



Hochschule für Angewandte
Wissenschaften Hamburg
Hamburg University of Applied Sciences

Bachelor-Thesis

**Quantitative Analyse von aroma-flüchtigen Komponenten
der Kakaobohne während der Nacherntebehandlung
anhand einer HS-SPME-GC-MS Methode**

Hochschule für Angewandte Wissenschaften Hamburg

Fakultät Life Sciences

B. Sc. Ökotrophologie

1. Prüferin: Prof. Dr. med. vet. Katharina Riehn

2. Prüferin: M. Sc. Stephanie Nottelmann

Vorgelegt von Johanna Thoms

Matrikelnummer: XXXXXXXXXX

Hamburg, 19.04.2020

“Kein zweites Mal hat die Natur eine solche Fülle der wertvollsten Nährstoffe auf einem so kleinen Raum zusammengedrängt, wie gerade bei der Kakaobohne.”

Alexander von Humboldt (1769-1859), Naturforscher

Inhaltsverzeichnis

Abbildungsverzeichnis	V
Tabellenverzeichnis.....	VI
Abkürzungsverzeichnis	VII
1) Einleitung.....	1
2) Theoretische Grundlagen	3
2.1) Der Kakao	3
2.1.1) Anbau.....	3
2.1.2) Aufbereitung und Nacherntebehandlung	5
2.1.3) Aromabildung und -entwicklung	7
2.2) HS-SPME-GC-MS.....	9
2.2.1) Headspace-Analyse.....	10
2.2.2) Solid-Phase-Mikroextraction	10
2.2.3) Gaschromatographie	11
2.2.4) Massenspektrometrie	12
2.2.5) Auswertung.....	13
2.3) Kalibrierung	13
2.3.1) Externe Standardmethode:	14
2.3.2) Interne Standardmethode	15
2.3.3) Standardadditionsmethode	15
2.3.4) Mehrpunkt-Kalibrierungsmethode.....	16
3) Substanzen, Materialien und Geräte	16
3.1) Kakaoproben.....	16
3.2) Chemikalien	17
3.3) Materialien	18
3.4) Geräte und Software	18
4) Methoden	19
4.1) Probenvorbereitung.....	19
4.2) Analytische Methoden	21
4.2.1) Analytische Durchführung.....	21
4.2.2) Peakflächenintegration.....	22
4.3) Statistische Methoden	23
4.3.1) Konzentrationsbestimmungen.....	23
4.3.2) Signifikanztests	23
4.3.3) Boxplot.....	24

5) Ergebnisse.....	24
5.1) 2,3-Butandiol	24
5.2) Ethylacetat	27
5.3) 2-Heptylacetat / 2-Heptanol.....	28
5.4) Isoamylalkohol.....	29
5.5) 2-Pentanol	30
5.6) 2-Pentanon	31
5.7) 2-Pentylacetat.....	32
5.8) 2-Phenylethanol	33
5.9) (-)- β -Pinen.....	34
6) Diskussion.....	35
6.1) Methodendiskussion	35
6.2) Ergebnisdiskussion	37
6.3) Literaturhinweise	40
7) Fazit	41
Zusammenfassung.....	42
Abstract	43
Literaturverzeichnis.....	44
Anhang	48

