

# SPARGEL- MONITORING

## METABOLOMICS-BASIERTE HERKUNFTSBESTIMMUNG VON SPARGEL

### Forschungsstelle 1

Prof. Dr. Markus Fischer  
 Marina Creydt  
 Hamburg School of Food Science  
 Institut für Lebensmittelchemie  
 Universität Hamburg

### Forschungsstelle 2

Dr. Thomas Hackl  
 Juliane Klare  
 Fachbereich Chemie  
 Abteilung für NMR-Spektroskopie  
 Universität Hamburg

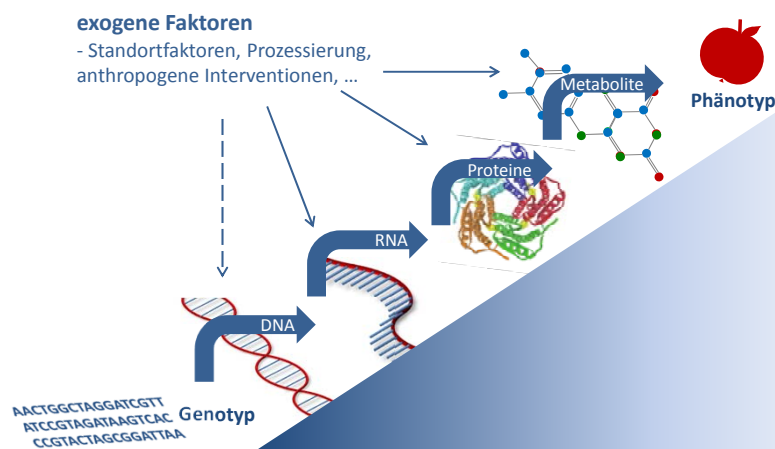
### Forschungsstelle 3

Prof. Dr.-Ing. Oliver Kohlbacher  
 Marc Rurik  
 Angewandte Bioinformatik  
 Zentrum für Bioinformatik  
 Eberhard-Karls-Universität Tübingen

