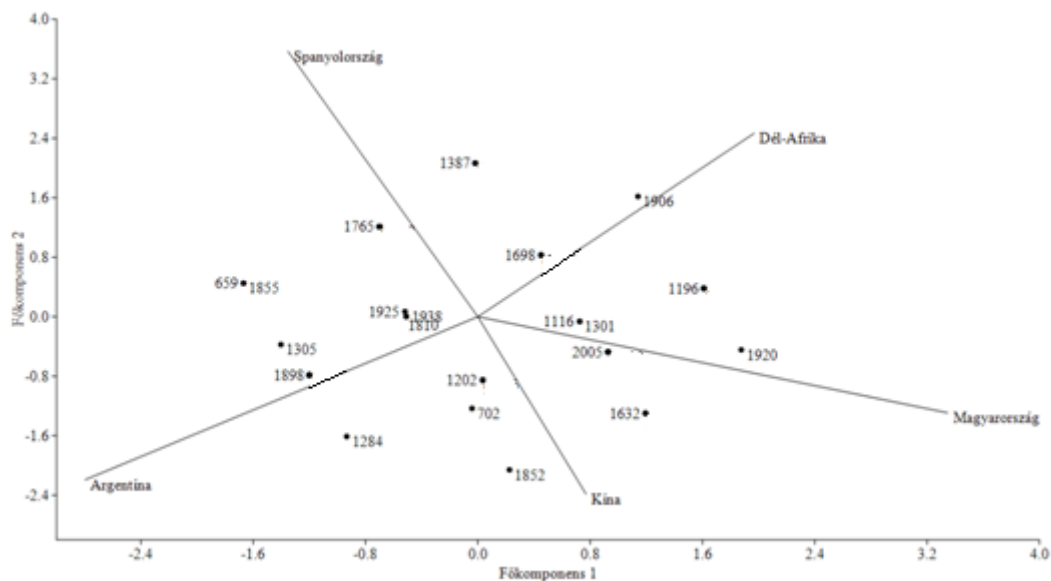
Standardok	Egyenes egyenlete	R ² (n=5)
Hexanal	$y=4,5*10^{-2}-2,3*10^{-4}x$	0,9991
β -Linalool	$y=2,7*10^{-3}-3,5*10^{-3}x$	0,9987
2-Isobutil-3-metoxipirazin	$y=3,1*10^{-2}-4,4*10^{-4}x$	1,0000
Metil-szalicilát	$y=7,1*10^{-2}-2,8*10^{-2}x$	0,99954
β -Citronellol	$y=4,6*10^{-3}-8,3*10^{-4}x$	0,9799
Eugenol	$y=8,2*10^{-4}-1,7*10^{-4}x$	1,0000
Dihidro- α -jonon	$y=4,5*10^{-2}-2,6*10^{-4}x$	0,9894
α -Humulén	$y=3,5*10^{-3}-4,3*10^{-4}x$	0,9973
Acetil-eugenol	$y=4,7*10^{-2}-2,8*10^{-4}x$	0,9989

5.2. Fűszerpaprikák aromavizsgálatának eredményei

A fűszerpaprika szinte a világ minden táján elterjedt fűszernövény. Mint fűszer, elsődleges minőségi paraméter a szín mellett a benne található aromaanyagok összessége.

Irodalmi adatok alapján a fűszerpaprika aromájának meghatározó vegyületcsoportjai a savak, alkoholok, aldehidek, alkének, észterek, ketonok, és laktonok és fenolos vegyületek. Ezek közül illat szempontjából a legaktívabb vegyületek a hexanal, melynek jellegzetes zöld fű illata van, a heptanal, melynek citromra, narancsra emlékeztető illata van, a kevésbé kellemes, enyhén rothadt illatú β -ocimén, vagy a gombaillatra emlékeztető *transz*-3-heptén-2-on. A fűszerpaprikában található összes aromakomponens komplex elegye alkotja és határozza meg a karakterisztikáját, jellemző illatát a különböző termesztési helyről származó fűszerpaprikáknak (Xavier et al., 2015).

Az eredményeim bemutatására külföldi és hazai termesztésű fűszerpaprika örleményeket választottam. Olyan aromakomponenseket kerestem, melyek az adott termesztési hely jellegzetességét adhatják. Hazai termesztésű fajok közül a Meteorit és a Mihálytelki fajtákat vizsgáltam, azon belül is a bio és a konvencionális termesztés közötti különbségeket kerestem. A magyar termesztésű paprikák mellett vizsgáltam Kínából, Argentínából, Dél-Afrikából és Spanyolországból származó fűszerpaprikákat.



21. ábra:

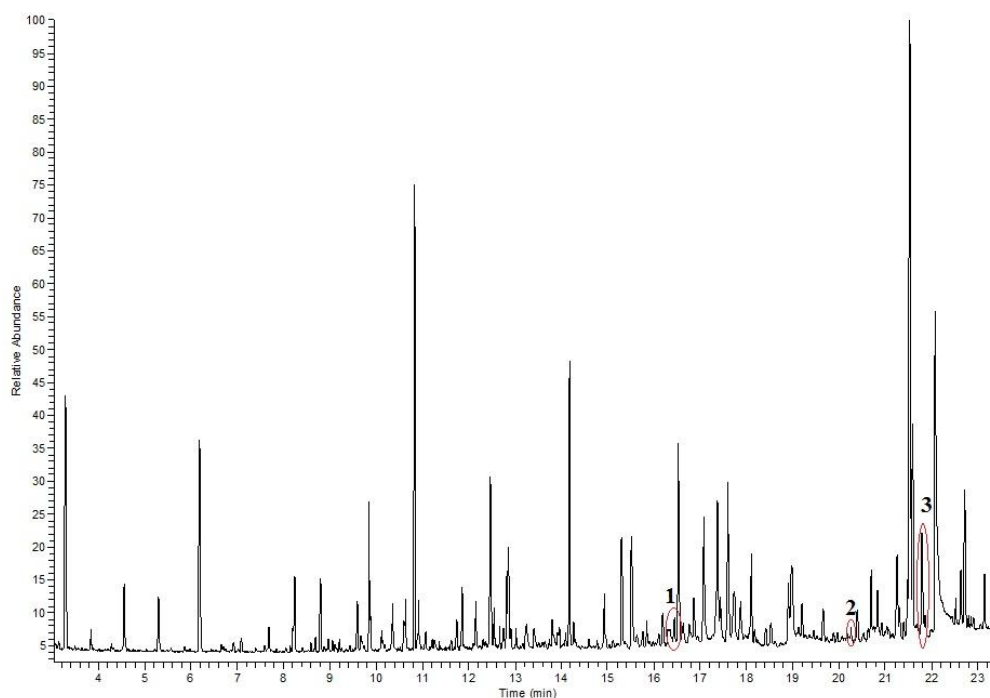
Magyar, spanyol, argentin, kínai, dél-afrikai fűszerpaprikák összehasonlítása PCA analízissel

A 21. ábrán látható a vizsgált mintákból összeállított főkomponens-analízis. Az ábra készítésénél azokat a komponenseket, amelyek minden mintában megtalálhatóak voltak, nem vettem figyelembe. a pontok mellett található számok a retenciós indexet jelölik. A 2-8. mellékletek tartalmazzák a minták aroma- összetételét és csúcs alatti területét részletesen. Jól látható, hogy minden termesztési helynek megvan a sajátos hatása az aroma kialakulására, valamint ezáltal igazolható, hogy a mintaelőkészítés és a validált mérési módszer alkalmas a különböző eredetű fűszerpaprikák közti különbségek meghatározására. A további fejezetek tartalmazzák részletesen az egyes termesztési helyre jellemző komponenseket.

5.2.1. Magyar fűszerpaprikák

A hazai fűszerpaprika, mint hungarikum, fűszernövény, a magyar konyha elengedhetetlen alapanyaga. Felhasználása világszerte elterjedt kellemes szín-, íz- és aromaanyagainak köszönhetően.

A vizsgálatokhoz Meteorit és Mihálytelki fajtákat választottam bio és konvencionális termesztésekből. Az két különböző paprikafajta és a termesztés módja közt tapasztaltam némi különbséget, de főként a bennük található aromakomponensek mennyiségére vonatkozóan. A vizsálatom célja az volt, hogy a magyar termesztésű paprikákra jellemző komponenseket meghatározzam. A részletes aromaösszetételt és a kromatogramokat a 2-4. melléklet tartalmazza. A mintákban 143 komponenst azonosítottam. Az aromakomponensek közül három olyan komponenst azonosítottam, amelyek csak a magyar fűszerpaprikákban voltak jelen, ezek a 2-metil-tetradekán, α -normetadol és a hexilfahéjsav-aldehid (22. ábra) (M1-M3).



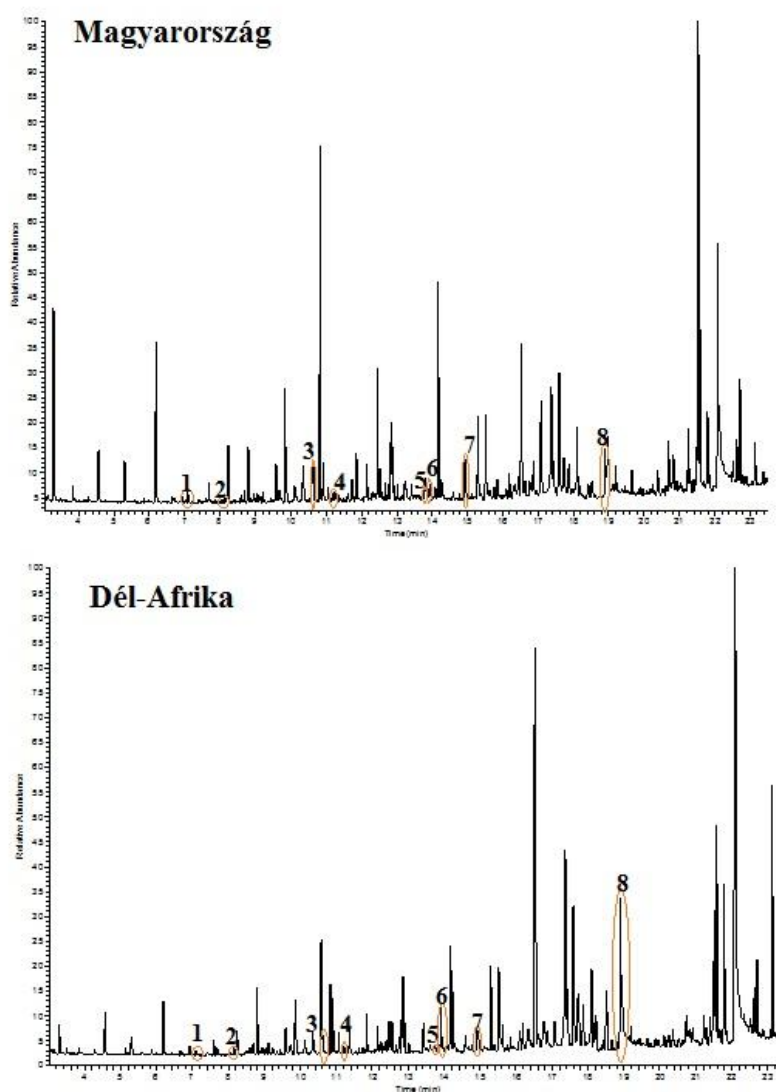
2

22. ábra:

Magyar fűszerpaprikákra jellemző kromatogramja

1. 2-metil-tetradekán, 2. α -normetadol, 3. hexilfahéjsav-aldehid

A vizsgálatok alkalmával nyolc olyan komponenst (acetilfurán; *cisz*-2-heptenal; α -terpinolén; prehnitén, 5-butil-1,3-ciklohexadién; anetol; 1,5,8-trimetil-dihidronaftalin, dodekánsav) azonosítottam, amelyek csak a magyar és dél-afrikai mintákban voltak megtalálhatóak (23. ábra). Ennek oka lehet, hogy az 1990-es években Marokkó paprikamagokat vásárolt Magyarországról és elkezdtek a fűszerpaprikatermeléssel foglalkozni. Pár év elteltével Dél-Afrika vásárolt Marokkóból fűszerpaprika vetőmagot. Noha az idő múlásával kialakultak mindkét termesztési helyre jellemző komponensek, a közös eredet nyomai a mai napig megmaradtak a fűszerpaprikában.



23. ábra:

Magyar és dél-afrikai fűszerpaprikákra jellemző közös komponensek
1. acetilfurán; 2. *cisz*-2-heptenal; 3. α -terpinolén; 4. prehnitén, 5. 5-butil-1,3-
ciklohexadién; 6. anetol; 7. 1,5,8-trimetil-dihidronaftalin, 8. dodekánsav

5.2.2. Külföldi eredetű fűszerpaprikák

A világban több táján termesztenek fűszerpaprikát. Európában Magyarország mellett Szlovákiában, Szerbiában, Horvátországban, Bulgáriában, Romániában, Görögországban, Portugáliában, Törökországban, Ázsiában például Kínában, Koreában, Indiában, Vietnamban, Japánban, Burmában, Indonéziában. Afrikában Egyiptomban, Etiópiában. Szudánban, Kenyában, Tunéziában, Dél-Afrikában, míg az óceánon túl az USA-ban, Mexikóban, Chilében, Braziliában, Peruban, Argentínában.

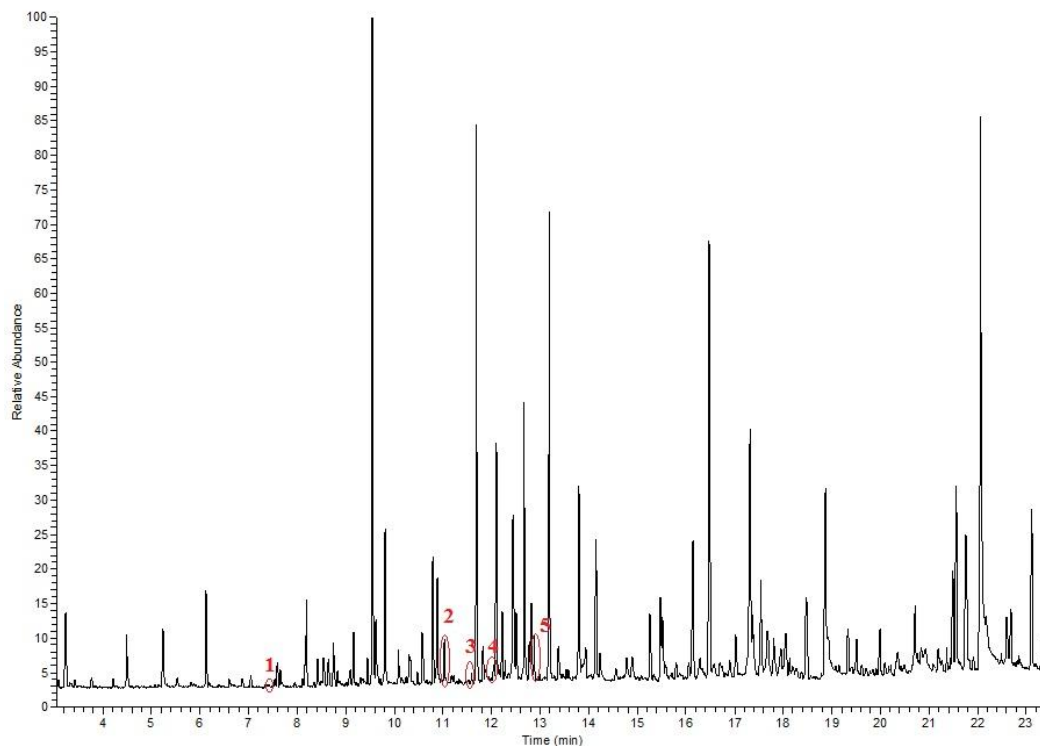
Vizsgálataim során Spanyolországból, Argentínából, Dél-Afrikából és Kínából származó fűszerpaprikaőrlemények aromaösszetételét kutattam, és olyan komponenseket kerestem, amelyek jellemzőek lehetnek az adott termesztési helyre.

5.2.2.1. Spanyolországból származó fűszerpaprikák

Két spanyol eredetű: egy Murcia és egy Andalúzia vidékéről származó fűszerpaprika mintát vizsgáltam. A fűszerpaprikákban 108 komponenst azonosítottam, melyekből öt az általam vizsgált minták közül csak a spanyol eredetű fűszerpaprikákban volt jelen (24. ábra) (M4).

Az általam vizsgált, csak a spanyol fűszerpaprikában azonosított komponensek:

1. *p*-metil-anizol
2. 1-metilcikloheptanol
3. D-kámfor
4. *p*-acetiltoluol
5. verbenon



24. ábra:

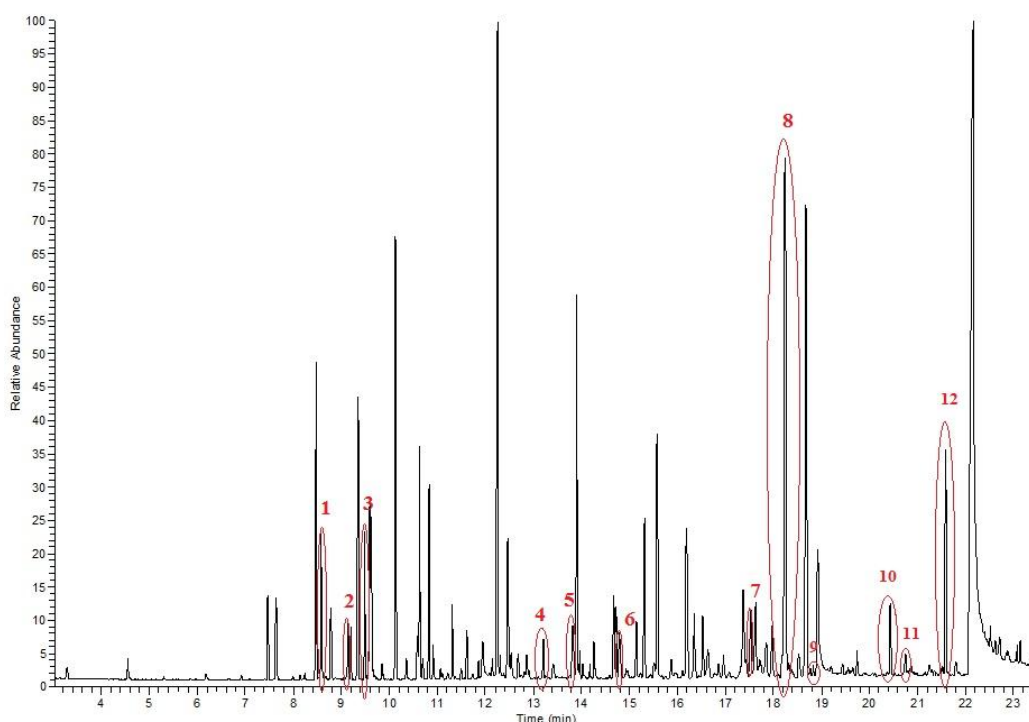
Spanyol eredetű fűszerpaprika kromatogramja

1. *p*-metil-anizol, 2. 1-metilcikloheptanol, 3. D-kámfor, 4. *p*-acetiltoluol,
5. verbenon

A *p*-metil-anizol színtelen, ánizsra emlékeztető illatú molekula, míg a kámfor fehér, viaszzerű, jellegzetes, erős illatú vegyület. A kámfor elsősorban a *Cinnamomum Camphora* fában található, ami Japánban, Kínában és Borneó szigetén élő örökzöld fa. A verbenon jellemzően a rozmarin alkotórésze, igen elterjedt aromaalkotó a növény- és állatvilágban egyaránt.

5.2.2.2. Argentínából származó fűszerpaprikák

Két Argentínából származó: egy édes és egy extra édes kereskedelmi forgalomban lévő őrölt fűszerpaprikát vizsgáltam. A kromatogrammon jól látható, hogy a fűszerpaprikák nagy mennyiségben és sok féle, az argentin termesztés során kialakuló jellegzetes aromakomponenst tartalmaznak (25. ábra). Az argentin eredetű fűszerpaprikákban összesen 96 komponenst azonosítottam (M5).



25. ábra:

Argentín édes fűszerpaprika őrlemény kromatogramja

1. β -pinén, 2. α -fellandrén, 3. α -terpinolén, 4. kumaldehid, 5. β -izoszaflol, 6. α -kubebén, 7. D-germakrén, 8. miriszticin, 9. elemicin, 10. izoelemicin, 11. ar-turmeron

Az általam vizsgált paprikamintákban 12, csak az argentin fűszerpaprikában megjelenő komponenst detektáltam: fenilpropán típusú miriszticin, β -izoszaflol, elemicin és izoelemicin, kumaldehid; bizabolán vázas ar-turmeron és curlone; a szeszkviterpén D-

germakrén és α -kubebén; ciklikus monoterpén; szeszkviterpén α -fellandrén; monoterpén alkohol α -terpinolén; és a biciklikus monoterpén β -pinén.

Az általam vizsgált argentin fűszerpaprikára jellemző komponensek:

- | | |
|--------------------------|-----------------|
| 1. β -pinén | 7. D-germakrén |
| 2. α - fellandrén | 8. miriszticin |
| 3. α -terpinolén | 9. elemicin |
| 4. kumaldehid | 10. izoelemicin |
| 5. β -izoszafról | 11. ar-turmeron |
| 6. α -kubebén | 12. curlone |

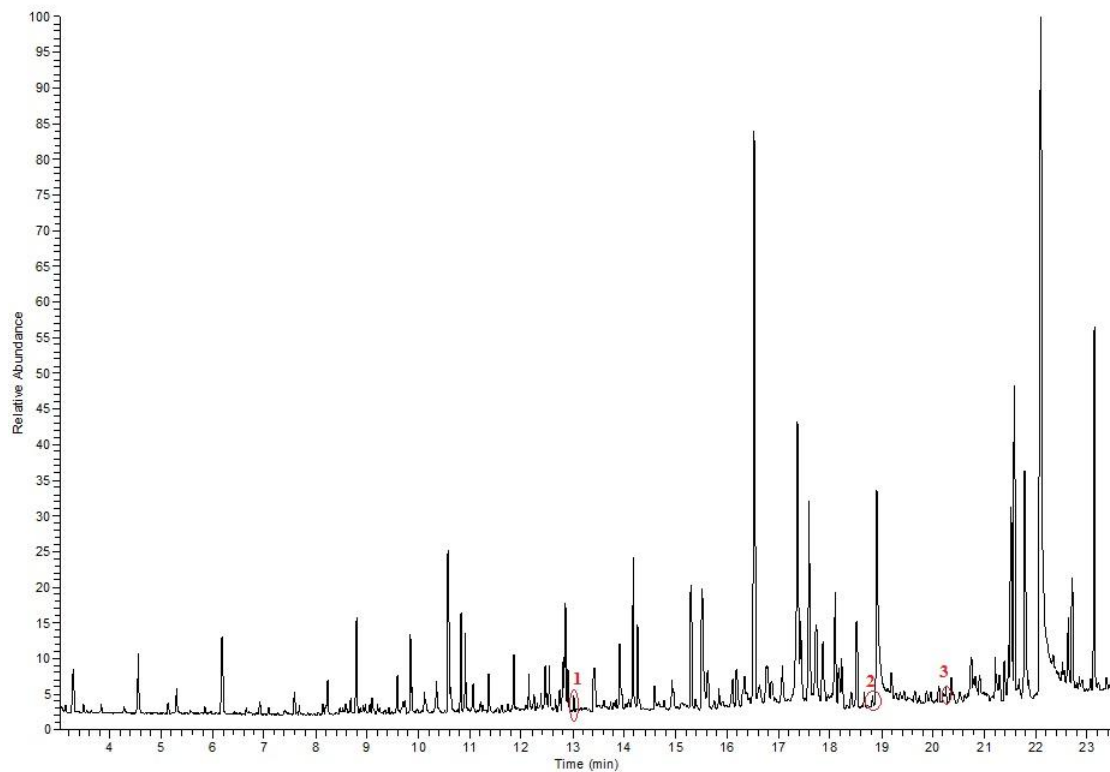
A fűszerpaprikákban található bizabolán vázas vegyületek (ar-turmeron, turmeron, curlone) kurkumára jellemző komponensek, míg a fenilpropán típusú vegyületek (miriszticin, β -izoszafról, elemicin, izoelemicin) szerecsendióra utalnak.

5.2.2.3. Dél-Afrikából származó fűszerpaprika

Az általam vizsgált Dél-Afrikából származó fűszerpaprikaőrlemény esetében 121 komponenst azonosítottam, amiből három csak a Dél-Afrikában termesztett fűszerpaprikákban jelent meg (26. ábra) (M6).

Az általam vizsgált, csak a Dél-Afrikából származó fűszerpaprikában azonosított komponensek:

1. 2-bornén
2. elemol
3. γ -eudeszmol



26. ábra:
Dél-Afrikai fűszerpaprika őrlemény kromatogramja
2-bornén, elemol, γ -eudeszmol

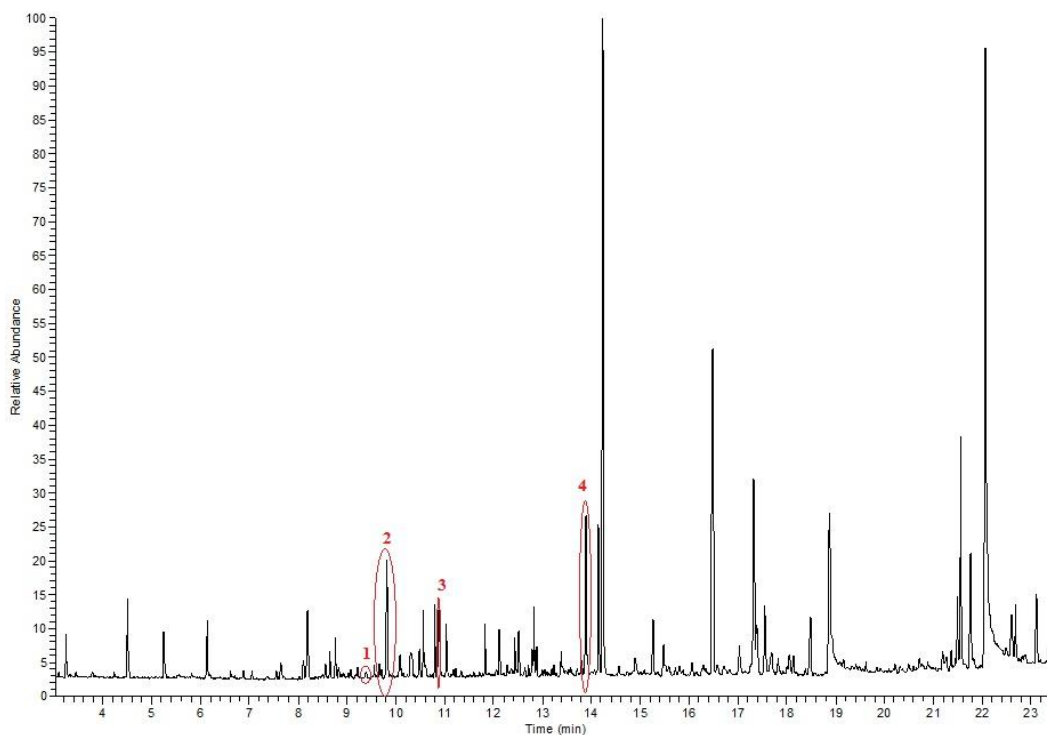
Mint említettem a magyar fűszerpaprikákról szóló fejezetben, a Dél-Afrikában természetesen fűszerpaprika magyar eredetű, így nyolc olyan komponens van a magyar és dél-afrikai mintákban, ami csak ezekre a termőterületekre jellemző.

5.2.2.4. Kínából származó fűszerpaprika

Az általam vizsgált, Kínából származó fűszerpaprika őrleményekben mintegy 124 aromakomponenst detektáltam (27. ábra) (M7).

Az általam vizsgált, csak a Kínából származó mintákban detektált aromakomponensek:

1. 2,4-heptadién-1-al
2. 5-etil-3-heptén-2-on
3. izopropil-ciklohexán
4. 2-*transz*-4-*transz*-dekadiénal



27. ábra:

Kínából származó fűszerpaprika kromatogramja

1. 2,4-heptadién-1-al, 2. 5-etil-3-heptén-2-on, 3. izopropil-ciklohexán, 4. 2-*transz*-4-*transz*-dekadiénal

A 2,4-heptadién-1-al, és az 5-etil-3-heptén-2-on gomba illatra emlékeztető aromakomponensek. A 2-*transz*-4-*transz*-dekadiénal viszont a vaj egyik jellemző illataalkotója.

5.2.3. Füstölt fűszerpaprikák

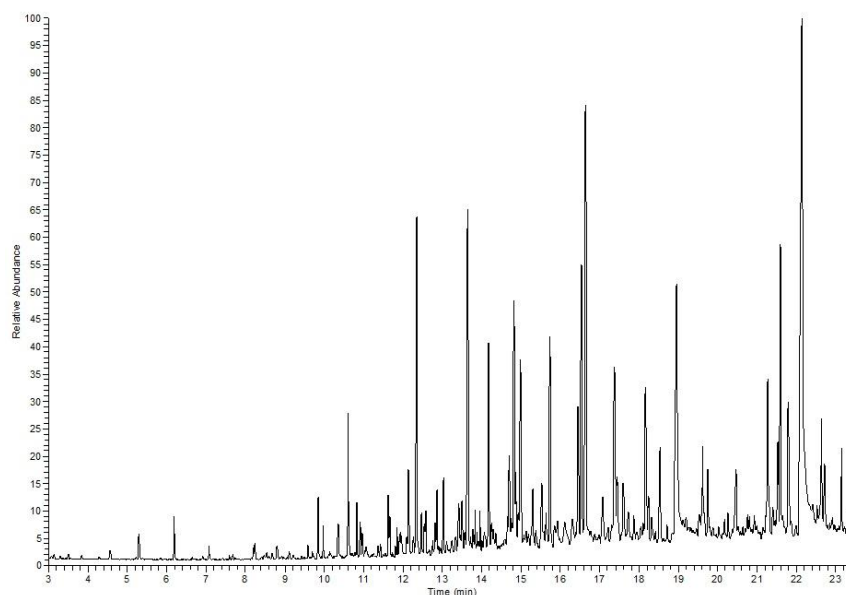
A hazai és a külföldi piacon egyre gyakrabban jelennek meg a füstölt fűszerpaprikák. Ezek a fűszerek kellemes füstös ízt kölcsönöznek az ételnek, ám nem kis veszélyt rejtnek magukban, amennyiben nagyobb mennyiségű PAH típusú karcinogén vegyület található bennük.

Vizsgálataim során magyar és spanyol füstölt fűszerpaprikát vizsgáltam. A 8. táblázatban összefoglaltam azoknak a vegyületeknek a területét, amelyek a füstölés során alakultak ki a termékben.

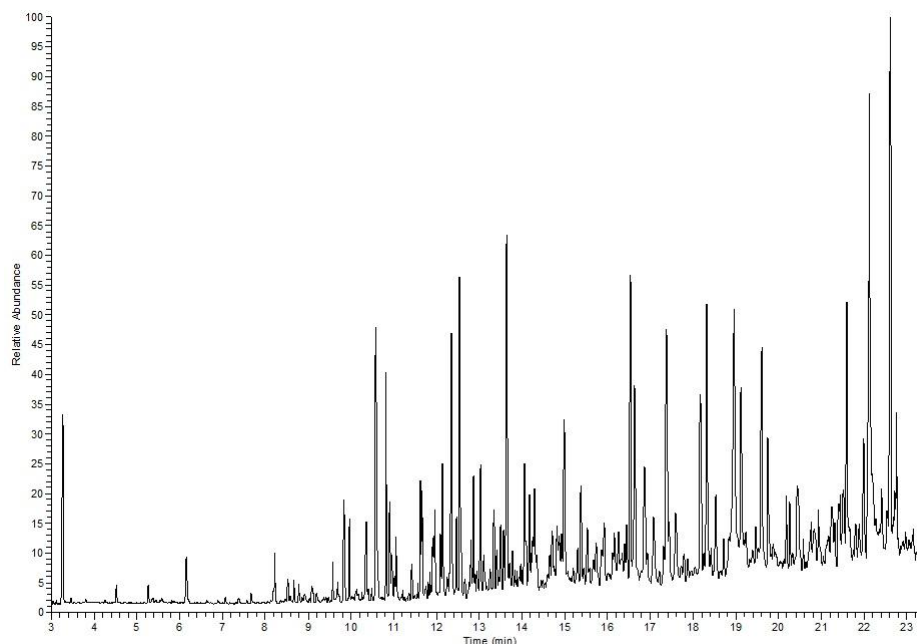
8. táblázat: Spanyol és magyar füstölt fűszerpaprikák aromaösszetétele

RI	Molekula	Füstölt spanyol (terület egység)	Szórás (n=5)	Füstölt magyar (terület egység)	Szórás (n=5)
809	o-kreozol	135440546	2708811	60421160	1208423
848	p-kreozol	210078808	4201576	89786505	1795730
908	2,6-xilenol	76246367	1524927	42724149	854483
975	3,4-xilenol	180469408	3609388	106888489	2137770
981	2,4-xilenol	165212724	3304254	61423669	1228473
1041	m-kreozol	36869365	737387	41231738	824635
1049	izokreozol	637314256	12746285	724373268	14487465
1162	3,5-dimetoxitoluol	12901805	258036	99997743	1999955
1185	1-naftol	38330103	766602	0	0
1193	1-indanon	62189354	1243787	0	0
1201	p-timol	23204264	464085	0	0
1219	β-metilnaftalin	319446246	6388925	0	0
1244	4-etil-1,2-dimetoxibenzol	41785943	835719	0	0
1249	naftalin	189796685	3795934	0	0
1250	2-metil-6-propilfenol	60868129	1217363	0	0
1268	5,8-dimetilkinoxilán	9620329	192407	0	0
1279	6-n-propil-m-	59516600	1190332	0	0

kreozol					
1296	eugenol	75719725	1514395	509361070	10187221
1313	<i>p</i> -propilgvajakol	307498745	6149975	438204993	8764100
1384	izoeugenol	134560164	2691203	530236272	10604725
1382	1,3-dimetilnaftalin	112603914	2252078	0	0
1406	1,4-dimetilnaftalin	149268662	2985373	0	0
1459	izovanillinsav	119108773	2382175	351281105	7025622
1478	<i>transz</i> -izoeugenol	493412049	9868241	1391186101	27823722
1655	2,3,6-trimetilnaftalin	49240704	984814	0	0
1738	fenilén	65352632	1307053	0	0
1753	acenaftenon	43910544	878211	0	0
1761	perinaftindén	73906198	1478124	0	0
1775	metoxieugenol	616990544	12339811	236871178	4737424
1833	xantén	148373074	2967461	0	0
1858	9H-xantén	244846245	4896925	0	0
2003	1,4,5,8-tetrametilnaftalin	99754605	1995092	0	0
2013	9-fluorén-9-on	302442546	6048851	0	0
2077	fenantrén	1124279805	22485596	0	0
2082	2-fenantrenol	14705920	294118	0	0



28. ábra:
Füstölt magyar fűszerpaprika kromatogramja



29. ábra:

Spanyol füstölt fűszerpaprika kromatogramja

A 28. és a 29. ábrán látható a magyar és spanyol füstölt fűszerpaprika kromatogramja.

Mivel a mintaelőkészítés ebben az esetben is desztillálás volt, csak az illékony PAH komponenseket tudtam detektálni, a nagyobb molekulatömegű, kevésbé illékonyakat nem. A különbség a két termék között így is szembeűnő. A spanyol füstölt fűszerpaprika illata sokkal intenzívebben volt fűst illatú, mintsem fűszerpaprika. A fűstölés során keletkezett illatkomponensek szinte teljesen elnyomták a paprikaaromákat. A magyar füstölt fűszerpaprika esetében szintén megvolt a fűstölt illat-jelleg, de érezhető maradt a paprika jellegzetes aromája. Ez a különbség a két kromatogram között is látható. A spanyol fűszerpaprika jellemzően sok naftalinvázás molekulát tartalmazott, míg a magyar fűszerpaprikában ezek vagy nem voltak jelen, vagy mennyiségük sokkal csekélyebb volt a spanyol fűstölt fűszerpaprikához képest. Ugyan ez a jelenség igaz a xantén és fenantrén származékokra is.

5.3. Paradicsomok aromavizsgálatának eredményei

Az aromavizsgálatokra fejlesztett, validált módszerrel a fűszerpaprika minták mellett megvizsgáltam különböző paradicsomok és paradicsom termékek aromaösszetételét. A mintákban mintegy 90 komponenst azonosítottam.

5.3.1. Friss paradicsomok aromavizsgálata

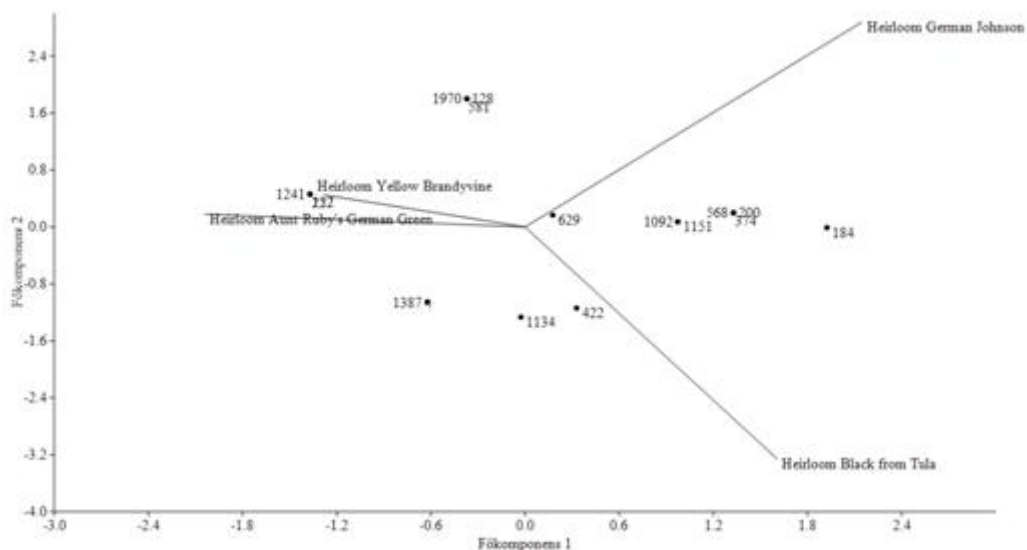
A hagyományosnak mondható piros paradicsomok mellett különböző színű paradicsomok aromaösszetételét is megvizsgáltam. A színes paradicsomok, mint a zöld Heirloom Aunt Ruby's German Green, a sárga Heirloom Yellow Brandyvine, sötét árnyalatú Heirloom Black from Tula és a piros Heirloom German Johnson voltak. Ezek mellett vizsgáltam ipari paradicsomokat, mint a Strombolino és Uno Rosso aromaösszetételét, valamint két spanyol, egy andalúz vidékről és egy Valencia környékéről származó koktélpáradicsomot (M8-M11).

Szinte minden vizsgált mintáról elmondható, hogy legnagyobb mértékben hexanalt tartalmaznak, ami friss paradicsomról lévén szó nem is meglepő, hiszen a hexanálnak főként zöld levélre, zöld növényre emlékeztető illata van. A hexanal mellett a *transz*-2-hexén-1-al koncentrációja sem elhanyagolható. Ez a komponens az érett paradicsomillat kialakulásáért felelős. A többi, kisebb mennyiségben jelen lévő terpének, karotinoid bomlástermékek, gyűrűs molekulák, alkoholok, aldehidek, ketonok, savak, szénhidrogének, észterek komplex jelenléte okozza a paradicsomok jellemző illatát, zamatát.

5.3.1.1. Heirloom fajták aromavizsgálata

A „heirloom” jelentése örökség, ami utal a fajta genetikai stabilitásra. Ezekre a fajtákra jellemző, hogy a szülők genetikai tulajdonságai az újravetések során megmaradnak. A heirloom típusú paradicsomok különleges megjelenésük, színük, alakjuk, és méretük miatt egyre elterjedtebbek a piacokon, így a hagyományosnak mondható paradicsomok mellett egyre gyakrabban vásárolhatóak ezek a fajták.