Abbildungsverzeichnis

Abbildung 1: Die wichtigsten Kakaoherkunftsländer aus 2016 mit einer Jahresproduktion in Tonnen (Miedaner 2018, S. 193).	3
Abbildung 2: a) Kakaobäume auf einer Plantage; b) Kakaoblüten am Stamm des Baumes; c) Kakaofrüchte unterschiedlicher Reifestadien am Baumstamm (Miedaner 2018, S. 181).....	4
Abbildung 3: links) Pulpa und Samen einer geöffneten Kakaofrucht; mittig) Kakaobohnen mit Pulpa vor der Fermentation; rechts) getrocknete, rohe Kakaobohnen (Bundesverband der Deutschen Süßwarenindustrie e.V.; Miedaner 2018, S. 181).	5
Abbildung 4: Verfahrensschritte zur Herstellung von Kakaobruch (Rimbach et al. 2015, S. 304)...	6
Abbildung 5: Schematische Übersicht des GC-Systems, vereinfachte Darstellung (FSKZ e. V. 2010).	10
Abbildung 6: Schematische Darstellung der Umsetzung einer Kalibrierung (ChemgaPedia 2016).	14
Abbildung 7: Eine Vielfalt der Kakaofrüchte "Chuncho" von Cusco (Rojas et al. 2018, S. 20).	16
Abbildung 8: Aufbau des HS-SPME-GC-MS (eigene Aufnahme).....	19
Abbildung 9: Präparation der Kakaobohnen (Kinkade 2019, S. 26).....	19
Abbildung 10: 2,3-Butandiol (RT 15,8) in unterschiedlichen Kakaoproben.	25
Abbildung 11: 2,3-Butandiol (RT 16,5) in unterschiedlichen Kakaoproben.	26
Abbildung 12: Ethylacetat in unterschiedlichen Kakaoproben.	27
Abbildung 13: Isoamylalkohol in unterschiedlichen Kakaoproben.	29
Abbildung 14: 2-Pentanol in unterschiedlichen Kakaoproben.....	30
Abbildung 15: 2-Pentanon in unterschiedlichen Kakaoproben.....	31
Abbildung 16: 2-Pentylacetat in unterschiedlichen Kakaoproben.	32
Abbildung 17: 2-Phenylethanol in unterschiedlichen Kakaoproben.....	33
Abbildung 18: (-)- β -Pinen in unterschiedlichen Kakaoproben.	34

Tabellenverzeichnis

Tabelle 1: Übersicht über die verwendeten Chemikalien.	17
Tabelle 2: Übersicht über die verwendeten Materialien.	18
Tabelle 3: Übersicht über die verwendeten Geräte.	18
Tabelle 4: Pipettierschema der Testmessungen.....	20
Tabelle 5: Pipettierschema der Verdünnungsreihen.....	20
Tabelle 6: Übersicht über die Verdünnungen der Standards, alphabetisch geordnet.....	21
Tabelle 7: Temperaturverlauf der GC-Methode nach TRABER (2018).....	22
Tabelle 8: 2,3-Butandiolkonzentration (in %) in den Kakaoproben (2 g).....	25
Tabelle 9: 2,3-Butandiolkonzentration (in %) in den Kakaoproben (2 g).....	26
Tabelle 10: Ethylacetatkonzentration (in %) in den Kakaoproben (2 g).....	27
Tabelle 11: Konzentrationen von 2-Heptylacetat pro Peakfläche.....	28
Tabelle 12: Isoamylalkoholkonzentration (in %) in den Kakaoproben (2 g).....	29
Tabelle 13: 2-Pentanolkonzentration (in %) in den Kakaoproben (2 g).	30
Tabelle 14: 2-Pentanonkonzentration (in %) in den Kakaoproben (2 g).....	31
Tabelle 15: 2-Pentylacetatkonzentration (in %) in den Kakaoproben (2 g).....	32
Tabelle 16: 2-Phenylethanolkonzentration (in %) in den Kakaoproben (2 g).....	33
Tabelle 17: (-)- β -Pinenkonzentration (in %) in den Kakaoproben (2 g).....	34

Abkürzungsverzeichnis

<	kleiner als
%	Anteil in Prozent
α	Signifikanzniveau
μ l	Mikroliter
Abb.	Abbildung
bspw.	beispielsweise
bzgl.	bezüglich
bzw.	beziehungsweise
CAS-Nr.	Chemical Abstracts Service-Registrierungsnummer
d.h.	das heißt
ESTD	externer Standard
et al.	und andere
ff.	folgende
g	Gramm
GC	Gaschromatograph
HS	Headspace / Kopfraum
Med.	Median
min.	Minuten
ml	Milliliter
MS	Massenspektrometer
MW	Mittelwert
NIST	National Institute of Standards and Technology
n	Stichprobenumfang
n.n.	nicht nachweisbar
PDMS/DVB	Polydimethylsiloxan / Divinylbenzene
p-Wert	Signifikanzwert
RT	Retention time / Retentionszeit
SD	Standardabweichung
SPME	Solid-Phase Mikroextraction / Festphasen-Mikroextraktion
u.a.	unter anderem