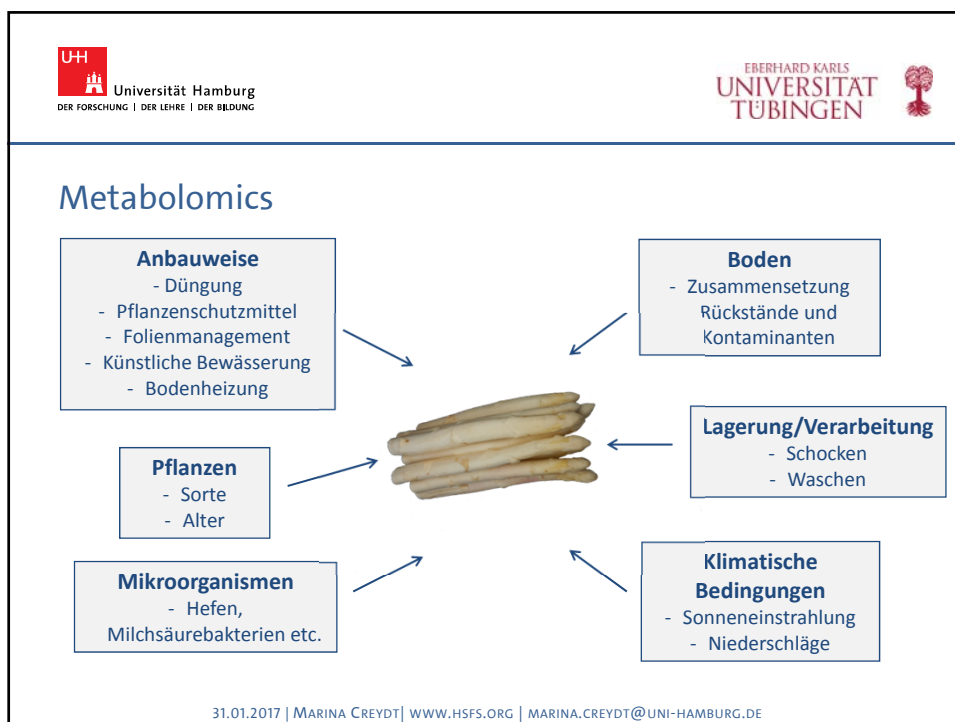



31.01.2017 | MARINA CREYDT | WWW.HSFS.ORG | MARINA.CREYDT@UNI-HAMBURG.DE


## Wissenschaftlicher Ansatz | Omics-Kaskade



31.01.2017 | MARINA CREYDT | WWW.HSFS.ORG | MARINA.CREYDT@UNI-HAMBURG.DE

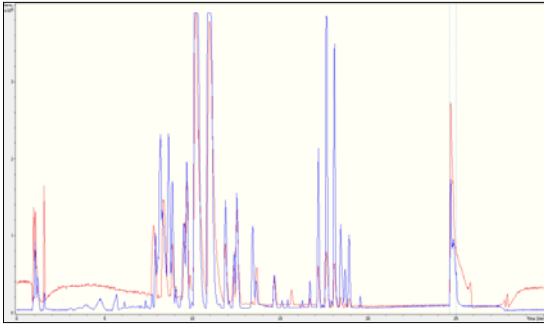



 Universität Hamburg  
 DER FORSCHUNG | DER LEHRE | DER BILDUNG



 EBERHARD KARLS  
 UNIVERSITÄT  
 TÜBINGEN

## Metabolomics-Analyse


- Non-Targeted-Metabolomics
  - Vergleich relativer Metabolitkonzentrationen
  - Hypothesen-freier Ansatz
  - Hochauflösende und vglw. teure Analysemethoden



31.01.2017 | MARINA CREYDT | WWW.HSFS.ORG | MARINA.CREYDT@UNI-HAMBURG.DE



Universität Hamburg  
DER FORSCHUNG | DER LEHRE | DER BILDUNG

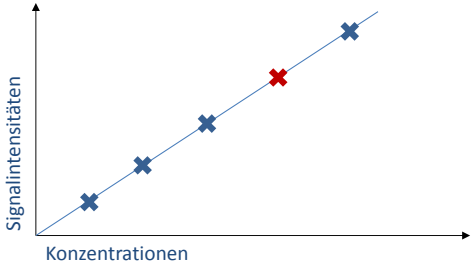


EBERHARD KARLS  
UNIVERSITÄT  
TÜBINGEN

---

## Metabolomics-Analyse

- Targeted-Metabolomics
  - Absolute Quantifizierung einzelner Metabolite
  - Hypothesen-generierender Ansatz
  - Robuste und kostengünstige Analysemethoden



Signalintensitäten  
Konzentrationen

31.01.2017 | MARINA CREYDT | WWW.HSFS.ORG | MARINA.CREYDT@UNI-HAMBURG.DE



Universität Hamburg  
DER FORSCHUNG | DER LEHRE | DER BILDUNG



EBERHARD KARLS  
UNIVERSITÄT  
TÜBINGEN


---

## Workflow und Projektplanung




- Probenakquisition
- Probenaufarbeitung (Vermahlung, Trocknung, Extraktion)
- Entwicklung von non-targeted Methoden (LC-QToF-MS)
- Anwendung der Methode und Datenakquise von authentischen Proben
- Multivariate Datenanalyse und Identifizierung von Markersubstanzen
- Qualitative und quantitative Bestimmung des ausgewählten Markerprofils (QqQ-MS)
- Validierung (bzgl. Ernteperioden, Probenanzahl etc.)

31.01.2017 | MARINA CREYDT | WWW.HSFS.ORG | MARINA.CREYDT@UNI-HAMBURG.DE



Universität Hamburg  
DER FORSCHUNG | DER LEHRE | DER BILDUNG

EBERHARD KARLS  
UNIVERSITÄT  
TÜBINGEN



---

## Probenakquisition



- Authentisches Referenzmaterial
- Erfassung von Metadaten
  - (Sorten, Düngung, etc.)