Az aromavizsgálatok során a paradicsomok színéből eredő, az aromában jelentkező különbségeket kerestem. Az eredmények könnyebb átláthatóságának érdekében elvégeztem a paradicsomok főkomponens-analízisét (30. ábra).



30. ábra:

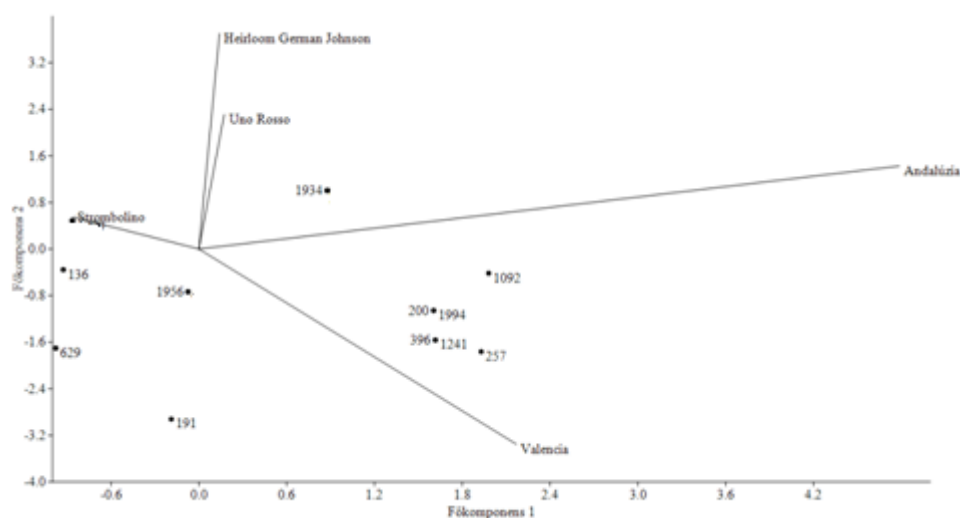
Friss Heirloom paradicsomok főkomponens analízise

A 32. ábrán jól látható ahogy „színek szerint” elkülönülnek az egyes paradicsomok.

A Heirloom Red fajtára jellemző a magasabb hexanalkoncentráció, míg a Heirloom Yellow-ra inkább a dihidro-*pseudojonon*, *transz*-3-hexén-1-ol és a 6-metil-5-heptán-2-on a jellemző komponens. A Heirloom Green fajtára a mirisztinsav, pentadecanal és a spanyol fajtákkal megosztva a furfural mennyisége a jellemző.

5.3.1.2. Piros színű paradicsomok aromaösszetételének vizsgálata

Elvégeztem a piros színű paradicsomok összehasonlítására is a főkomponens-amalízist (31. ábra). Két ipari paradicsomot, az Uno Rosso-t és a Strombolinot, egy közkedvelt fajtát a Heirloom German Johnson-t és két Spanyolországból, Valencia és Andalúzia vidékéről származó koktélpadicsomot hasonlítottam össze. A 31. ábrán jól látható, hogy a hazai termesztésű fajok fajtától függetlenül elkülönülnek a Spanyolországból származó paradicsomoktól. A hazai termesztésű fajtákra főként a 2-pentadekanon, a 2-*cisz*-6-*transz*-farnezal, az izopentil-alkohol és a 2-metil-5-formilfurán volt a jellemző molekula. A Spanyolországban termesztett koktélpadicsomokra jellemző komponensek a 3-metilheptán, a *p*-ment-1-én-9-al, a *transz*-3-hexén-1-ol, a butilfenol és a 3-hexénal voltak.



31. ábra:

Különböző színű paradicsomok főkomponens-analízise

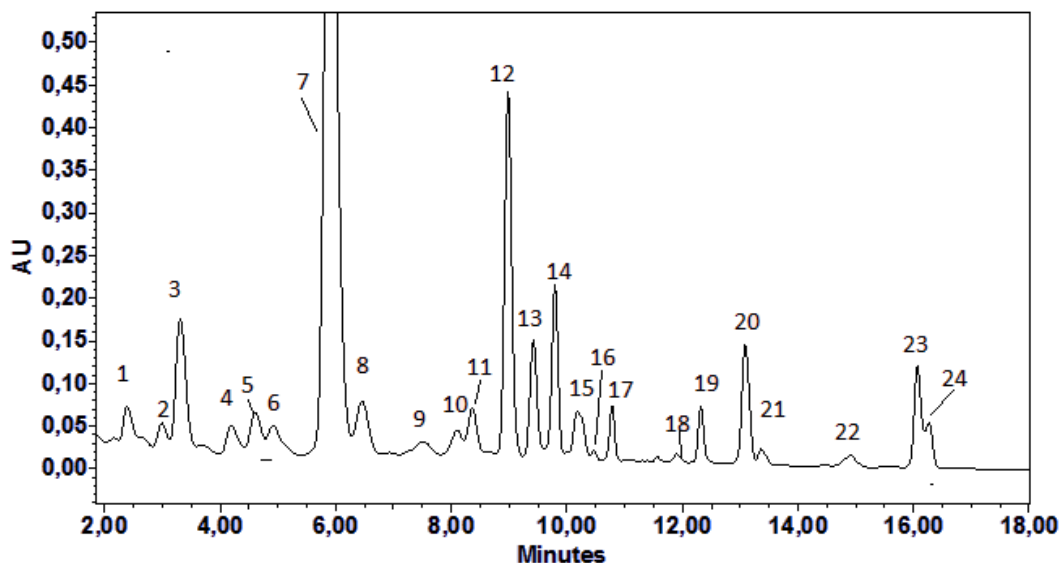
5.3.2. Paradicsomkészítmények aromaösszetétele

A paradicsom feldolgozása során a nyers paradicsomot hőkezelik, ekkor a hő hatására degradáció történik, a levegőben lévő oxigén oxidálja a sejteket, szöveteket, és nő az endogén enzimek aktivitása. Például a C-vitamin koncentráció főzés hatására drasztikusan csökkenni kezd (Francisco et al., 2010), valamint a fitonutriensek, mint a flavonoidok, glükozinolatok szinte teljesen elbomlanak (Aires et al., 2012). Ezzel a tapasztalattal

5.4. HPLC módszerek fejlesztése és validálása karotinoidok meghatározására

5.4.1. C18 keresztkötésű oszlop validálása

A fűszerpaprika karotinoidjainak elválasztására a keresztkötésű C18 oszlop kitűnően alkalmasnak bizonyult, így szükséges volt a módszer és a mérési körülmények validálása.



33. ábra: Elszappanosított fűszerpaprika kivonátban lévő karotinoid vegyületek HPLC profilja kereszt-kötésű C18, 5 μ m, 150 cm x 4,6 mm oszlop és aceton-víz gradiens elúció alkalmazásával:

1: Kapszorubin, 2: Nem azonosított, 3: Cucurbitaxantin B, 4: Nem azonosított, 5: Violaxantin, 6: Kapszantin-epoxid, 7: Kapszantin, 8: Ciklo-violaxantin, 9: Mutatoxantin, 10: Lutein, 11: Anterxantin, 12: Zeaxantin, 13: *cisz*-Kapszantin, 14: *cisz*-Zeaxantin, 15: *cisz*-kKapszantin, 16: Nem azonosított, 17: Kriptokapszin, 18: Kriptoflavin, 19: β -Kriptoxantin-epoxid, 20: β -Kriptoxantin, 21: *cisz*- β -Kriptoxantin, 22: β -Karotin-epoxid, 23: β -Karotin, 24: *cisz*- β -Karotin.

33. ábra mutatja az elszappanosított fűszerpaprika karotinoidjainak elválasztásának kromatogramját a keresztkötésű C18-as oszlopon gradiens elúció alkalmazásával. A fejlesztett módszer kitűnő elválasztást biztosított 16 perc alatt legalább 24 karotinoid típusú vegyületnek. Az irodalmi adatok szerint (Baranyai et al., 1982; Almela et al., 1991) hasonló profilt 40 perc alatt sikerült elérni konvencionális C18 alkalmazásával. Így szükséges volt a módszer és a mérési körülmények validálása.

5.4.1.1. Pontosság

A pontosság meghatározásához lutein és β -karotin standard oldatokat alkalmaztam. A lutein standard koncentrációja 6 $\mu\text{g/ml}$, a β -karotin standard koncentrációja 9,5 $\mu\text{g/ml}$ volt. A pontosság meghatározására három párhuzamos mérést végeztem, melynek eredményeképp a területek standard deviációja lutein esetébe 2,36%, míg β -karotin esetében 6,27% volt.

5.4.1.2. Visszanyerés

Elvégeztem a standardok visszanyerési hatékonyságára hat párhuzamos mérést. A visszanyerési vizsgálat eredménye lutein esetében 93%, míg β -karotin esetében 92% volt.

5.4.1.3. A lutein és a β -karotin detektálási határa (LOD) és kimutatási határa (LOQ)

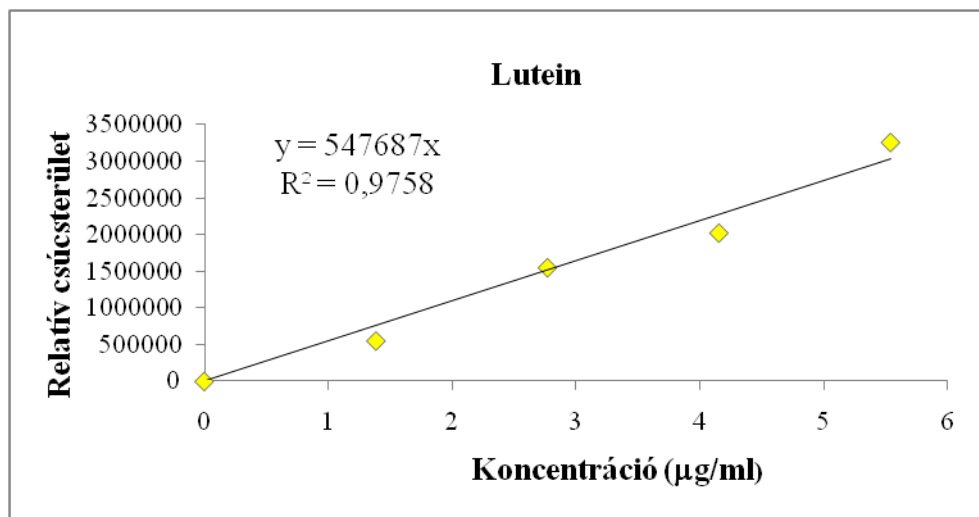
Detektálási határnak tekintjük a gyakorlatban a zaj háromszorosát, míg a kimutatás alsó határának a zaj tízszeresét. Meghatároztam a kiválasztott standard oldatok detektálási és kimutatási határát három párhuzamos vizsgálattal, amit a 9. táblázatban foglaltam össze.

9. táblázat: A lutein és a β -karotin detektálási és kimutatási határa

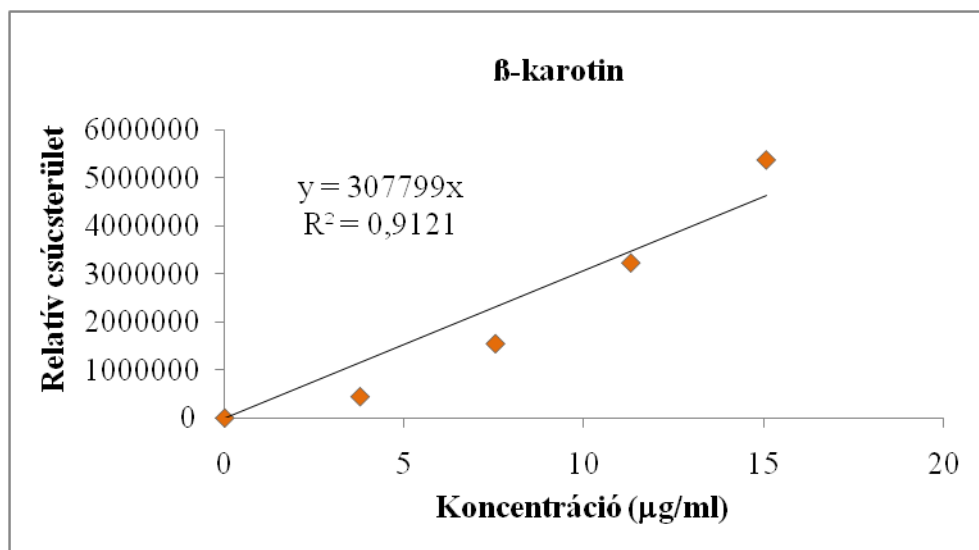
Standardok	LOD (S/N=3) (ng/ml)	SD (n=6)	LOQ (S/N=10) (ng/ml)	SD (n=6)
Lutein	19,44	0,05	64,79	0,7
β -karotin	8,28	0,01	27,61	0,2

5.4.1.4. Linearitás

A módszer linearitásának meghatározásához lutein és β -karotin standardokat alkalmaztam. Lutein esetében a lineáris tartomány 0-6 $\mu\text{g/ml}$ -es koncentráció közé esett (34. ábra), míg β -karotin standard esetében 0-15 $\mu\text{g/ml}$ közé (35. ábra).



34. ábra:
Lutein kalibrációs görbéje



35. ábra:
β-karotin kalibrációs görbéje

A validálási és a kromatográfiai paraméterek arra utaltak, hogy a keresztkötésű C18, 3 μm , 150 cm x 4,6 mm-es oszlop aceton-víz gradiens elúcióval a szappanosított fűszerpaprika kivonátban lévő karotinoidok kiváló elválasztását biztosítja. A töltet alacsony polaritásának és a vízterhelési kapacitásának köszönhetően az oszlopnak nagy a teljesítménye. A 0,4 és 13 közötti kapacitási faktor valamint 920 és 270000 közötti elméleti tányérszám értékek kitűnő, nagy teljesítményű és érzékeny elválasztási módszerek felel meg (10. táblázat).

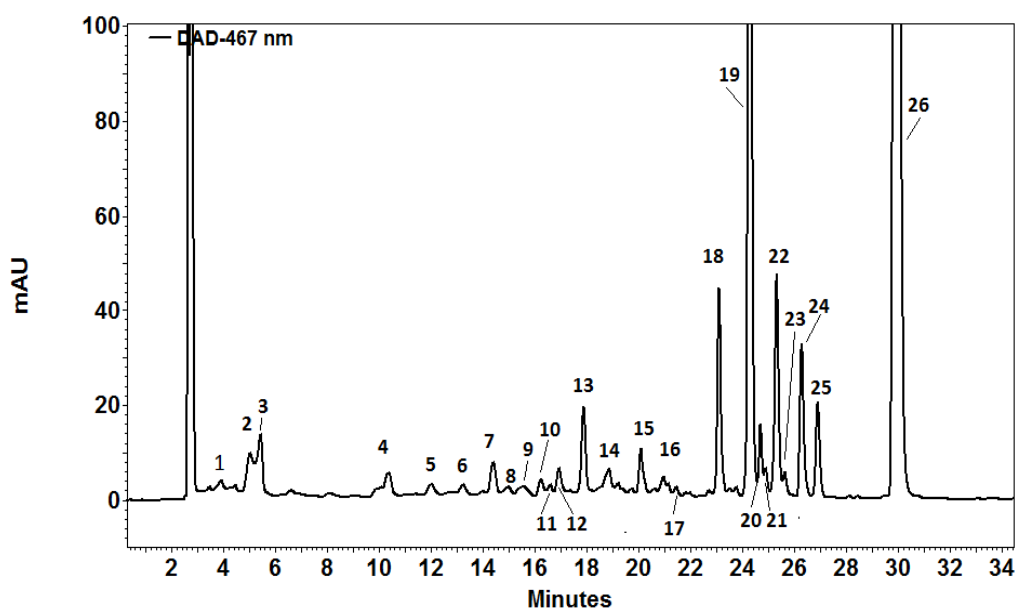
10. táblázat: Fűszerpaprika karotinoid-összetételének vizsgálati eredményei keresztkötésű C18-as oszloppal

Csúcs	Retenció s idő (min)	Komponens	Spektrális tulajdonság (nm)				Kapacitási faktor	Elméleti tányérszám
1	1,70	Ismeretlen	415	455			0,41	920,7
2	1,91	Ismeretlen	395	422	442		0,58	3157,1
3	2,25	5,6-diepikapszo- karboxantin	431	464	492		0,86	10031,1
4	2,43	Neoxantin	417	444	468		1,02	1291,7
5	2,73	Kapszantin- epoxid	360	430	461	500	1,26	4403,2
6	3,05	<i>cisz</i> -kapszantin- epoxid	360	(430)	461	488	1,53	3275,4
7	3,39	Kapszorubin	(450)	483	512		1,81	2242,4
8	3,75	Ismeretlen	(372)	424	452	475	2,11	27570,4
9	3,87	<i>cisz</i> -kapszorubin 1	340	433	471	496	2,20	10850,8
10	4,27	Ismeretlen	448	(508)			2,53	2684,4
11	4,71	Violaxantin	423	449	478		2,90	4523,0
12	5,02	<i>cisz</i> -kapszantin- epoxid	368	446	476	503	3,16	5826,1
13	6,02	Kapszantin	475,8	(501)			3,99	3133,5
14	6,57	Ismeretlen	471	(496)			4,45	6561,0
15	7,03	Ismeretlen	363	501			4,82	10696,2
16	7,63	Mutatoxantin	354	(416)	448	468,5	5,32	5394,9
17	8,20	<i>cisz</i> -kapszantin- 1	366	473	496		5,79	14565,8
18	8,46	<i>cisz</i> -kapszantin- 2	361	(436)	466	(494)	6,01	17973,1
19	9,10	<i>cisz</i> -kapszantin- 3	358	466	492		6,54	19390,3
20	9,49	Kukurbitaxantin	430	456	483		6,86	35158,9
21	9,64	Anteraxantin	426	449	487		6,98	147805,1
22	9,85	Zeaxantin	423	449	477		7,16	35629,4
23	10,23	<i>cisz</i> -lutein	334	418	442	471	7,47	90103,7
24	10,51	<i>cisz</i> -zeaxantin- 1	340	357	449	476	7,71	109960,7
25	10,82	<i>cisz</i> -zeaxantin-	340	422	449	475	7,96	51299,2

2								
26	11,59	<i>cisz-</i> kriptokapszi- epoxid	(345)	(360)	498	472	8,60	132014,5
27	11,93	Ismeretlen	361	(426)	450	(472)	8,88	75922,3
28	12,34	Kriptokapszin	358	471	(495)		9,23	67415,8
29	13,11	β -criptoxantin	342	427	453	482	9,86	37680,8
30	13,39	<i>cisz-</i> β - criptoxantin	342	(427)	450	479	10,10	72830,8
31	13,79	Ismeretlen	359	376	396,4		10,42	94763,7
32	14,45	ξ -karotin	384	406	428		10,97	162323,1
33	14,94	Kriptoflavin	332	409	433	457	11,37	201583,4
34	16,09	β -karotin	428	456	483		12,33	77657,4
35	16,28	<i>cisz-</i> β -karotin	341	418	450	478	12,49	275532,5

5.4.2. A tömör magvú C30 oszlop validálása paradicsomban lévő karotinoidok meghatározására

A paradicsomból kinyert karotinoid típusú vegyületek tömör magvú C30-as oszlopon gradiens elúció alkalmazásával történő HPLC elválasztása a 36, 37, 38. ábrákon látható. Az új elválasztási protokollal több mint 30 nagy illetve kis mennyiségű karotinoid komponenst tudtam detektálni. A 11. táblázat foglalja össze a módszer kromatográfiás paramétereit, amelyek megfeleltek egy hatékony és jó teljesítményű HPLC módszernek.



36. ábra:

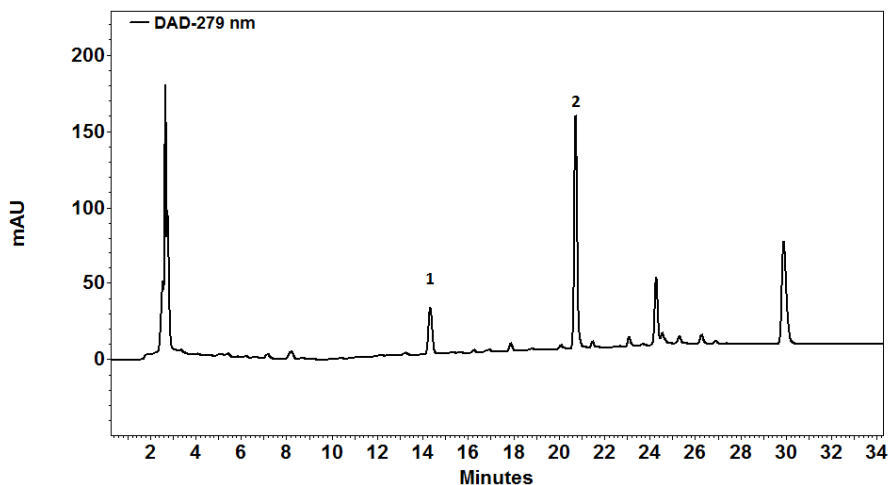
Paradicsomból kinyert és a core C30 oszlopon elválasztott karotinoidok diódasoros (PDA) detektor felvétele 467-nm-en.

A csúcsok azonosítása a 11. táblázatban található.

11. táblázat: Piros színű paradicsomok karotinoidjainak meghatározása

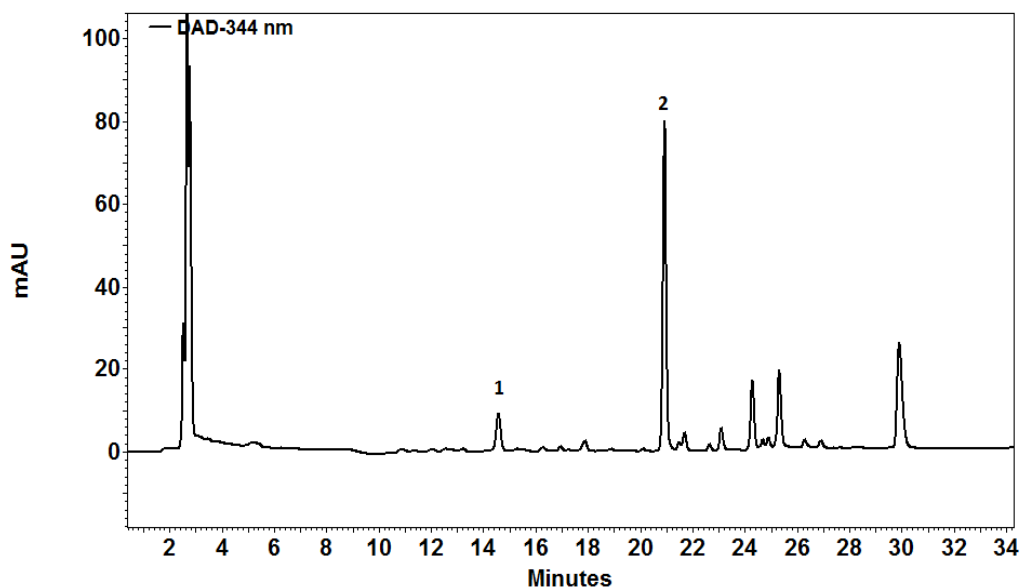
Csúcs száma	Retenciós idő (min)	Hullámhossz			Azonosítás
1	3,88	413	438	467	violaxantin
2	5,04	420	444	472	lutein izomer
3	5,44	421	444	472	lutein
4	10,35	451	471	492	<i>cisz</i> -likopin-diepoxid

5	12,02	343	410	434	461	<i>cisz</i> -likoxanthin-di-epoxid
6	13,21	345	423	450	475	<i>cisz</i> - β -kriptoxantin epoxid
7	14,40	348	427	450	486	γ -karotin epoxid
8	14,97		425	451	476	β -kriptoxantin-epoxid-2
9	15,43	348	425	454	492	<i>cisz</i> -likoxantin-di-epoxid
10	16,25	342	406	429	457	<i>cisz</i> - β -karotin-di-epoxid
11	16,61		406	433	462	β -karotin-di-epoxid
12	16,94	344	410	434	461	<i>cisz</i> -likopin di-epoxid
13	17,86	343	412	434	461	<i>cisz</i> -likopin di-epoxid
14	18,82		422	451	476	β -kriptoxantin
15	20,10		430	455	488	likopin-di-epoxid
16	20,94		434	463	496	likopin-epoxid
17	21,45		378	401	423	ζ -karotin
18	23,1		443	470	502	likoxantin
19	24,30		423	452	478	β -karotin
20	24,68		445	471	492	15- <i>cisz</i> -likopin
21	24,90	344,358	442	468	497	13'- <i>cisz</i> -likopin
22	25,29	344,358	441	464	494	13- <i>cisz</i> -likopin
23	25,64	345,36	440	468	492	9'- <i>cisz</i> -likopin
24	26,26		436	460	491	γ -karotin
25	26,87	342,361	441	466	496	9- <i>cisz</i> -likopin
26	30,21		445	472	503	all- <i>transz</i> -likopin



37. ábra:

Paradicsomból kinyert és a tömör magvú C30 oszlopon elválasztott karotinoidok diódasoros (PDA) detektor felvétele 279-nm-en. 1: Fitoén származék , 2. *all-transz*-fitoén



38. ábra:

Paradicsomból kinyert és a core C30 oszlopon elválasztott karotinoidok diódasoros (PDA) detektor felvétele 344-nm-en. 1: Fitofluén származék , 2. *all-transz*-fitofluén

A módszer az alkalmazott körülmények által képes volt legalább 5 likopin izomert elválasztani az *all-transz*-likopintól. Emellett sikeresen elválasztotta a β -karotin *cisz*

izomerjeit és egyéb karotnoid izomereket és származékait mindössze 35 perces vizsgálati idővel.

Az irodalomban található HPLC módszerek, amelyekben hagyományos analitikai C30 töltetet használtak, a likopin izomerjeinek elválasztására szükséges volt mintegy 60-90 perces minta futási idő. Azonban ezek a hagyományos C30 oszlopot alkalmazó módszerek nem voltak képesek a poláros xantofillok izomerjeit elválasztani. Az izomerek elválasztásnak egyik módja, ha az elúciót megváltoztatják, ám abban az esetben az apoláris karotnoidokat veszítik el az elválasztás során (Sander et al., 2000; Lin és Chen, 2003).

Az UV tartományban detektelhető fitoén, fitofluén és származékaik elválasztása a 12-14. táblázatokban látható. Mindkét vegyület *all-transz* izomerje mellett poláros származékait is detektáltam. Valószínűleg a poláris származék az epoxid jellegű vegyületekhez tartozik.

12. táblázat: A paradicsom karotnoidok tömör magvú C30 oszlopon történő elválasztásának kromatográfias paraméterei

Retenciós idő	Kapacitási faktor	Elméleti tányérszám	Retenciós idő	Kapacitási faktor	Elméleti tányérszám
1,56					
3,46	1,22	1197	12,02	6,71	14448
3,99	1,56	1592	12,32	6,90	15178
4,19	1,69	1756	12,65	7,11	16002
4,54	1,91	2061	13,08	7,38	17109
4,84	2,10	2343	13,81	7,85	19072
5,10	2,27	2601	14,17	8,08	20079
5,75	2,69	3306	15,98	9,24	25536
6,15	2,94	3782	16,89	9,83	28527
6,59	3,22	4343	17,25	10,06	29756
7,30	3,68	5329	18,11	10,61	32797
8,27	4,30	6839	18,45	10,83	34040
8,80	4,64	7744	19,40	11,44	37636
9,26	4,94	8575	20,24	11,97	40966
10,26	5,58	10527	21,99	13,10	48356
10,56	5,77	11151	22,98	13,73	52808
10,79	5,92	11642	24,63	14,79	60664

10,98	6,04	12056	25,88	15,59	66977
11,09	6,11	12299	26,34	15,88	69380
11,38	6,29	12950	26,92	16,26	72469
11,56	6,41	13363	28,18	17,06	79411
11,84	6,59	14019			

5.4.2.1. Pontosság

A módszer pontosságának meghatározásához a kinyerés napján öt alkalommal, illetve másnap kilenc alkalommal végeztem HPLC vizsgálatot egy jól homogenizált mintából. A különböző karotinoidok mért koncentrációjában talált különbség alapján számoltam a módszer pontosságát. Mivel a karotinoidok igen érzékeny molekulák a fényre és az oxigénre, a másnap mért értékek magasabbak voltak mint az első nap (13. táblázat). A tapasztalatok alapján javaslom a kinyerés és a HPLC vizsgálatok egy napon belüli elvégzését a pontos karotinoidösszetétel meghatározásának érdekében.

13. táblázat: Karotin standardok pontossági (precision) tesztjének eredményei tömör magvú C30 oszlop és metanol-TBME gradiens elúció alkalmazásával

Standardok	Első nap (%)	SD	Másnap (%)	SD
		(n=5)		(n=9)
Lutein	2,38	0,05	3,13	0,09
Apo-karotinal	2,18	0,07	3,21	0,05
β-karotin	4,45	0,02	6,86	0,1
Likopin	1,81	0,001	4,16	0,05

5.4.2.2. Visszanyerés

Elvégeztem a standardok visszanyerését három-három párhuzamos mérésrel. A kapott eredményeket a 14. táblázatban foglaltam össze. A visszanyerés értéke 94- 99,9% között volt, amely mutatja a fejlesztett módszer nagyfokú reprodukálhatóságát és megbízhatóságát.

14. táblázat: A tömör magvú C30-as oszlopon elválasztott és meghatározott karotinoidok visszanyerési tesztének eredményei

<i>Standardok</i>	<i>Kezdő+hozáadott ($\mu\text{g/ml}$)</i>	<i>Visszanyert ($\mu\text{g/ml}$)</i>	<i>Visszanyerés %</i>	<i>Szórás % (n=3)</i>
Lutein	1,3+20	21,27	99,9	0,14
	1,3+50	51,24	99,8	0,2
Apo-karotinal	0+50	43,9	96	1,78
	0+250	239,5	95,6	2,7
β-karotin	9,8+50	58,01	97	0,95
	9,8+100	106,88	97,2	2,3
Likopin	132+50	171,69	94	1,52
	132+100	95,3	95,3	1,53

5.4.2.3. Detektálási és kimutatási határ

A detektálási és kimutatási határ meghatározásához három-három párhuzamos mérést végeztem a különböző standardokkal. Az eredményeket a 15. táblázatban foglaltam össze. A kapott értékek arra utalták, hogy az új módszer elég érzékeny, hogy a mintákban kis mennyiségben jelen lévő karotinoidokat is ki tudjunk mutatni és meghatározni a mennyiségüket.

15. táblázat: A paradicsom főkarotinoidjai és a belső standard apo-karotinal detektálási illetve kimutatási határ meghatározása a core C-30 oszlop és gradiens elúció alkalmazásával

<i>Standardok</i>	<i>LOD (S/N=3) ($\mu\text{g/ml}$)</i>	<i>SD (n=3)</i>	<i>LOQ (S/N=10) ($\mu\text{g/ml}$)</i>	<i>SD (n=3)</i>
Lutein	0,017	0,001	0,059	0,007
Apo-karotinal	0,009	0,001	0,029	0,002
β-karotin	0,008	0,002	0,031	0,005
Likopin	0,014	0,005	0,046	0,003

5.4.2.4. Linearitás

A módszer linearitása meghatározásának eredményét a 16. táblázatban foglaltam össze. A csúcs területe és a koncentráció közötti lineáris összefüggés széles koncentrációtartományban, magas regressziós faktor értékkel fennáll. Ez erősíti a módszer nagyfokú megbízhatóságát és alkalmasságát a kvantitatív mérések esetében.

16. táblázat: Különböző karotinoidok koncentrációja és a csúcs területe között összefüggés

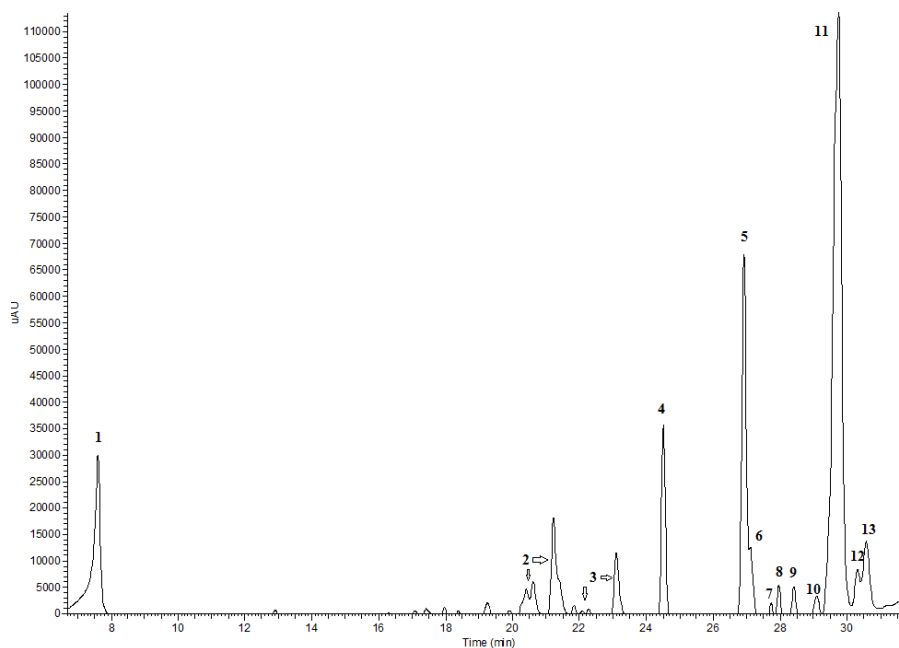
Standardok	R ²	Egyenes egyenlete
Lutein	0,9999	$y=1,0476x-0,1346$
Apo-karotinal	0,9974	$y=0,256x+0,845$
β -karotin	0,9966	$y=0,2768x-0,0211$
Likopin	0,9994	$y=8,43x-0,27$

5.5. Paradicsomban található ismert és ismeretlen karotinoidok azonosítása LC-MS módszerrel

A paradicsomban a már jól ismert komponensek, mint a lutein, likoxantin, *all-transz*-fitofluén, *cisz*-fitofluén, α -karotin, β -karotin, ζ -karotin, likopin és izomerei és a rubixantin mellett sikerült a módszernek köszönhetően új komponenseket is elválasztani (17. táblázat) (39. ábra).

17. táblázat: Elválasztott karotinoidok paradicsom mintában

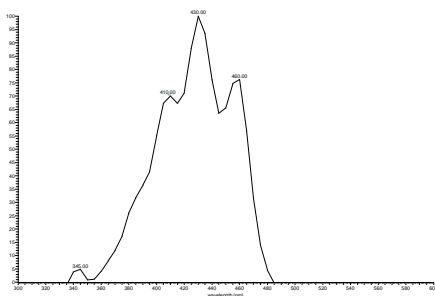
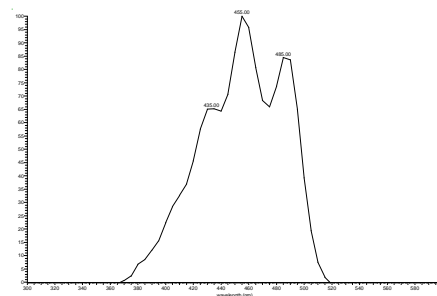
Csúcs száma	Retenciósi idő	Komponens
1	7,61	Lutein
2	20,41	β-karotin-diepoxi
2	20,64	β-karotin-diepoxi
2	21,22	β-karotin-diepoxi
3	21,42	Likopin-diepoxi
3	23,10	Likopin-diepoxi
4	24,51	Likoxantin
5	26,92	<i>all-transz</i> -fitofluén
6	27,11	<i>cisz</i> -fitofluén
7	27,71	ζ -karotin
8	27,96	α -karotin
9	28,41	13- <i>cisz</i> - β -karotin
10	29,09	β -karotin
11	29,62	13- <i>cisz</i> -likopin
12	29,75	Rubixantin
13	30,59	9- <i>cisz</i> -likopin



39. ábra:
Fotodióda soros (PDA) detektor felvétel

5.5.1. Ismeretlen karotinoidok azonosítása

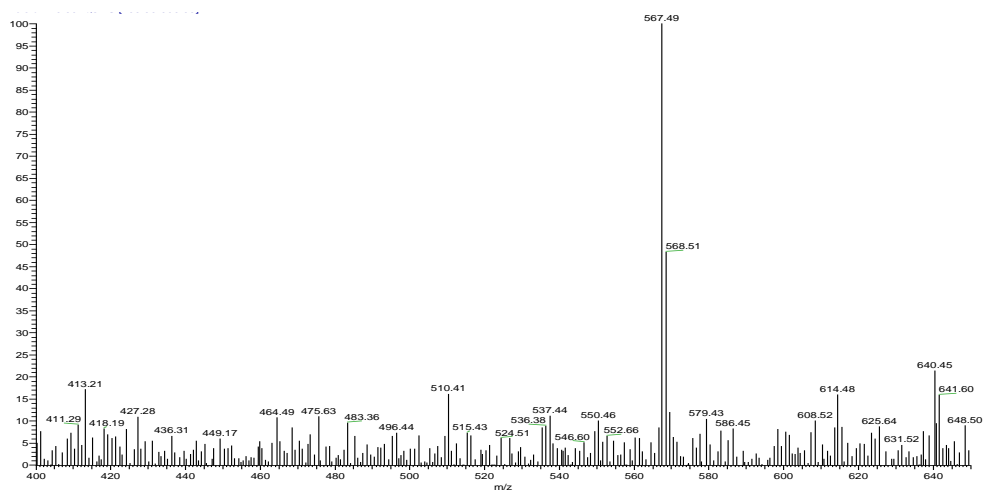
A tömör magvú C30-as oszlop segítségével sikerült két új komponenst elválasztanom a paradicsom mintákban. Ezeknek a vegyületeknek a spektrális tulajdonságai (400 és 486 nm közötti fényelnyelése) (40. ábra) közel voltak a sárga színű violaxantinéhez, neoxantinéhez vagy kriptoflavinéhez, de a kromatográfiás viselkedésük, az oszlopon történő visszatartásuk nem egyezett a poláros vegyületek tulajdonságaival. Ezért a komponensek azonosítása érdekében LC-MS módszert alkalmaztam. A HPLC-MS módszer segítségével azonosítottam a β -karotin-diepoxid és a likopin-dipeoxid molekulákat a paradicsommintákban. Mivel a karotinoidok nehezen ionizálódnak a vízmentes eluens használatakor, a gradiens elúciót módosítottam víz hozzáadásával, a víztartalmat 4%-ra növeltem.

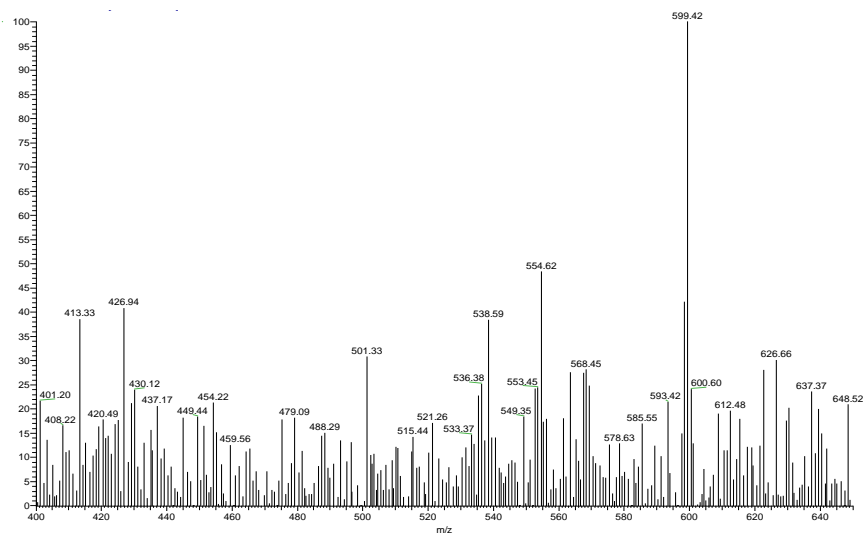
 β -karotin-diepoxid

Likopin-diepoxid

40. ábra: **β -karotin és likopin diepoxid diódasoros spektruma a tömör magyú C30 oszlopon gradiens elúcióval történő elválasztás után**

Az ismeretlen csúcsok azonosítása céljából a total ion mérése mellett az LC-MS/MS technika segítségével a molekulák fragmentálását is végeztem. A 567,49 m/z főtömeg értéke és a 536,44 m/z tömegű fragment jelenléte bizonyította a likopin illetve β -karotin diepoxid jellegét az ismeretlen karotinoidoknak (41. és 42. ábra). A likopinra és β -karotinra jellemző fragment (157 m/z) (Meulebroek et al., 2012), valamint a 32 m/z vezetessége fragmentáláskor erősíti a diepoxid természetét a vizsgált vegyületeknek.