1) Einleitung

Die Qualität von Schokolade wird maßgeblich durch die verwendete Kakaosorte, d.h. durch den Genotyp des Kakaos sowie durch dessen geografische Herkunft, den Anbau, die Nacherntebehandlungen und die nachfolgenden industriellen Prozesse beeinflusst (Afoakwa 2010; Kongor et al. 2016, S. 44; Rodriguez-Campos et al. 2012, S. 1). Der Welthandel differenziert den Kakao nach seinem Aroma in Edelkakao, auch „Fine or Flavour cocoa“, mit sehr feinen und ausgeprägten Aromen und den aromaschwächeren Konsumkakao, auch „Bulk cocoa“ (Kadow et al. 2013, S. 90). Aufgrund der steigenden Nachfrage von Kakao- und Schokoladenerzeugnissen stieg der Netto-Import an Rohkakao in Deutschland im Jahr 2018 um 6,3 % auf 459.678 Tonnen an (Bundesverband der Deutschen Süßwarenindustrie e.V.). Insbesondere die zunehmende Beliebtheit an hochwertigen Schokoladen mit einem hohen Kakaoanteil trägt dazu bei, dass nicht nur der Bedarf an Edelkakao, der derzeit nur ca. 5 % der Weltermte ausmacht, ansteigt, sondern auch die Bedeutung für ein besseres Verständnis der Faktoren, die zu den unterschiedlichen Geschmacksrichtungen und Aromausprägungen beitragen (Forschungskreis der Ernährungsindustrie e.V. (FEI) 2010-2013; Kongor et al. 2016, S. 44).

Im Gegensatz zu vielen natürlichen Aromen, wie Vanille oder Mandel, hat Kakao nicht nur eine Hauptkomponente, die für das Aroma verantwortlich ist. Das Kakaoaroma setzt sich aus einem komplexen Gemisch aus flüchtigen, aromagebenden Komponenten zusammen, von denen bisher ca. 500 Komponenten identifiziert wurden (Ducki et al. 2008, S. 1166). Die Einflussnahme von chemischen und biochemischen Reaktionen auf die komplexe Aromabildung ist bisher nicht ausreichend erforscht, jedoch ist bekannt, dass die Fermentation, die Trocknung sowie die Röstung des Kakaos eine zentrale Rolle spielen, da während dieser Prozesse wichtige Aromavorstufen und Aromen gebildet werden (Afoakwa 2012, S. 2 ff). So spielen beispielsweise die Bildung und Entwicklung von Aromavorstufen während der Fermentation eine entscheidende Rolle bei der Geschmacksgebung des Kakaos. Die Fermentation erfolgt in den Anbauländern und bietet meist ein heterogenes Ausgangsmaterial, da die meisten Kakaobohnen von mehreren kleinen bis mittelgroßen Farmen stammen. Während der Fermentation wird der Kakao unterschiedlichen, natürlich in der Umwelt vorkommenden Organismen, wie Hefen, Bakterien und Pilzen ausgesetzt (Aprotosoie et al. 2016, S. 73 ff). Änderungen in diesem Stadion der Nacherntebehandlung, z.B. durch die gezielte Zugabe von Mikroorganismen, haben u.a. Einfluss auf die Produktion von Alkoholen und Säuren und damit auch auf die Aromabildung. So könnte das Einführen von Starterkulturen bei der Fermentation beispielsweise die Aromausprägung optimieren und zu einem verbesserten Geschmackpotential beitragen sowie zu einer kontrollierbareren und reproduzierbareren Aromaentwicklung. Die Nacherntebehandlung könnte somit signifikante Auswirkungen auf den Geschmack der Kakaobohnen haben (Kongor et al. 2016, S. 48).