**g. g. A.**

- Schrobenhausen
- Abensberg
- Franken
- Bornheim
- Walbeck

**Wirtschaftlich relevante Anbauregionen**


- Westfalen
- Niedersachsen
- Brandenburg
- Südhessen
- Pfalz
- Nordbaden
- Südbaden

Bundesrepublik Deutschland  
Verwaltungsgrenzen (VG2000)


Maßstab  
1 : 2 500 000

31.01.2017 | MARINA CREYDT | WWW.HSFS.ORG | MARINA.CREYDT@UNI-HAMBURG.DE



Universität Hamburg  
DER FORSCHUNG | DER LEHRE | DER BILDUNG

EBERHARD KARLS  
UNIVERSITÄT  
TÜBINGEN



---

## Metadaten

Food Profiling – Qualitätssicherung in der Lebensmittelproduktion

Probenahmeprotokoll | Spargelproduzenten

---

**1. Allgemeine Angaben zum Erzeugerbetrieb**

Name des Betriebes		Ansprechpartner	
Straße, Hausnummer	PLZ	Ort	

**2. Angaben zur Spargelpflanze und Kultur der Probe**

Um welche Sorte handelt es sich?

Gijnlim
  sonstige Sorte und zwar \_\_\_\_\_

Backlim

Wann erfolgte die Neuanlage der Kultur?

Jahr \_\_\_\_\_

Welche Pflanzdichte wurde bei der Neuanlage verwendet?

\_\_\_\_\_ Pflanzen/ha

Welcher Anbauart unterliegt die Probe?

konventionell
  biologisch

31.01.2017 | MARINA CREYDT | WWW.HSFS.ORG | MARINA.CREYDT@UNI-HAMBURG.DE

## Synergieeffekte LC-MS | NMR

- Schnittmenge an identifizierten Molekülen: **NMR ≠ LC-MS**
- **Erhöhung der Anzahl insgesamt erfassbarer Metabolite**
- **Effiziente Identifizierung** durch Kombination LC-MS & NMR

Zusätzlich: IRMS-Analyse als Referenzmethode

31.01.2017 | MARINA CREYDT | WWW.HSFS.ORG | MARINA.CREYDT@UNI-HAMBURG.DE

## Authentifizierung | Geographischer Ursprung



31.01.2017 | MARINA CREYDT | WWW.HSFS.ORG | MARINA.CREYDT@UNI-HAMBURG.DE

## Authentifizierung | Geographischer Ursprung



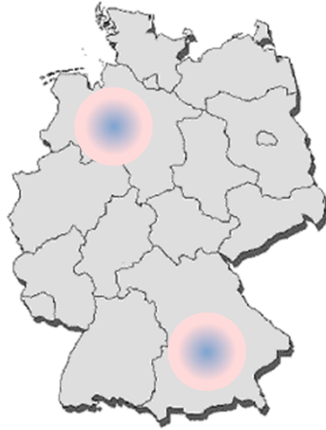
31.01.2017 | MARINA CREYDT | WWW.HSFS.ORG | MARINA.CREYDT@UNI-HAMBURG.DE

## Authentifizierung | Geographischer Ursprung



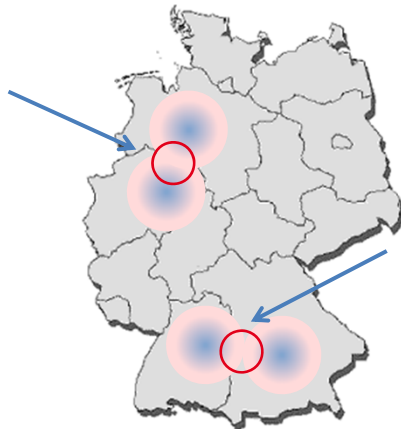
31.01.2017 | MARINA CREYDT | WWW.HSFS.ORG | MARINA.CREYDT@UNI-HAMBURG.DE