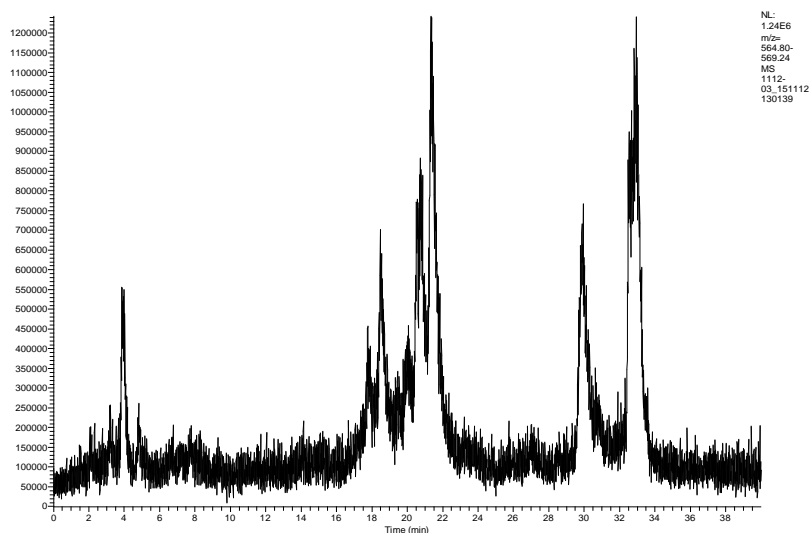
**41. ábra:** **β -karotin-diepoxid MS/MS spektruma $[M-H]^+$ a C30 oszlopon gradiens elúcióval történő elválasztás után**



42. ábra:

Likopin-dieoxid származékai $[M-H]^+$ 567,49 m/z -értéken felvett LC-MS kromatogramja

A 43. ábra mutatja az MS detektálással kapott elválasztási profilt 567,49 m/z -n. Több, mint 6 csúcsot kaptam a 15. és 22. perc között. A total ion értékek alapján azok a csúcsok a likopin és β -karotin epoxidokhoz tartoznak. A DAD detektorral végzett spektrum felvétel szerint a diepoxidok *cis*z formában vannak jelen, mert felvételeken 341-és 345 közötti extra elnyelés maximot találtam, valamint a vegyületek fényelnyelési maximuma 20 nm-rel alacsonyabb a β -karotinéhez és a likopinéhez képest

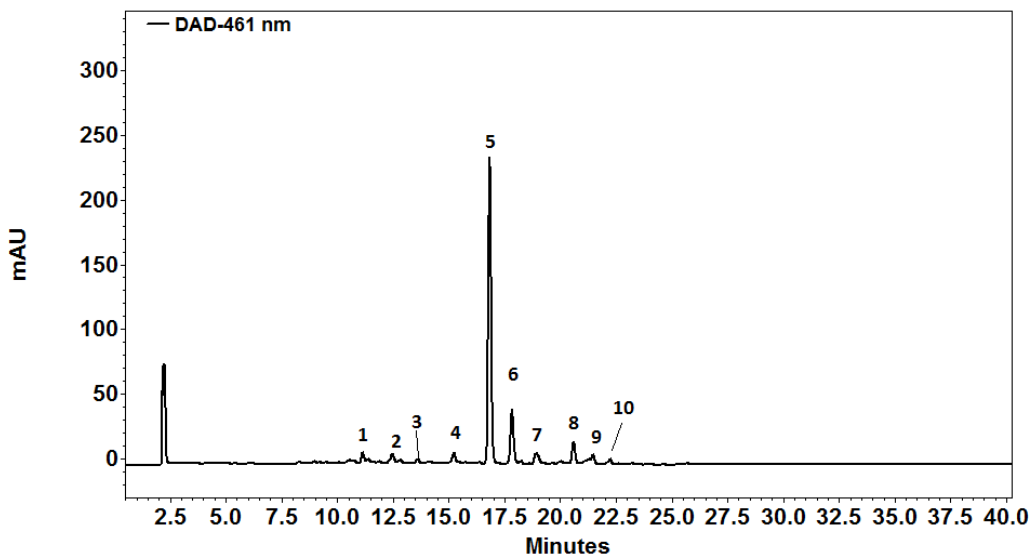


43. ábra:

Paradicsom kivonatból kinyert karotinoidok MS detektálással kapott elválasztási profilja 567,49 m/z -n

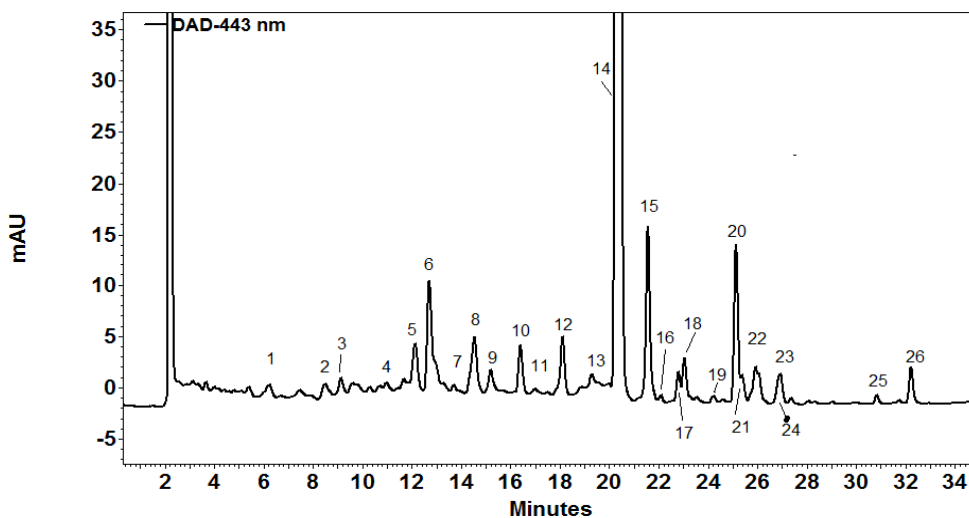
5.5.2. Paradicsom összetételének vizsgálata tömör magvú C30-as oszloppal

A vizsgált Heirloom paradicsomtermések színe igen változatos: sárga, lilás-pirosas, narancssárga és piros volt. A Heirloom fajták termesztése a hazai ökológiai körülmények között még csak kutatási fázisban van, ezért fontosnak láttam a karotinoidösszetételük vizsgálatát a kifejlesztett HPLC módszerrel. A 44. és 45. ábra valamint 17. táblázat mutatják a karotinoid összetételét és tartalmát a vizsgált Heirloom paradicsomoknak.



44. ábra:

Sárga színű Heirloom paradicsom fajta karotinoid profilja C30 tömör magvú oszlop és gradiens elúció alkalmazásával.



45. ábra:

Sárga színű amerikai paradicsom fajta karotinoid profilja C30 tömör magvú oszlop és gradiens elúció alkalmazásával.

A csúcsok azonosítása a 18. táblázatban található.

18. táblázat: Sárga színű amerikai paradicsom színanyagok összetételének azonosítása

Csúcs szám	Retenció idő (min)	Hullámhossz (nm)			Azonosítás
1	10,41	401	420	446	Lutein-epoxid
2	12,49	403	427	452	Mutatoxantin
3	13,68	409	431	463	Neurosporin-diepoxid
4	15,38	412	431	456*	Proneusporin
5	16,80	417	437	461	Proneurosporin
6	17,10	417	437	461*	Neurosporin származék
7	19,37	380	400	425	ζ -karotin
8	20,61	421	445	471	α -karotin
9	22,23	414	439	470	Neurosporin
21	23,06	342	413	439	<i>cisz</i> -neurosporin

A sárga színű tangerin paradicsomban a domináns karotinoid a pro-neusporin, ζ -karotin és α -karotin. β -karotint csupán nyomokban detektáltam, viszont likopin ki sem alakult. A vizsgálatot a likopin maximális fényelnyelésének hullámhosszán végeztük. Long és munkatársai (2006) viszont nem találtak sem β -karotint, sem likopint a sárga színű Heirloom paradicsom termésében. A szerzők a luteint, mint domináns karotinoidot detektálták a mintákban. A Magyarországon termesztett sárga színű paradicsomban luteint nem detektáltam. A különbség a genetikai és ökológiai tényezők hatásának köszönhető.

A narancssárga színű paradicsom karotinoidösszetétele hasonlít a tangerin típusú paradicsoméhoz, amelyben a prolikopin és a ζ -karotin a domináns színanyag (Raymundo és Simpson, 1972; Long et al., 2006; Pattenden és Robson, 2006). Glass és Simson (1976) vizsgálatai szerint a tangerin paradicsom jelentős γ -karotin mennyiséget tartalmaz. A munkámban vizsgált Heirloom paradicsomok nem tartalmaztak ilyen karotin izomert.

19. táblázat: Narancssárga színű paradicsom karotinoid összetétele:

Csúcs száma	Retenciós idő (min)	Hullámhossz			Azonosítás	
1	6,24	343	410	432	466	<i>cisz</i> -violaxantin
2	9,12		405	436	666	Klorofill származék
3	9,60		410	437	466	Violaxantin
4	10,94		416	442	471	Cukurbitaxantin B
5	12,13		399	420	447	Lutexantin származék
6	12,70		418	439	467*	Proneusporén-epoxid
7	13,70	341	402	428	450	<i>cisz</i> -neochrom
8	14,50		403	429	453	Mutatokrom
9	15,20	342	411	432	461	<i>cisz</i> - β -karotin-diepoxid
10	16,40	342	412	432	463	<i>cisz</i> - β -karotin di-epoxid
11	18,10		410	430	461*	Proneusporén-epoxid
12	19,30		428	453	483	β -kriptoxantin
13	20,35		417	437	461*	Proneusporén
14	21,16		377	399	421	<i>cisz</i> - ζ -karotin
15	21,53	343,362	409	432	462	<i>cisz</i> -likopin-diepoxid
16	22,76		380	400	425	ζ -karotin
17	23,03	341	410	438	467	<i>cisz</i> - α -karotin
18	23,31		381	401	427	ζ -karotin
19	24,20		414	435	461	Likopin-diepoxid
20	25,13		421	445	471	Neurosporin
21	25,40		421	453	478	β -karotin
22	25,90	342,361	451	473	491*	15- <i>cisz</i> likopin
23	26,90	342,361	438	468	494	Likopin származék
24	32,21		445	472	503	<i>all-transz</i> -likopin

A 20. táblázat azt is bemutatja, hogy a sárga és narancssárga színű paradicsomokban az összes karotinoidtartalom majdnem 2,5-szer nagyobb, mint a piros színű paradicsomok esetében. Ez a prolikopin vagy proneurosporin illetve ζ -karotin nagy mértékű felhalmozódásának köszönhető.

A piros színű amarikai paradicsomokban előforduló *all-transz* likopin mennyisége (17-20 µg/g ny.a.) abba a tartományban esik, amelyet Kuti és Konuru (2005) talált különböző piros színű paradicsomfajtákban. A *cisz* izomerek mennyisége viszont jóval magasabb a Magyarországon termesztett Heirloom paradicsomokban, ami a magas izomeráz enzim aktivitásra utal.

20. táblázat: A friss Heirloom paradicsomok karotinoid összetétele a fejlesztett HPLC módszerrel végzett meghatározás alapján

Karotinoidok (mg/g)	Molekulatömeg	Cherokee purple	German Johanson	Kellog's Breakfast	Yellow Brandy wine
ζ-karotin	540,90	0	0	19,14±15,3	32,65±22,21
				9	
ζ-karotin	540,90	0	0	1,68±1,58	3,33±3,21
Proneurosporén	549,44	0	0	2,49±1,76	70,99±15,27
Prolikopin	536,88	0	0	100,87±51,	3,82± 0,23
				4	
Neokrom	598,89	0	0	3,1±1,54	2,26±0,41
Neurosporén	538,89	0	0	1,55±0,59	1,42±0,38
α-kriptoxantin	552,87	0	0	5,33±3,12	5,96±1,29
Violaxantin	600,87	0	0	2,92±1,17	1,89±0,65
Likopin	536,87	19,25±14,2	17,93±6,	0	0
		5	2		
β-karotin	536,87	11,51±3,32	12,2±3,3	0	0
			4		
9- <i>cisz</i> -likopin	536,87	4,5±5,39	7,84±2,2	0	0
			4		
13- <i>cisz</i> -likopin	536,87	3,68±3,15	5,28±2,7	0	0
			7		
Likopin-epoxid -1	552,43	2,55±2,63	0,81±0,3	0	0
			6		
Likopin-epoxid -2	552,43	2,83±5,61	0,76±0,1	0	0
			8		
β-kriptoxantin	552,87	0,96±1,05	0,67±0,1	0	0
			9		
Likoxantin	552,87	0,42±0,11	0,77±0,2	0	0
			9		
Likopin-diepoxid-1	568,42	1,1±0,07	1,04±0,3	0	0
			5		
Likopin-diepoxid-2	568,42	1,03±0,14	1,09±0,1	0	0

3					
Lutein	568,87	0,99±1,2	0,19±0,0	0	0
4					
Mutatoxantin	584,87	0,75±0,28	1,25±0,2	0	0
7					
Neoxantin	600,87	1,52±1,05	2,69±0,5	0	0
Összes:		50,67	52,52	137,08	122,08

5.5.3. Paradicsomtermékek karotinoidösszetétele

A mindennapi étrendben a paradicsomtermékek fogyasztása igen gyakori. A termék feldolgozása enyhe hőkezeléssel jár, így a paradicsomban található karotinoid komponensek károsodása várhatóan minimális. Vizsgálataim során különböző termékeket: ivóleveket, sűrített paradicsomokat, püréket és ketchupokat vizsgáltam.

A kereskedelmi forgalomban leginkább elterjedt ketchup termékeket vizsgáltam. Az összkarotinoid-tartalom és a likopintartalom a magyar Globus és Univer cégek termékeiben volt a legnagyobb (21. táblázat). A β -karotin koncentrációja az Univer ketchupban jóval magasabb volt, mint a többi termékben, így ez a termék tekinthető a legértékesebbnek táplálkozástudományi szempontból.

21. táblázat: A paradicsom ketchup karotinoidösszetételének és -tartalmának ($\mu\text{g/g}$ ny.a.) értékelése a fejlesztett HPLC módszerrel végzett vizsgálat alapján

Karotinoid (mg/g)	Ketchup				
	Univer	Globus	Heinz	Chumak-tom	Chumak-chil
Violaxantin	0,6	2,8	0,9	0,8	1,1
Lutein epoxid	1,7	0,9	1,1	8,1	6
Lutein	6,9	5,1	4,2	2,9	3,4
cisz-β-kriptoxantin-epoxid	6,9	3,2	0,2	2,1	1,8
Prolikopin	1,8	2,9	1,8	2,1	1,5
cisz-β-karotin-diepoxid	0,8	tr	tr	0,5	0,8
cisz-neokrom	6,3	7,6	1,2	5,5	4,6
cisz-likoxantin-epoxid	6,6	8,1	6,1	5,9	6,5
cisz-likopin-diepoxid	18,7	21,6	16,6	16,5	18,6
Likoxantin-epoxid	3,8	6,6	5,2	4,7	2,6
Rubixantin	11,6	12,1	8,8	8,3	8,7
Fitofluén1+karotinoid	2,6	1,5	0,3	1,1	1,8
β-kriptoxantin	tr	tr	0,8	3,7	tr

ζ -karotin	8,7	4,2	3,8	2,1	8,7
ζ -karotin + <i>cisz</i> - β -karotin	10,2	9,2	4,7	tr	10,2
Likoxantin	31,7	27,8	12,3	12,4	9,9
<i>cisz</i> - β -karotin-diepoxid	5,2	6,6	4,7	4,8	5,7
β -karotin	31,7	21,1	15,7	15,9	22,8
5- <i>cisz</i> -likopin	3,1	4,7	2,7	3,8	4,4
13- <i>cisz</i> -likopin	27,2	29,8	20,3	25,8	26,9
Neurosporén	2,2	2,5	1,2	1,3	1,1
γ -karotin	3,8	4,6	1,7	1,9	2,1
9- <i>cisz</i> -likopin	8,5	9,6	6,5	9,4	12,2
Likopin	852,5	1099,1	616,6	664,3	495,5
Fitoén-1	15,4	14,5	10,1	8,2	8,7
Fitoén-2	83,8	85,8	46,4	50,4	59,2
Fitofluén-1	17,2	19,2	18,3	12,7	16,8
Fitofluén-2	32,4	9,9	12,7	9,9	10,7
Összes karotinoid:	966,9	1241,7	698,5	753,9	592,5

A sűrített paradicsom szerepe a táplálkozásban megelőzi a ketchupét, többet használjuk a főzés során. A sűrítési folyamat során emelkedik a termék szárazanyagtartalma, természetesen a sűrítőanyagban magasabb karotinoidkoncentrációt találunk (22. táblázat). A különböző termékekben 1515-1922 $\mu\text{g/g}$ összkarotinoid-tartalmat mértem. Ebben 1371-1507 $\mu\text{g/g}$ likopin található. A sűrített paradicsomban lévő karotinoidtartalom kb. 80%-át a likopin teszi ki. A β -karotin esetében a legnagyobb koncentrációt az S5 Carloni és az Aranyfácán termékében mértem. A sűrítőanyagok HPLC vizsgálata értékes információval szolgál a táplálkozás területén, mert ezek a bioaktív karotinoidok beviteléhez jelentősen hozzájárulnak.

22. táblázat. Sűrített paradicsom karotinoidösszetételének és -tartalmának értékelése a fejlesztett HPLC módszerrel végzett vizsgálat alapján

Karotinoid (mg/g)	Sűrített paradicsom				
	Kecskeméti	Aranyfácán	Vitafood Bio	Isabel	S5 Carloni
Violaxantin	4,7	10,2	5,2	4,3	7,5
Lutein epoxid	4,5	2,4	4,6	6,5	2,1
Lutein	18,1	20,9	13,5	10,3	21,4
<i>cisz</i> - β -kriptoxantin-epoxid	3,3	5,1	3,7	2,5	6,4
Prolipopin	1,6	2,3	0,7	2,5	3,4

cisz-β-karotin-diepoxid	1,1	2,7	0,4	4,3	6,2
<i>cisz</i> -neokrom	2,1	5,5	5,3	3,2	10,6
<i>cisz</i> -likoxantin-epoxid	3,3	13,1	23,8	16,8	10,6
<i>cisz</i> -likoxantin-epoxid	2,1	14,2	1,8	14,8	14,9
<i>cisz</i> -likopin-diepoxid	25,1	54,6	11,5	43,4	55,6
Likoxantin-epoxid	3,7	5,6	3,9	20,9	6,8
Rubixantin	14,2	94,7	tr	3,9	18,3
Fitofluén1+karotinoid	6,1	1,8	1,4	12,9	5,4
β-kriptoxantin	1,5	21,3	3,3	20,9	6,8
ζ-karotin	25,6	45,5	16,8	29,8	48,8
ζ-karotin + <i>cisz</i>-β-karotin	18,7	7,5	18,7	6,2	8,9
Likoxantin	42,1	44,6	43,9	12,8	33,5
<i>cisz</i> - β -karotin-diepoxid	?	5,6	1,9	3,9	6,8
β-karotin	72,4	94,7	38,1	29,2	95,1
5-<i>cisz</i>-likopin	13,5	20,9	13,9	12,9	22,7
13-<i>cisz</i>-likopin	86,5	124,1	99,8	94,9	121,9
Neurosporén	3,2	5,4	4,3	4,5	6,6
γ-karotin	9,8	12,4	9,9	8,9	13,9
9-<i>cisz</i>-likopin	16,6	30,7	22,3	21,1	39,4
Likopin	1347,7	1475,6	1371,2	1267,3	1507,2
Fitoén-1	?	48,3	31,1	27,2	50,1
Fitoén-2	223,7	310,1	160,6	227,8	373,6
Fitofluén-1	113,5	152,1	65,4	103,8	194,5
Fitofluén-2	66,5	38,2	39,7	27,6	44,6
Összes karotinoid:	1642,8	1875,8	1652,8	1515,8	1922,2

A vizsgált ivólé termékek között jelentős különbséget találtam az összes karotinoid tartalomban (23. táblázat). Az olasz LS Pomil ivólében mértem a legmagasabb karotinoid tartalmat, a legalacsonyabbat pedig az MPM kiskunsági mintában találtam. A likopin, mint biológiailag aktív karotinoid és a színért felelős komponens hasonló tendenciát mutatott, mint az összkarotinoid-tartalom. A legmagasabb β -karotin koncentrációt viszont a kecskeméti mintában találtuk. A 9-*cisz*-likopin és a 13-*cisz*-likopin koncentrációja a három magyar mintában volt a legkisebb, ami arra utal, hogy ezek gyártásakor kíméletesebb technológiát alkalmaztak.

A legmagasabb *cisz*-likopin koncentrációt az LS Pomil termékben mértem. A termékekben a *cisz* izomerek mennyisége egyenesen arányos az összes karotinoid

mennyiségével, ami szintén a kémleletes előállítást igazolja, mivel a hőkezelés során az izomerizációt szabályozó enzimek aktivitásukat megőrizték.

Az ivólevelekben mért likopintartalom 152,9 - 343,5 $\mu\text{g/g}$ volt. Ez a tartomány jóval magasabb, mint az irodalomban említett koncentrációk a paradicsomlevelekben illetve passzírozott paradicsomok esetében (Abushita et al., 2000; Lin és Chen, 2005 a,b; Takeoka et al., 2001; Saybold et al., 2004), de kevesebb mint a 2100 $\mu\text{g/g}$ paradicsom, amit Dewanto és munkatársai (2002) publikáltak. Valószínű, hogy az utóbbi szerzők munkájukban elszámolták a koncentrációt, mert a publikált értékek tízszeresek az eddig mértékhez képest az ipari illetve étkezési paradicsom fajták esetében, viszont a leírásban üvegházban termesztett étkezési paradicsomról, nem pedig ipari paradicsomról számoltak be.

23. táblázat. A paradicsom ivólé karotinoidösszetételének és -tartalmának értékelése a fejlesztett HPLC módszerrel végzett vizsgálat alapján

Karotinoid (mg/g)	Paradicsom ivólé				
	Szobi	Kecskeméti	LS Pomil	MPM Kkiskun	Tesco
Violaxantin	2,3	1,5	2,4	0,3	0,7
Lutein epoxid	0,3	0,3	1,8	0,7	1,3
Lutein	3,4	4,1	5,1	2,7	3,6
<i>cisz</i> - β -kriptoxantin-epoxid	0,6	0,6	0,6	2,7	1,5
Prolikopin	0,4	0,6	1,9	0,4	0,5
<i>cisz</i> - β -karotin-diepoxid	0,2	0,3	0,4	0,4	0,2
<i>cisz</i> -neokrom	1,4	1,8	1,1	2,2	0,4
<i>cisz</i> -likoxantin-epoxid	1,3	2,1	2,6	2,4	1,9
<i>cisz</i> -likoxantin-epoxid	0,2	0,4	0,2	0,4	tr
<i>cisz</i> -likopin-diepoxid	4,1	6,3	6,1	6,9	5,9
Likoxantin-epoxid	0,8	1,1	0,2	1,4	0,7
Rubixantin	2,2	2,9	2,1	3,4	2,1
Fitofluén1+karotinoid	0,1	0,7	0,2	0,6	1,4
β -kriptoxantin	tr	tr	tr	0,5	0,2
ζ -karotin + <i>cisz</i> - β -karotin	3,6	3,1	6	1,5	4,6
Likoxantin	7,4	3,4	7,8	1,4	8,6
<i>cisz</i> - β -karotin-diepoxid	2,6	3,6	2,8	2,9	2,7
β -karotin	14,6	20,3	16,6	14,8	16,1
5- <i>cisz</i> -likopin	1,8	1,5	3,4	1,1	2,9
13- <i>cisz</i> -likopin	14,6	12,5	21,5	10,2	16,9
Neurosporén	1,1	0,7	1,1	0,6	0,9

γ-karotin	2,3	2,1	2,2	2,2	2,1
9-<i>cisz</i>-likopin	2,3	2,1	9,5	2	8,8
Likopin	292,7	196,5	343,5	152,9	340,4
Fitoén-1	6,54	8,83	8,01	4,5	8,87
Fitoén-2	46,3	71,4	63,1	36,4	44,9
Fitofluén-1	7,8	14,7	28,3	6,4	22,5
Fitofluén-2	22,5	25,9	11,1	11,2	8,1
Összes karotinoid:	339,8	246,8	417,6	193,1	407,2

A paradicsompüré szárazanyagtartalma magasabb, mint az ivóléé, emiatt a különböző pürékben mért karotinoidok koncentrációja majdnem duplája volt az ivólében mérhető értékeknek (24. táblázat). A legmagasabb likopintartalmat a Tesco mintájában találtam, a többi termék között nem volt szignifikáns különbség a likopintartalomban. Az A-vitamin legfontosabb prekursora, a β-karotin koncentrációja a Happy Fruch termékben volt a legkisebb, a Tesco termékében a legnagyobb. Mindegyik termékben magasabb volt a 13-*cisz*-likopin koncentrációja az ivólé termékekhez képest, a legnagyobb értéket a Tesco püréjében találtuk. Ez várható volt, hiszen a püré feldolgozásakor a passzírozás és a szűrés után hőkezeléssel csökkentik a nedvességtartalmat, és a meleg passzírozás során gyorsul az *all-transz-cisz* izomerizáció (Nguyen et al., 2001; Lin és Chen, 2005a). A minták közötti különbség az alapanyaghoz választott fajták és a gyártási technológiák különbözőségének tulajdonítható.

24. táblázat. A paradicsompüré karotinoid összetételének és tartalmának értékelés a fejlesztett HPLC módszerrel végzett vizsgálat alapján

Karotinoid (mg/g)	Paradicsompüré				
	HappyFruch	CBA	Cirio	Mutti-Pama	Tesco
Violaxantin	3,3	1,6	3,6	3,2	3,1
Lutein epoxid	0,5	0,4	0,2	0,3	3,7
Lutein	6,3	4,3	8,3	4,6	11,2
<i>cisz</i>-β-kriptoxantin-epoxid	3,2	1,7	1,3	1,8	6,6
Prolikopin	1,2	0,9	2,1	1,1	1,8
<i>cisz</i>-β-karotin-diepoxid	1,1	1,6	2,4	1,8	0,8
<i>cisz</i>-neokrom	0,8	6,4	7,9	7,4	0,8
<i>cisz</i>-likoxantin-epoxid	6,5	6,2	7,1	6,8	7,6
<i>cisz</i>-likoxantin-epoxid	0,9	0,8	0,8	1,2	0,9
<i>cisz</i>-likopin-diepoxid	22,9	19,7	25,2	23,3	32,6

Likoxantin-epoxid	2,3	4,3	2,2	2,2	3,1
Rubixantin	5,7	5,8	6,3	6,3	6,6
Fitofluén1+karotinoid	1,7	1,1	1,3	1,1	2,7
β-kriptoxantin	2,1	1,4	1,1	1,6	2,5
ζ-karotin	6,2	2,6	17,1	9,4	12,7
ζ-karotin + <i>cisz</i>-β-karotin	3,3	2,4	6,4	3,2	3,4
Likoxantin	8,7	4,1	3,4	4,1	17,8
<i>cisz</i>-β-karotin-diepoxid	0,8	0,8	0,7	0,8	0,9
β-karotin	13,8	32,8	54,9	44,4	59,7
5-<i>cisz</i>-likopin	8,7	6,1	6,7	6,2	10,6
13-<i>cisz</i>-likopin	57,7	47,6	50,4	49,3	71,1
Neurosporén	2,4	1,6	2,9	2,1	2,8
γ-karotin	3,8	2,3	4,8	3,3	8,3
9-<i>cisz</i>-likopin	20,5	9,1	15,2	10,6	15,3
Likopin	673,7	629,1	677,1	662,7	728,9
Fitoén-1	14,9	10,7	19,3	11,1	32,3
Fitoén-2	88,2	42,1	132,1	68,4	174,7
Fitofluén-1	40,4	19,8	47,2	20,8	84,2
Fitofluén-2	17,8	11,2	24,8	22,1	35,5
Összes karotinoid:	831,8	760,3	974,2	808,4	963,5

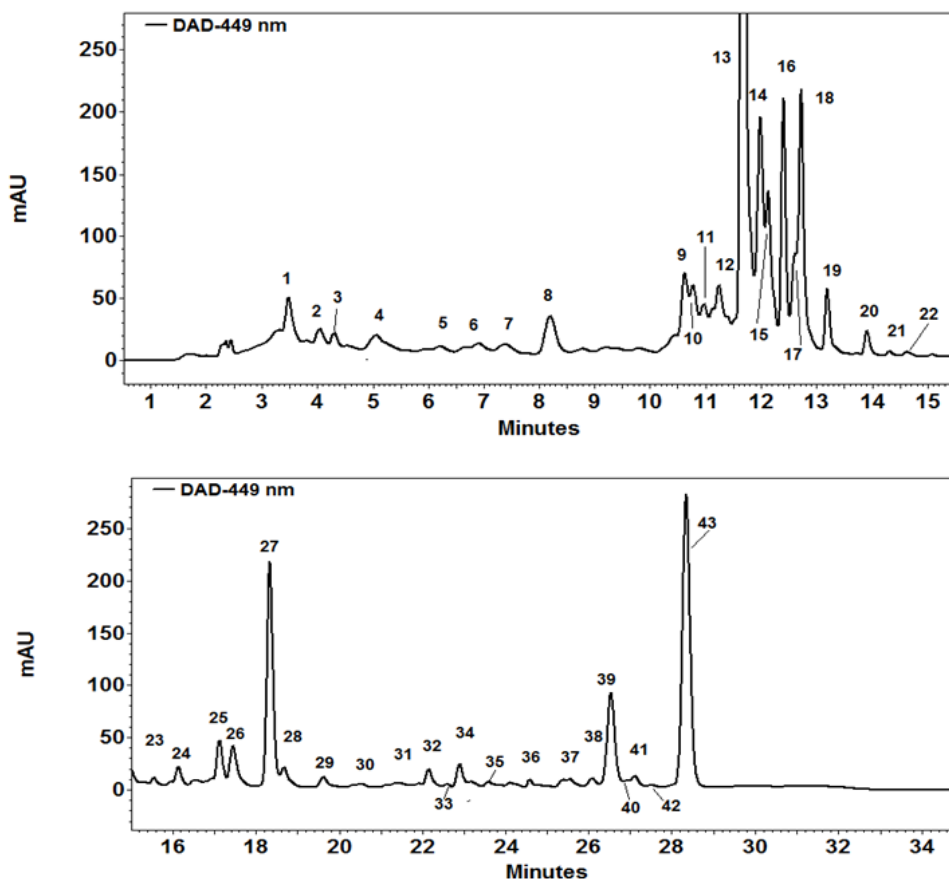
A kutatási munkámban vizsgált paradicsom termékek magas karotinoidtartalmának több oka is lehet. Olyan termékeket választottam, amelyek előállításához magas karotinoidtartalmú alapanyagot használtak főként jó minőségű termékeket előállító vállalatoktól. A második ok, hogy a termesztési szezon időjárási körülményei kedvezők voltak a karotinoidokban gazdag paradicsom előállításához.

Az általam fejlesztett módszerben az injektálás előtt a karotinoid pigment oldását módosítottuk annak érdekében, hogy kristályosodásukat a HPLC szűrőben teljes mértékben elkerüljük. Általában a karotinoidokat a HPLC eluensben oldják fel. Ezzel kapcsolatban több kísérletet végeztünk. Az egyik kísérletben a pigmenteket feloldódtuk 50% TBME metanolban. Az összkarotinoid, likopin és β -karotin mennyiségének felét mértük és a paradicsomtermékekre vonatkoztatva a tartalom nagyon közel volt az irodalomban említett értékekhez. A pigment kristályokat jelentős mennyiségben találtuk meg a HPLC szűrőn. A HPLC tisztaságú acetont alkalmaztunk a probléma megoldására. Az acetont biztosította a karotinoidok teljes oldódását és ezzel a valódi karotinoidkoncentrációt mértük a mintákban.

A fentiek alapján az új HPLC módszerrel végzett meghatározások új és több információt adnak a paradicsom és a paradicsomból készült termékekben előforduló karotinoidokról. A szerzett kvantitatív adatok nagy jelentőséggel bírnak a biológiai és táplálkozás-tudományi területen.

5.5.4. Különböző magyar és külföldi fűszerpaprika-őrlemények karotinoidösszetételének vizsgálata tömör magvú C30 oszloppal

A 46. ábrán a szappanosított fűszerpaprikából kinyert minták C30-as oszlopon, gradiens elúcióval elválasztott karotinoid kromatogramját láthatjuk. Ez az általunk kidolgozott HPLC módszer kiváló elválasztást biztosított 43 karotinoid vegyület számára. A fő komponensek azonban kis retenciós idő tartományban eluálódtak, így ez nehezítette ezen vegyületek izomerjeinek elválasztását és kimutatását. A kidolgozott módszer lehetőséget nyújt a genetikai, környezeti és technológiai hatások okozta összetételbeli változások nyomonkövetésére.



46. ábra:

Szappanosított fűszerpaprika karotinoid típusú színanyagok C-30 oszlopon és gradiens elúcióval történő elválasztása

25. táblázat: Szappanosított fűszerpaprika karotinoidjainak azonosítása

csúcs száma	Retenciós idő (min)	Hullámhossz				Azonosítás
		(nm)				
1	3,46	318	398	421	443	<i>cisz</i> luteoxantin
2	4,07		385	401	427	<i>cisz</i> auroxantin
3	4,31		378	403	429	Auroxantin
4	5,02	331*	403	426	452	<i>cisz</i> neokrom
5	6,38		403	427	455	Neokrom
6	6,82		401	422	447	Luteoxantin
7	7,38		421	443	471	Kukurbitaxantin B epoxid
8	8,16		419	445	472	Kukurbitaxantin B
9	10,66		452	479	515	Kapszorubin
10	11,01		402	440	468	Ciklo-violaxantin
11	11,16	341,36	441	462		<i>cisz</i> -kapszantin epoxid
12	11,27	353		453		<i>cisz</i> -kapszantin
13	11,68			472	494*	Kapszantin
14	12,01		422	445	472	Kukurbitaxantin A
15	12,14	357		468		<i>cisz</i> -kapszantin
16	12,4		425	451	476	Zeaxantin
17	12,6	364*		462		Nem azonosított
18	12,73	360		464	488*	<i>cisz</i> -kriptokapszin
19	13,20	338	418	443	470	<i>cisz</i> β -kriptoxantin epoxid
20	13,92		421	441	474	β -kriptoxantin epoxid
21	14,33		403	431	455	Mutatokrom származék
22	14,67		422	450	478	β -kriptoxantin epoxid
23	15,56		401*	448		Nem azonosított
24	16,15	352*		467		Nem azonosított
25	17,18	338	418	442	470	<i>cisz</i> - β -kriptoxantin epoxid
26	17,45	340	420	443	471	<i>cisz</i> - β -kriptoxantin epoxid
27	18,30		425	451	478	β -kriptoxantin
28	18,70		415	444	474	α -kriptoxantin
29	19,64	346	417	445	472	<i>cisz</i> - β -kriptoxantin
30	20,5		380	410	436	Nem azonosított

31	22,19	404	430	454	495*	Nem azonosított
32	22,60		419	446	474	<i>cisz</i> - β -karotin-epoxid
33	22,80		423	450	476	<i>cisz</i> - β -karotin-epoxid
34	23,19		422	450	476	β -karotin-epoxid-1
35	23,87	348	421	445	475	<i>cisz</i> - β -karotin-epoxid
36	24,32		421	445	476	β -karotin-epoxid 2
37	25,41		413	442	472	α -karotin-epoxid
38	25,92	342	414	439	463	<i>cisz</i> - β -karotin
39	26,56	339	418	445	471	<i>cisz</i> - β -karotin
40	26,90		378	401	427	Zeta-karotin
41	27,08		422	445	473	α -karotin
42	27,31		378	401	427	Zeta-karotin
43	28,38		426	452	478	β -karotin

A különböző magyar és külföldi fűszerpaprika őrleményekben előforduló karotinoid színanyagok összetétele és tartalma a 26-27. táblázatokban található. A különböző típusok karotinoid összetétele majdnem teljesen megegyezett. A technológiai tényezőknek köszönhetően némely mintákban több *cisz* karotinoid izomert detektáltam, azonban elhanyagolható mennyiségben.

A vizsgált fűszerpaprika minták között különbséget az összkarotinoid-tartalomban és az egyedi komponensek mennyiségében találtam.

A fűszerpaprika füstölése jelenleg elterjedt eljárás, mivel növeli a tárolhatóságot, és különleges aromát ad a terméknek. Kísérleteimben a füstölésnek a fűszerpaprika karotinoidokra gyakorolt hatását vizsgáltam spanyol és magyar termékekben. A füstölés védelmet biztosított a zeaxantinnak, β -kriptoxantinnak mind a spanyol, mind a magyar mintákban, azonban a magyar mintákban a β -karotinnak, fitofluénnek és fitoénnek is.

A füstölés eredményeképpen a piros színért felelős két legnagyobb mennyiségben detektált komponens – kapszantin és kriptokapszin – mennyisége lecsökkent.

Érdekes eredmény, hogy a sárga színű poláros kukurbitaxantin A és kukurbitaxantin B esetében a füstölés hatására koncentrációjuk csak a magyar mintáknál volt megfigyelhető.

Figyelemre méltó eredmény, hogy a füstölés hatására a spanyol mintákban 3-szor, a magyar mintákban 5,6-szor akkora mennyiséget mértünk *cisz*-luteoxantinból. Ez azt sejteti, hogy a füstölési eljárás gyorsítja az *all-transz*, *cisz* izomerizációs folyamatot a

fűszerpaprikában. Erre alapozva füstöléssel kapcsolatos eredményeink nyomon követési rendszer kiépítésére alkalmazhatóak.

A különböző minták karotinoid összetétele és tartalma alapján megállapítható, hogy a dél-afrikai és a konvencionális magyar fűszerpaprika minták mind összkarotinoid, mind az egyedi komponensek mennyisége szempontjából a legjobb eredményeket érték el.