Das Ziel dieser Arbeit ist es, durch eine quantitative Analyse von Kakaoaromen festzustellen, ob eine Inokulation, d.h. ein Eingreifen in die Nacherntebehandlung, speziell in die Fermentation mittels zugesetzter Hefen, die Bildung und Ausprägung von Kakaoaromen und deren Vorstufen begünstigt. Im theoretischen Teil werden hierzu der Kakaoanbau, die Ernte sowie die Nacherntebedingungen und die Aromabildung beschrieben. Zudem folgt eine Darstellung des Trennverfahrens und der verwendeten Gerätekomponenten der HS-SPME-GC-MS (Headspace-Solid-Phase-Mikroextraction-Gaschromatograph-Massspectrometrie) sowie eine Bezugnahme auf die Kalibrierung und unterschiedliche Methoden für den Einsatz sogenannter Standards. Im praktischen Teil beschreibt die Arbeit die quantitative Analyse von ausgewählten, flüchtigen, organischen Verbindungen in den Proben des „Chuncho“-Kakaos aus Peru. Diese unterliegen dabei zwei unterschiedlichen Fermentationsarten, einer natürlichen bzw. spontanen und einer inokulierten Fermentation, sowie einer Einteilung nach den Tagen der Probenentnahme während der Fermentation. Die aroma-flüchtigen Verbindungen werden mittels HS-SPME extrahiert und über eine GC analysiert, welche an eine Quadropol-MS gekoppelt ist. Die Methode der HS-SPME-GC-MS ist in der Arbeit von TRABER (2018) beschrieben. Die qualitative Analyse des Kakaos erfolgte bereits in der Arbeit von KINKADE (2019).

2) Theoretische Grundlagen

Im Folgenden werden die theoretischen Grundlagen erläutert. Zunächst wird der Kakao beschrieben. Hier stehen vor allem der Kakaobaum, die Aufbereitung und Nacherntebehandlung der Kakaofrüchte sowie der Einfluss auf die Aromaentwicklung im Fokus. Es folgt eine Darstellung des Trennverfahrens und der Gerätekomponenten der HS-SPME-GC-MS sowie eine Einführung in die Thematik der Kalibrierung mit dem Fokus auf unterschiedliche Standardmethoden.

2.1) Der Kakao

Zur Herstellung von Kakaoerzeugnissen ist die Gewinnung einwandfreier Kakaobohnen unabdingbar. Die Qualität der Bohnen wird sowohl durch einen fachgerechten Anbau des Kakaobaumes als auch durch die Aufbereitung und Nacherntebehandlung der Kakaofrüchte beeinflusst. Diese Schritte haben ebenfalls Einfluss auf die Aromaentwicklung des Rohkakaos.

2.1.1) Anbau

Der Kakaobaum (*Theobroma cacao L.*), ursprünglich in den Regenwäldern des westlichen Amazonas beheimatet, wächst heute nicht mehr nur in den Ursprungsländern, sondern rund um den Äquator im Tropengürtel (Abbildung 1) in der 20-20-Zone, d.h. zwischen dem nördlichen und südlichen 20. Breitengrad (Miedaner 2018, S. 193).