## Authentifizierung | Geographischer Ursprung





31.01.2017 | MARINA CREYDT | WWW.HSFS.ORG | MARINA.CREYDT@UNI-HAMBURG.DE

## Authentifizierung | Geographischer Ursprung




31.01.2017 | MARINA CREYDT | WWW.HSFS.ORG | MARINA.CREYDT@UNI-HAMBURG.DE



**Universität Hamburg**  
 DER FORSCHUNG | DER LEHRE | DER BILDUNG


EBERHARD KARLS  
**UNIVERSITÄT TÜBINGEN**


## Probenaufarbeitung




31.01.2017 | MARINA CREYDT | WWW.HSFS.ORG | MARINA.CREYDT@UNI-HAMBURG.DE


**Universität Hamburg**  
 DER FORSCHUNG | DER LEHRE | DER BILDUNG

EBERHARD KARLS  
**UNIVERSITÄT TÜBINGEN**



## Ultra High Performance Liquid Chromatography


- Chromatographie
  - Auftrennung eines Stoffgemisches aufgrund von Wechselwirkungen mit einer mobilen und stationären Phase



31.01.2017 | MARINA CREYDT | WWW.HSFS.ORG | MARINA.CREYDT@UNI-HAMBURG.DE

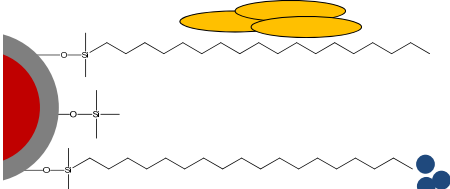




**Universität Hamburg**  
 DER FORSCHUNG | DER LEHRE | DER BILDUNG



**EBERHARD KARLS  
UNIVERSITÄT  
TÜBINGEN**


## Ultra High Performance Liquid Chromatography

- Chromatographie
  - Auftrennung eines Stoffgemisches aufgrund von Wechselwirkungen mit einer mobilen und stationären Phase

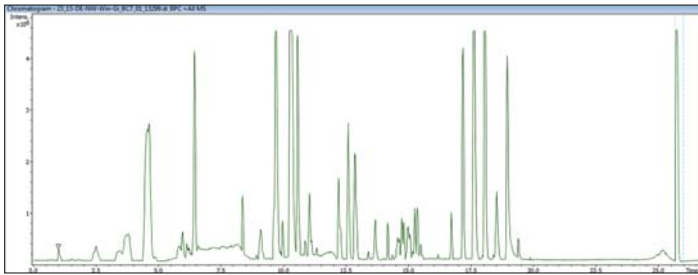

31.01.2017 | MARINA CREYDT | WWW.HSFS.ORG | MARINA.CREYDT@UNI-HAMBURG.DE


**Universität Hamburg**  
 DER FORSCHUNG | DER LEHRE | DER BILDUNG



**EBERHARD KARLS  
UNIVERSITÄT  
TÜBINGEN**

## Ultra High Performance Liquid Chromatography


- Chromatographie
  - Auftrennung eines Stoffgemisches aufgrund von Wechselwirkungen mit einer mobilen und stationären Phase

31.01.2017 | MARINA CREYDT | WWW.HSFS.ORG | MARINA.CREYDT@UNI-HAMBURG.DE



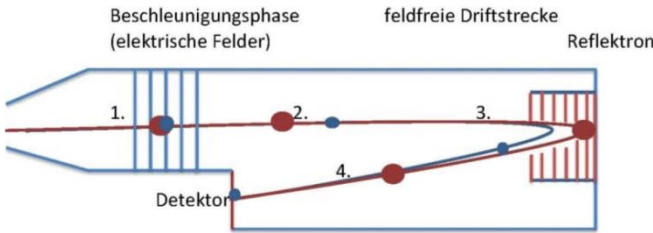
Universität Hamburg  
DER FORSCHUNG | DER LEHRE | DER BILDUNG



EBERHARD KARLS  
UNIVERSITÄT  
TÜBINGEN

## Massenspektrometrie

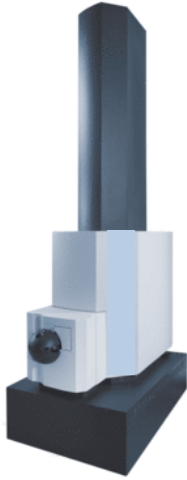
- Time-of-Flight-Analysatoren




Beschleunigungsphase (elektrische Felder)      feldfreie Driftstrecke      Reflektron

1.      2.      3.      4.