26. táblázat: Magyar fűszerpaprika örlemények karotinoidok összetétele és tartalma ($\mu\text{g/g}$) Accucore C30 oszlop alkalmazásával, gradiens elúcióval

Karotinoidok	Bio Meteor	Konv. Magyar	Füstölt Magyar
<i>cisz</i> -luteoxantin	123,1	25,2	142,1
<i>cisz</i> -auroxantin	6,6	6,1	19,7
Auroxantin	4,2	4,9	7,4
<i>cisz</i> -neokrom	11,2	22,7	14,9
Neokrom	18,7	20,6	17,6
Luteoxantin	20,3	13,8	5,5
KukurbitaxantinB-epoxid	65,1	63,1	35,4
Kukurbitaxantin B	297,2	387,6	267,2
Kapszorubin	236,2	69,8	70,6
Ciklo-violaxantin	49,6	58,2	47,2
<i>cisz</i> -kapszantin	110,4	224,1	170,2
Kapszantin	2248,1	2790,1	2181,6
Kukurbitaxantin B	469,6	652,2	477,3
<i>cisz</i> -kapszantin	513,6	672,8	536,1
Zeaxantin	481,8	642,6	693,6
Kriptokapszin	1026	1154,4	775,2
<i>cisz</i> - β -kriptoxantin-epoxid	144,8	206,2	181,6
β -kriptoxantin-epoxid	28,5	61,6	159,1
Mutatokrom származék	5,6	14,1	152,2
β -kriptoxantin-epoxid	18,1	4,5	8,2
<i>cisz</i> -kriptokapszin	5,2	36,4	40,3
<i>cisz</i> - β -kriptoxantin-epoxid	32,8	60,2	111,2
<i>cisz</i> - β -kriptoxantin-epoxid	46,6	72,4	116,3
β -kriptoxantin	238,9	329,8	615,8

α -kriptoxantin	15,5	19,3	27,1
<i>cisz</i> - β -kriptoxantin	8,8	12,4	38,1
Nem azonosított	11,2	22,7	46,5
β -karotin-epoxid-1	7,2	16,5	6,1
<i>cisz</i> - β -karotin-epoxid		8,4	18,2
β -karotin-epoxid-2	4,2	9,5	14,8
α -karotin-epoxid	7,4	8,2	8,4
<i>cisz</i> - β -karotin	5,7	14,3	23,2
<i>cisz</i> - β -karotin	119,2	304,3	339,4
α -karotin	14,4	28,2	18,9
β -karotin	484,2	949,5	1141,1
<i>cisz</i> - β -karotin	38,4	34,4	36,2
Fitoén	174,7	281,1	996
Fitofluén	70,6	158,1	285,8
összes karotinoid	6448,8	8906,4	8951,2

27. táblázat: Külföldi fűszerpaprika őrlemények karotinoidok összetétele és tartalma ($\mu\text{g/g}$) Accucore C30 oszlop alkalmazásával, gradiens elúcióval

Karotinoidok	Spanyol	Füstölt spanyol	Dél Afrika	Kína
<i>cisz</i> -luteoxantin	26,1	80,1	110,2	35,9
<i>cisz</i> -auroxantin	12,7	32	16,9	23,8
Auroxantin	16,5	22,4	24,1	20,9
<i>cisz</i> -neokrom	13,4	75,2	22,3	78,4
Neokrom	24,5	13,3	19,2	17,1
Luteoxantin	5,3	14,4	17,1	7,2
KukurbitaxantinB-epoxid	20,1	30,9	55,4	47,5
Kukurbitaxantin B	125,3	131,2	359,1	231,4
Kapszorubin	52,2	80,1	58,9	66,9
Ciklo-violaxantin	14,8	19,3	47,8	31,7
<i>cisz</i> -kapszantin	86,4	43,9	241,1	117,6
Kapszantin	2130,4	2035,2	3228,4	2781,6
Kukurbitaxantin B	188,8	192,1	528,8	361,6

<i>cisz</i> -kapszantin	120,2	94,1	455,7	153,2
Zeaxantin	245,6	275,3	1268,8	456,8
Kriptokapszin	564,1	516,8	1143,2	738,4
<i>cisz</i> - β -kriptoxantin-epoxid	103,6	100,4	474	190,1
β -kriptoxantin-epoxid	32,9	40,2	92,8	47,2
Mutatokrom származék	8,8	7,8	12,4	14,2
β -kriptoxantin-epoxid	6,1	10,1	13,4	16,4
<i>cisz</i> -kriptokapszin	30,6	39,2	39,5	25,2
<i>cisz</i> - β -kriptoxantin-epoxid	27	23,2	110,1	58,8
<i>cisz</i> - β -kriptoxantin-epoxid	29,6	30,4	115,6	62,9
β -kriptoxantin	129,1	140,8	615,5	298,4
α -kriptoxantin	8,3	10,4	18,8	12,5
<i>cisz</i> - β -kriptoxantin	11,9	13,4	34,2	22,6
Nem azonosított	9,1	8,1	26,4	19,5
β -karotin-epoxid-1	10,7	6,5	16,2	14,4
<i>cisz</i> - β -karotin-epoxid	6,6	4,1	14,7	6,8
β -karotin-epoxid-2	5,6	ND	9,2	6,3
α -karotin-epoxid	11,8	4,5	6,2	4,9
<i>cisz</i> - β -karotin	6,6	5,5	12,2	8,4
<i>cisz</i> - β -karotin	53	38,5	220,5	116,8
α -karotin	4,3	4,2	30,2	10,6
β -karotin	162,4	138,8	749,4	348,8
<i>cisz</i> - β -karotin	36,6	41,1	34,9	38,4
Fitoén	240,8	138,9	584,8	314,5
Fitofluén	57,5	20,7	187,8	91,7
összes karotinoid	4092,6	4125,6	9876,3	6218,4

5.6. Új tudományos eredmények

Doktori dolgozatomban fűszerpaprika és paradicsom karotinoid, illetve aromakomponenseinek vizsgálatát végeztem el. Munkám célja megfelelő kromatográfiai módszerek kidolgozása a karotinoidok és aromakomponensek meghatározására, és ezek alkalmazásának igazolása valós minták alkalmazásával.

Új tudományos eredményeim az alábbi pontokban foglalhatók össze:

1. Hatékony GC-MS módszert fejlesztettem és validáltam aromakomponensek elválasztására fűszerpaprika, paradicsom és készítményei esetében. Fűszerpaprika esetében több mint 140 komponenst azonosítottam, míg paradicsom esetében közel 100 komponenst. Olyan aromavegyületeket mutattam ki, amelyek egyes mintákban előfordulnak, de a többi mintában nem. Megállapítottam, hogy a fűszerpaprika füstölése során legalább 35 új komponens azonosítható. Ezen komponensek detektálása igazolja a füstölést, valamint koncentrációjuk a füstölés mértékét.
2. Megállapítottam, hogy a friss paradicsomok aromaprofilja számottevően nem különbözik egymástól, viszont az íz és szín között jelentős különbség van. Ráadásul a feldolgozott paradicsomkészítményekben jelentősen csökkent a friss paradicsomokra jellemző hexanal és a *transz*-2-hexén-1-al koncentrációja.
3. Két HPLC módszert fejlesztettem és validáltam a szappanosított fűszerpaprikában található karotinoidok elválasztására és meghatározására. Az egyik módszerben keresztkötésű, kevésbé poláros C18 oszlopot és víz-aceton gradiens elúciót alkalmaztam a karotinoidok elválasztására. A másik módszerben szilárd magvú (core) C30 15 cm, 2,6 µm-es oszlopot alkalmaztam metanol-*terc*-butil-metil-éter (TBME) alapú gradiens elúcióval. A keresztkötésű oszloppal 26 komponenst, míg a C30 oszloppal 43 komponenst sikerült kimutatnom fűszerpaprika mintákból.
4. Az LC-MS/MS technika alkalmazásával azonosítottam a likopin és β -karotin diepoxidjait, amelyek a DAD felvétel és a kromatográfiai tulajdonságok alapján nem voltak egyértelműen azonosíthatók. A fejlesztett módszerrel egyidőben meghatároztam a fő komponensek és egyéb kisebb koncentrációban jelen lévő

karotinoidok *all-transz* és *cisz* izomerjeit, amelyeknek nagy biológiai, táplálkozástudományi és technológiai jelentőségük van. Ezzel a módszerrel új adatokat biztosítottam a friss paradicsomokban illetve a paradicsomtermékekben lévő karotinoidok valódi összetételéről és tartalmáról.

6. KÖVETKEZTETÉSEK ÉS JAVASLATOK

A paradicsom és fűszerpaprika szerepe a gasztronómiában kiemelkedő jelentőségű, fogyasztásuk széles körben elterjedt. Mivel a fűszerpaprikában és a paradicsomban azonosították a legtöbb, a szervezet számára hasznos bioaktív komponenst, elengedhetetlennek tartottam a pontos karotinoidtartalmuk megállapítását, valamint az érzékszervi szempontból igen jelentős aromakomponensek feltérképezését.

Az aromavizsgálatokhoz különböző eredetű: magyar, spanyol, dél-afrikai, kínai, argentin, valamint füstölt fűszerpaprikákat használtam fel. Az aromaösszetétel mellett a karotinoid-összetételt is vizsgáltam a fűszerpaprikák, valamint különböző színű Heirloom típusú paradicsomok és kereskedelmi forgalomból beszerezhető paradicsomkészítmények esetében.

Az aromakomponenseket vízgőzdesztillációval vontam ki. Az extraktumokban található aromakomponensek vizsgálata Thermo Trace 1300 Series Single Quadrupole GC-MS segítségével történt. Az elválasztáshoz SLBTM-5ms fused silica 30m x 0,25mm x 0,25 µm kapilláris oszlopot alkalmaztam. A mérések során az injektor hőmérséklete 200°C volt, split módban. A vizsgálatokhoz 1 µl-t injektáltam, a vivőgázként hélium (4.6) gázt, a sebessége 1 ml/min volt. A kemence felfűtése 50°C-on indult, és több lépéssel 230°C-ra fűtött fel 30 perc alatt. A vizsgálat során a detektor a 35-350 Da közötti tömegtartományt vizsgálta. A detektor hőmérséklete 260°C, az ionforrás hőmérséklete 240°C volt.

A HPLC vizsgálatokat egy Chromaster Hitachi készülékkel végeztem, a detektálás Model 5430-as diódasoros detektorral történt, az injektálás Model 5210 automata mintaadagolóval, az eluens áramoltatását Model 5110 típusú gradiens pumpa végezte. A berendezést az EZchrom Elite software (3.3.2. SP2) segítségével kezeltem.

A fűszerpaprika karotinoidjainak elválasztását keresztkötésű UHPLC oszlopon (5 cm, 1,8 µm) végeztem. Az elválasztás gradiens elúcióval történt (A) aceton- (B) víz segítségével. Az elúció kezdetben 20% B A-ban, majd 25 perc alatt 100% A-ra, végül 5 perc alatt visszatért a kezdeti 20% B A-ban. Az áramlási sebesség 0,7 ml/perc volt.

A paradicsom és a szappanosított fűszerpaprika elválasztására tömör magvú (core) C30 (15 cm, 2,6 µm) oszlopot alkalmaztam. A gradiens elúció (A) metanol- (B) *terc*-butilmetil-éterben történt. A gradiens 100% A-val kezdődik, és 30 perc alatt 30% B A-ban, végül 5 perc alatt visszatér 100% A-ra. Az áramlási sebesség 0,7 ml/perc volt.

A minőségi meghatározás mindkét elválasztás esetében diódasoros detektorral (DAD, 190-600 nm) történt, minden komponens maximális abszorbanciáján.

Az általam fejlesztett GC-MS módszerrel azonosítottam a vizsgált minták aromaösszetételét, valamint olyan komponenseket találtam, amelyek jellemzően csak az adott mintákban fordultak elő. A fűszerpaprika nemesítése és a technológiai feldolgozás során figyelembe kell venni ezeket a komponenseket a jellegzetes fűszerpaprika aroma megőrzése érdekében. A vizsgálatok során nyolc közös komponenst találtam a dél-afrikai és magyar fűszerpaprikákban. Ezek az aromaalkotók csak ebben a két termékben voltak megfigyelhetőek. Ez valószínűsíthetően a közös eredetre vezethető vissza, ami részben igazolja a fűszerpaprika genetikai stabilitását. A többi általam vizsgált, különböző termőhelyekről származó fűszerpaprikákban nem találtam ilyen jellegű egyezést.

Paradicsom-aromaprofilok vizsgálatakor jelentős különbség nem volt megfigyelhető a különböző színű paradicsomok esetében, viszont a paradicsom termékeken jelentősen lecsökkent a friss aromát okozó komponensek mennyisége. Az ízért felelős komponensek, mint a cukrok, savak, polifenolok alapján lehet különbséget tenni köztük mind a friss paradicsomok, mind a feldolgozott paradicsom termékek esetében.

Mind a keresztkötésű C18 UHPLC oszlop, mind a C30 szilárd magvú oszlop alkalmazásával meghatározott karotinoid összetétellel kapcsolatos eredményeim alapján hatékonyabban lehet a fűszerpaprika termékeit újraértékelni, mivel a valódi összetételt lehet meghatározni, ami a minőségét és stabilitást meghatározza. Javaslom, hogy amennyiben szükséges a magyar fűszerpaprika színének javítása, dél-afrikai illetve kínai fűszerpaprikát alkalmazzanak erre a célra, mivel színük intenzitása hasonló, közel áll a magyar fűszerpaprikáéhoz.

A paradicsom karotinoidkomponenseinek többsége biológiailag aktív vegyület, táplálkozástudományi és minőségi szempontok alapján érdemes olyan termékeket választani, amelyeknek magas a likopin vagy β -karotin tartalma. Eredményeim alapján az ivólevelek közül a Pomil olasz termékben, a Globus ketchupban, a Carloni sűrített paradicsomban és a Cirio paradicsom pürében volt a legmagasabb karotinoid mennyiség detektálható.

7. ÖSSZEFOGLALÁS

Az elért eredményeimet az alábbi pontokban foglalom össze:

- A fűszerpaprikában és a paradicsomban található aromakomponensek meghatározásához a GC-MS módszert fejlesztettem és validáltam. A pontosság 0,22%, a visszanyerés 95,2%, a LOD értéke 2,9-6,4 ng/ml, míg az LOQ 10,1-14,5 ng/ml. A standardok csúcs alatti terület és koncentráció közötti regressziós faktora 0,9499-1,000 volt.
- A magyar fűszerpaprika mintákban 143 komponenst azonosítottam. Az aromakomponensek közül három csak a magyar fűszerpaprikákban volt jelen: a 2-metil-tetradekán, α -normetadol és a hexilfahéjsav-aldehid.
- A spanyol fűszerpaprikákban 108 komponenst azonosítottam, melyekből öt csak a spanyol eredetű fűszerpaprikákban volt jelen: a, *p*-metil-anizol, 1-metilcikloheptanol, D-kámfor, *p*-acetiltoluol és a verbenon.
- Két Argentínából származó: egy édes és egy extra édes kereskedelmi forgalomban lévő őrölt fűszerpaprikát vizsgáltam, összesen 96 komponenst azonosítottam. A paprikamintákban 12, csak az argentin eredetű fűszerpaprikában megjelenő komponenst detektáltam: a fenilpropán típusú miriszticin, β -izoszafrol, elemicin és izoelemicin, kumaldehid; bizabolán vázas ar-turmeron és curlone; a szeszkviterpén D-germakrén és α -kubeba; ciklikus monoterpén; szeszkviterpén α -fellandrén; monoterpén alkohol α -terpinolén; és a biciklikus monoterpén β -pinén.
- A Dél-Afrikából származó fűszerpaprikaőrlemény esetében 121 komponenst azonosítottam, amiből három csak a Dél-Afrikában termesztett fűszerpaprikákban jelent meg: 2-bornén, elemol, γ -eudeszmol.

- A Kínából származó fűszerpaprikaőrleményekben 124 aromakomponenst detektáltam. A kínai eredetet igazoló komponensek a 2,4-heptadién-1-al, 5-etil-3-heptén-2-on, izopropil-ciklohexán, 2-*transz*-4-*transz*-dekadiénal.
- A magyar és spanyol füstölt fűszerpaprikát vizsgálata alapján megállapítottam, hogy a spanyol fűszerpaprika jellemzően sok naftalinvázis molekulát tartalmazott.
- A vizsgált friss paradicsomokról és termékekről elmondható, hogy nagy mennyiségben hexanalt tartalmaznak. A hexanal mellett a *transz*-2-hexén-1-al koncentrációja sem elhanyagolható. Ez a komponens az érett paradicsom illat kialakulásáért felelős. A többi, kisebb mennyiségben jelen lévő terpének, karotinoid bomlástermékek, gyűrűs molekulák, alkoholok, aldehidek, ketonok, savak, szénhidrogének, észterek komplex jelenléte okozza a paradicsomok jellemző illatát, zamatát.
- A fűszerpaprika karotinoidjainak elválasztására a keresztkötésű C18 UHPLC oszlop kitűnően alkalmasnak bizonyult. A pontosság lutein esetében 2,36%, míg β -karotin esetében 6,27% volt. A visszanyerési vizsgálat eredménye lutein esetében 93%, míg β -karotin esetében 92% volt. Lutein esetében a detektálási határ 19,44 ng/ml a kimutatási határ 64,79 ng/ml, β -karotin esetében a detektálási határ 8,28 ng/ml, míg a kimutatási határ 27,61 ng/ml volt. A lutein esetében a lineáris tartomány 0-6 μ g/ml-es koncentráció közé esett, míg β -karotin standard esetében 0-15 μ g/ml közé. A kapacitási faktor 0,4 és 13 közötti értéket mutat valamint az elméleti tányérszám értékek 920 és 270000.
- A C30 oszlopon történő elválasztás esetében a pontosság 1,91-2,38%, a visszanyerés 94-99,9%, a detektálási határ 0,008-0,17, míg a kimutatási határ 0,029-0,059 közötti értéket vett fel. A standardok korrelációs faktora 0,9974-0,9999 közötti értékeket mutatott.
- C18 keresztkötésű oszlop alkalmazásával fűszerpaprika őrleményekből 26 komponenst, a C30 tömör magvú oszlop alkalmazásával pedig 43 komponenst detektáltam, azonosítottam, és mennyiségileg meghatároztam.

- Friss paradicsomok illetve paradicsom termékek karotinoidösszetételét meghatároztam C30 oszloppal, amely nagy hatásfokkal és felbontással választotta el mind a nagy mennyiségben, mind a kis mennyiségben jelenlévő komponenseket és izomerjeiket, különös tekintettel a likopinra és a β -karotinra, melyek ipari és táplálkozási szempontból kiemelkedő jelentőségűek.
- A spektrumfelvételek alapján nem egyértelműen azonosítható komponensek meghatározása érdekében LC-MS/MS technikával azonosítottam a paradicsomban és paradicsom termékekben található likopin és β -karotin diepoxidjait.
- A Heirloom típusú sárga illetve narancssárga színű paradicsomok karotinoidösszetételét meghatározva megállapítottam, hogy a fő komponenseik a proneurosporin, prolikopin és zéta-karotin.
- Kereskedelmi forgalomban kapható külföldi illetve magyar paradicsom termékeket vizsgáltam, és kimutattam a valódi karotinoidösszetételt, melynek alapján a különböző termékeket értékeltem. A legnagyobb likopinkoncentrációt (343 $\mu\text{g/g}$) az LS Pomil termékben detektáltam. A legmagasabb β -karotin koncentráció (20,3 $\mu\text{g/g}$) a magyar kecskeméti termékben volt detektálható. A paradicsompürék között a legmagasabb likopinkoncentráció a Tesco-ból származó pürében volt (728,9 $\mu\text{g/g}$). Ketchupok között a Globus termékben 1099,1 $\mu\text{g/g}$ likopint, míg az Univer ketchupban a legmagasabb β -karotin koncentrációt (31,7 $\mu\text{g/g}$) mértem. A sűrített paradicsomok közül a Carloni S5 termékben volt a legmagasabb likopin (1507,2 $\mu\text{g/g}$) és β -karotin (95,1 $\mu\text{g/g}$) koncentráció.

8. SUMMARY

The results achieved in my research work are summarised as follows:

- A GC-MS method for the determination of aroma compounds in tomato and spice paprika products was developed and validated. Precision, recovery, LOD and LOQ were 0.22, 95.6, 2.9-6.4 ng/ml and 10.1-14.5 ng/ml, respectively. Regression factor for the straight relation between peak area and concentration of standards was 0.9499-1.0000.
- In spice paprika samples, 143 aroma compounds could be separated and detected. Three of them were found only in Hungarian paprika, these are 2-methyl-tetradecane, α -normethadol, and a hexylcinamic acid-aldehyde.
- In Spanish paprika 108 compounds could be detected, of those compounds 5 were found only in Spanish product. These are: *p*-methyl-anisol, methylcycloheptanol, D-camphor, *p*-acetyltoluol, and verbenone.
- In two Argentinian paprika samples 96 compounds were separated and determined. These are: myrecitine, β -isosafrinol, elemicin, isoelemicin, cumaldehyde, ar-turmerone, curlone; D-germacren, α -cubeba, α -fellandrene; α -terpinolen; and β -pinen were found only in Argentinian spice paprika.
- 2-bornen, elemol, γ -eudesmol, among 121 aroma compounds detected, were found in only paprika from Republic of South Africa.
- In case of paprika from China, the certificating compounds were found to be 2,4-heptadien-1-al, 5-ethyl-3-hepten-2-on, isopropyl-cyclohexane, 2-*trans*-4-*trans*-decadienal.

- In the Spanish smoked paprika, the smoke was more intensive than the original aroma profile of paprika. The Spanish paprika typically contained much compounds with naphthalene skeleton.
- In the case of fresh tomatoes and tomato products, almost in all samples analyzed, hexanal was found to be the major aroma component. Besides it, *trans*-2-hexen-1-al is of significant concentration. This component is responsible for the formation of mature tomato aroma. The other terpenes present in smaller amounts are decomposition products of carotenoids, cyclic molecules, alcohols, aldehydes, ketones, acids, hydrocarbons, esters. This complex composition causes the tomatoes' characteristic flavor.
- Excellent separation of paprika carotenoids could be achieved on cross-linked ultra HPLC C18 column. Precision was 2.36% for lutein and 6.27% for β -carotene. The recovery was 93% and 92% for lutein and β -carotene, respectively. The detection limit of lutein was 19.44 ng/ml and limit of quantitation was 64.79 ng/ml. For β -carotene, the detection limit was 8.28 ng/mL, and the quantitation limit was 27.61 ng/mL. The linearity range with lutein was between 0 and 6 mg/mL concentration, and with β -carotene standard 0-15 mg/mL. The capacity factor has a value between 0.4 and 13 and the theoretical plate number was between 920 and 270000.
- With core C30 column, the precision was 1.91-2.38%, recovery was 94-99%, LOD was 0.008-0.17 μ g/mL, LOQ was 0.029-0.095 μ g/mL and the regression factor for standard materials was between 0.9974 and 0.9999.
- With use of cross-liked C18 column 26 compounds could be separated, whereas core C30 column provided good separation of 43 compounds from spice paprika extract. Most of these compounds were identified and quantified.
- LC-MS/MS technique was successfully used to identify the compounds that were not identified on the basis of the spectral characteristics in the extract of tomatoes and tomato products. These carotenoids were found to be di-esters of both lycopene and β -carotene.

- Yellow- and orange-coloured Heirloom tomatoes were found to have proneurosporene and prolycopene as the dominant carotenoids followed by zeta-carotene.
- Commercially available foreign and Hungarian tomato products have been analysed for their carotenoid composition and content. The developed method showed the true composition of carotenoids, which assisted to accurately evaluate the tomato products. The highest concentration (343.5 $\mu\text{g/g}$) of lycopene was recorded for LS Pomil product among the examined tomato juices. The highest level of β -carotene was 20.3 $\mu\text{g/g}$ and found in Kecskemét product. Tomato puree from Tesco had the highest lycopene (728.9 $\mu\text{g/g}$) and other carotenoids among the investigated purees. In case of ketchup, the highest concentration of lycopene was in the Globus 1099.1 $\mu\text{g/g}$ and the highest content of β -carotene was in the Univer products 31.7 $\mu\text{g/g}$. In tomato paste products, the highest concentration of lycopene (1507.2 $\mu\text{g/g}$) and β -carotene and 95.1 $\mu\text{g/g}$ was found in Carloni S5 product.

Irodalomjegyzék

ABDI H., WILLIAMS LJ. (2010). Principal component analysis. *WIREs Comp Stat.* 2: 433–459.

AGERSTAD M.J., SKOG K. (2005). Review genotoxicity of heat-processed foods. *Mutation Research.* 574: 156–172.

AIRES A., CARVALHO R., ROSA. E. (2012). Glucosinolate composition of Brassica is affected by postharvest food processing and myrosinase activity. *Journal of Food Processing and Preservation.* 36 (3): 214-224.

AIZAWA K., INAKUMA T. (2007). Quantitation of carotenoids in commonly consumed vegetables in Japan. *Food Sci. Technol. Res.* 13 (3): 247-252.

AKPAMBANGA VOE., G. PURCAROB, L. LAJIDEA, IA. AMOOA, LS. CONTEB, S. MORETB (2009). Determination of polycyclic aromatic hydrocarbons (PAHs) in commonly consumed Nigerian smoked/grilled fish and meat. *Food Additives and Contaminants.* 26 (7): 1096–1103.

ALMELA A., LÓPEZ-ROCA T.M, MANDELA M.E., ALCAZAR M.D. (1991). Separation and determination of individual carotenoids in a capsicum cultivars by normal-phase high-performance liquid chromatography. *J. Chromatography,* 502, 95-106.

AMBROGI A., CARDARELLI DA, EGGERS R (2002). Fractional extraction of paprika using supercritical carbon dioxide and on-line determination of carotenoids. *J Food Sci.* 67 (9): 3236–3241.

APEL W., BOCK R (2009). Enhancement of carotenoid biosynthesis in transplastomic tomatoes by induced lycopene to provitamin A conversion. *Plant Physiol.* 151: 59-66.

ARIMBOOR R., VENUGOPALAN VV, SARINKUMAR K, ARUMUGHAN C, SAWHNEY RC (2006). Integrated processing of fresh Indian sea buckthorn (*Hippophae rhamnoides*) berries and chemical evaluation of products. *J Sci Food Agric.* 86 (14): 2345–2353.

ARMSTRONG GA., HEARST JE (1996). Genetics and molecular biology of carotenoid biosynthesis. *FASEB J.* 10: 228-237.

ARNAUD A (1886). Recherches sur la composition de la carotene sa fonction chimique et sa formule, *C. R. Séances. Acad. Sci.* 102: 1119-1122.

ARNAUD A (1889). Recherches sur la carotene, son role physiologique probable dans la feuille. *C. R. Séances Acad. Sci., Ser. C,* 109: 911-914.

AYALA-ZAVALA J.F., G. GONZÁLEZ-AGUILAR, L. DEL-TORO-SÁNCHEZ (2009). Enhancing safety and aroma appealing of fresh-cut fruits and vegetables using the antimicrobial and aromatic power of essential oils. *Journal of Food Science,* 74 (7): 84–90.

AZEVEDO-MELEIRO CH, RODRIGUEZ-AMAYA DB (2007). Qualitative and quantitative differences in carotenoid composition among *Cucurbita sp.* *J Agr food Chem.* 55: 4027-4033.

BARANYAI M., MATUS Z., SZABOLCS J. (1982). Determination, by HPLC, of carotenoids in paprika products. *Acta Alimentaria,* 11, 309-323.

BASU HN, VECCHIO AJD, FLIDER F, ORTHOEFER FT (2001). Nutritional and potential disease prevention properties of carotenoids. *J.A.O.C.S.,* 78 (7): 665-675.

BAUMES R, WIRTH J, BUREAU S, GUANTA Y, RAZUNGLES A, (2002). *Anal. Chim. Acta.* 458: 3-14.

BÖHM F, EDGE R, BURKE M, TRUSCOTT TG (2001). Dietary uptake of lycopene protects human cells from singlet oxygen and nitrogen dioxide-ROS components from cigarette smoke. *J Photochem Photobiol.* 64: 176-178.

BÖHM F, EDGE R., TRUSCOTT G. (2012), Interactions of dietary carotenoids with activated (singlet) oxygen and free radicals: Potential effects for human health. *Mol. Nutr. & Food Res*, 52 (2), 205-216.

BONNIE TYP, CHOOYM (1999). Oxidation and thermal degradation of carotenoids. *J. Oil Palm Res.*, 2(1): 62-78.

BOULOGNE I, P. PETIT, H. OZIER-LAFONTAINE, L. DESFONTAINES, G. LORANGER-MERCIRIS (2012). Insecticidal and antifungal chemicals produced by plants: a review. *Environmental Chemistry Letters*, 10 (4): 325–347.

BOWEN P, CHEN L, STAOEWICZ-SAPUNTZAKIS M, DUNCAN C, SHARIFI R, GHOSH L (2002). Tomato sauce supplementation and prostate cancer lycopene accumulation and modulation of biomarkers of carcinogenesis. *Experimental Biology and Medicine*. 227: 886-893.

BRAMLEY P (2003). The genetic enhancement of phytochemicals: the case of carotenoids. *Phytochemical functional foods*. Johnson, I and Williamson, G (Eds.) Ch. 13. Woodhead Publishing Limited. CRC Press. ISBN 0-8493-1754-1, pp. 253-274.

BRITTON G (1995). Structure and properties of carotenoids in relation to function. *FASEB J.*, 9: 1551-1558.

BRITTON G., S. LIAAEN-JENSEN, H. PFANDER (Eds.) (2008). *Carotenoids*, Birkhäuser, Basel: 189–212.

CACCIOLA F, DONATOC P, GIUFFRIDAD D, TORREB G, DUGOB P, MONDELLOB L (2012). Ultra high pressure in the second dimension of a comprehensive two-dimensional liquid chromatographic system for carotenoid separation in red chilli peppers. *J. Chromatogr A* 1255: 244-251.

CANO, A., ACOSTA, M., ARNAO, M. B. (2003). Hydrophilic and lipophilic antioxidant activity changes during on-vine ripening of tomatoes (*Lycopersicon esculentum* Mill.) Postharvest Biology and Technology, 28: 59-65.

CARRILLO-LOPEZ A, YAHIA EM, RAMIREZ-PADILLA GK (2010). Bioconversion of carotenoids in five fruits vegetables to vitamin A measured by retinol accumulation in rat livers. Am. J. Agric. Biol. Sci., 5 (2): 215-221.

CENTER FOR FOOD SAFETY (CFS) (2004). Risk assessment studies report No. 14, chemical hazard evaluation, polycyclic aromatic hydrocarbons in barbecued meat Food and Environmental Hygiene Department, the Government of the Hong Kong Special Administrative Region

CERVANTES-PAZ B, YAHIA EM, ORNELAS-PAZ JJ, VICTORIA-CAMPOS CI, IBARRA-JUNQUERA V, PÉREZ-MARTÍNEZ JD, ESCALANTE-MINAKATA P (2014). Antioxidant activity and content of chlorophylls and carotenoids in raw and heat processed Jalapeno peppers at intermediate stages of ripening. Food Chem 146: 188-196.

CHAN, H.W.S. (1987). Autoxidation of Unsaturated Lipids; Academic Press: London, UK.

COLLERA-ZÚNIGA O, JIMÉNEZ FG, GORDILLO RM (2005). Comparative study of carotenoid composition in three mexican varieties of *Capsicum annum* L. Food Chem 90 (1-2): 109-114.

CSEHATI T, FORGACS E, MORAIS MH, MOTA T, RAMOS A (2000). Separation and quantitation of colour pigments of chili powder (*Capsicum frutescenes*) by high-performance liquid chromatography-diode array detection. J Chromatogr A 896 (1-2): 69-73.

DAOOD HG, BIACS PT A (2005). Simultaneous determination of sudan dyes and carotenoids in red pepper and tomato products by HPLC. J Chromatogr Sci 43 (9): 461-465.

DAVIDOVICH-RIKANATI R., SITRIT Y., TADMOR Y., IJIMA Y., N. BILENKO, E. BAR (2007). Enrichment of tomato flavor by diversion of the early plastidial terpenoid pathway. *Nature Biotechnology*, 25 (8): 899–901.

DAVIS EM, CROTEAU R (2000). Cyclization enzymes in the biosynthesis of monoterpenes, sesquiterpenes, and diterpenes. In *Topics in Current Chemistry: Biosynthesis: Aromatic Polyketides, Isoprenoids, Alkaloids*, 209. Edited by Leeper FJ, Vederas JC. Springer-Verlag 53-95.

DE AZEVEDO-MELEIRO CH, RODRIGUEZ-AMAYA DB (2009). Qualitative and quantitative differences in the carotenoid composition of yellow and red peppers determined by HPLC-DAD-MS. *J Sep Sci* 32 (21): 3652-3658.

DE FARIA AF, DE ROSSO VV, MERCADANTE AZ (2009) Carotenoid composition of jackfruit (*Artocarpus heterophyllus*), determined by HPLC-PDA-MS/MS. *Plant Foods Hum Nutr* 64:108–115.

DE QUIROS AR-B, COSTA HS (2006) Analysis of carotenoids in vegetable and plasma samples: a review. *J Food Compos Anal* 19 (2–3): 97–111.

DE ROSSO VV, MERCADANTE AZ (2007) Identification and quantification of carotenoids, by HPLC-PDA-MS/MS, from Amazonian fruits. *J Agric Food Chem* 55:5062–5072.

DELI J, MATUS Z, TOTH G (1996). Carotenoid composition in the fruits of *Capsicum annum* cv. Szentesi Kosszarvú during ripening. *J Agric Food Chem* 44: 711-716.

DEMMIG-ADAMS B, ADAMS WW III (2002). Antioxidants in photosynthesis and human nutrition. *Science*, 298: 2149-2153.

DI MASCIO P, KAISER S, SIES H (1989). Lycopene as the most efficient biological carotenoid singlet oxygen quencher. *Archives of Biochemistry and Biophysics*. 274: 532-538.

DIRETTO G, TAVAZZA R, WELSCH R, PIZZICHINI D, MOURGUES F, PAPACCHIOLI V, BEYER P, GIULIANO G (2006). Metabolic engineering of potato tubercarotenoids through tuber-specific silencing of lycopene epsilon cyclase. *BMC Plant Biol.*, 6(13): 1-11.

DRAGOVIC-UZELAC V, LEVAJ B, MRKIC V, BURSAE D, BORAS M (2007). The content of polyphenols and carotenoids in three apricot cultivaris depending on stage of maturity and geographical region. *Food Chem.* 102: 966-975.

DWYER JH, NAVAB M, DWYER KM, HASSA K, SUN P, SHIRCORE A (2001). Oxygenated carotenoid lutein and progression of early atherosclerosis: the Los Angeles Atherosclerosis Study. *Circulation.* 103: 2922-2927.

EISENREICH W, BACHER A, ARIGONI D, ROHDICH F. (2004). Biosynthesis of isoprenoids via the non-mevalonate pathway. *Cell Mol. Life Sci.*, 61: 1401–1426.

EISENREICH W, ROHDICH F, BACHER A. (2001). Deoxyxylulose phosphate pathway to terpenoids. *Trends Plant Sci.* 6: 78–84.

EL-AGAMEY A, MCGARVEY DJ (2008): Carotenoid radicals and radical ions. In *carotenoids: natural function*. ISBN: 978-3-7643-7500-3, pp. 119-154.

ERNST H (2002). Recent advances in industrial carotenoid synthesis. *Pure and Applied Chemistry* 74: 1369-1382.

EUROPEAN COMMISSION SCIENTIFIC COMMITTEE ON FOODS (2002). Opinion of the scientific committee on food on the risks to human health of polycyclic aromatic hydrocarbons in food expressed on fourth December 2002. Brussels, European Commission, health and consumer Protection Directorate-general.

EUROPEAN FOOD SAFETY AUTHORITY (EFSA) (2008). Scientific opinion of the panel on contaminants in the food chain on a request from the European commission on polycyclic aromatic hydrocarbons in food. *The EFSA Journal*, 724: 1–114.

FAO/WHO (2005). Joint FAO/WHO expert committee on food additives. Sixty-fourth meeting, Rome, 8–17 February.

FARHADIAN A., S. JINAP, F. ABAS, Z.I. SAKAR (2010). Determination of polycyclic aromatic hydrocarbons in grilled meat. *Food Control*, 21: 606–610.

FARHADIAN A., S. JINAP, H.N. HANIFAH, I.S. ZAIDUL (2011). Effects of meat preheating and wrapping on the levels of polycyclic aromatic hydrocarbons in charcoal-grilled meat. *Food Chemistry*, 124: 141–146.

FISCHER C. AND KOCSIS J.(1987). Separation of paprika pigments by HPLC. *J.Agric. Food Chem.* 35,55-57.

FRANCISCO ,M., VELASCO, P., MORENO, D. A., GRACIA-VIGUERA, C., & CARTEA, M. E.(2010). Cooking methods of Brassica rapa affect the preservation of glucosinolates,phenolics and vitamin C. *Food Research International*, 43 (5): 1455-1463.

FRASER P.D., ELISABETE –PINTO, M. S.,HOLLOWAY D.E., BRAMLEY P. (2000). Application of high-performance liquid chromatography with photodiode array detection to the metabolic profiling of plant isoprenoids. *The Plant Journal*, 24, 551-558.

FROMBERG A., A. HØJGÅRD, L. DUEDAHL-OLESEN (2007). Analysis of polycyclic aromatic hydrocarbons in vegetable oils combining gel permeation chromatography with solid-phase extraction clean-up. *Food Additives and Contaminants*, 24: 758–767.

GIUFFRIDA D, DUGO P, TORRE G, BIGNARDI C, CAVAZZA A, CORRADINI C, DUGO G (2013). Characterization of 12 Capsicum varieties by evaluation of their carotenoid profile and pungency determination. *Food Chem* 140 (4): 794-802.

GLASS R.W. AND SIMPSON K.L. (1976). The isolation of γ -carotene from the tangerin tomato. *Phytochemistry*, 15, 1077-1078.

GOFF, S.A. KLEE, H.J. (2006). Plant volatile compounds: Sensory cues for health and nutritional value. *Science*. 311: 815–819.

GUADAGNI, D.G. BOMBEN, J.L. HUDSON, J.S. (1971). Factors influencing the development of aroma in apple peel. *J. Sci. Food Agric.* 22: 110–115.

GUADAYOL JM, CAIXACH J, RIBÉ J. (1997). *Agric Food Chem* 45:1868.

GUIL-GUERRERO JL, MARTÍNEZ-GUIRADO C, DEL MAR REBOLLOSO-FUENTES M, CARRIQUE-PÉREZ A (2006). Nutrient composition and antioxidant activity of 10 pepper (*Capsicum annum*) varieties. *Eur Food Res Technol* 224 (1): 1-9.

GUILLÉN M.D., P. SOPELANA (2003). Polycyclic aromatic hydrocarbons in divers foods J.P.F.F. D’Mello (Ed.), *Food safety: Contaminants and toxins* (1st ed.), CABI Publishing, Oxford, UK 175–198

GUPTA P., Y. SREELAKSHMI, R. SHARMA (2015). A rapid and sensitive method for determination of carotenoids in plant tissues by high performance liquid chromatography. *Plant Methods* 11 (1): 5

HART DJ, SCOTT KJ (1995). Development and evaluation of an HPLC method for the analysis of carotenoids in foods, and the measurement of the carotenoid content of vegetables and fruits commonly consumed in the UK. *Food Chem.* 54: 101-111.

HORNERO-MÉNDEZ D, DE GUEVARA RG-L, MÍNGUEZ-MOSQUERA MI (2000). Carotenoid biosynthesis changes in five red pepper (*Capsicum annum* L.) cultivars during ripening. Cultivar selection for breeding. *J Agric Food Chem* 48: 3857-3864.

HUBERT J., MÜNZBERGOVÁ Z., SANTINO A (2008). Plant volatile aldehydes as natural insecticides against stored-product beetles. *Pest Management Science*, 64: 57–64.

HURST W J. (2008). *Methods of analysis for functional foods and nutraceuticals* CRC Press. Taylor & Francis Group, Boca Raton Florida 33487, USA

HUSEMANN A. (1860). Ueber Carotin und Hydrocarotin. *Ann. Chem. Pharm.* 117: 200-229.

IBDAH, M.; AZULAY, Y. PORTNOY, V. WASSERMAN, B. BAR, E. MEIR, A. BURGER, Y. HIRCHBERG, J. SCHAFFER, A.A.; KATZIR, N. TADMOR, Y. LEWINSOHN, E. (2006) Functional characterization of CmCDD1, a carotenoid cleavage dioxygenase from melon. *Phytochemistry*. 67: 1579–1589.

ILLÉS V, DAOOD HG, BIACS PA, GNAYFEED MH, MÉSZÁROS B (1999). supercritical CO₂ and subcritical propane extraction of spice red pepper oil with special regard to carotenoid tocopherol content. *J Chromatogr Sci* 37: 345-352.

IMAMURA T, BANDO N, YAMANISHI R (2006). β -carotene modulates the immunological function of RAW264, a murine macrophage cell line, by enhancing the level of intracellular glutathione. *Biosic. Biotechnol. Biochem.*, 70 (9): 2112-2120.

JAREN-GALAN M, NIENABER U, SCHWARTZ SJ (1999) Paprika (*Capsicum annum*) oleoresin extraction with supercritical carbon dioxide. *J Agric Food Chem* 47 (9):3558-3564. (2009). Carotenoid content in fresh and dry pepper (*Capsicum annum* L.) fruits for paprika production. *Food Process Qual Saf* 1-2: 21-27.

JOHNSON EJ (2012). A possible role for lutein and zeaxanthin in cognitive function in the elderly. *The American Journal of Clinical Nutrition*. 96: 1161-1165.

KANASAWUD P, CROUZET JC (1990). *Agric Food Chem*. 38: 237-243.

KATO M, IKOMA Y, MATSUMOTO H, SUGIURA M, HYODO H, YANO M (2004). Accumulation of carotenoids and expression of carotenoid biosynthetic genes during maturation in citrus fruit 1. *Plant Physiol.*, 134: 824-837.