Detektor



31.01.2017 | MARINA CREYDT | WWW.HSFS.ORG | MARINA.CREYDT@UNI-HAMBURG.DE

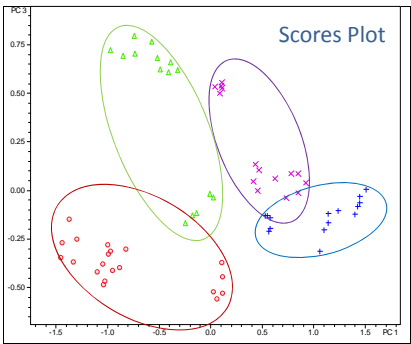


Universität Hamburg  
DER FORSCHUNG | DER LEHRE | DER BILDUNG

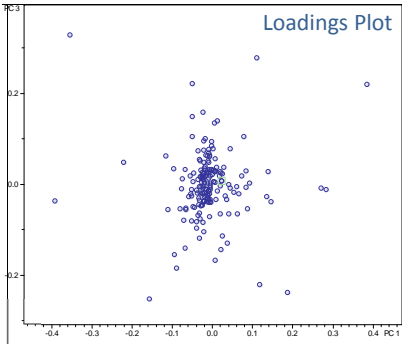


EBERHARD KARLS  
UNIVERSITÄT  
TÜBINGEN

## Multivariate Datenanalyse



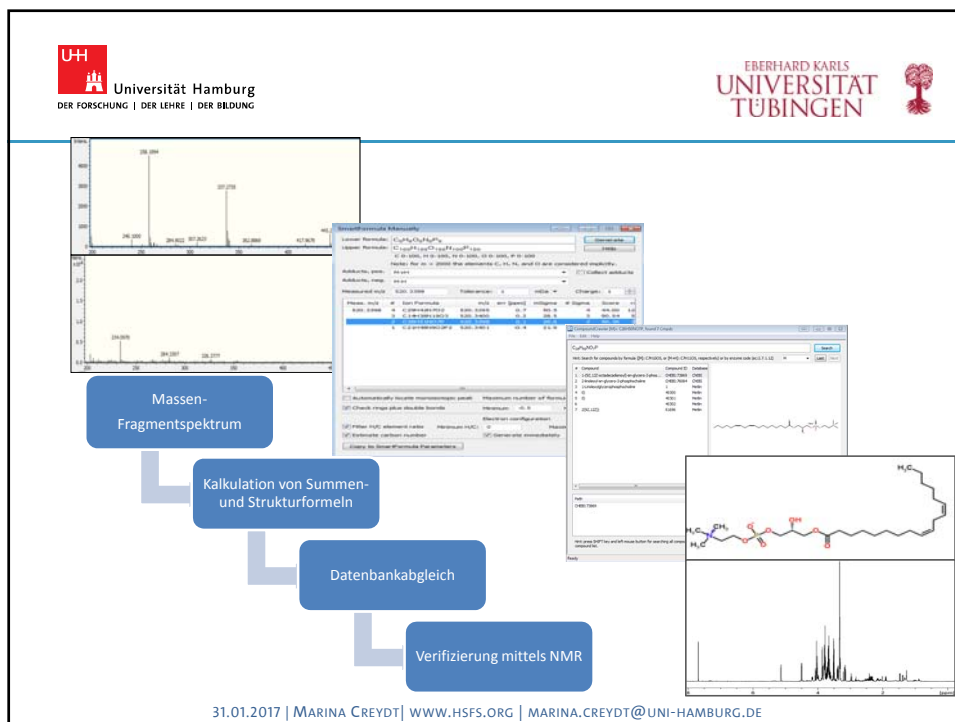
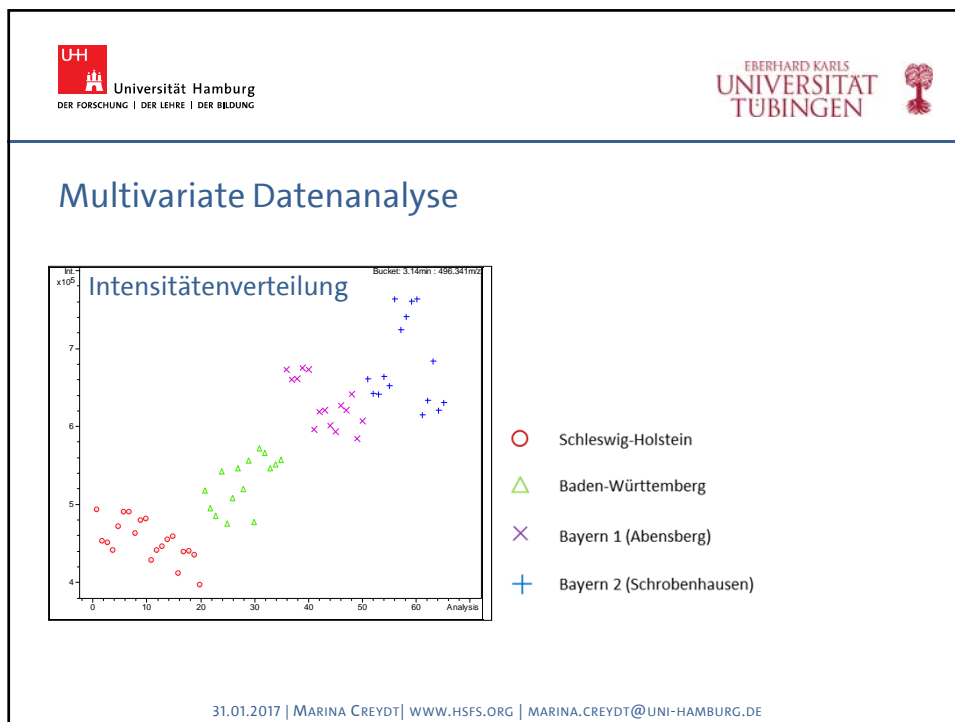
Scores Plot



Loadings Plot

○ Schleswig-Holstein	× Bayern 1 (Abensberg)
△ Baden-Württemberg	+ Bayern 2 (Schrobenhausen)

31.01.2017 | MARINA CREYDT | WWW.HSFS.ORG | MARINA.CREYDT@UNI-HAMBURG.DE



 **Universität Hamburg**  
DER FORSCHUNG | DER LEHRE | DER BILDUNG

 **EBERHARD KARLS  
UNIVERSITÄT  
TÜBINGEN**

## Ausblick

- Finale non-targeted Messungen
- Identifizierung von Markersubstanzen
- Entwicklung einer targeted-MS-Methode

- **Potenzielle Anwendergruppen**
  - Handelslaboratorien
  - Qualitätssicherungslaboratorien in der Industrie
  - Lebensmitteluntersuchungsämter

- **Weitere Forschungsprojekte im Anschluss**
  - Anwendung auf weitere Rohstoffe
  - Einzeltest-Schnellmethoden



31.01.2017 | MARINA CREYDT | WWW.HSFS.ORG | MARINA.CREYDT@UNI-HAMBURG.DE

 **Universität Hamburg**  
DER FORSCHUNG | DER LEHRE | DER BILDUNG

 **EBERHARD KARLS  
UNIVERSITÄT  
TÜBINGEN**

## Vielen Dank für Ihre Aufmerksamkeit!

31.01.2017 | MARINA CREYDT | WWW.HSFS.ORG | MARINA.CREYDT@UNI-HAMBURG.DE