KATO M, MATSUMOTO H, IKOMA Y, KUNIGA T, NAKAJIMA N, YOSHIDA T, YANO M (2007). Accumulation of carotenoids and expression of carotenoid biosynthetic genes and carotenoid cleavage dioxygenase genes during fruit maturation in the juice sacs of Tamami, Kiyomi tangor, and Wilking mandarin. *J. Jpn. Soc. Hort. Sci.*, 76(2): 103-111.

KEILER A.M., O. ZIERAU, G. KRETZSCHMAR (2013). Hop extracts and hop substances in treatment of menopausal complaints. *Planta Medica*, 79 (7): 576–579.

KHACHIK F, BEECHER GR, LUSBY WR (1989). Separation identification and quantification of the major carotenoids in extracts of apricots, peaches, cantaloupe and pink grape fruit by liquid chromatography. *J Agric Food Chem.* 37: 1465-1473.

KHACHIK F, GOLI MB, BEECHER GR (1992). Effect of food preparation on qualitative and quantitative distribution of major carotenoid constituents of tomatoes and several green vegetables. *J Agric Food Chem* 40: 390-398.

KHALIL M, RAILA J, ALI M, ISLARN KMS, SCHENK R (2012). Stability and bioavailability of lutein ester supplements from Tagets flower prepared under processing conditions. *J Func Foods.* 4: 602-610.

KHOO H. E., K.N. PRASAD, K.-W. KONG, Y. JIANG, A. ISMAIL (2011). Carotenoids and their isomers: Color pigments in fruits and vegetables. *Molecules* 16 (2): 1710–1738.

KIM S, PARK JB. HWANG IK (2008). Composition of main carotenoids in Korean red pepper (*Capsicum annum* L.) and changes of pigment stability during the drying and storage process. *J. Food Sci* 69 (1): FCT39-FCT44.

KIMURA M, RODRIGUEZ-AMAYA DB, YOKOYAMA SM (1991). Cultivar differences and geographic effects on the carotenoid composition and vitamin A value of papaya. *Lebens Wissen Technol.* 24: 415-418.

KIMURA M., D.B. RODRIGUEZ-AMAYA (2002). A scheme for obtaining standards and HPLC quantification of leafy vegetable carotenoids. *Food Chem.* 78 (3): 389–398

KISS GAC, FORGACS E, CSERHATI T, MOTA T, MORAIS H, RAMOS A (2000) Optimisation of the microwave-assisted extraction of pigments from paprika (*Capsicum annum* L.) powders. *J Chromatogr A* 889 (1–2): 41–49.

KNIZE M.G., C.P. SALMON, P. PAIS, J.S. FELTON (1999). Food heating and the formation of heterocyclic aromatic amine and PAH mutagens/carcinogens L.S. Jackson,

M.G. Knize, J.N. Morgan (Eds.), *Impact of processing on food safety*, Kluwer Academic, New York, 179–193.

KOSA A, CSERHATI T, FORGACS E, MORAIS H, MOTA T, RAMOS AC (2001). Profiling of colour pigments of chili powders of different origin by high-performance liquid chromatography. *J Chromatogr A* 915 (1-2): 149-154.

KUTI J.O. AND KONURU H.B. (2005). Effect of genotype and cultivation environment on lycopene content in red-ripe tomatoes. *J. Sci. Food Agric.*, 85, 2021-2026.

LADISLAV F, VERA P, KAREL S, KAREL V (2005) Reliability of carotenoid analyses: a review. *Curr Anal Chem* 1 (1): 93–102.

LAKSHMINARAYANA R, M. RAJU, T.P. KRISHNAKANTHA, V. BASKARAN (2005). Determination of major carotenoids in a few indian leafy vegetables by high-performance liquid chromatography. *J Agric Food Chem* 53 (8): 2838–2842.

LANDRUM JT, BONE RA (2001). Lutein, zeaxanthin and macular pigment. *Archives of Biochemistry and Biophysics*. 385: 28-40.

LEE HS, CASTLE WS, COATES GA (2001) High-performance liquid chromatography for the characterization of carotenoids in the new sweet orange (Earlygold) grown in Florida, USA. *J Chromatogr A* 913:371–377.

LIN C.H. AND CHEN B.H. (2003). Determination of carotenoids in tomato juice by liquid chromatography. *J. Chromatography A*. 1012, 103-109.

LIU CL, HUANG YS, HOSOKAWA M, MIYASHITA K, HU ML (2009). Inhibition of proliferation of hepatoma cell line by fucoxanthin in relation to cell cycle arrest and enhanced gap junctional intercellular communication. *Chem-Biol. Interact.*, 182: 165-172.

LIU M, LEE ML (2006). Ultrahigh pressure liquid chromatography using elevated temperature. *Journal of Chromatography.*, 1104: 198-202.

LONG M., MILLAR D.J., KIMURA Y., DONOVAN G., REES J., FRASER P.D., BRAMLEY M., BOLWELL G.P. (2006). Metabolite profiling of carotenoid and phenolic pathways in mutant and transgenic lines of tomato: identification of a high antioxidant fruit line. *Phytochemistry*, 67, 1750-1757.

LOPEZ H.L., T.N. ZIEGENFUSS, J.E. HOFHEINS, S.M. HABOWSKI, S.M. ARENT, J.P. WEIR (2013). Eight weeks of supplementation with a multi-ingredient weight loss product enhances body composition, reduces hip and waist girth, and increases energy levels in overweight men and women. *Journal of the International Society of Sports Nutrition*, 10 (22): 1–14.

LORENTO F, PINELLI P, MANES F, KOLLIST H (2004). Impact of ozone on monoterpene emissions and evidence for an isoprene-like antioxidant action of monoterpenes emitted by *Quercus ilex* leaves. *Tree Physiol.* 24: 361-367.

MA L, YAN S-F, HUANG Y-M, LU X-R, QUIAN F, PANG H-L (2012). Effect of lutein and zeaxanthin on macular pigment and visual function in patients with early age-related macular degeneration. *Ophthalmology*. 119: 2290-2297.

MACKINNON ES, RAO AV, JOSSE RG, RAO LG (2011). Supplementation with the antioxidant lycopene significantly decrease oxidative stress parameters and the bone resorption marker N-telopeptide of type I collagen in postmenopausal women. *Osteoporosis International*. 22: 1091-1101.

MARKUS F, DAOOD HG, KAPITANY J, BIACS PA (1999) Change in the carotenoid and antioxidant content of spice red pepper (paprika) as a function of ripening and some technological factors. *J Agric Food Chem* 47(1):100–107.

MARTIN M, GUIOCHON G (2005) Effects of high pressures in liquid chromatography. *J. Chromatogr. A.*, 7: 16-38.

MARTÍNEZ-MAYORGA K., J.L.M. FRANCO (2014). *Food informatics*. Springer Cham Heidelberg, New York Dordrecht London 97–110.

MATHEWS-ROTH MM (1993). Carotenoids in erythropoietic protoporphyria and other photosensitivity disease. *Annals of the New York Academy of Science*. 691: 127-138.

MATHEWS-ROTH MM (1997). Carotenoids and photoprotection. *Photochemistry and Photobiology*. 655: 148-151.

MATTEA F, MARTIN A, COCERO MJ (2009). Carotenoid processing with supercritical fluids. *J. Food Eng.*, 93: 255-265.

MATUSFUJI H, NAKAMURA H, CHINO M, TAKEDA M (1998). antioxidant activity of capsanthin and fatty acid esters in paprika. *Journal of Agricultural and Food Chemistry*. 46: 3468-3472.

MESTDAGH F, DAVIDEK T, CHAUMONTEUIL M, FOLMER B, BLANK I (2014). The kinetics of coffee aroma extraction. *Food Research International*, 63: 271–274.

MINQUEZ-MOSQUERA M.I., HORNERO-MÉNDEZ D. (1994). Changes in carotenoid esterification during the fruit ripening of *Capsicum annuum* cv. Bola. *J. Agric. Food Chem.* 42, 640-644.

MOORE T. (1932). Vitamin-A reserves of the human liver in health and disease. *The lancet*. 669-674.

N. BELLETTI, S.S. KAMDEM, F. PATRIGNANI, R. LANCIOTTI, A. COVELLI, F. GARDINI (2007). Antimicrobial activity of aroma compounds against *Saccharomyces cerevisiae* and improvement of microbiological stability of soft drinks as assessed by logistic regression. *Applied and Environmental Microbiology*. 73 (17): 5580–5586.

NISBET I.C.T., P.K. LAGOY (1992). Toxic equivalency factor (TEFs) for polycyclic aromatic hydrocarbons (PAHs). *Regulatory Toxicology and Pharmacology*, 16: 290–300.

NOVIENDRI D, JASWIR I, SALLEH HM, TAHER M, MIYASHITA K (2011). Techniques of extraction and purification of carotenoid (fucoxanthin) from brown seaweed. *BPMERU Mei 2011*. P. 26.

OKADA T, NAKAI M, MAEDA H, HOSOKAWA M, SASHIMA T, MIYASHITA K (2008). Suppressive effect of neoxanthin on the differentiation of 3T3-L1 adipose cells. *J. Oleo. Sci.*, 57 (6): 345-351.

OLIVER J, PALOU A (2000) Chromatographic determination of carotenoids in foods. *J Chromatogr A* 881 (1–2): 543–555.

ÖZÇELİK B., KARTAL M, ORHAN I. (2011). Cytotoxicity, antiviral and antimicrobial activities of alkaloids, flavonoids, and phenolic acids. *Pharmaceutical Biology*. 49 (4): 396–402.

PALMER L. S., ECKLES C. H. (1914). The Chemical and Physiological Relation of the Pigments of Milk Fat to the Carotin and Xanthophylls of Green Plants. *J. Biol. Chem.* 17: 191-210.

PALMER L.S. (1923). Carotinoids and related pigments: the chromolipoids. The chemical Catalog Company Vol.8.

PARK SY, NOMURA SMY, MURPHY SP, WILKENS LR, HENDERSON BE, KOLONEL LN (2009). Carotenoid intake and colorectal cancer risk: the multitechnic cohort study. *J. Epidemiol.*, 19 (2): 63-71.

PATTENDEN G. AND ROBSON D.C. (2006). Total synthesis of prolycopene, a novel 7,9,7',9'-tetra-cis (z) carotenoid and main pigment of the tangerin tomato *Lycopersicon esculentum*. *Tetrahedron*, 62, 7477-7483.

PENDON ZD, SULLIVAN JO, VAN DER HOEF I, LUGTENBURG J., CUA A., BOCIAN DF. (2005). Stereoisomers of carotenoids: Spectroscopic properties of locked and unlocked cis-isomers of spheroidene. *Photosynthesis Research*. 86 (1–2): 5–24.

PERELLÓ G., R. MARTÍ-CID, V. CASTELL, J.M. LLOBET, J.L. DOMINGO (2009). Concentrations of polybrominated diphenyl ethers, hexachlorobenzene and polycyclic

aromatic hydrocarbons in various foodstuffs before and after cooking. *Food and Chemical Toxicology*, 47 (4): 709–715.

PEREZ-GALVEZ A, MINGUEZ-MOSQUERA MI (2004). Degradation, under non-oxygen-mediated autooxidation, of carotenoid profile present in paprika oleorensis with liquid substrates of different fatty acid composition. *J Agric Food Chem* 52 (3): 632-637.

PEREZ-LÓPEZ AJ, NÚÑEZ-DELICADO E, LÓPEZ-NICOLAS JM, AMOR FMD, CARBONELL-BARRACHINA AA (2007). Effect of agricultural practices on color, carotenoids composition, and minerals contents of sweet peppers, cv. almuden. *J Agric Food Chem* 55: 8158-8164.

PÉREZ-RODRÍGUEZ L (2009). Carotenoids evolutionary ecology: reevaluating the antioxidant role. *BioEssays*, 31: 1116-1126.

PERKINS-VEAZIE P, COLLINS JK, PAIR SD, ROBERTS W (2001). Lycopene content differs among red-fleshed watermelon cultivars. *J Sci Food Agr*. 81: 983-987.

PERRY A, RASMUSSEN H, JOHNSON EJ (2009). Xanthophyll (lutein, zeaxanthin) content in fruits, vegetables, and corn and egg products. *J Food Comp Analysis*. 22: 9-15.

PICHERSKY E, GERSHENZON J (2002). The formation and function of plant volatiles: perfumes for pollinator attraction and defense. *Curr Opin Plant Biol*. 5: 237-243.

PINO J, SAURI-DUCHB E, MARBOT R (2006) *Food Chem*. 94:394.

PORCU OM, RODRIGUEZ-AMAYA DB (2006). Variation in the carotenoid composition of acerola and its processed products. *J Sci Food Agric*. 86: 1916-1920.

PORRINI M, RISO P (2000). Lymphocyte lycopene concentration and DNA protection from oxidative damage is increased in woman after short period tomato consumption. *J Nutr*. 130: 189-192.

PORRINI M, RISO P, BRUSAMOLINO A, BERTI C, GUARNIERI S, VISIOLI F (2005). Daily intake of a formulated tomato drink affects carotenoid plasma and lymphocyte concentrations and improved cellular antioxidant protection. *J Nutr Res.* 19: 93-99.

QIU D, W-L. ZHU, C-K. TANG, L-F. SHI, H-Q. GAO. (2014). Identification of the composition of isomeric canthaxanthin sample by NMR, HPLC, and mass spectrometry. *Food Analytical Methods.* 7 (3): 597–605

RAMEL F, BIRTIC S, GINIES C, SOUBIGOU-TACONNAT L, TRIANTHAPHYLIDÉS C, HAVAUX M (2012). Carotenoid oxidation products are stress signals that mediate gene responses to singlet oxygen in plants. *Proc. Natl. Acad. Sci.*, 109 (14): 5535-5540.

RANJITH A, KUMAR K, VENUGOPALAN V, ARUMUGHAN C, SAWHNEY R, SINGH V (2006) Fatty acids, tocopherols, and carotenoids in pulp oil of three sea buckthorn species (*Hippophae rhamnoides*, *H. salicifolia* and *H. tibetana*) grown in the Indian Himalayas. *J Am Oil Chem Soc* 83 (4): 359–364.

RASMUSSEN HM, MUZHINGI T, EGGERT EMR, JOHNSON EJ (2012). Lutein, zeaxanthin, meso-zeaxanthin content in egg yolk and their absence in fish and seafood. *J Food Comp Analysis.* 27: 139-144.

RAYMUNDO L.C. AND SIMPSON K.L. (1972). The isolation of cis-zeta-carotene from the tangerine tomato. *Phytochemistry*, 11, 397-400.

REINECCIUS, G. (2006). *Flavor Chemistry and Technology* 2nd ed.; CRC Press: Boca Raton, FL, USA.

RIVERA SM, CANELA-GARAYOA R. (2012). Analytical tools for the analysis of carotenoids in diverse materials. *Journal of Chromatography, A.* 1224: 1–10.

RIVERA SM, CHRISTOU P, CANELA-GARAYOA R. (2014). Identification of carotenoids using mass spectrometry. *Mass Spectrometry Reviews*, 33 (5): 353–372.

ROCK CL (1997). Carotenoids: Biology and treatment. *Pharmacol. Ther.*, 75 (3): 185-197.

RODRIGUEZ-AMAYA DB (1997). Carotenoids and food preparation: the retention of provitamin A carotenoids in prepared, processed, and stored foods. Department of Food Science Faculty of Engineering, State University of Campinas. Brazil. John Snow, Inc. / OMNI project, P. 93.

RODRIGUEZ-AMAYA D.B. (2001). A guide to carotenoid analysis in food. Ilsi Press, Washington, pp.14-22.

RODRIGUEZ-AMAYA DB, KIMURA M, GODOY HT, AMAYA-FARFAN (2008). Updated Brazilian database on food carotenoids: factors affecting carotenoid composition. *J. Food Comp Analysis*. 21: 445-463.

RODRIGUEZ-CONCEPCION M, BORONAT A. (2002). Elucidation of the methylerythritol phosphate pathway for isoprenoid biosynthesis in bacteria and plastids. A metabolic milestone achieved through genomics. *Plant Physiol*. 130: 1079–1089.

ROUSEFF RL, SADLER GD, PUTNAM TJ, DAVIS JE (1992). Determination of beta-carotene and other hydrocarbon carotenoids in red grapefruit cultivaris. *J Agric Food Chem*. 40: 47-51.

SAJILATA MG, SINGHAL RS (2006). Isolation and stabilisation of natural pigments for food application. *Stewart Postharvest Review* 5: 11.

SAJILATA MG, SINGHAL RS, KAMAT MY (2008). The carotenoid pigment zeaxanthin-a review. *Comprehensive Reviews in food science and food safety*. 7: 29-49.

SANDER L.C., SHARPLESS K.E., PURSCH M. (2000). C-30 stationary phase for the analysis of food by liquid chromatography. *J. Chromatography A*, 880, 189-202.

SCHMIDT R (2004). Deactivation of O₂ singlet oxygen by carotenoids: internal conversion of excited encounter complexes. *J. Phys. Chem. A*. 108 (26): 5509-5513.

SCHREIER, P. (1984). *Chromatographic Studies of Biogenesis of Plant Volatiles*; Alfred Hüthig Verlag GmbH: Heidelberg, Germany.

SCHWAB W, DAVIDOVICH-RIKANATI R., E. LEWINSOHN (2008). Biosynthesis of plant-derived flavor compounds. *Plant Journal*, 54 (4): 712–732.

SCHWAB, W. SCHREIER, P. (2002). Enzymic formation of flavor volatiles from lipids. In *Lipid Biotechnology*; Kuo, T.M., Gardner, H.W., Eds.; Marcel Dekker: New York, NY, USA, 293–318.

SELLI S., KELEBEK H., AYSELI M.T., TOKBAS H. (2014). Characterization of the most aroma-active compounds in cherry tomato by application of the aroma extract dilution analysis. *Food Chemistry*, 165: 540–546.

SHARKEY TD, YEH S (2004). Isoprene emission from plants. *Annu Rev Plant Physiol Plant Mol Biol*. 52: 407-436.

SONG, J. FORNEY, C.F. (2008). Flavour volatile production and regulation in fruit. *Can. J. Plant Sci.* 88: 537–550.

SOUSA ET., RODRIGUES FM, MARTINSA CC (2006) *Microchem J.* 82:142.

STAHL W, HEINRICH U, JUNGSMANN H, SIES H, TRONNIER (2000). Carotenoids and carotenoids plus vitamin E protect against UV light induced erythema in humans. *Am J Clin Nutr.* 71: 795-798.

STAHL W, SIES H (2003). Antioxidant activity of carotenoids. *Molecular Aspects Med.* 24: 345-351.

SUGAWARA T, YAMASHITA K, ASAI A, NAGAO A, SHIRAISHI T, IMAI I, HIRATA T (2009) Esterification of xanthophylls by human intestinal Caco-2 cells. *Arch. Biochem. Biophys.*, 483: 205-212.

SUJAK A, GABRIELSKA J, GRUDZINSKI W, BORC R, MAZUREK P, GRUSZECKI WI (1999). Lutein and zeaxanthin as protectors of lipid membranes against oxidative damage: the structural aspects. *Archives of Biochemistry and Biophysics*. 371: 301-307.

SVELANDER,C.A., LOPEZ-SANCHEZ, P., PUDNEY, P.D.A., SCHUMM, S.,& ALMINGER, M.A.G. (2011). High pressure homogenization increases the in vitro

bioaccessibility of alpha- and beta-carotene in carrot emulsions but not of lycopene in tomato emulsions. *Journal of Food Science*, 76 (9): H215-H225.

TAKAHASI M, WATANABE H, KIKKAWA J, OTA M, WATANABE M, SATO Y, INOMATA H, SATO N (2006): Carotenoids extraction from Japanese Persimmon peels by supercritical CO₂ with ethanol. *Anal. Sci.*, 22: 1441-1447.

TANG G, RUSSELL RM (2009). Carotenoids as provitamin A. In: carotenoids nutrition and health. Vol 5. Ch. 8. Britton, G., Liaaen-Jensen, F and Pfander, H (Eds.). Birkhauser Verlag Basel, ISBN 978-3-7643-7500-3, pp. 149-172.

TEPIC A, ZEKOVIC Z, KRAVIC S, MANDIC A (2009) Pigment content and fatty acid composition of paprika oleoresins obtained by conventional and supercritical carbon dioxide extraction. *CyTA J Food* 7 (2): 95–102.

THANE C, REDDY S (1997). Processing of fruit and vegetables: effect on carotenoids. In. *Nutrition and Food Science*. MCB Univ. Press. ISSN 0034-6659, pp. 58.65.

THUDICHUM J. L. W. (1868-1869). Results of researches on luteine and the spectra of yellow organic substances contained in animals and plants. *Proc. R. Soc.* 17: 252-256.

TIAN B, XU Z, SUN Z, LIN J, HUA Y (2007). Evaluation of antioxidant effects of carotenoids of *Deinococcus radiodurans* through targeted mutagenesis, chemiluminescence, and DNA damage analyses. *Biochim. Biophys. Acta*, 1770: 902-911.

TOPUZ A, OZDEMIR F (2007). Assessment of carotenoids, capsaicinoids and ascorbic acid composition of some selected pepper cultivars (*Capsicum annum* L.) grown in Turkey. *J. Food Compos anal* 20: 596-602.

TURNER C, KING JW, MATHIASSEN L (2001) Supercritical fluid extraction and chromatography for fat-soluble vitamin analysis. *J Chromatogr A* 936 (1–2): 215–237.

UMENO D, TOBIAS AV, ARNOLD FH (2005). Diversifying carotenoid biosynthetic pathways by directed evolution. *Microbiol. Mol. Biol. Rev.*, 69 (1): 51-78.

UQUICHE E, DEL VALLE JM, ORTIZ J (2004) Supercritical carbon dioxide extraction of red pepper (*Capsicum annuum* L.) oleoresin. *J Food Eng* 65 (1): 55–66.

VAN JAARVELD PJ, MARAIS DW, HARMSE E, NESTEL P, RODRIGUEZ-AMAYA DB (2006). Retention of beta-carotene in boiled, mashed orange-fleshed sweetpotato. *J Food Comp Analysis*. 19: 321-329.

VAN MEULEBROECK L., BUSSCHE J.V., STEPPE K., VANHAECKE L. (2014). High-resolution orbitrap mass spectrometry for the analysis of carotenoids in tomato fruit: validation and comparative evaluation towards UV-VIS and tandem mass spectrometry. *Anal. Bioanal. Chem.*, 406: 2613-2626.

VAN MEULEBROEK L. , VANHAECKE L., DE SWAEF T., STEPPE K., DE BRABANDER H. (2012). U-HPLC-MS/MS to quantify liposoluble antioxidants in red ripe tomatoes, grown under different salt stress levels. *J. Agric. Food Chem.* 60, 560-573.

WACKENRODER H. (1831). Ueber das Oleum radices Dauci aetherum, das Carotin, den Carotenzucker und den officinellen succus Dauci; so wie auch über das Mannit, welches in dem Möhrensaft durch eine besondere Art der Gährung gebildet wird. *Geigers Magazin der Pharmazie*. 33: 144-172.

WAHIBERG I, EKLUND A-M in: BRITTON G, LIAASEN-JENSEN S, PFANDER H (1998). Carotenoids: biosynthesis and metabolism. *Birkhäuser Basel* 3: 195-216.

WALL M-X, JIAO J-H, LI Z-Y, LIU R-R, SHI Q, MA L (2006). Lutein supplementation reduces lipid peroxidation and C-reactive protein in healthy nonsmokers. *Atherosclerosis*. 227: 380-385.

WEISSENBERG M, SCHAEFFLER I, MENAGEM E, BRAZILIA M, LEVY A (1997). Isocratic non-aqueous reversed-phase-high-performance liquid chromatography separation of capsanthin and capsorubin in red peppers (*Capsicum annuum* L.) paprika and oleoresin. *J Chromatogr A* 757 (1-2): 89-95.

WILLIS RBH, RANGGA A (1996). Determination of carotenoids in Chinese vegetables. *Food Chem* 56: 451-455.

WILLSTATTER R., ESCHER H. H. (1910). Über den Farbstoff der Tomate. *Z. Physiolog. Chem.* 64: 47-61.

WILLSTATTER R., MIEG W. (1907)^a .Ueber die Gelben Begleiter des Chlorophylls. *Justus Liebigs Ann- Chem*, 355: 1-28.

WINTERHALTER P, ROUSEFF R (2002). Carotenoid-derived aroma compounds , ACS, Washington DC.

WU CM, LIOU SE (1986). *Agric Food Chem.* 34:770.

WU S, SCHOENBECK MA, GREENHAGEN BT, TAKAHASHI S, LEE S, COATES RM, CHAPPELL J (2005). Surrogate splicing for functional analysis of sesquiterpenes synthase genes. *Plant Physiol.* 138: 1322-1333.

XU X-R, ZOU Z-Y, HUANG Y-M, XIAO X, MU L, LIN X-M (2012). Serum carotenoids in relation to risk factors for the development of atherosclerosis. *Clinical Biochem.* 45: 1357-1361.

YAMAMIZO C, KISHIMOTO S, OHMIYA A (2008). Carotenoid composition and carotenogenic gene expression during ipomoea petal development. *J. Exp. Bot.*, 61 (3): 709-719.

YANO M, KATO M, IKOMA Y, KAWASAKI A, FUKAZAWA Y, SUGIURA M, MATSUMOTO H, OOHARA Y, NAGAO A, OGAWA K (2005). Quantitation of carotenoids in raw and processed fruits in Japan. *Food Sci. Technol. Res.*, 11 (1): 13-18.

YEUM KJ, ALDINI G, RUSSELL RM, KIRINSKY NI (2009). Antioxidant/proantioxidant actions of carotenoids. In: *carotenoids: nutrition and health*. Vol. 5. Ch. 12. Britton, G., Liaen-JENSEN, F AND PFANDER, H (EDS.) BIRKHAUSER VERLAG BASEL, ISBN 978-3-7643-7500-3, pp. 235-268.

YOUNESI E., M.T. AYSELI (2015). An integrated systems-based model for substantiation of health claims in functional food development. *Trends in Food Science & Technology*, 41 (1): 95–100.

ZEB A, MEHMOOD S (2004). Carotenoids contents from various sources and their potential health applications. *Pak. J. Nutr.*, 3 (3): 199-204.

ZEISE W. C. (1849). Ueber das Carotin. *Ann. Chem. Pharm.* 62: 380-382.

Mellékletek:**M1: Magyar bio Meteorit fűszerpaprika**

Retenciós index	Molekula	Bio Meteorit (1) (területegység)	Szórás (n=3)	Bio Meteorit (2) (területegység)	Szórás (n=3)
141	N-metilpirrol	93060172	372241	53252160	319513
161	2,4,6-oktatrién	1198718	4795	1788580	10731
196	Toluol	5540183	22161	8513595	51082
242	Brómcikloheptán	2547332	10189	5436369	32618
268	Hexanal	36879263	147517	48068957	288414
342	3-furánkarbaldehyd	36985444	147942	34355081	206130
430	<i>m</i> -xilol	45854426	183418	88282604	529696
480	2-heptanon	3704922	14820	4498938	26994
506	Heptanal	3650946	14604	4247243	25483
572	3,5-xilenol	1336874	5347	2231403	13388
577	α -Pinén	0	0	759170	4555
629	<i>cisz</i> -2-heptenal	3237363	12949	2579355	15476
637	Benzaldehyd	35308648	141235	27625781	165755
653	Dimetil-triszulfid	1341655	5367	0	0
672	β -tuján	5031023	20124	5336093	32017
683	Szulkaton	4576277	18305	4414246	26485
693	2- <i>n</i> -pentilfurán	21140504	84562	41358293	248150
702	Hemimellitén	2353665	9415	2366040	14196
720	Oktanal	4067623	16270	4258787	25553
733	β -ocimén	4313573	17254	6309015	37854
756	Pszudokumol	2162293	8649	2031616	12190
762	<i>o</i> -cimol	737164	2949	753635	4522
772	D-limonén	13135198	52541	20803662	124822
798	β - <i>cis</i> -cimol	608464	2434	54124488	324747
811	<i>m</i> -propiltoluol	919143	3677	1081961	6492
826	<i>transz</i> -2-oktenal	6323427	25294	6840490	41043
833	2-acetilpirrol	972730	3891	1276603	7660
847	<i>m</i> -toluol-aldehyd	24043649	96175	21588480	129531
865	Dihidrocitronellol	2198402	8794	4410114	26461
875	α -terpinolén	19380152	77521	23844663	143068
897	β -linalool	172678498	690714	192295880	1153775
906	3,4,4-trimetil-2-cikloheptén-1-on	21650261	86601	22525275	135152
921	2-izopropil-ciklohexanol	5804372	23217	6218233	37309
935	<i>o</i> -cimol	3333798	13335	3826863	22961
940	2-nonén-4-on	5404881	21620	6267927	37608
950	2,6-dimetil-1,3,5,7-oktatetraén	9840591	39362	12174962	73050
963	Pentilciklohexán	955642	3823	1015181	6091

987	2,6-nonadiénal	8740723	34963	7529510	45177
995	Ciklookatetraén-karbaldehyd	2486588	9946	2424440	14547
999	<i>transz</i> -2-nonén-1-al	16603809	66415	19352818	116117
1014	3-metil-undekán	0	0	589928	3540
1029	Izoxilaldehyd	22220778	88883	21012469	126075
1038	Terpinén-4-ol	1968069	7872	1595619	9574
1045	<i>o</i> -acetiltoluol	4261379	17046	4089536	24537
1061	α -terpineol	74984831	299939	78297230	469783
1068	Szafranál	10482801	41931	14520102	87121
1088	α -jonon	9540219	38161	14816696	88900
1096	2-metilhexa-dihidrociklopropanal- pentalén-2-on	20075165	80301	24428625	146572
1100	β -ciklocitrál	27640241	110561	32611993	195672
1105	Metil- <i>m</i> -tolilkarbinol	1808499	7234	2295187	13771
1116	<i>p</i> -hidroxiacetofenon	9802328	39209	12751896	76511
1136	Geraniol	15461377	61846	16076530	96459
1155	2,6,6-trimetil-1-ciklohexén-1- acetaldehyd	7392190	29569	10419484	62517
1164	Tetrahydrokinolin	2185479	8742	3835103	23011
1171	2-fenil-2-butenal	2171560	8686	1913218	11479
1176	4,8-dimetil-1,7-nonadién-4-ol	2518597	10074	5455122	32731
1187	5-butyl-1,3-ciklohexadién	2898686	11595	2380978	14286
1196	Anetol	4032512	16130	7302998	43818
1207	Indol	11692317	46769	7075733	42454
1209	<i>n</i> -tridekán	5017824	20071	8915708	53494
1221	α -jonon	5587842	22351	9244593	55468
1231	2-metoxi-4-vinilfenol	66686117	266744	87828592	526972
1240	2,4-dekadiénal	15003946	60016	21257307	127544
1307	1,5,8-trimetil-1,2-dihidronaftalin	14056617	56226	27167260	163004
1326	3-hidroxi-2,2,4-trimetilpentil- izobutánsav-észter	0	0	0	0
1344	β -damaszkon	80244270	320977	97288365	583730
1365	β -elemén	55505842	222023	70288105	421729
1397	Dihidrodehidro- β -jonon	13592066	54368	20662122	123973
1425	<i>transz</i> - α -jonon	4897670	19591	6566637	39400
1432	Kariofillén	4667928	18672	5318569	31911
1456	2-metil-1-tetradekán	2882145	11529	4752689	28516
1467	Dihidropszeudojonon	44773399	179094	78689268	472136
1476	2,3-dimetilfenil-izovaleriánsav-észter	10639019	42556	13107520	78645
1490	α -gvajén	10615349	42461	13981834	83891
1498	2-metiltetradekán	9153835	36615	10086606	60520
1522	4-hidroxi- β -jonon	115132140	460529	129837246	779023
1551	β -jonon	43535486	174142	62647813	375887
1573	4,5-di- <i>epi</i> -arisztolochén	68725456	274902	89121239	534727
1587	Valencén	23403184	93613	29792890	178757

1600	γ -Gurjunén	23243834	92975	34218966	205314
1610	N-Guanilpirolin	6438923	25756	8346891	50081
1624	8-izopropenil-1,5-dimetil-1,5-ciklodekadién	63631635	254527	64829239	388975
1632	Dodekánsav-metilészter	4719492	18878	7051828	42311
1656	<i>n</i> -hexadekán	8772649	35091	17603174	105619
1666	Dihidroaktinidiolid	7071321	28285	8766629	52600
1703	Dodekánsav	27204773	108819	49170793	295025
1711	2-metilpentadekán	32543234	130173	59145721	354874
1733	Szkvalén	21942383	87770	32126042	192756
1779	Heptadekán	8184961	32740	12411748	74470
1810	<i>n</i> -propil-linolenát	3791353	15165	4768909	28613
1820	Izopropil-laurát	3412754	13651	5923182	35539
1826	1-Heptatriakontanol	3911008	15644	2434071	14604
1830	α -N-normetadol	2957401	11830	3074481	18447
1839	6,11-dimetil-2,6,10-dodekatrién-1-ol	8961444	35846	16724983	100350
1852	1-klorohexadekán	13533542	54134	16497485	98985
1864	Etil-4-izopropenil-6-metil-2-oxo-6-heptenoát	5621127	22485	7340784	44045
1876	Hexilciklopentán	4241799	16967	5796259	34778
1882	2,6-dimetilheptadekán	6898122	27592	12201975	73212
1887	α -eudeszmol	1238681	4955	1652377	9914
1897	3,3,4-trimetil-4-(4-metilfenil)-ciklopentanol	22120097	88480	28809262	172856
1906	Metil-10,13-oktadekadinionát	6859571	27438	7930817	47585
1912	2,6-diizopropilnaftalin	3225164	12901	3833795	23003
1916	2-etoxiamfetamin	3906088	15624	3676329	22058
1920	Ciklooktatetraén	4222522	16890	3874010	23244
1925	3-oxo-3-(3,4,5-trimetoxi-fenil)-propionsav-etilészter	707277	2829	991742	5950
1935	2-pentadekanon	0	0	7081781	42491
1938	Heptadekán	10664471	42658	13256727	79540
1943	Norfitán	10800480	43202	17959709	107758
1952	4,5-dimetil-1,2,3,6,7,8-oktahidrodifenilén	6039575	24158	5149319	30896
1960	<i>n</i> -pentadekanal	226755059	907020	311153671	1866922
1972	Metiltetradekanoát	51285911	205144	66424638	398548
1992	2-metilén-6,8,8-trimetil-triciklo(1,6)]undekán-3-ol	3606075	14424	57243524	343461
2005	<i>p</i> -anizil-alkohol	4923145	19693	0	0
2010	Hexilfahéjsav-aldehid	683519	2734	6796388	40778
2021	Tetradekánsav	2503524	10014	214525668	1287154
2064	Tetradekánsav-etilészter	27395112	109580	39492459	236955
2084	2,6,10,14-tetrametil-hexadekán	38764939	155060	70226556	421359
2092	Szolavetivon	3606075	14424	2564610	15388

2097	Nootkaton	4460066	17840	5530134	33181
2112	Izopropil-mirisztát	683519	2734	3563466	21381
2127	Hexahidrofarnesil-aceton	11511042	46044	19958310	119750
2151	Ftálsav-diizobutilészter	6448836	25795	11071678	66430

M2: Magyar bio Mihálytelki fűszerpaprika

Retenciószám	Molekula	Bio Mihálytelki (területegység)	Szórás (n=3)
141	N-metilpirrol	180197177	1621775
161	2,4,6-oktatrién	1934250	17408
196	Toluol	8692278	78231
242	Brómcikloheptán	4588292	41295
268	Hexanal	69918944	629270
342	3-furánkarbaldehyd	27633447	248701
430	<i>m</i> -xilol	54936909	494432
480	2-heptanon	946097	8515
506	Heptanal	6081194	54731
572	3,5-xilenol	2006628	18060
629	<i>cisz</i> -2-heptenal	3851780	34666
637	Benzaldehyd	32854519	295691
653	Dimetil-triszulfid	2798049	25182
672	β -tuján	3964637	35682
683	Szulkaton	7902152	71119
693	2- <i>n</i> -pentilfurán	46778897	421010
702	Hemimellitén	2993319	26940
720	Oktanal	4917221	44255
733	β -ocimén	4475848	40283
756	Pszeudokumol	1941848	17477
762	<i>o</i> -cimol	1959921	17639
772	D-limonén	27126624	244140
784	1,1,3-trimetil-2-ciklohexanon	2315927	20843
798	β - <i>cis</i> -cimol	67853421	610681
811	<i>m</i> -propiltoluol	698443	6286
826	<i>transz</i> -2-oktenal	9423702	84813
833	2-acetilpirrol	1094728	9853
847	<i>m</i> -toluol-aldehyd	23980299	215823
865	Dihidrocitronellol	2225798	20032
875	α -terpinolén	30928640	278358
897	β -linalool	297362900	2676266
906	3,4,4-trimetil-2-cikloheptén-1-on	21669041	195021
921	2-izopropil-ciklohexanol	9787675	88089
935	<i>o</i> -cimol	4888747	43999
940	2-nonén-4-on	5317113	47854
950	2,6-dimetil-1,3,5,7-oktatetraén	1652285	14871
963	Pentilciklohexán	1334314	12009
987	2,6-nonadiénal	12673491	114061
995	Ciklooktatetraén-karbaldehyd	1350465	12154
999	<i>transz</i> -2-nonén-1-al	22958402	206626

1014	3-metil-undekán	4727975	42552
1029	Izoxilaldehid	23747783	213730
1038	Terpinén-4-ol	1762521	15863
1045	<i>o</i> -acetiltoluol	3528621	31758
1061	α -terpineol	130263434	1172371
1068	Szafranál	14692379	132231
1088	α -jonon	8528392	76756
1096	2-metilhexa-dihidrociklopropanal- pentalén-2-on	23429978	210870
1100	β -ciklocitrál	39273968	353466
1105	Metil- <i>m</i> -tolilkarbinol	7624602	68621
1116	<i>p</i> -hidroxiacetofenon	10426944	93842
1136	Geraniol	29742220	267680
1155	2,6,6-trimetil-1-ciklohexén-1- acetaldehid	9779412	88015
1164	Tetrahidrokinolin	3467808	31210
1171	2-fenil-2-butenal	1698922	15290
1176	4,8-dimetil-1,7-nonadién-4-ol	3256335	29307
1187	5-butil-1,3-ciklohexadién	3761031	33849
1196	Anetol	7319071	65872
1207	Indol	5651831	50866
1209	<i>n</i> -tridekán	6282000	56538
1221	α -jonon	5105812	45952
1231	2-metoxi-4-vinilfenol	136893224	1232039
1240	2,4-dekadiénal	20186417	181678
1307	1,5,8-trimetil-1,2-dihidronaftalin	19705755	177352
1344	β -damaszkon	69939772	629458
1365	β -elemén	48262086	434359
1397	Dihidrodehidro- β -jonon	14143800	127294
1425	<i>transz</i> - α -jonon	6234702	56112
1432	Kariofillén	4057224	36515
1456	2-metil-1-tetradekán	4537391	40837
1467	Dihidropszeudojonon	89701580	807314
1476	2,3-dimetilfenil-izovaleriánsav-észter	12233555	110102
1490	α -gvajén	10417488	93757
1498	2-metiltetradekán	10336363	93027
1522	4-hidroxi- β -jonon	122623054	1103607
1551	β -jonon	69231296	623082
1573	4,5-di-epi-arisztolochén	69264489	623380
1587	Valencén	24911953	224208
1600	γ -Gurjunén	20334382	183009
1610	N-Guanilpirolin	9156538	82409
1624	8-izopropenil-1,5-dimetil-1,5- ciklodekadién	50191778	451726
1632	Dodekánsav-metilészter	6270861	56438

1656	<i>n</i> -hexadekán	9631355	86682
1666	Dihidroaktinidiolid	10527477	94747
1703	Dodekánsav	49636618	446730
1711	2-metilpentadekán	57302974	515727
1733	Szkvalén	13989451	125905
1779	Heptadekán	9590654	86316
1810	<i>n</i> -propil-linolenát	4363392	39271
1820	Izopropil-laurát	2745932	24713
1826	1-Heptatriakontanol	1865687	16791
1830	α -N-normetadol	3510706	31596
1839	6,11-dimetil-2,6,10-dodekatrién-1-ol	24411181	219701
1852	1-klorohexadekán	16394438	147550
1864	Etil-4-izopropenil-6-metil-2-oxo-6-heptenoát	6928462	62356
1876	Hexilciklopentán	2372545	21353
1882	2,6-dimetilheptadekán	14462634	130164
1887	α -eudeszmol	2479860	22319
1897	3,3,4-trimetil-4-(4-metilfenil)ciklopentanol	24631452	221683
1906	Metil-10,13-oktadekadinionát	8940360	80463
1912	2,6-diizopropilnaftalén	7832473	70492
1916	2-etoxiamfetamin	3718069	33463
1938	Heptadekán	21747918	195731
1943	Norfítán	10535026	94815
1952	4,5-dimetil-1,2,3,6,7,8-oktahidrodifenilén	7731857	69587
1960	<i>n</i> -pentadekanal	304694110	2742247
1972	Metiltetradekanoát	59522565	535703
1992	2-metilén-6,8,8-trimetil-triciklo(1,6)undekán-3-ol	71757815	645820
2010	Hexilfahéjsav-aldehid	967218	8705
2021	Tetradekánsav	161261007	1451349
2064	Tetradekánsav-etilészter	18546688	166920
2084	2,6,10,14-tetrametil-hexadekán	39004251	351038
2092	Szolavetivon	2802469	25222
2097	Nootkaton	5615466	50539
2112	Izopropil-mirisztát	1173330	10560
2127	Hexahidrofarnesil-aceton	15693444	141241
2151	Ftálsav-diizobutilészter	9690824	87217

M3: Magyar konvencionális fűszerpaprika

Retenció index	Molekula	Konvencionális (1) (területegység)	Szórás (n=3)	Konvencionális (2) (területegység)	Szórás (n=3)
141	N-metilpirrol	104987133	734910	602313727	3613882
161	2,4,6-oktatrién	1342451	9397	13268222	79609
196	Toluol	5712395	39987	29112638	174676
242	Brómcikloheptán	2700197	18901	14132030	84792
268	Hexanal	25655614	179589	14571079	87426
342	3-furánkarbaldehyd	28574044	200018	45470603	272824
430	<i>m</i> -xilol	33301210	233108	324204381	1945226
480	2-heptanon	2597536	18183	20905389	125432
506	Heptanal	2821661	19752	39702226	238213
524	Acetilfurán	1980683	13865	0	0
572	3,5-xilenol	5700016	39900	13962507	83775
577	α -Pinén	1182977	8281	19136775	114821
629	<i>cisz</i> -2-heptenal	9882288	69176	41839902	251039
637	Benzaldehyd	2239030	15673	12213265	73280
672	β -tuján	30693345	214853	110258183	661549
683	Szulkaton	2055713	14390	0	0
693	2- <i>n</i> -pentilfurán	2274660	15923	27054630	162328
702	Hemimellitén	3367905	23575	51723792	310343
720	Oktanal	16013055	112091	313680886	1882085
733	β -ocimén	1591619	11141	18660719	111964
756	Pszudokumol	2258001	15806	20058654	120352
762	<i>o</i> -cimol	2445751	17120	28562147	171373
772	D-limonén	1440289	10082	36757862	220547
784	1,1,3-trimetil-2-ciklohexanon	0	0	9209870	55259
798	β - <i>cis</i> -cimol	6860888	48026	190234393	1141406
811	<i>m</i> -propiltoluol	4067316	28471	31817561	190905
826	<i>transz</i> -2-oktenal	47775919	334431	25824659	154948
833	2-acetilpirrol	430572	3014	10765783	64595
847	<i>m</i> -toluol-aldehyd	5071334	35499	81426261	488558
865	Dihidrocitronellol	0	0	15542146	93253
875	α -terpinolén	19384005	135688	121217560	727305
897	β -linalool	747304	5231	15160259	90962
906	3,4,4-trimetil-2-cikloheptén-1-on	18521237	129649	72538172	435229
921	2-izopropil-ciklohexanol	117711368	823980	593172497	3559035
935	<i>o</i> -cimol	12081505	84571	165035491	990213
940	2-nonén-4-on	5459140	38214	81071223	486427
950	2,6-dimetil-1,3,5,7-oktatetraén	0	0	44718921	268314
963	Pentilciklohexán	2833323	19833	62223167	373339
987	2,6-nonadiénal	3164690	22153	27023675	162142

995	Ciklooktatetraén-karbaldehyd	3164690	22153	9148718	54892
999	<i>transz</i> -2-nonén-1-al	8726926	61088	100294892	601769
1014	3-metil-undekán	1491218	10439	5015335	30092
1029	Izoxilaldehyd	12674861	88724	205082503	1230495
1038	Terpinén-4-ol	385878	2701	3717126	22303
1045	<i>o</i> -acetiltoluol	385878	2701	165940727	995644
1061	α -terpineol	1031183	7218	8298762	49793
1068	Szafranál	2293985	16058	44218382	265310
1088	α -jonon	55710278	389972	305467794	1832807
1096	2-metilhexa-dihidrociklopropanal-pentalén-2-on	6667656	46674	150998485	905991
1100	β -ciklocitrál	5458225	38208	35026216	210157
1105	Metil- <i>m</i> -tolilkarbinol	15162997	106141	90234582	541407
1116	<i>p</i> -hidroxiacetofenon	17297377	121082	209708649	1258252
1136	Geraniol	2608917	18262	20412778	122477
1155	2,6,6-trimetil-1-ciklohexén-1-acetaldehyd	4501502	31511	37356015	224136
1164	Tetrahidrokinolin	9949510	69647	56405767	338435
1171	2-fenil-2-butenal	5708060	39956	99629230	597775
1176	4,8-dimetil-1,7-nonadién-4-ol	1632609	11428	17819490	106917
1187	5-butil-1,3-ciklohexadién	1214346	8500	14155215	84931
1196	Anetol	2044994	14315	18725999	112356
1207	Indol	3998652	27991	39663589	237982
1221	α -jonon	6895556	48269	48936386	293618
1231	2-metoxi-4-vinilfenol	4753219	33273	283985868	1703915
1240	2,4-dekadiénal	7297209	51080	0	0
1307	1,5,8-trimetil-1,2-dihidronaftalin	4142408	28997	30378426	182271
1326	3-hidroxi-2,2,4-trimetilpentil-izobutánsav-észter	68148569	477040	301635338	1809812
1344	β -damaszkon	7819404	54736	62344200	374065
1365	β -elemén	0	0	153450560	920703
1397	Dihidrodehidro- β -jonon	1027005	7189	155337655	932026
1425	<i>transz</i> - α -jonon	57641877	403493	327989854	1967939
1432	Kariofillén	56288893	394022	460321889	2761931
1456	2-metil-1-tetradekán	9154954	64085	40424816	242549
1467	Dihidropszeudojonon	2901557	20311	68175227	409051
1476	2,3-dimetilfenil-izovaleriánsav-észter	4499756	31498	53476148	320857
1490	α -gvajén	8681559	60771	14278361	85670
1498	2-metiltetradekán	40669183	284684	853056717	5118340
1522	4-hidroxi- β -jonon	9984642	69892	76087595	456526
1551	β -jonon	11149456	78046	141197968	847188
1573	4,5-di-epi-arisztolochén	21935849	153551	43418787	260513
1587	Valencén	67899684	475298	197727991	1186368
1600	γ -Gurjunén	32112281	224786	660206247	3961237

1610	N-Guanilpirolin	93739905	656179	578134161	3468805
1624	8-izopropenil-1,5-dimetil-1,5-ciklodekadién	32630508	228414	271213729	1627282
1632	Dodekánsav-metilészter	20058310	140408	165500022	993000
1656	<i>n</i> -hexadekán	968735	6781	17660156	105961
1666	Dihidroaktinidiolid	57897192	405280	283843970	1703064
1703	Dodekánsav	2943884	20607	117550162	705301
1711	2-metilpentadekán	6172276	43206	39758286	238550
1733	Szkvalén	7660634	53624	75445663	452674
1779	Heptadekán	2981519	20871	7605271	45632
1810	<i>n</i> -propil-linolenát	27893685	195256	803148047	4818888
1820	Izopropil-laurát	9737400	68162	114442854	686657
1826	1-Heptatriakotanol	13122301	91856	64936068	389616
1830	α -N-normetadol	4539975	31780	22874501	137247
1839	6,11-dimetil-2,6,10-dodekatrién-1-ol	2200866	15406	87507028	525042
1852	1-klorohexadekán	1623296	11363	37299465	223797
1864	Etil-4-izopropenil-6-metil-2-oxo-6-heptenoát	3350081	23451	4442283	26654
1876	Hexilciklopentán	5021860	35153	352900321	2117402
1882	2,6-dimetilheptadekán	21976704	153837	66431127	398587
1887	α -eudeszmol	5744968	40215	26879276	161276
1897	3,3,4-trimetil-4-(4-metilfenil)ciklopentanol	2671234	18699	16578326	99470
1906	Metil-10,13-oktadekadimionát	24968445	174779	46017111	276103
1916	2-etoxiamfetamin	3181752	22272	32304602	193828
1925	3-oxo-3-(3,4,5-trimetoxi-fenil)-propionsav-etilészter	16505067	115535	131680900	790085
1935	2-pentadekanon	7545001	52815	130058403	780350
1938	Heptadekán	1383270	9683	0	0
1943	Norfitán	5391732	37742	3457042	20742
1952	4,5-dimetil-1,2,3,6,7,8-oktahidrodifenilén	3040042	21280	0	0
1960	<i>n</i> -pentadekanal	0	0	3541582	21249
1972	Metiltetradekanoát	0	0	41447418	248685
1992	2-metilén-6,8,8-trimetil-triciklo(1,6)undekán-3-ol	32311015	226177	44157333	264944
2010	Hexilfahéjsav-aldehid	12070630	84494	63293098	379759
2021	Tetradekánsav	5705619	39939	48557806	291347
2064	Tetradekánsav-etilészter	11343927	79407	436874298	2621246
2084	2,6,10,14-tetrametil-hexadekán	59228892	414602	578648170	3471889
2092	Szolavetivon	75886266	531204	309002316	1854014
2097	Nootkaton	11219145	78534	0	0
2112	Izopropil-mirisztát	880369	6163	4709097	28255
2127	Hexahidrofarnesil-aceton	32138565	224970	1326837357	7961024

2151	Ftálsav-diizobutilészter	5000817	35006	96774597	580648
------	--------------------------	---------	-------	----------	--------

M4: Spanyolországból származó fűszerpaprika

Retenciószám	Molekula	Spanyolország (1) (területegység)	Szórás (n=3)	Spanyolország (2) (területegység)	Szórás (n=3)
141	N-metilpirrol	71329296	285317	198094661	990473
161	2,4,6-oktatrién	7120521	28482	9456106	47281
196	Toluol	10583119	42332	7810515	39053
242	Brómcikloheptán	10256872	41027	3132115	15661
268	Hexanal	57144764	228579	84994688	424973
328	1,3-Oktadién	4290090	17160	2835707	14179
342	3-furánkarbaldehid	65643831	262575	89052886	445264
368	Homoszerin	12393849	49575	17786773	88934
412	Etilbenzol	2028424	8114	2551375	12757
430	<i>m</i> -xilol	93121963	372488	93510813	467554
480	2-heptanon	7673286	30693	13311131	66556
506	Heptanal	10678000	42712	13757316	68787
568	<i>p</i> -metil-anizol	7838490	31354	8802770	44014
577	α -Pinén	21759648	87039	11378632	56893
637	Benzaldehid	94191220	376765	112568780	562844
653	Dimetil-triszulfid	5127222	20509	4510430	22552
659	β -fellandré	28088413	112354	14934390	74672
661	Linalil-butirát	2892624	11570	4268048	21340
667	1-Heptén-3-on	37118758	148475	4268048	21340
683	Szulkaton	25840967	103364	35731682	178658
693	2- <i>n</i> -pentilfurán	54003234	216013	100828544	504143
700	6-metil-5-heptén-2-on	14014843	56059	28058399	140292
720	Oktanal	2808313	11233	6124782	30624
733	β -ocimén	47772770	191091	19347313	96737
772	D-limonén	580351007	2321404	41700011	208500
776	Eukaliptol	49366120	197464	15274483	76372
784	1,1,3-trimetil-2-ciklohexanon	9172854	36691	24076808	120384
798	β -cis-cimol	142901865	571607	195966030	979830
826	<i>transz</i> -2-oktenal	35935118	143740	47306315	236532
833	2-acetilpirrol	7041879	28168	6808891	34044
847	<i>m</i> -toluol-aldehid	22046929	88188	33725537	168628
865	Dihidrocitronellol	10880620	43522	11948562	59743
873	<i>p</i> -cimol	66459924	265840	104918018	524590
897	β -linalool	97634750	390539	304545048	1522725
906	3,4,4-trimetil-2-cikloheptén-1-on	100542490	402170	136745119	683726
917	1-metilcikloheptanol	41544529	166178	66807512	334038
935	<i>o</i> -cimol	9752728	39011	15459082	77295
940	2-nonén-4-on	6928203	27713	16279613	81398
950	2,6-dimetil-1,3,5,7-oktatetraén	4451789	17807	9113401	45567

963	Pentilciklohexán	4048903	16196	3401855	17009
985	D-kámfor	499234333	1996937	92681180	463406
999	<i>transz</i> -2-nonén-1-al	29998710	119995	89285704	446429
1014	3-metil-undekán	2817994	11272	24487405	122437
1020	<i>p</i> -acetiltoluol	10590013	42360	23322925	116615
1023	<i>m</i> -metil-acetofenon	239230721	956923	199984316	999922
1038	Terpinén-4-ol	52445077	209780	23402998	117015
1045	<i>o</i> -acetiltoluol	16539698	66159	30531825	152659
1061	α -terpineol	204664607	818658	208325294	1041626
1068	Szafranál	49978148	199913	128551787	642759
1082	Verbenon	256117093	1024468	161230197	806151
1096	2-metilhexa-dihidrociklopropanal- pentalén-2-on	34491826	137967	55329310	276647
1100	β -ciklocitrál	61368382	245474	137188213	685941
1103	Metil- <i>p</i> -tolilkarbinol	32434813	129739	23590215	117951
1116	<i>p</i> -hidroxiacetofenon	6165376	24662	18607686	93038
1133	(-)-Karvon	429789374	1719157	24164235	120821
1155	2,6,6-trimetil-1-ciklohexén-1- acetaldehid	41261325	165045	73041809	365209
1164	Tetrahidrokinolin	5130875	20524	6341856	31709
1171	2-fenil-2-butenal	8017671	32071	6340805	31704
1176	4,8-dimetil-1,7-nonadién-4-ol	10722731	42891	6925018	34625
1207	Indol	48054774	192219	21974553	109873
1209	<i>n</i> -tridekán	48054774	192219	48602925	243015
1221	α -jonon	4394329	17577	7512033	37560
1231	2-metoxi-4-vinilfenol	122077557	488310	168876517	844383
1240	2,4-dekadiénal	29853381	119414	55964071	279820
1291	α -kuberén	2049764	8199	7203032	36015
1301	<i>n</i> -dekánsav	23102507	92410	3000187	15001
1326	3-hidroxi-2,2,4-trimetilpentil- izobutánsav-észter	6573044	26292	14040316	70202
1344	β -damaszkon	80749309	322997	196304031	981520
1365	β -elemén	83028359	332113	159426967	797135
1397	Dihidrodehidro- β -jonon	19225821	76903	26927235	134636
1425	<i>transz</i> - α -jonon	17398320	69593	38791070	193955
1432	Kariofillén	167467334	669869	38791070	193955
1467	Dihidropszeudojonon	520533073	2082132	938514072	4692570
1476	2,3-dimetilfenil-izovaleriánsav-észter	17728200	70913	45245155	226226
1490	α -gvajén	12491032	49964	57301250	286506
1498	2-metiltetradekán	3982775	15931	19830976	99155
1522	4-hidroxi- β -jonon	55561078	222244	148826719	744134
1551	β -jonon	297121765	1188487	530237566	2651188
1600	γ -Gurjunén	52276187	209105	101922615	509613
1610	N-Guanilpirolin	37072845	148291	59373768	296869
1630	5- <i>terc</i> -butilpirogallol	19915755	79663	37913804	189569

1656	<i>n</i> -hexadekán	10419171	41677	18518133	92591
1666	Dihidroaktinidiolid	105264728	421059	103492230	517461
1733	Szkvalén	9281952	37128	38125784	190629
1765	Kariofillén-oxid	44189719	176759	22653032	113265
1779	Heptadekán	11526264	46105	47214616	236073
1810	<i>n</i> -propil-linolenát	7325418	29302	14688658	73443
1813	Humulén-epoxid	50245696	200983	6416436	32082
1820	Izopropil-laurát	50245696	200983	4588172	22941
1826	1-Heptatriakotanol	12732379	50930	7257015	36285
1839	6,11-dimetil-2,6,10-dodekatrién-1-ol	10489834	41959	46940202	234701
1876	Hexilciklopentán	2252593	9010	12288907	61445
1882	2,6-dimetilheptadekán	3535110	14140	11469013	57345
1887	α -eudeszmol	79157572	316630	48496452	242482
1897	3,3,4-trimetil-4-(4-metilfenil)- ciklopentanol	17064315	68257	21730603	108653
1906	Metil-10,13-oktadekadienionát	34038564	136154	28241567	141208
1912	2,6-diizopropilnaftalin	2909621	11638	14789701	73949
1938	Heptadekán	33303676	133215	34541319	172707
1943	Norfitán	14167393	56670	37760662	188803
1972	Metiltetradekanoát	178206310	712825	377080827	1885404
1992	2-metilén-6,8,8-trimetil- triciklo(1,6)]undekán-3-ol	163189765	652759	397690300	1988451
2084	2,6,10,14-tetrametil-hexadekán	50898085	203592	96219994	481100
2092	Szolavetivon	3619017	14476	4614272	23071
2097	Nootkaton	6194093	24776	4614272	23071
2112	Izopropil-mirisztát	15490498	61962	2712320	13562
2127	Hexahidrofarnesil-aceton	150637165	602549	102747058	513735
2151	Ftálsav-diizobutilészter	26644492	106578	18757983	93790

M5: Argentínából származó fűszerpaprika

Retenció index	Molekula	Argentína (1) (területegység)	Szórás (n=3)	Argentína (2) (területegység)	Szórás (n=3)
141	N-metilpirrol	26880282	241923	18715156	112291
268	Hexanal	53600197	482402	77736912	466421
342	3-furánkarbaldehyd	7648635	68838	36981285	221888
430	<i>m</i> -xilol	15383511	138452	180132593	1080796
480	2-heptanon	4994114	44947	22285321	133712
506	Heptanal	9584177	86258	10694558	64167
577	α -Pinén	171567632	1544109	44493086	266959
637	Benzaldehyd	18186619	163680	57036278	342218
659	β -fellandrén	698365637	6285291	26458368	158750
670	β -Pinén	308907589	2780168	108797460	652785
683	Szulkaton	7459109	67132	129250120	775501
693	2- <i>n</i> -pentilfurán	166765698	1500891	108357167	650143
702	Hemimellitén	4768387	42915	33239345	199436
726	α -fellandrén	112910698	1016196	37027986	222168
733	β -ocimén	102083118	918748	78359003	470154
747	α -terpinol	592248077	5330233	47657410	285944
762	<i>o</i> -cimol	288702536	2598323	196070297	1176422
772	D-limonén	338075101	3042676	408998927	2453994
784	1,1,3-trimetil-2-ciklohexanon	3437514	30938	77527042	465162
798	β - <i>cisz</i> -cimol	38697942	348281	102013120	612079
826	<i>transz</i> -2-oktenal	997626109	8978635	270014942	1620090
847	<i>m</i> -toluol-aldehyd	47054878	423494	114650496	687903
897	β -linalool	364439116	3279952	707491547	4244949
906	3,4,4-trimetil-2-cikloheptén-1- on	72016864	648152	516668970	3100014
921	2-izopropil-ciklohexanol	18976525	170789	238578357	1431470
935	<i>o</i> -cimol	17450656	157056	71823106	430939
940	2-nonén-4-on	139490464	1255414	30205337	181232
950	2,6-dimetil-1,3,5,7-oktatetraén	5406302	48657	53705678	322234
963	Pentilciklohexán	20747039	186723	6608742	39652
977	2,6,6-trimetil-2-ciklohexén- 1,4-dion	163955784	1475602	29011922	174072
987	2,6-nonadiénal	12280319	110523	50655402	303932
999	<i>transz</i> -2-nonén-1-al	33211404	298903	85385103	512311
1023	<i>m</i> -metil-acetofenon	5848083	52633	38330983	229986
1029	Izoxilaldehyd	39776461	357988	274168621	1645012
1038	Terpinén-4-ol	1596077667	14364699	143545639	861274
1045	<i>o</i> -acetiltoluol	33814737	304333	61353146	368119
1061	α -terpineol	263382592	2370443	129420951	776526
1068	Szafranál	50842473	457582	823053187	4938319

1088	α -jonon	9093493	81841	42454491	254727
1096	2-metilhexa- dihidrociklopropanal-pentalén- 2-on	16872966	151857	62594266	375566
1100	β -ciklocitrál	52547938	472931	288795230	1732771
1105	Metil- <i>m</i> -tolilkarbinol	13429161	120862	57260830	343565
1134	<i>p</i> -kuminaldehid	78109433	702985	290911033	1745466
1155	2,6,6-trimetil-1-ciklohexén-1- acetaldehid	42635666	383721	137218739	823312
1164	Tetrahidrokinolin	4705940	42353	22973803	137843
1203	β -izoszafrol	854809406	7693285	133623424	801741
1209	<i>n</i> -tridekán	51869107	466822	22727783	136367
1231	2-metoxi-4-vinilfenol	29726333	267537	100183593	601102
1240	2,4-dekadiénal	81548332	733935	124868097	749209
1284	Sziringol	142498687	1282488	18577558	111465
1291	α -kuberén	131422864	1182806	18577558	111465
1305	Dehidro-ar-jonén	17595177	158357	125173550	751041
1344	β -damaszkon	411166830	3700501	182567253	1095404
1365	β -elemén	31983016	287847	204138066	1224828
1397	Dihidrodehidro- β -jonon	45442015	408978	98287840	589727
1425	<i>transz</i> - α -jonon	17470147	157231	196816483	1180899
1432	Kariofillén	418776733	3768991	389308419	2335851
1459	Izovanillinsav	4239933	38159	2239355571	13436133
1476	2,3-dimetilfenil-izovaleriánsav- észter	100552380	904971	202355211	1214131
1498	2-metiltetradekán	36963631	332673	47205673	283234
1522	4-hidroxi- β -jonon	21063708	189573	133318527	799911
1551	β -jonon	270150703	2431356	1276017097	7656103
1564	D-germakrén	185485159	1669366	15267770	91607
1573	4,5-di-epi-arisztolochén	214975139	1934776	152077778	912467
1587	Valencén	45700562	411305	428689766	2572139
1600	γ -Gurjunén	116316206	1046846	320027878	1920167
1610	N-Guanilpirolin	145633689	1310703	89797521	538785
1624	8-izopropenil-1,5-dimetil-1,5- ciklodekadién	12138816	109249	21020946	126126
1635	Miriszticin	7595595	68360	1559852715	9359116
1656	<i>n</i> -hexadekán	16070133	144631	32690157	196141
1666	Dihidroaktinidiolid	76713081	690418	419438022	2516628
1680	Elemicin	1434924875	12914324	14440592	86644
1733	Szkvalén	14201078	127810	14816584	88900
1779	Heptadekán	17440184	156962	66183935	397104
1810	<i>n</i> -propil-linolenát	8301381	74712	23000538	138003
1820	Izopropil-laurát	11793502	106142	22870229	137221
1826	1-Heptatriakotanol	7340108	66061	33326897	199961
1839	6,11-dimetil-2,6,10-	8353138	75178	62076978	372462

dodekatrién-1-ol					
1852	1-klorohexadekán	10792679	97134	106755094	640531
1855	Izoelemicin	168118357	1513065	9852668	59116
1864	Etil-4-izopropenil-6-metil-2-oxo-6-heptenoát	7938628	71448	40925561	245553
1888	Ar-tumeron	53655686	482901	803492740	4820956
1898	Tumeron	25754812	231793	499049234	2994295
1912	2,6-diizopropilnaftalén	3932538	35393	13635182	81811
1925	3-oxo-3-(3,4,5-trimetoxi-fenil)-propionsav-etilészter	12596511	113369	12915489	77493
1935	2-pentadekanon	31312313	281811	9164668	54988
1938	Heptadekán	13553814	121984	42338145	254029
1948	Kurlon	8624267	77618	68009041	408054
1952	4,5-dimetil-1,2,3,6,7,8-oktahidrodifenilén	5123446	46111	85742470	514455
1960	<i>n</i> -pentadekanal	11738922	105650	162912103	977473
1972	Metiltetradekanoát	484302781	4358725	199480319	1196882
2064	Tetradekánsav-etilészter	49192971	442737	99087579	594525
2084	2,6,10,14-tetrametil-hexadekán	45183573	406652	113512192	681073
2097	Nootkaton	14399144	129592	9919326	59516
2127	Hexahidrofarneszil-aceton	48222686	434004	193971897	1163831
2151	Ftálsav-diizobutilészter	11739511	105656	60499833	362999

M6: Dél-Afrikából származó fűszerpaprika

Retenciószám	Molekula	Dél-Afrika (területegység)	Szórás (n=3)
141	N-metilpirrol	40028591	320229
154	(3E)-8-metil-3,7-nonadién-2-on	1212729	9702
161	2,4,6-oktatrién	8069165	64553
196	Toluol	9145061	73160
242	Brómcikloheptán	8419461	67356
268	Hexanal	59656857	477255
328	1,3-Oktadién	9120957	72968
342	3-furánkarbaldehid	24845934	198767
412	Etilbenzol	2806300	22450
430	<i>m</i> -xilol	71236496	569892
480	2-heptanon	6159274	49274
506	Heptanal	13211252	105690
524	Acetilfurán	6444500	51556
577	α -Pinén	8514540	68116
629	<i>cisz</i> -2-heptenal	8262646	66101
637	Benzaldehid	34528329	276227
653	Dimetil-triszulfid	2524638	20197
661	Linalil-butirát	4863175	38905
667	1-Heptén-3-on	5157437	41259
672	β -tuján	8391230	67130
683	Szulkaton	12747838	101983
693	2- <i>n</i> -pentilfurán	82681441	661452
700	6-metil-5-heptén-2-on	4447866	35583
720	Oktanal	7001132	56009
733	β -ocimén	8229287	65834
756	Pszudokumol	6308988	50472
762	<i>o</i> -cimol	1947301	15578
772	D-limonén	30086016	240688
784	1,1,3-trimetil-2-ciklohexanon	11839215	94714
798	β - <i>cisz</i> -cimol	80747805	645982
826	<i>transz</i> -2-oktenal	26242618	209941
833	2-acetilpirrol	1329148	10633
865	Dihidrocitronellol	1393775	11150
873	<i>p</i> -cimol	141188391	1129507
875	α -terpinolén	18336692	146694
897	β -linalool	73503118	588025
906	3,4,4-trimetil-2-cikloheptén-1-on	67998082	543985
921	2-izopropil-ciklohexanol	26936900	215495

929	Prehnitén	1513712	12110
935	<i>o</i> -cimol	8551467	68412
940	2-nonén-4-on	4996510	39972
950	2,6-dimetil-1,3,5,7-oktatetraén	30549456	244396
963	Pentilciklohexán	1654871	13239
987	2,6-nonadiénal	7775512	62204
995	Ciklooktatetraén-karbaldehid	3435686	27485
999	<i>transz</i> -2-nonén-1-al	42834400	342675
1014	3-metil-undekán	1707659	13661
1023	<i>m</i> -metil-acetofenon	3705835	29647
1029	Izoxilaldehid	31068384	248547
1038	Terpinén-4-ol	13914655	111317
1045	<i>o</i> -acetiltoluol	8380127	67041
1061	α -terpineol	14343046	114744
1068	Szafranál	31307759	250462
1088	α -jonon	18819557	150556
1096	2-metilhexa-dihidrociklopropanal- pentalén-2-on	45427713	363422
1100	β -ciklocitrál	81185872	649487
1105	Metil- <i>m</i> -tolilkarbinol	25778752	206230
1115	2-Bornén	11853029	94824
1155	2,6,6-trimetil-1-ciklohexén-1- acetaldehid	54560272	436482
1164	Tetrahidrokinolin	2052321	16419
1171	2-fenil-2-butenal	10209269	81674
1187	5-butil-1,3-ciklohexadién	2043498	16348
1196	Anetol	7407601	59261
1209	<i>n</i> -tridekán	5359390	42875
1221	α -jonon	9310732	74486
1231	2-metoxi-4-vinilfenol	124270030	994160
1240	2,4-dekadiénal	70775217	566202
1291	α -kuberén	8476203	67810
1307	1,5,8-trimetil-1,2-dihidronaftalin	37804808	302438
1326	3-hidroxi-2,2,4-trimetilpentil- izobutánsav-észter	9206401	73651
1344	β -damaszkon	134483334	1075867
1365	β -elemén	122768890	982151
1387	3,4-dehidro- β -jonon	10663186	85305
1397	Dihidrodehidro- β -jonon	20339051	162712
1425	<i>transz</i> - α -jonon	33176895	265415
1432	Kariofillén	43959057	351672
1467	Dihidropszeudojonon	678225790	5425806
1476	2,3-dimetilfenil-izovaleriánsav-észter	26220624	209765
1490	α -gvajén	36768984	294152
1498	2-metiltetradekán	23618680	188949

1522	4-hidroxi- β -jonon	44708785	357670
1551	β -jonon	353090338	2824723
1573	4,5-di-epi-arisztolochén	235993853	1887951
1587	Valencén	104993544	839948
1600	γ -Gurjunén	76001165	608009
1610	N-Guanilpirolin	4586963	36696
1624	8-izopropenil-1,5-dimetil-1,5-ciklodekadién	125279557	1002236
1630	5- <i>terc</i> -butilpirogallol	36265510	290124
1656	<i>n</i> -hexadekán	21297024	170376
1666	Dihidroaktinidiolid	101226181	809809
1698	Elemol	10121447	80972
1703	Dodekánsav	269316281	2154530
1733	Szkvalén	24982485	199860
1779	Heptadekán	12005103	96041
1820	Izopropil-laurát	2295642	18365
1826	1-Heptatriakotanol	15824485	126596
1839	6,11-dimetil-2,6,10-dodekatrién-1-ol	17166267	137330
1850	γ -eudezmol	28316890	226535
1864	Etil-4-izopropenil-6-metil-2-oxo-6-heptenoát	16690769	133526
1876	Hexilciklopentán	5377168	43017
1882	2,6-dimetilheptadekán	2121398	16971
1887	α -eudeszmol	45370618	362965
1897	3,3,4-trimetil-4-(4-metilfenil)ciklopentanol	22233508	177868
1906	Metil-10,13-oktadekadinonát	20017748	160142
1912	2,6-diizopropilnaftalén	3602554	28820
1916	2-etoxiamfetamin	3829876	30639
1920	Ciklooktatetraén	5261204	42090
1925	3-oxo-3-(3,4,5-trimetoxi-fenil)-propionsav-etilészter	4598242	36786
1935	2-pentadekanon	47378286	379026
1943	Norfítán	28275539	226204
1952	4,5-dimetil-1,2,3,6,7,8-oktahidrodifenilén	33438532	267508
1960	<i>n</i> -pentadekanal	31932297	255458
1972	Metiltetradekanoát	278671352	2229371
1992	2-metilén-6,8,8-trimetil-triciklo(1,6)undekán-3-ol	249896893	1999175
2064	Tetradekánsav-etilészter	15872550	126980
2084	2,6,10,14-tetrametil-hexadekán	93862099	750897
2092	Szolavetivon	4092944	32744
2097	Nootkaton	10871892	86975
2112	Izopropil-mirisztát	1294766	10358

2127	Hexahidrofarnesil-aceton	299643860	2397151
2151	Ftálsav-diizobutilészter	9578766	76630

M7: Kínából származó fűszerpaprika

Retenciószám	Molekula	Kína (1) (tömeg egység)	Szórás (n=3)	Kína (2) (tömeg egység)	Szórás (n=3)
141	N-metilpirrol	59396222	475170	19467599	136273
161	2,4,6-oktatrién	6001629	48013	1830269	12812
196	Toluol	9239150	73913	4684741	32793
268	Hexanal	1,16E+08	930987	28912637	202388
342	3-furánkarbaldehyd	71640389	573123	26818366	187729
412	Etilbenzol	1555959	12448	1406227	9844
430	<i>m</i> -xilol	85385387	683083	31093725	217656
577	α -Pinén	1745241	13962	1227301	8591
637	Benzaldehyd	1,01E+08	808010	28918802	202432
653	Dimetil-triszulfid	4357869	34863	1014084	7099
667	1-Heptén-3-on	5597058	44776	1593886	11157
672	β -tuján	17524850	140199	6224823	43574
683	Szulkaton	34243557	273948	9166976	64169
693	2- <i>n</i> -pentilfurán	55298259	442386	18425661	128980
700	6-metil-5-heptén-2-on	15257668	122061	3242661	22699
720	Oktanal	5189888	41519	2171854	15203
733	β -ocimén	5770760	46166	3677333	25741
738	2,4-heptadién-1-al	17365217	138922	19771790	138403
756	Pszudokumulol	11680061	93440	2970469	20793
772	D-limonén	15495093	123961	27692395	193847
785	5-etil-3-heptén-2-on	11504942	92040	6895718	48270
798	β - <i>cisz</i> -cimol	1,51E+08	1205453	62460162	437221
826	<i>transz</i> -2-oktenal	34894056	279152	20585612	144099
833	2-acetilpirrol	4923339	39387	928754,6	6501
865	Dihidrocitronellol	33307736	266462	3585548	25099
873	<i>p</i> -cimol	96947385	775579	21758238	152308
897	β -linalool	80877647	647021	49334436	345341
905	4-izopropil-ciklohexanol	99773507	798188	28290616	198034
921	2-izopropil-ciklohexanol	69529796	556238	16191607	113341
940	2-nonén-4-on	10831586	86653	2924117	20469
950	2,6-dimetil-1,3,5,7-oktatetraén	6555187	52441	10653297	74573
963	Pentilciklohexán	3714238	29714	811122,6	5678
987	2,6-nonadiénal	10429637	83437	5069579	35487
995	Ciklooktatetraén-karbaldehyd	4531820	36255	1952387	13667
999	<i>transz</i> -2-nonén-1-al	60558362	484467	20786478	145505
1014	3-metil-undekán	10303166	82425	1690136	11831
1023	<i>m</i> -metil-acetofenon	6789435	54315	2131335	14919
1029	Izoxilaldehyd	59017308	472138	21289239	149025
1038	Terpinén-4-ol	2443347	19547	1066213	7463
1045	<i>o</i> -acetiltoluol	14888594	119109	2827746	19794

1061	α -terpineol	45586981	364696	69477070	486339
1068	Szafranál	52919597	423357	14044369	98311
1088	α -jonon	14825775	118606	14825775	103780
1096	2-metilhexa-dihidrociklopropanal- pentalén-2-on	37003323	296027	12673384	88714
1100	β -ciklocitrál	79889476	639116	37168195	260177
1105	Metil- <i>m</i> -tolilkarbinol	30484812	243878	4399842	30799
1116	<i>p</i> -hidroxiacetofenon	8647377	69179	5485289	38397
1136	Geraniol	7312689	58502	7568596	52980
1155	2,6,6-trimetil-1-ciklohexén-1- acetaldehyd	37107461	296860	15308237	107158
1164	Tetrahydrokinolin	5406929	43255	15308237	107158
1176	4,8-dimetil-1,7-nonadién-4-ol	11478444	91828	4548375	31839
1202	2-transz-4-transz-dekadiénal	2,08E+08	1664267	9681838	67773
1207	Indol	2,08E+08	1664267	85148190	596037
1221	α -jonon	4585826	36687	5645443	39518
1231	2-metoxi-4-vinilfenol	1,82E+08	1459737	67672369	473707
1240	2,4-dekadiénal	7,87E+08	6296171	2,3E+08	1612926
1284	Sziringol	2605586	20845	6624519	46372
1291	α -kuberén	5666107	45329	7428544	52000
1296	Eugenol	1400807	11206	2095385	14668
1326	3-hidroxi-2,2,4-trimetilpentil- izobutánsav-észter	8388420	67107	10014429	70101
1344	β -damaszkon	85860559	686884	52352733	366469
1365	β -elemén	52550685	420405	46889939	328230
1397	Dihidrodehidro- β -jonon	13296957	106376	8621886	60353
1425	transz- α -jonon	25027512	200220	14620290	102342
1432	Kariofillén	9435419	75483	21166915	148168
1467	Dihidropszeudojonon	5,53E+08	4422741	3,67E+08	2570354
1476	2,3-dimetilfenil-izovaleriánsav-észter	20223870	161791	19711028	137977
1522	4-hidroxi- β -jonon	53376155	427009	34451549	241161
1551	β -jonon	3,44E+08	2755859	2,11E+08	1475127
1573	4,5-di-epi-arisztolochén	1,22E+08	972163	1,25E+08	877851
1587	Valencén	44394248	355154	69384234	485690
1600	γ -Gurjunén	31538886	252311	50885647	356200
1610	N-Guanilpirolin	3759345	30075	7169831	50189
1624	8-izopropenil-1,5-dimetil-1,5- ciklodekadién	35339294	282714	53320831	373246
1632	Dodekánsav-metilészter	4955883	39647	1,52E+08	1064625
1656	<i>n</i> -hexadekán	11785585	94285	8020684	56145
1666	Dihidroaktinidiolid	1,02E+08	814884	40408489	282859
1733	Szkvalén	13036584	104293	13398122	93787
1779	Heptadekán	14622006	116976	17152095	120065
1820	Izopropil-laurát	3654814	29239	12297668	86084
1826	1-Heptatriakotanol	5401778	43214	3614438	25301

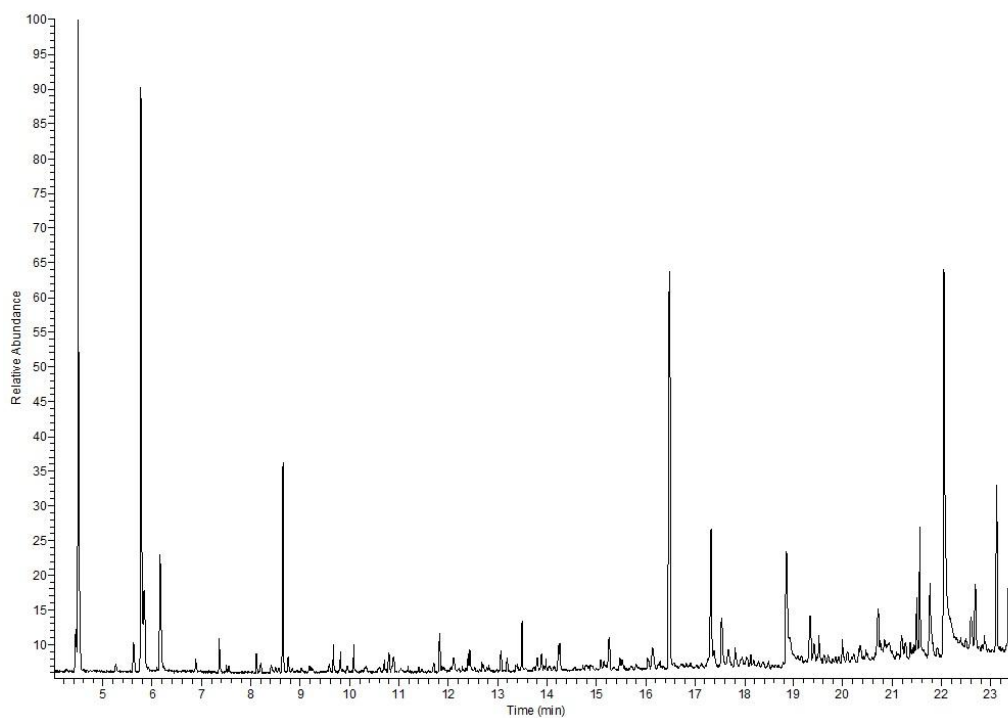
1839	6,11-dimetil-2,6,10-dodekatrién-1-ol	16238521	129908	8546471	59825
1852	1-klórhexadekán	8613598	68909	11102316	77716
1876	Hexilciklopentán	7646927	61175	9315304	65207
1882	2,6-dimetilheptadekán	2024330	16195	2485376	17398
1887	α -eudeszmol	18000297	144002	44753950	313278
1897	3,3,4-trimetil-4-(4-metilfenil)ciklopentanol	5356754	42854	33617203	235320
1920	Ciklooktatetraén	2291835	18335	6183020	43281
1935	2-pentadekanon	34578762	276630	17165522	120159
1943	Norfitán	27850240	222802	18434953	129045
1960	<i>n</i> -pentadekanal	7712765	61702	10634935	74445
1972	Metiltetradekanoát	3,19E+08	2551075	5,64E+08	3948612
2021	Tetradekánsav	9,44E+08	7549725	6,69E+08	4683025
2064	Tetradekánsav-etilészter	13095411	104763	47722547	334058
2084	2,6,10,14-tetrametil-hexadekán	71926787	575414	72828845	509802
2092	Szolavetivon	2449922	19599	2135224	14947
2097	Nootkaton	7027273	56218	6368960	44583
2112	Izopropil-mirisztát	1427195	11418	1247796	8735
2127	Hexahidrofarnesil-aceton	94162439	753300	63585323	445097
2151	Ftálsav-diizobutilészter	18921388	151371	12658131	88607

M8: Uno Rosso és Strombolino friss paradicsomok aromaösszetétele és kromatogramja

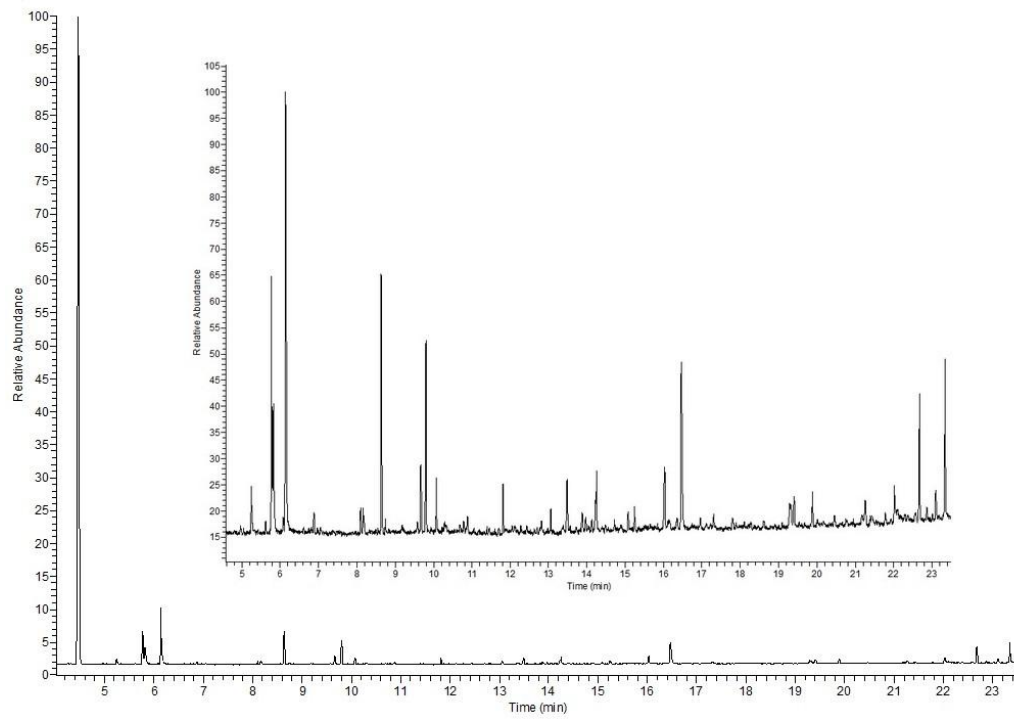
Retenció index	Molekula	Uno Rosso (területegység)	Szórás (n=3)	Strombolino (területegység)	Szórás (n=3)
122	4,4-dimetil-2-pentén	33229295,8	99687,9	0,0	0,0
128	Izovaleronitril	0,0	0,0	1043912,0	46976,0
136	Izopentil alkohol	0,0	0,0	1660712,9	74732,1
172	2-amino-1 <i>H</i> -imidazol-5- karbonsav	4971832,6	14915,5	2146684,3	96600,8
184	2-metilheptán	490999,1	1473,0	5337670,6	240195,2
191	Toluol	0,0	0,0	132145,3	5946,5
200	3-metilheptán	0,0	0,0	10234566,7	460555,5
257	3-hexenal	15330500,5	45991,5	0,0	0,0
261	Hexanal	309391715,9	928175,1	716424948,8	32239122,7
338	Furfural	3768038,5	11304,1	7786538,0	350394,2
374	1-metil-1,2,4-triazol	489198,4	1467,6	193453,2	8705,4
389	<i>transz</i> -2-hexén-1-al	277179633,5	831538,9	33925198,7	1526633,9
396	<i>transz</i> -3-hexén-1-ol	43800722,0	131402,2	20090599,7	904077,0
422	<i>transz</i> -2-hexén-1-ol	0,0	0,0	1895517,6	85298,3
428	1-hexanol	63574923,8	190724,8	62372822,4	2806777,0
501	3-metilhexanal	8366609,7	25099,8	3135958,0	141118,1
549	Metil-kaproát	15341570,6	46024,7	1402754,7	63124,0
563	3-metil-hexenoát	3960978,9	11882,9	398855,3	17948,5
568	3,5-xilenol	2076137,7	6228,4	1068764,9	48094,4
581	5-metil-4-metiloxazol	1158097,9	3474,3	396185,6	17828,4
625	<i>transz</i> -2-heptenal	8756597,0	26269,8	3282311,2	147704,0
629	2-metil-5-formilfurán	0,0	0,0	5088959,7	229003,2
634	Benzaldehid	4967568,2	14902,7	5088959,7	229003,2
655	Valerisav	4767140,6	14301,4	866227,0	38980,2
664	1-heptén-3-on	1533240,9	4599,7	831961,4	37438,3
679	6-metil-5-heptén-2-on	81810696,6	245432,1	32232319,3	1450454,4
689	2- <i>n</i> -pentilfurán	6244755,0	18734,3	2208342,5	99375,4
737	2-propilfurán	1876855,9	5630,6	812455,5	36560,5
773	4-metil-3-ciklohexén-1- karbaldehid	4338530,5	13015,6	2061795,1	92780,8
782	2-izobutiltiazol	11696007,7	35088,0	9827183,8	442223,3
795	Benzénacetaldehid	8401451,2	25204,4	23914907,3	1076170,8
823	<i>transz</i> -2-oktenal	11484792,1	34454,4	7539442,2	339274,9
847	<i>transz</i> -linalool-oxid	3635927,0	10907,8	927926,5	41756,7
871	<i>o</i> -gvajakol	1682926,2	5048,8	407506,5	18337,8
894	β -linalol	6652518,9	19957,6	1422350,1	64005,8
904	2,2-dimetil-3-heptin	8100807,6	24302,4	3537966,8	159208,5

933	Oktánsav-metilészter	2308004,9	6924,0	432052,0	19442,3
985	Kámfor	4289822,2	12869,5	1301385,9	58562,4
997	<i>transz</i> -2-nonén-1-al	13638652,1	40916,0	5756195,7	259028,8
1020	4-(1-hidroxi-1-metiletil)-1-ciklohexen-1-il]-metilacetát	2217834,0	6653,5	906184,3	40778,3
1025	<i>endo</i> -borneol	8075583,8	24226,8	1126300,1	50683,5
1043	<i>m</i> -metilacetofenon	2671043,8	8013,1	1326315,6	59684,2
1054	Metil-szalicilát	5041290,6	15123,9	271949,2	12237,7
1059	α -terpinol	7638585,8	22915,8	1398230,2	62920,4
1069	Dekanal	1118821,2	3356,5	458344,5	20625,5
1084	Verbenon	6772620,3	20317,9	1169015,0	52605,7
1092	<i>p</i> -Ment-1-én-9-al	1145744,7	3437,2	0,0	0,0
1098	Artemiszeol	4695464,1	14086,4	3461214,5	155754,7
1121	<i>cisz</i> -citrál	7614951,5	22844,9	3498352,2	157425,8
1134	(-)-karvon	4694883,6	14084,7	329415,3	14823,7
1151	Nonánsav	3421857,7	10265,6	2067324,8	93029,6
1164	Citrál	19481482,5	58444,4	7918751,2	356343,8
1196	Karvakrol	5709875,9	17129,6	556683,0	25050,7
1202	2,4-dekadiénal	7185095,7	21555,3	2726995,6	122714,8
1229	4-vinilgvajakol	2540150,3	7620,5	1670838,0	75187,7
1238	<i>transz</i> -2- <i>transz</i> -4-dekadiénal	8981833,5	26945,5	11198167,2	503917,5
1241	butilfenol	10580409,4	31741,2	217439,4	9784,8
1288	1-(2-hidroxi-1-metiletil)-2,2-dimetilpropil 2-metilpropanoát	1317565,6	3952,7	2137992,5	96209,7
1293	Eugenol	1693100,2	5079,3	915499,4	41197,5
1324	Izobutánsav-3-hidroxi-2,2,4-trimetilpentil-észter	4560203,1	13680,6	222899,8	10030,5
1341	β -damaszkon	14990055,7	44970,2	4205684,2	189255,8
1362	β -elemen	4987204,7	14961,6	235314,7	10589,2
1367	Tetradekán	5489297,7	16467,9	582009,2	26190,4
1387	1,1-dimetil-4-indánkarbonsav	2538596,1	7615,8	413214,3	18594,6
1395	1-izopropenil-2,3,4,5-tetrametilbenzol	4363838,4	13091,5	1221923,1	54986,5
1429	Kariofillén	13823665,0	41471,0	1805476,0	81246,4
1444	Dihidro- β -jonon	5302056,2	15906,2	1818329,2	81824,8
1463	Dihidropszeudojonon	210218952,4	630656,9	29061957,7	1307788,1
1548	β -jonon	73295334,6	219886,0	2924859,8	131618,7
1570	4,5-di- <i>epi</i> -aristolokén	27313578,3	81940,7	253254,1	11396,4
1583	α -szelinén	13861077,0	41583,2	247586,6	11141,4
1597	3,5-di- <i>terc</i> -butilfenol	13300987,6	39903,0	2194071,5	98733,2
1611	Valencen	7201188,0	21603,6	267717,1	12047,3
1700	Dodekánsav	53040433,0	159121,3	1195122,3	53780,5

1748	Pseudojonon	28028158,6	84084,5	3065094,3	137929,2
1757	Anozol	10359916,4	31079,7	4823085,4	217038,8
1767	Kariofillén oxid	16230892,9	48692,7	800323,5	36014,6
1814	Humulén-1,2-epoxid	12526658,8	37580,0	6755767,3	304009,5
1862	Hedion	8102099,0	24306,3	2112867,3	95079,0
1886	Kubenol	24292220,7	72876,7	1464529,7	65903,8
1934	2-Pentadekanon	17234868,9	51704,6	2064480,4	92901,6
1956	2-cisz-6-transz-farneszal	2752194,7	8256,6	1263005,6	56835,3
1958	1-pentadekanal	3031072,2	9093,2	2243962,8	100978,3
1970	Metil-izomirisztát	59701538,4	179104,6	524940,0	23622,3
1994	<i>transz,transz</i> -2,6-farneszal	0,0	0,0	2089387,1	94022,4
2020	Mirisztidsav	160271758,8	480815,3	5979697,5	269086,4
2083	Fitán	28156923,6	84470,8	17948485,9	807681,9
2126	Hexahidrofarneszil-aceton	71361029,8	214083,1	4596990,1	206864,6



Uno Rosso kromatogramja



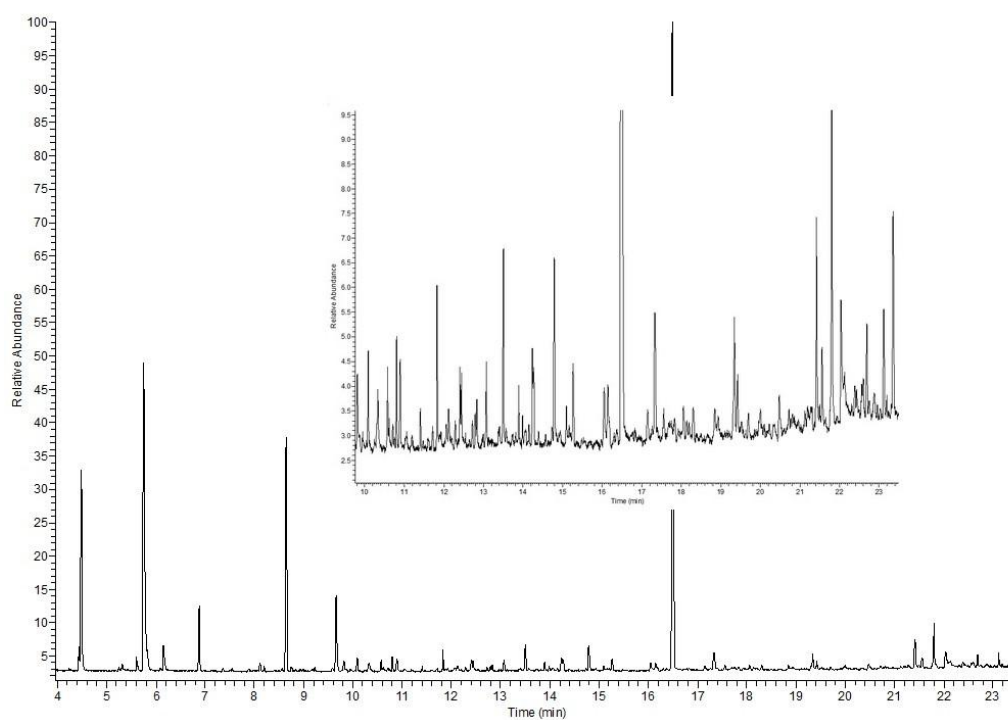
Strombolino kromatogramja

M9: Heirloom Yellow Brandivine és Heirloom Aunt Ruby's paradicsomok
aromaösszetétele és kromatogramja

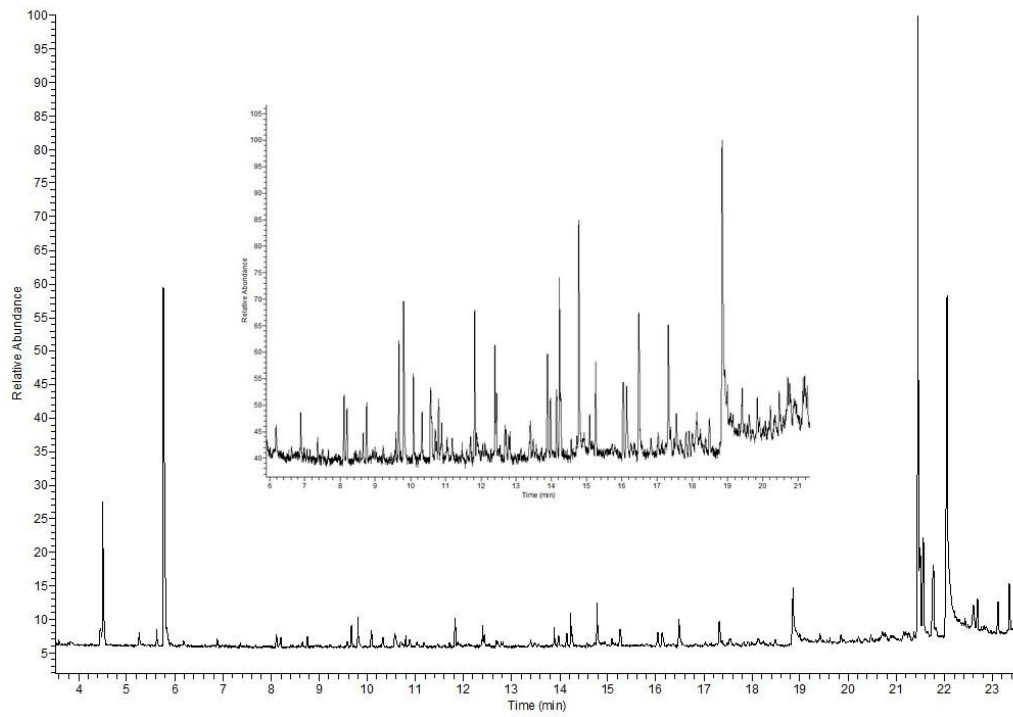
Retenciósi index	Molekula	H. Y. Brandyvine (területegység)	Szórás (n=3)	H. Aunt Ruby's (területegység)	Szórás (n=3)
122	4,4-dimetil-2-pentén	15677221,2	360576,1	8333327,5	133333,2
128	Izovaleronitril	17717913,8	407512,0	990224,4	15843,6
136	Izopentil alkohol	46591521,1	1071605,0	2949917,7	47198,7
172	2-amino-1 <i>H</i> -imidazol-5- karboxilsav	7465290,9	171701,7	2935015,6	46960,3
191	Toluol	18805776,7	432532,9	1872186,3	29955,0
200	3-metilheptán	516812,7	11886,7	0,0	0,0
257	3-hexenal	24497513,9	563442,8	8820863,4	141133,8
261	Hexanal	245059346,7	5636365,0	78112366,5	1249797,9
338	Furfural	3894269,7	89568,2	8149572,2	130393,2
345	Izovalérsav	3894269,7	89568,2	1249731,0	19995,7
374	1-metil-1,2,4-triazol	18540637,3	426434,7	0,0	0,0
389	<i>transz</i> -2-hexén-1-al	768680,2	17679,6	180652490,5	2890439,8
396	<i>transz</i> -3-hexén-1-ol	406048604,2	9339117,9	1377722,4	22043,6
422	<i>transz</i> -2-hexén-1-ol	3420283,0	78666,5	0,0	0,0
428	1-hexanol	31522798,7	725024,4	856417,2	13702,7
501	3-metilhexanal	71654987,1	1648064,7	5278994,2	84463,9
549	Metil-kaproát	4435293,0	102011,7	2756964,3	44111,4
563	3-metil-hexenoát	2250143,3	51753,3	1592114,8	25473,8
568	3,5-xilenol	4038999,6	92897,0	0,0	0,0
581	5-metil-4-metiloxazol	772642,3	17770,8	1856879,9	29710,1
625	<i>transz</i> -2-heptenal	10658506,0	245145,6	5766423,2	92262,8
634	Benzaldehid	7171542,8	164945,5	5510866,1	88173,9
655	Valerisav	1781768,0	40980,7	1228682,9	19658,9
664	1-heptén-3-on	1710992,4	39352,8	455492,8	7287,9
679	6-metil-5-heptén-2-on	233825501,8	5377986,5	2994534,4	47912,6
689	2- <i>n</i> -pentilfurán	4768141,7	109667,3	5395813,1	86333,0
737	2-propilfurán	6957199,7	160015,6	1695057,4	27120,9
773	4-metil-3-ciklohexén-1- karbaldehid	3990154,6	91773,6	3554516,7	56872,3
782	2-izobutiltiazol	81938946,1	1884595,8	10709815,5	171357,0
795	Benzénacetaldehid	12071962,0	277655,1	14589652,6	233434,4
823	<i>transz</i> -2-oktenal	15010534,8	345242,3	8511319,3	136181,1
847	<i>transz</i> -linalool-oxid	12118213,2	278718,9	5287092,6	84593,5
871	<i>o</i> -gvajakol	11971536,9	275345,3	10065419,2	161046,7

894	β -linalool	14031606,5	322726,9	4833445,5	77335,1
904	2,2-dimetil-3-heptin	14819142,1	340840,3	5736304,6	91780,9
933	Oktánsav-metilészter	4324812,2	99470,7	2727894,9	43646,3
985	Kámfor	3718479,2	85525,0	2841901,9	45470,4
997	<i>transz</i> -2-nonén-1-al	21572962,1	496178,1	11541984,8	184671,8
1020	4-(1-hidroxi-1-metiletil)-1-ciklohexén-1-il]-metilacetát	5086414,0	116987,5	1317753,6	21084,1
1025	<i>endo</i> -borneol	6310627,0	145144,4	1423652,2	22778,4
1043	<i>m</i> -metilacetofenon	4656507,6	107099,7	943642,8	15098,3
1054	Metil-szalicilát	10073868,0	231699,0	8303551,0	132856,8
1059	α -terpinol	8551748,6	196690,2	4322982,1	69167,7
1069	Dekanal	1545291,5	35541,7	1251175,9	20018,8
1084	Verbenon	4140252,2	95225,8	2879102,0	46065,6
1092	<i>p</i> -Ment-1-én-9-al	0,0	0,0	4424077,4	70785,2
1098	Artemiszeol	7347532,4	168993,2	2200428,0	35206,8
1121	<i>cisz</i> -citrál	12391788,7	285011,1	985432,1	15766,9
1134	(-)-karvon	0,0	0,0	266743,4	4267,9
1151	Nonánsav	0,0	0,0	4540719,2	72651,5
1164	Citrál	26129438,6	600977,1	1717233,6	27475,7
1196	Karvakrol	1501266,8	34529,1	670379,4	10726,1
1202	2,4-dekadiénal	8553914,2	196740,0	9774986,2	156399,8
1229	4-vinilgvajakol	12738405,2	292983,3	6618130,5	105890,1
1238	<i>transz</i> -2- <i>transz</i> -4-dekadiénal	12738405,2	292983,3	19075236,7	305203,8
1241	butilfenol	11104706,3	255408,2	543509,5	8696,2
1288	1-(2-hidroxi-1-metiletil)-2,2-dimetilpropil 2-metilpropanoát	2114328,0	48629,5	2114328,0	33829,2
1293	Eugenol	28753115,3	661321,7	21451702,2	343227,2
1324	Izobutánsav-3-hidroxi-2,2,4-trimetilpentil-észter	6787186,1	156105,3	4563497,7	73016,0
1341	β -damaszkon	14119065,0	324738,5	9368331,7	149893,3
1362	β -elemen	1999951,4	45998,9	771951,6	12351,2
1367	Tetradekán	3495746,9	80402,2	847300,1	13556,8
1387	1,1-dimetil-4-indanekarbonsav	886547,7	20390,6	1195426,0	19126,8
1395	1-izopropenil-2,3,4,5-tetrametilbenzol	1181267,7	27169,2	1790298,1	28644,8
1429	Kariofillén	13943286,8	320695,6	9844411,5	157510,6
1444	Dihidro- β -jonon	1990001,5	45770,0	266478,2	4263,7
1463	Dihidropszeudojonon	917908628,6	21111898,5	18916561,3	302665,0
1548	β -jonon	24991761,7	574810,5	15446495,4	247143,9
1570	4,5-di- <i>epi</i> -arisztolokén	6567397,8	151050,2	6387503,6	102200,1
1583	α -szelinén	1294745,3	29779,1	1873376,2	29974,0
1597	3,5-di- <i>terc</i> -butilfenol	4536991,1	104350,8	4035625,8	64570,0
1611	Valencen	826502,8	19009,6	3566129,3	57058,1
1700	Dodekánsav	6820760,5	156877,5	34334650,0	549354,4
1748	Pszseudojonon	24162528,4	555738,2	1291525,5	20664,4

1757	Anizol	10402236,4	239251,4	5677163,9	90834,6
1767	Kariofillén oxid	2761337,0	63510,8	1905967,4	30495,5
1814	Humulén-1,2-epoxid	6962984,7	160148,6	817040,9	13072,7
1862	Hedion	11354410,2	261151,4	6748074,8	107969,2
1886	Kubenol	4888784,8	112442,1	6074083,1	97185,3
1934	2-Pentadekanon	3447245,8	79286,7	4629918,4	74078,7
1956	2-cisz-6-transz-farneszal	32478392,1	747003,0	32478392,1	519654,3
1958	1-pentadekanal	32478392,1	747003,0	299603328,6	4793653,3
1970	Metil-izomirisztát	12270052,4	282211,2	45239545,8	723832,7
1994	transz,transz-2,6-farnezal	58123238,8	1336834,5	4716624,8	75466,0
2020	Mirisztidsav	27214648,3	625936,9	192269455,2	3076311,3
2083	Fitán	14520319,0	333967,3	14772279,4	236356,5
2126	Hexahidrofarneszil-aceton	16630001,5	382490,0	16289813,8	260637,0



Heirloom Yellow Brandyvine kromatogrammja



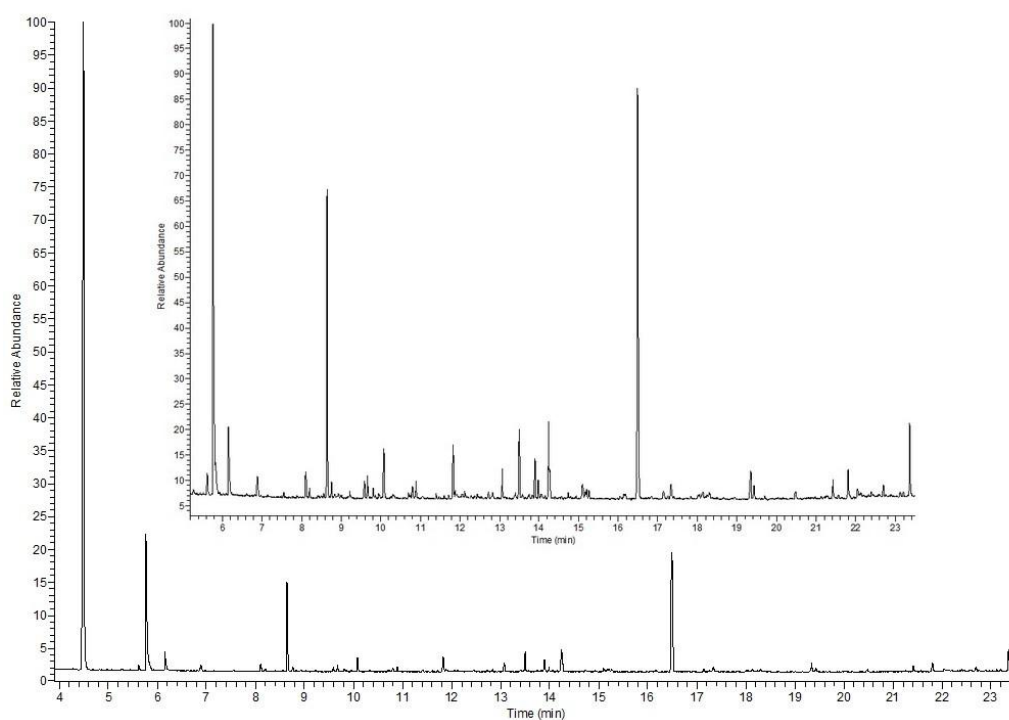
Heirloom Aunt Ruby's kromatogrammja

M10: Heirloom Black of Tula és Heirloom German Johnson aromaösszetétele és kromatogramja

Retenció index	Molekula	Heirloom Black of Tula (területegység)	Szórás (n=3)	Heirloom German Johnson (területegység)	Szórás (n=3)
128	Izovaleronitril	0	0	2433215	4866
136	Izopentil alkohol	3421249	13685	611611	1223
172	2-amino-1 <i>H</i> -imidazol-5-karboxilsav	6133859	24535	5881672	11763
184	2-metilheptán	9941128	39765	10385245	20770
191	Toluol	10253586	41014	0	0
200	3-metilheptán	19075846	76303	20586775	41174
261	Hexanal	1479695106	5918780	1713511877	3427024
338	Furfural	3981179	15925	3834231	7668
345	Izovalérsav	799959	3200	0	0
374	1-metil-1,2,4-triazol	16746228	66985	16683351	33367
389	<i>transz</i> -2-hexen-1-al	316508765	1266035	377779249	755558
396	<i>transz</i> -3-hexen-1-ol	1782238	7129	0	0
422	<i>transz</i> -2-hexen-1-ol	941715	3767	0	0
428	1-hexanol	1014438	4058	52922539	105845
501	3-metilhexanal	9271393	37086	15286443	30573
549	Metil-kaproát	539463	2158	678222	1356
563	3-metil-hexenoát	1069185	4277	984802	1970
568	3,5-xilenol	5975040	23900	4076424	8153
581	5-metil-4-metiloxazol	0	0	889861	1780
625	<i>transz</i> -2-heptenal	18257500	73030	18362602	36725
634	Benzaldehid	4783008	19132	7555621	15111
655	Valerisav	3121755	12487	2487170	4974
664	1-heptén-3-on	996077	3984	1380510	2761
679	6-metil-5-heptén-2-on	224607013	898428	192586068	385172
689	2- <i>n</i> -pentilfurán	14362660	57451	10497906	20996
737	2-propilfurán	6486055	25944	5534814	11070
773	4-metil-3-ciklohexén-1-karbaldehid	10841195	43365	12406812	24814
782	2-izobutiltiazol	10387854	41551	15588520	31177
795	fenilacetaldehid	5458559	21834	7573324	15147
823	<i>transz</i> -2-okténal	35764904	143060	31017733	62035
847	<i>transz</i> -linalool-oxid	6143857	24575	2411094	4822
871	<i>o</i> -gvajakol	6643968	26576	1452677	2905
894	β -linalool	8239340	32957	7911346	15823
904	2,2-dimetil-3-heptin	16176846	64707	13875477	27751

933	Oktánsav-metilészter	1663558	6654	1066439	2133
985	Kámfor	4243432	16974	3222701	6445
997	<i>transz</i> -2-nonén-1-al	37033689	148135	30309758	60620
1020	4-(1-hidroxi-1-metiletil)-1-ciklohexen-1-il]-metilacetát	3706491	14826	3395069	6790
1025	<i>endo</i> -borneol	5367327	21469	4760868	9522
1043	<i>m</i> -metilacetofenon	2520340	10081	2651006	5302
1054	Metil-szalicilát	2816010	11264	1566129	3132
1059	α -terpinol	3657415	14630	3986137	7972
1069	Dekanal	840520	3362	2067272	4135
1084	Verbenon	4911051	19644	4979265	9959
1092	<i>p</i> -Ment-1-én-9-al	2441449	9766	888662	1777
1098	Artemiszeol	4058418	16234	5432232	10864
1121	<i>cisz</i> -citrál	21109702	84439	19367746	38735
1134	(-)-karvon	1092109	4368	0	0
1151	Nonánsav	1040917	4164	6086828	12174
1164	Citrál	45276667	181107	42194235	84388
1196	Karvakrol	1971885	7888	2934122	5868
1202	2,4-dekadiénal	26301812	105207	24929720	49859
1229	4-vinilgvajakol	3232825	12931	2788008	5576
1238	<i>transz</i> -2- <i>transz</i> -4-dekadiénal	65749171	262997	62700996	125402
1288	1-(2-hidroxi-1-metiletil)-2,2-dimetilpropil 2-metilpropanoát	2299384	9198	5054555	10109
1293	Eugenol	24730606	98922	2699144	5398
1324	Izobutánsav-3-hidroxi-2,2,4-trimetilpentil-észter	9771542	39086	10968329	21937
1341	β -damaszkon	9571018	38284	6055192	12110
1362	β -elemén	1102044	4408	591795	1184
1367	Tetradekán	1902935	7612	1344703	2689
1387	1,1-dimetil-4-indánkarbonsav	788763	3155	0	0
1395	1-izopropenil-2,3,4,5-tetrametilbenzol	1839468	7358	2025327	4051
1429	Kariofillén	11069327	44277	3708375	7417
1444	Dihidro- β -jonon	1130135	4521	1171126	2342
1463	Dihidropszeudojonon	92975570	371902	355621144	711242
1548	β -jonon	17512466	70050	14605116	29210
1570	4,5-di-epi-arisztolokén	4503338	18013	1373511	2747
1583	α -szelinén	2418915	9676	670545	1341

1597	3,5-di- <i>terc</i> -butilfenol	3246445	12986	2690348	5381
1611	Valencen	2199881	8800	3408695	6817
1700	Dodekánsav	14741835	58967	792709	1585
1748	Pszseudojonon	19112223	76449	23917354	47835
1757	Anozol	10067492	40270	10825816	21652
1767	Kariofillén oxid	699577	2798	1196574	2393
1814	Humulén-1,2-epoxid	1182722	4731	2802896	5606
1862	Hedion	6822754	27291	6722069	13444
1886	Kubenol	1387699	5551	0	0
1934	2-Pentadekanon	2790391	11162	928313	1857
1956	2- <i>cisz</i> -6- <i>transz</i> -farnezal	3030475	12122	14740597	29481
1958	1-pentadekanal	2341556	9366	14740597	29481
1970	Metil-izomirisztát	0	0	2731927	5464
1994	<i>transz,transz</i> -2,6-farnezal	21824266	87297	24264929	48530
2020	Mirisztidsav	75490798	301963	9619175	19238
2083	Fitán	10393485	41574	8776675	17553
2126	Hexahidrofarneszil-aceton	10413415	41654	3911593	7823

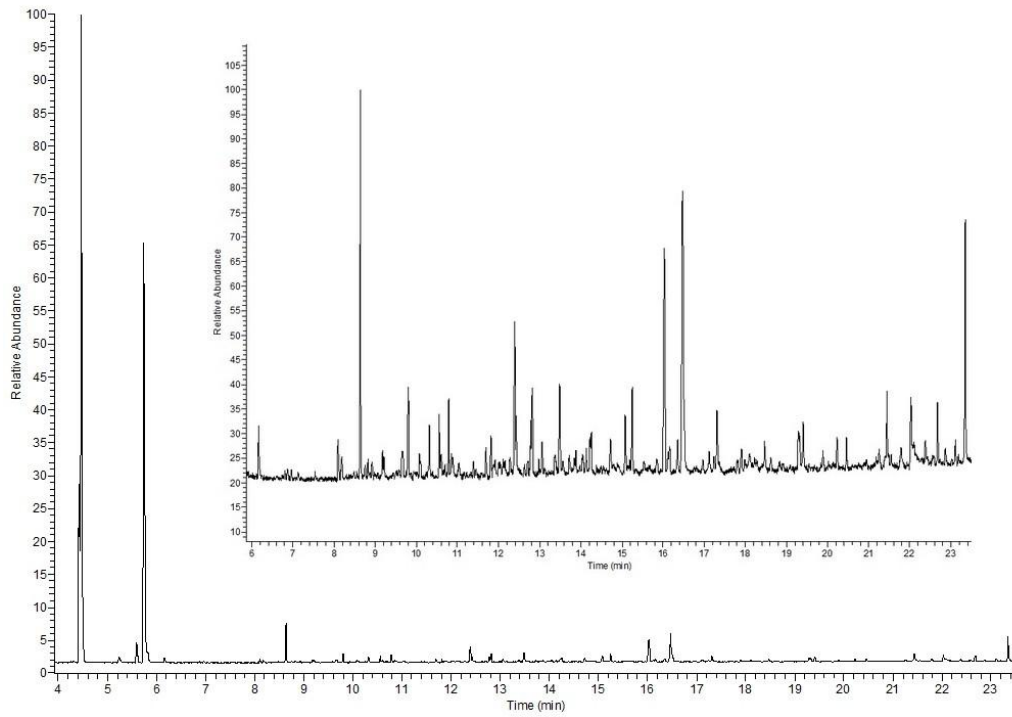


Heirloom German Johnson kromatogrammja

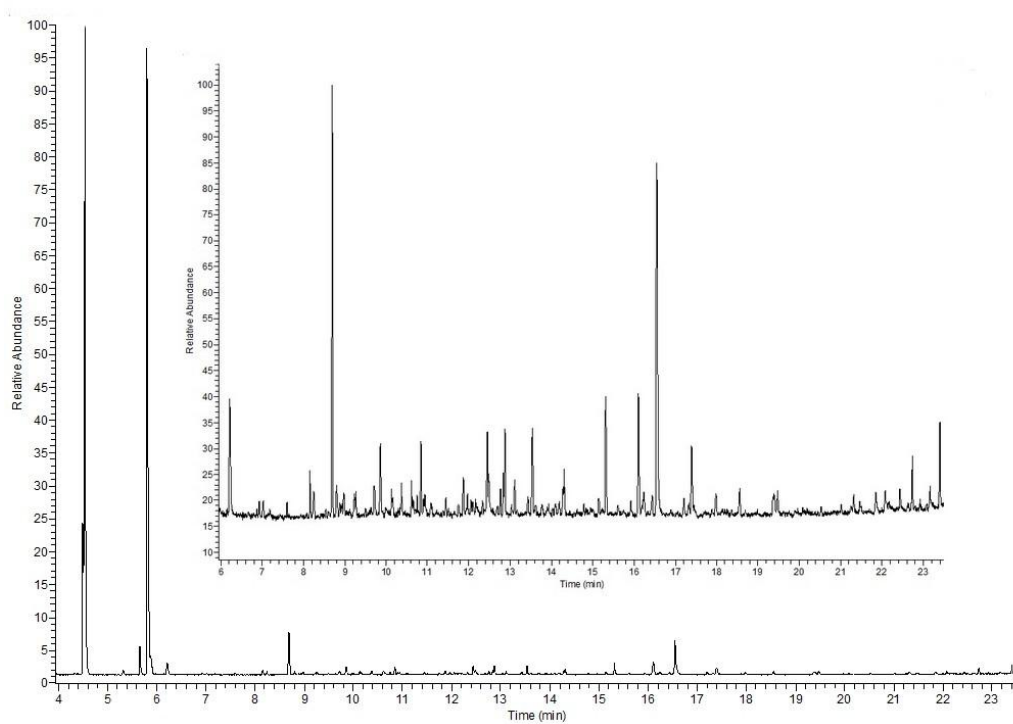
M11: Valenciai és Andalúz paradicsomok aromaösszetétele és kromatogramja

Retenciószám	Molekula	Valencia (területegység)	Szórás (n=3)	Andalúzia (területegység)	Szórás (n=3)
172	2-amino-1H-imidazol-5-karboxilsav	5140236,9	35981,7	0,0	0,0
184	2-metilheptán	5391212,7	37738,5	7956083,6	55692,6
191	Toluol	0,0	0,0	4728130,8	33096,9
200	3-metilheptán	11024265,3	77169,9	10689445,8	74826,1
257	3-hexenal	173840738,8	1216885,2	158303951,4	1108127,7
261	Hexanal	841175526,1	5888228,7	905815591,2	6340709,1
338	Furfural	8355074,3	58485,5	7068954,8	49482,7
374	1-metil-1,2,4-triazol	24291151,6	170038,1	36367226,5	254570,6
389	transz-2-hexén-1-al	499551709,3	3496862,0	809144418,3	5664010,9
396	transz-3-hexén-1-ol	3446195,4	24123,4	5179620,3	36257,3
428	1-hexanol	6890794,8	48235,6	15007751,7	105054,3
625	transz-2-hepténal	4727573,7	33093,0	5275178,9	36926,3
634	Benzaldehid	3200531,8	22403,7	4309376,9	30165,6
679	6-metil-5-heptén-2-on	39831844,1	278822,9	46476394,7	325334,8
689	2-n-pentilfurán	2347297,6	16431,1	3934320,6	27540,2
737	2-propilfurán	2107837,9	14754,9	3192450,7	22347,2
782	2-izobutiltiazol	4628914,0	32402,4	4534028,3	31738,2
795	Benzénacetaldehid	10262154,7	71835,1	8849819,6	61948,7
823	transz-2-oktenal	2221151,9	15548,1	1942893,6	13600,3
847	transz-linalool-oxid	6105454,5	42738,2	4710544,6	32973,8
871	o-gvajakol	7082034,9	49574,2	4152191,3	29065,3
894	β-linalool	7693021,2	53851,1	7600664,1	53204,6
904	2,2-dimetil-3-heptin	2480885,9	17366,2	3052146,8	21365,0
985	Kámfor	3847920,2	26935,4	1938279,9	13568,0
997	transz-2-nonén-1-al	4475469,8	31328,3	4024671,6	28172,7
1020	4-(1-hidroxi-1-metiletil)-1-ciklohexen-1-ol]-metilacetát	0,0	0,0	1988514,8	13919,6
1025	endo-borneol	2500837,3	17505,9	2472864,0	17310,0
1043	m-metilacetofenon	2085528,9	14598,7	0,0	0,0
1054	Metil-szalicilát	14880512,5	104163,6	8221182,5	57548,3
1059	α-terpinol	4805320,6	33637,2	3709519,9	25966,6
1084	Verbenon	1983654,4	13885,6	3380502,9	23663,5
1092	p-Ment-1-en-9-al	4954121,5	34678,9	4012138,2	28085,0
1098	Artemiszeol	9430797,8	66015,6	9839011,2	68873,1
1121	cisz-citrál	5320302,2	37242,1	1895808,0	13270,7
1151	Nonánsav	4073167,9	28512,2	2868633,2	20080,4
1164	Citrál	9822733,0	68759,1	10661227,4	74628,6
1202	2,4-dekadiénal	2439869,0	17079,1	0,0	0,0
1229	4-vinilgvajakol	2961284,2	20729,0	2214753,9	15503,3

1238	<i>transz-2-transz-4-</i> dekadiénal	3098056,6	21686,4	2599666,2	18197,7
1241	butilfenol	4235945,7	29651,6	5273894,2	36917,3
1288	1-(2-hidroxi-1-metiletil)- 2,2-dimetilpropil 2- metilpropanoát	5025072,4	35175,5	0,0	0,0
1293	Eugenol	1844783,4	12913,5	0,0	0,0
1324	Izobutánsav-3-hidroxi- 2,2,4-trimetilpentil-észter	7255851,7	50791,0	2477285,0	17341,0
1341	β -damaszkon	11026015,9	77182,1	15207759,1	106454,3
1367	Tetradekán	1692876,5	11850,1	0,0	0,0
1395	1-izopropenil-2,3,4,5- tetrametilbenzol	2719394,8	19035,8	0,0	0,0
1429	Kariofillén	4589702,1	32127,9	3965404,2	27757,8
1444	Dihidro- β -jonon	4926450,8	34485,2	3460647,1	24224,5
1463	Dihidropszeudojonon	45241405,5	316689,8	53363998,9	373548,0
1548	β -jonon	9487505,6	66412,5	10641497,0	74490,5
1597	3,5-di- <i>terc</i> -butilfenol	2504609,7	17532,3	0,0	0,0
1611	Valencen	0,0	0,0	3719623,3	26037,4
1700	Dodekánsav	1826139,1	12783,0	0,0	0,0
1748	Pszeudojonon	3978735,1	27851,1	5179463,2	36256,2
1757	Anizol	6351258,2	44458,8	3674370,2	25720,6
1814	Humulén-1,2-epoxid	3523499,5	24664,5	0,0	0,0
1862	Hedion	4607127,0	32249,9	0,0	0,0
1934	2-Pentadekanon	3829876,9	26809,1	0,0	0,0
1956	2- <i>cisz</i> -6- <i>transz</i> -farneszal	0,0	0,0	2028753,1	14201,3
1958	1-pentadekanal	11483500,8	80384,5	0,0	0,0
1994	<i>transz,transz</i> -2,6-farneszal	4659323,3	32615,3	3747630,6	26233,4
2020	Mirisztidsav	0,0	0,0	3318393,2	23228,8
2083	Fitán	7764880,7	54354,2	6502337,4	45516,4
2126	Hexahidrofarneszil-aceton	3743427,8	26204,0	4178763,0	29251,3



Andalúz paradicsom kromatogramja



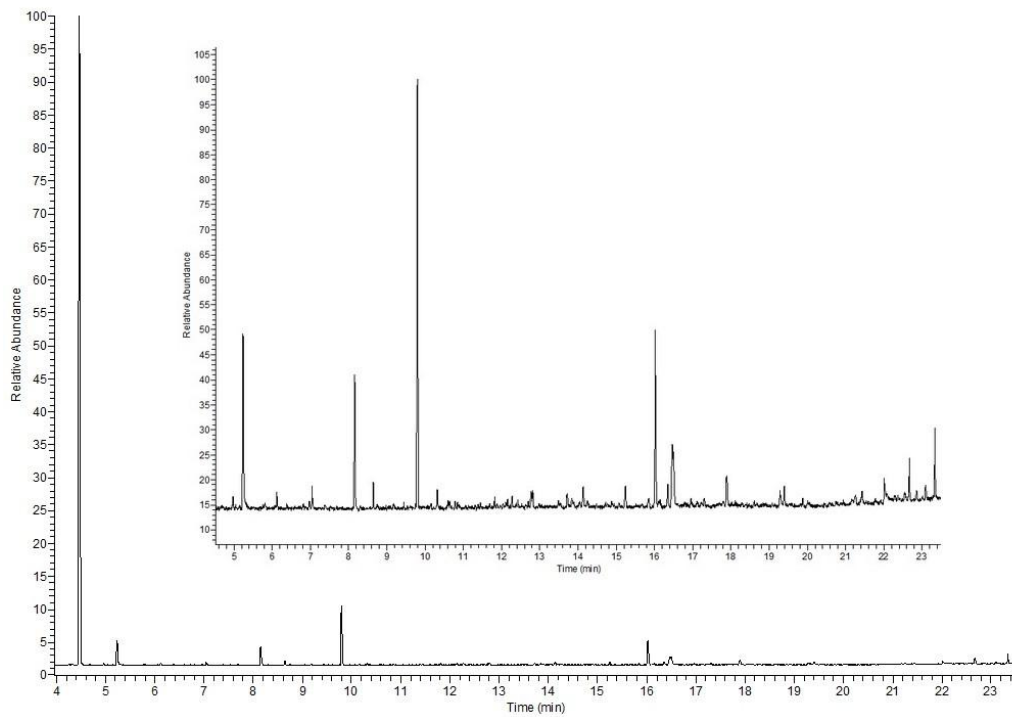
Valenciai paradicsom kromatogramja

M12: Aranyfácán és Kecskeméti paradicsompüré aromaösszetétele és kromatogramja

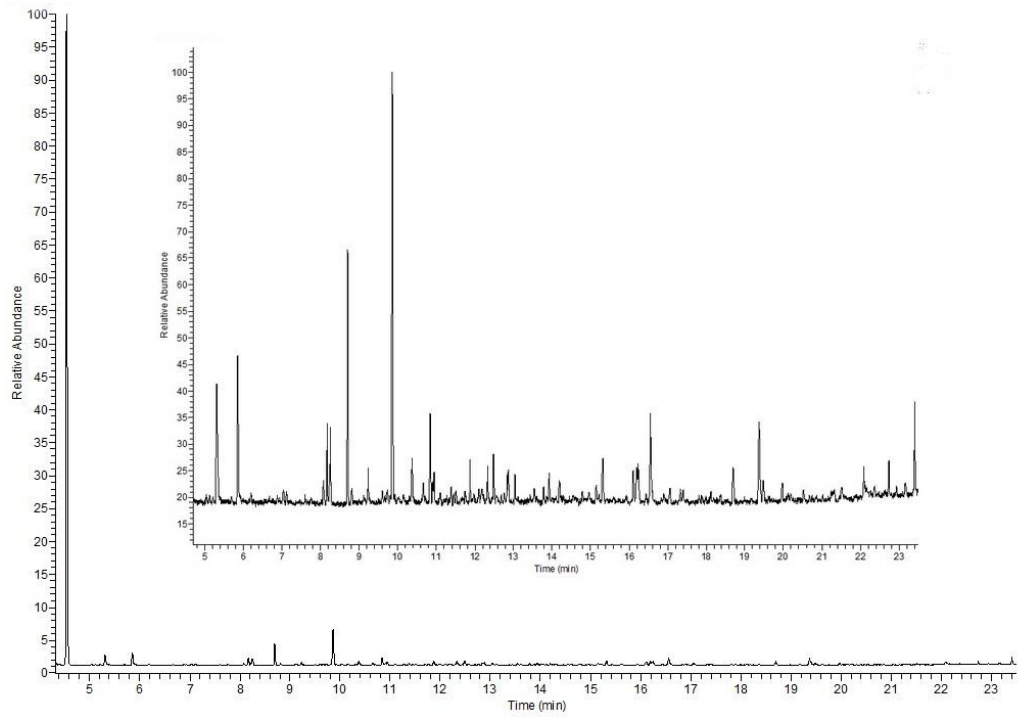
Retenció index	Molekula	Aranyfácán (tömeg egység)	Szórás (n=3)	Kecskeméti (tömeg egység)	Szórás (n=3)
136	Izopentil-alkohol	202834,7	1825,5	0,0	0,0
172	2-amino-1H- imidazol-5- karbonsav	502347,3	4521,1	0,0	0,0
184	2-metilheptán	6551072,9	58959,7	0,0	0,0
191	Toluol	6551072,9	58959,7	7089601,3	35448,0
200	3-metilheptán	11063667,8	99573,0	1320298,6	6601,5
257	3-hexénal	0,0	0,0	2633568,1	13167,8
261	Hexanal	758664879,8	6827983,9	0,0	0,0
338	Furfural	31462390,2	283161,5	0,0	0,0
345	Izovaletriánsav	312240,1	2810,2	15269051,9	76345,3
374	1-metil-1,2,4-triazol	248520,5	2236,7	0,0	0,0
389	transz-2-hexén-1-al	546108,4	4915,0	0,0	0,0
396	transz-3-hexén-1-ol	1519745,2	13677,7	16534623,6	82673,1
422	transz-2-hexén-1-ol	658179,5	5923,6	0,0	0,0
428	1-hexanol	2946929,7	26522,4	1666115,6	8330,6
501	3-metilhexanal	624550,9	5621,0	1095780,1	5478,9
549	Metil-kaproát	968801,0	8719,2	0,0	0,0
563	3-metil-hexenoát	358066,9	3222,6	0,0	0,0
568	3,5-xilenol	996196,5	8965,8	0,0	0,0
581	5-metil-4- metiloxazol	211408,7	1902,7	0,0	0,0
625	transz-2-hepténal	383075,3	3447,7	2598404,4	12992,0
629	2-metil-5-förmilfurán	20853230,5	187679,1	7498158,8	37490,8
679	6-metil-5-heptén-2- on	3952801,7	35575,2	0,0	0,0
689	2-n-pentilfurán	1039578,1	9356,2	0,0	0,0
737	2-propilfurán	0,0	0,0	4580719,0	22903,6
773	4-metil-3- ciklohexén-1- karbaldehid	0,0	0,0	1377696,3	6888,5
795	Fenilacetaldehid	61757538,3	555817,8	0,0	0,0
823	transz-2-okténal	1303540,0	11731,9	1882057,6	9410,3
847	transz-linalool-oxid	0,0	0,0	5285344,8	26426,7
894	β-linalool	0,0	0,0	8451559,6	42257,8
904	2,2-dimetil-3-heptin	0,0	0,0	2221200,5	11106,0
985	Kámfor	1057252,7	9515,3	1072067,4	5360,3
997	transz-2-nonén-1-al	1813434,3	16320,9	4108102,5	20540,5
1020	4-(1-hidroxi-1- metiletil)-1-	780285,4	7022,6	0,0	0,0

ciklohexen1-il]- metilacetát					
1025	endo-borneol	1042070,7	9378,6	1709970,3	8549,9
1043	m-metilacetofenon	2254283,5	20288,6	4807653,7	24038,3
1054	Metil-szalicilát	1164024,2	10476,2	0,0	0,0
1059	α -terpinol	0,0	0,0	5932110,3	29660,6
1069	Dekanal	0,0	0,0	1449213,1	7246,1
1084	Verbenon	1099547,9	9895,9	0,0	0,0
1092	p-Ment-1-én-9-al	2192049,8	19728,4	0,0	0,0
1098	Artemiszeol	0,0	0,0	2366691,1	11833,5
1121	cisz-citrál	0,0	0,0	3062619,4	15313,1
1164	Citrál	1251828,5	11266,5	1512106,6	7560,5
1196	Karvakrol	1959966,8	17639,7	0,0	0,0
1202	2,4-dekadiénal	894026,7	8046,2	0,0	0,0
1229	4-vinilgvajakol	3441082,3	30969,7	2551871,3	12759,4
1238	transz-2-transz-4- dekadiénal	1241638,8	11174,7	0,0	0,0
1288	1-(2-hidroxi-1- metiletil)-2,2- dimetilpropil 2- metilpropanoát	985414,3	8868,7	0,0	0,0
1293	Eugenol	0,0	0,0	1445796,2	7229,0
1324	Izobutánsav-3- hidroxi-2,2,4- trimetilpentil-észter	0,0	0,0	2328221,5	11641,1
1341	β -damaszkon	3864799,2	34783,2	1432550,8	7162,8
1395	1-izopropenil- 2,3,4,5- tetrametilbenzol	2012852,6	18115,7	0,0	0,0
1429	Kariofillén	2670501,3	24034,5	3885769,7	19428,8
1444	Dihidro- β -jonon	5839084,3	52551,8	4738660,8	23693,3
1463	Dihidropszeudojonon	7369908,3	66329,2	2193460,6	10967,3
1548	β -jonon	2220497,2	19984,5	1462704,9	7313,5
1570	4,5-di-epi- arisztolokén	804187,0	7237,7	0,0	0,0
1597	3,5-di-t-butilfenol	6764899,3	60884,1	1231573,2	6157,9
1611	Valencen	0,0	0,0	1113462,1	5567,3
1700	Dodekánsav	0,0	0,0	1226387,5	6131,9
1748	Pszeudojonon	0,0	0,0	12593934,1	62969,7
1757	Anizol	3680077,6	33120,7	3409625,8	17048,1
1767	Kariofillén oxid	827149,6	7444,3	0,0	0,0
1814	Humulén-1,2-epoxid	1672441,1	15052,0	2433972,2	12169,9
1862	Hedion	897642,5	8078,8	1937452,4	9687,3
1886	Kubenol	818678,1	7368,1	1131279,3	5656,4
1934	2-Pentadekanon	0,0	0,0	1234947,2	6174,7

1958	1-pentadekanal	2460048,6	22140,4	0,0	0,0
2020	Mirisztidsav	0,0	0,0	5332649,9	26663,2
2083	Fitán	7059122,5	63532,1	3948966,0	19744,8
2126	Hexahidrofarnesil- aceton	2768108,9	24913,0	2249233,4	11246,2



Aranyfácán paradicsompüré kromatogramja

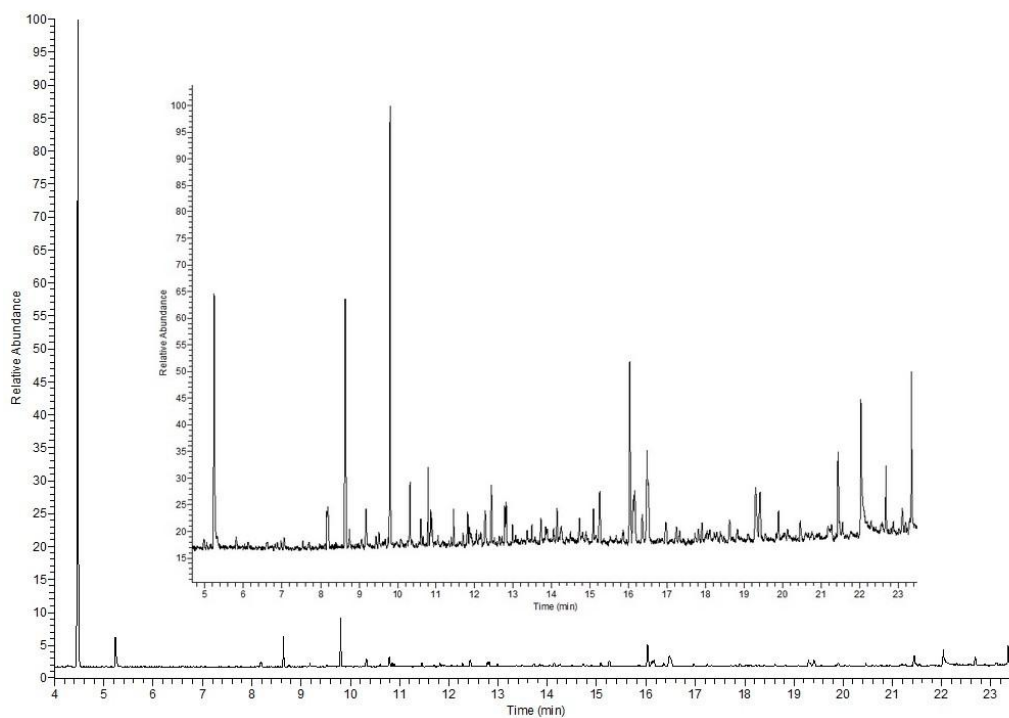


Kecske-méti paradicsompüré kromatogramja

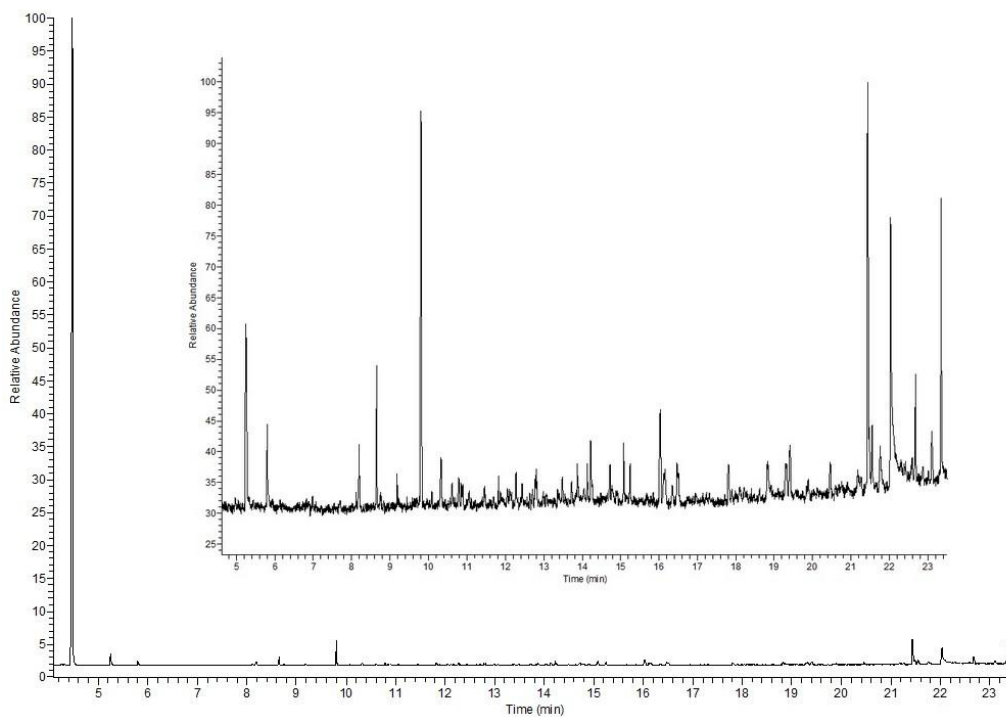
M13: Pármai és Toszkán paradicsompüré aromaösszetétele és kromatogramja

Retenció index	Molekula	Toscana (területegység)	Szórás (n=3)	Parma (területegység)	Szórás (n=3)
172	2-amino-1 <i>H</i> -imidazol-5- karboxilsav	780488,1	4682,9	0,0	0,0
184	2-metilheptán	6099097,2	36594,6	6500703,5	58506,3
191	Toluol	1453119,4	8718,7	0,0	0,0
200	3-metilheptán	10467152,3	62802,9	11900286,9	107102,6
261	Hexanal	707376430,8	4244258,6	819374690,2	7374372,2
338	Furfural	14465739,7	86794,4	42603878,2	383434,9
389	<i>transz</i> -2-hexén-1-al	5876954,7	35261,7	0,0	0,0
396	<i>transz</i> -3-hexén-1-ol	0,0	0,0	2087873,8	18790,9
428	1-hexanol	1355468,6	8132,8		0,0
501	3-metilhexanal	1864756,5	11188,5	1400071,0	12600,6
568	3,5-xilenol	945358,0	5672,1	1350288,4	12152,6
581	5-metil-4-metiloxazol	0,0	0,0	1987768,9	17889,9
625	<i>transz</i> -2-hepténal	932894,0	5597,4	0,0	0,0
629	2-metil-5-formilfurán	0,0	0,0	4766113,7	42895,0
634	Benzaldehid	5391210,5	32347,3	5953945,6	53585,5
679	6-metil-5-heptén-2-on	8587289,9	51523,7	33404109,3	300637,0
689	2- <i>n</i> -pentilfurán	1518536,9	9111,2	3613266,1	32519,4
782	2-izobutiltiazol	0,0	0,0	1285970,6	11573,7
795	Fenilacetaldehid	24309958,8	145859,8	61021923,8	549197,3
823	<i>transz</i> -2-okténal	1130175,0	6781,1	1691995,9	15228,0
847	<i>transz</i> -linalool-oxid	3458026,8	20748,2	9719687,7	87477,2
894	β -linalool	1728516,3	10371,1	9833439,0	88501,0
904	2,2-dimetil-3-heptin	1691242,2	10147,5	3986990,9	35882,9
985	Kámfor	882285,6	5293,7	2299733,6	20697,6
997	<i>transz</i> -2-nonén-1-al	2031661,6	12190,0	4071748,9	36645,7
1020	4-(1-hidroxi-1-metiletil)- 1-ciklohexén-1-il]- metilacetát	1082014,0	6492,1	2582289,1	23240,6
1025	<i>endo</i> -borneol	1239453,3	7436,7	1852042,4	16668,4
1043	<i>m</i> -metilacetofenon	2645617,2	15873,7	6065049,3	54585,4
1054	Metil-szalicilát	1013808,3	6082,8	8747433,3	78726,9
1059	α -terpinol	1926176,8	11557,1	0,0	0,0
1084	Verbenon	1876230,5	11257,4	1719862,2	15478,8
1092	<i>p</i> -Ment-1-én-9-al	2063570,1	12381,4	4890184,8	44011,7
1098	Artemiszeol	2195578,2	13173,5	5460691,8	49146,2
1121	<i>cisz</i> -citrál	900067,6	5400,4	0,0	0,0
1151	Nonánsav	1976193,2	11857,2	2471514,9	22243,6
1164	Citrál	1748849,1	10493,1	2787336,2	25086,0
1202	2,4-dekadiénal	2474371,2	14846,2	1847488,6	16627,4

1229	4-vinilgvajakol	2579373,8	15476,2	4822091,3	43398,8
1238	<i>transz</i> -2- <i>transz</i> -4-dekadiénal	4792412,3	28754,5	2300238,6	20702,1
1241	butilfenol	0,0	0,0	2452145,5	22069,3
1288	1-(2-hidroxi-1-metiletil)-2,2-dimetilpropil 2-metilpropanoát	2410331,7	14462,0	3401710,5	30615,4
1293	Eugenol	1641859,3	9851,2	1889354,1	17004,2
1324	Izobutánsav-3-hidroxi-2,2,4-trimetilpentil-észter	0,0	0,0	5817552,4	52358,0
1341	β -damaszkon	3203958,0	19223,7	0,0	0,0
1367	Tetradekán	800491,1	4802,9	1990355,4	17913,2
1395	1-izopropenil-2,3,4,5-tetrametilbenzol	1089199,0	6535,2	0,0	0,0
1429	Kariofillén	2922055,1	17532,3	9242955,2	83186,6
1444	Dihidro- β -jonon	2144719,1	12868,3	0,0	0,0
1463	Dihidropszeudojonon	5171390,5	31028,3	23322689,2	209904,2
1548	β -jonon	1134461,0	6806,8	2592100,6	23328,9
1570	4,5-di-epi-arisztolokén	0,0	0,0	1325713,6	11931,4
1597	3,5-di- <i>terc</i> -butilfenol	3651316,0	21907,9	2913380,5	26220,4
1611	Valencen	1545396,3	9272,4	0,0	0,0
1700	Dodekánsav	3492508,9	20955,1	0,0	0,0
1748	Pszeudojonon	3233515,9	19401,1	12279821,2	110518,4
1757	Anizol	4195136,2	25170,8	8750504,1	78754,5
1767	Kariofillén oxid	1166263,3	6997,6	1423358,2	12810,2
1814	Humulén-1,2-epoxid	0,0	0,0	5482044,5	49338,4
1862	Hedion	3232829,4	19397,0	3839832,9	34558,5
1886	Kubenol	1409629,8	8457,8	0,0	0,0
1934	2-Pentadekanon	1296780,7	7780,7	2440727,1	21966,5
1956	2- <i>cisz</i> -6- <i>transz</i> -farnezal	0,0	0,0	0,0	0,0
1958	1-pentadekanal	25448849,2	152693,1	14582016,7	131238,2
1970	Metil-izomirisztát	4678651,2	28071,9	2510510,3	22594,6
1994	<i>transz</i> , <i>transz</i> -2,6-farnezal	0,0	0,0	2355154,4	21196,4
2020	Mirisztidsav	0,0	0,0	28663666,5	257973,0
2083	Fitán	7323969,2	43943,8	10432102,7	93888,9
2126	Hexahidrofarneszil-aceton	4225843,9	25355,1	4657092,5	41913,8



Pármai paradicsompüré kromatogramja

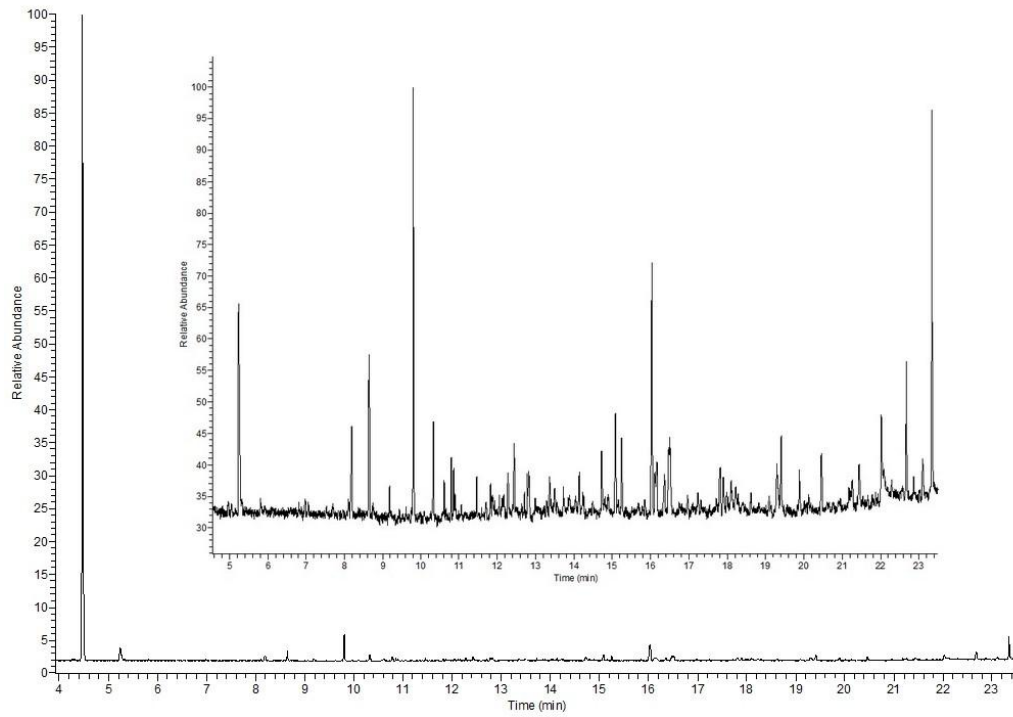


Toszán paradicsompüré kromatogramja

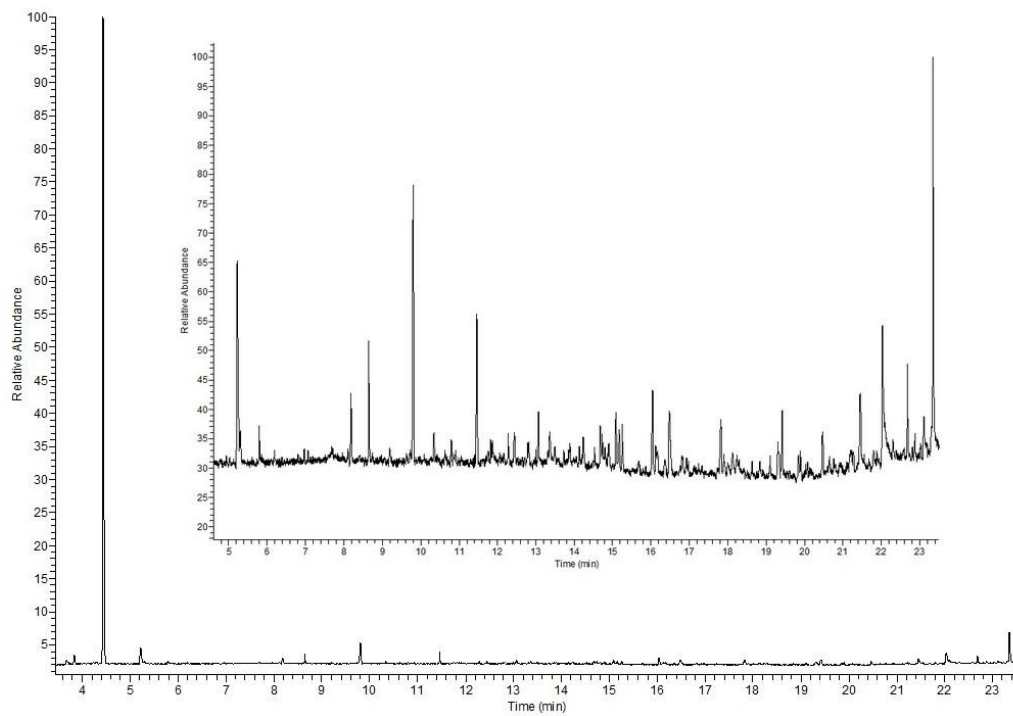
M14: Amiko (Olasz) és Szerb paradicsom ivólé aromaösszetétele és kromatogramja

Retenciós index	Molekula	Amiko (Olasz) (területegység)	Szórás (n=3)	Szerbia (területegység)	Szórás (n=3)
128	Izovaleronitril	0	0	1105240,833	7736,685831
184	2-metilheptán	6139441,151	24557,7646	7006450,118	49045,15083
191	Toluol	997352,587	3989,410348	0	0
200	3-metilheptán	10272074,77	41088,29907	11854467,83	82981,27481
261	Hexanal	730725687,4	2922902,75	828168392,2	5797178,746
338	Furfural	17345665,13	69382,66051	22122385,91	154856,7013
345	Izovalérsav	0	0	2236680,74	15656,76518
396	<i>transz</i> -3-hexén-1-ol	1582925,847	6331,703388	1214550,522	8501,853654
428	1-hexanol	1004674,755	4018,69902	2137451,292	14962,15904
501	3-metilhexanal	954301,689	3817,206756	0	0
568	3,5-xilenol	1204955,329	4819,821316	0	0
581	5-metil-4-metiloxazol		0	2067980,102	14475,86071
625	<i>transz</i> -2-hepténal	1506403,282	6025,613128	2266586,543	15866,1058
634	Benzaldehid	7542805,518	30171,22207	8492530,126	59447,71088
655	Valerisav	1049176,645	4196,70658	0	0
679	6-metil-5-heptén-2-on	10109142,42	40436,56968	11210021,02	78470,14717
782	2-izobutiltiazol	0	0	1420231,085	9941,617595
795	fenilacetaldehyd	26508745,8	106034,9832	25383089,5	177681,6265
823	<i>transz</i> -2-okténal	1177031,318	4708,125272	1390091,185	9730,638295
847	<i>transz</i> -linalool-oxid	6508568,228	26034,27291	2313159,352	16192,11546
894	β -linalool	3850170,802	15400,68321	2888642,856	20220,49999
904	2,2-dimetil-3-heptin	1676643,551	6706,574204	1734542,115	12141,79481
985	Kámfor	1215192,261	4860,769044	1185768,045	8300,376315
997	<i>transz</i> -2-nonén-1-al	1737841,905	6951,36762	2111944,685	14783,6128
1020	4-(1-hidroxi-1-metiletil)-1-ciklohexén-1-il]-metilacetát	1451053,411	5804,213644	1431404,108	10019,82876
1025	<i>endo</i> -borneol	1446938,52	5787,75408	0	0
1043	m-metilacetofenon	3673782,512	14695,13005	3010236,055	21071,65239
1054	Metil-szalicilát	4264082,891	17056,33156	0	0
1059	α -terpinol	0	0	4614554,08	32301,87856
1084	Verbenon	1706351,397	6825,405588	1150070,053	8050,490371
1092	<i>p</i> -Ment-1-én-9-al	2474498,365	9897,99346	2080341,848	14562,39294
1098	Artemiszeol	2566549,61	10266,19844	2098194,318	14687,36023
1121	<i>cisz</i> -citral		0	6815372,816	47707,60971
1151	Nonánsav	3102363,683	12409,45473	3978038,694	27846,27086
1164	Citral	2198695,464	8794,781856	1879660,019	13157,62013
1196	Karvakrol	950182,893	3800,731572	1215130,174	8505,911218
1202	2,4-dekadiénal	1383983,151	5535,932604	1937953,424	13565,67397
1229	4-vinilgvajakol	2529732,78	10118,93112	1681817,699	11772,72389

1238	<i>transz-2-transz-4-</i> dekadiénal	1990938,271	7963,753084	3535639,687	24749,47781
1241	butilfenol	1172281,777	4689,127108	0	0
1288	1-(2-hidroxi-1-metiletil)- 2,2-dimetilpropil 2- metilpropanoát	4602485,284	18409,94114	4068258,787	28477,81151
1293	Eugenol	0	0	2470429,007	17293,00305
1324	Izobutánsav-3-hidroxi- 2,2,4-trimetilpentil-észter	7229011,739	28916,04696	6365913,885	44561,3972
1341	β -damaszkon	5937567,867	23750,27147	5351957,419	37463,70193
1367	Tetradekán	0	0	1100758,426	7705,308982
1429	Kariofillén	20508198,28	82032,79311	3107994,142	21755,95899
1463	Dihidropszeudojonon	4426811,709	17707,24684	10200096,84	71400,67787
1548	β -jonon	1293080,797	5172,323188	1263205,074	8842,435518
1570	4,5-di-epi-arisztolokén	978409,772	3913,639088	0	0
1597	3,5-di- <i>terc</i> -butilfenol	5249423,525	20997,6941	7195359,065	50367,51346
1611	Valencen	1677982,645	6711,93058	1336514,962	9355,604734
1700	Dodekánsav	0	0	2227844,821	15594,91375
1748	Pszeudojonon	5652254,407	22609,01763	6550999,591	45856,99714
1757	Anizol	6323370,34	25293,48136	7899942,808	55299,59966
1814	Humulén-1,2-epoxid	0	0	3546204,159	24823,42911
1862	Hedion	4652966,132	18611,86453	4704633,874	32932,43712
1886	Kubenol	0	0	1734286,968	12140,00878
1934	2-Pentadekanon	1221860,734	4887,442936	2720243,656	19041,70559
1958	1-pentadekanal	3916090,248	15664,36099	10019875,58	70139,12908
2020	Mirisztidsav	1831096,062	7324,384248	0	0
2083	Fitán	9394014,016	37576,05606	1651221,527	11558,55069
2126	Hexahidrofarnesil-aceton	3932761,71	15731,04684	5770280,206	40391,96144



Amiko (Olasz) paradicsom ivólé kromatogramja

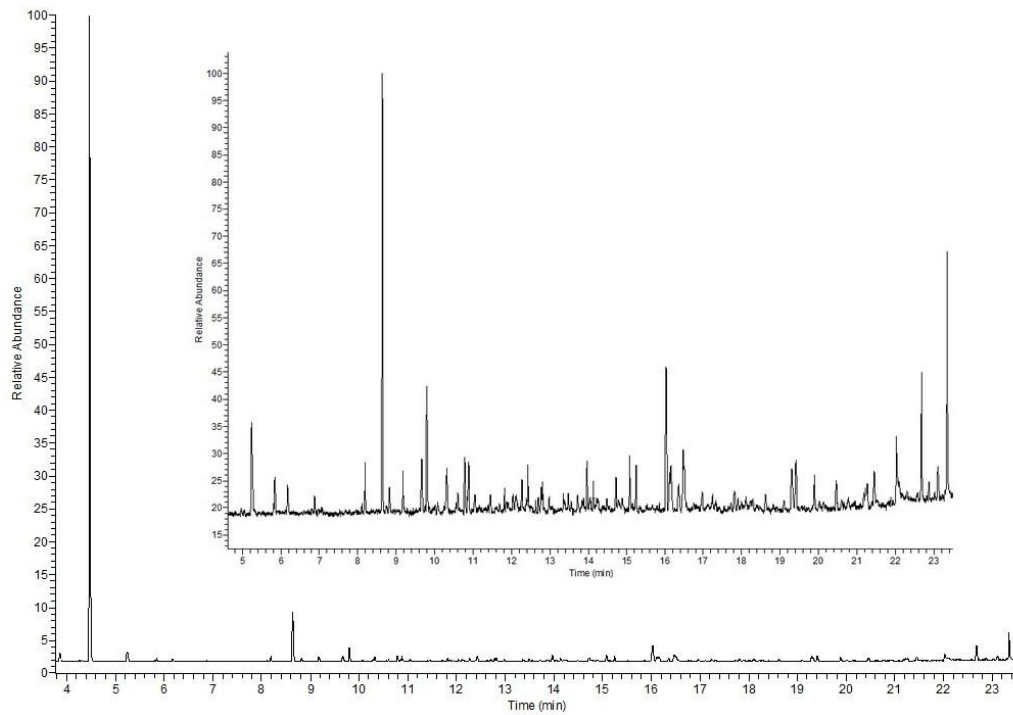


Szerb paradicsom ivólé kromatogramja

M15: Olasz egész konzerv paradicsom aromaösszetétele és kromatogramja

Retenciósi index	Molekula	Olasz egész (területegység)	Szórás (n=3)
184	2-metilheptán	3138950,798	12555,80319
191	Toluol	2466531,172	9866,124688
261	Hexanal	5870561,395	23482,24558
338	Furfural	1190982,129	4763,928516
345	Izovaleriánsav	10075139,69	40300,55874
428	1-hexanol	695999313,2	2783997,253
501	3-metilhexanal	12656504,35	50626,0174
634	Benzaldehid	1136945,618	4547,782472
679	6-metil-5-heptén-2-on	3409718,767	13638,87507
782	2-izobutiltiazol	2753846,44	11015,38576
904	2,2-dimetil-3-heptin	1399751,229	5599,004916
997	<i>transz</i> -2-nonén-1-al	6419007,067	25676,02827
1043	<i>m</i> -metilacetofenon	46232599,59	184930,3984
1054	Metil-szalicilát	1447204,364	5788,817456
1092	<i>p</i> -Ment-1-én-9-al	6435054,794	25740,21918
1098	Artemiszeol	13703529,9	54814,11958
1121	<i>cisz</i> -citrál	1190407,294	4761,629176
1151	Nonánsav	5937426,783	23749,70713
1164	Citrál	1136471,101	4545,884404
1196	Karvakrol	6085856,959	24343,42784
1202	2,4-dekadiénal	7530042,475	30120,1699
1238	<i>transz</i> -2- <i>transz</i> -4-dekadiénal	1260012,381	5040,049524
1241	butilfenol	2700109,529	10800,43812
1288	1-(2-hidroxi-1-metiletil)-2,2-dimetilpropil 2-metilpropanoát	1814320,084	7257,280336
1293	Eugenol	3660611,09	14642,44436
1324	Izobutánsav-3-hidroxi-2,2,4-trimetilpentil-észter	4548632,061	18194,52824
1341	β -damaszkon	1429141,003	5716,564012
1367	Tetradekán	5672996,669	22691,98668
1463	Dihidropszeudojonon	1901929,382	7607,717528
1548	β -jonon	2415047,217	9660,188868
1597	3,5-di-t-butilfenol	1081617,649	4326,470596
1700	Dodekánsav	3330789,997	13323,15999
1748	Pszudojonon	2414760,629	9659,042516
1757	Anizol	1459255,474	5837,021896
1814	Humulén-1,2-epoxid	1974244,231	7896,976924
1862	Hedion	3513484,957	14053,93983
1886	Kubenol	1252594,874	5010,379496
1934	2-Pentadekanon	1836644,584	7346,578336

1958	1-pentadekanal	4415014,834	17660,05934
2020	Mirisztidsav	1771425,181	7085,700724
2083	Fitán	7029434,911	28117,73964
2126	Hexahidrofarneszil-aceton	6126086,275	24504,3451



Olasz egész konzervparadicsom kromatogramja