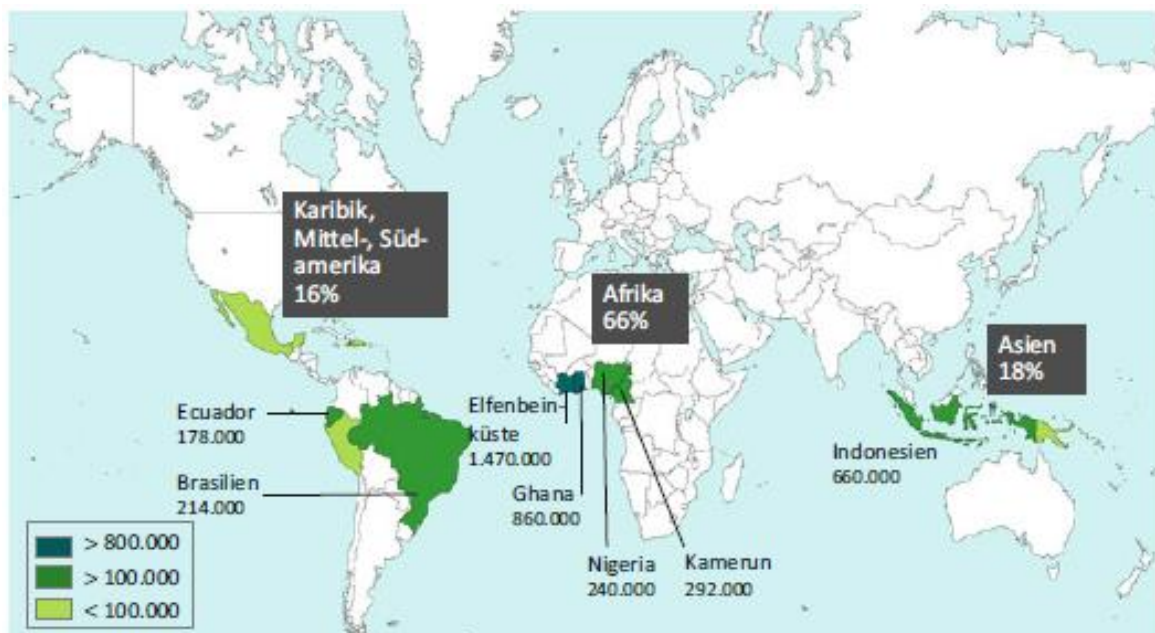


Abbildung 1 Die wichtigsten Kakaoherkunftsländer aus 2016 mit einer Jahresproduktion in Tonnen (Miedaner 2018, S. 193).

Der Kakaobaum benötigt für ein optimales Wachstum sowohl ein feuchtheißes Klima, d.h. hohe Temperaturen (von 24°C bis 28°C) und ausreichend Niederschläge (1000 – 1600 mm/Jahr), nährstoffreichen Boden, als auch Schutz vor Wind und direkter Sonneneinstrahlung. Daher dienen Baumriesen als Schattenspender, die entweder natürlich vorkommen oder auf den Plantagen, auf denen die Kakaobäume überwiegend kultiviert werden, zwischen diesen gepflanzt werden.

Die Kakaobäume erreichen eine Höhe von bis zu 15 m, werden auf den Plantagen jedoch auf 3 – 4 Meter gestutzt, um die Ernte zu erleichtern (Coady op. 1998, S. 16; Miedaner 2018, S. 181).

Aufgrund der leichten Kreuzbarkeit des Kakaos gibt es eine große Kakaovielfalt. Es sind mehr als 14.000 Varietäten bekannt, welche sich auf zwei Grundformen zurückführen lassen: den Edelkakao Criollo und den Konsumkakao Forastero (Aprotosoai et al. 2016, S. 74). Der Criollo verfügt über feine Aroma- und Geschmackseigenschaften, ist jedoch schwer kultivierbar, da er sehr empfindlich gegen Krankheiten und Umweltveränderungen ist (Rimbach et al. 2015, S. 303 ff). Der Forastero macht mit über 90 % den größten Teil des Welthanbaus aus (Afoakwa 2012, S. 1). Er ist widerstandsfähiger und liefert deutlich höhere Erträge als der Edelkakao. Zudem hat der Forastero einen kräftigen Grundsokoladengeschmack, ist dabei jedoch weniger aromatisch. Eine Kreuzung dieser beiden Kakaos ist der Trinitario. Als Hybridform vereint dieser die guten aromatischen Eigenschaften des Criollos mit der Widerstandsfähigkeit des Forasteros und hat sich dadurch in den letzten Jahren im Welthandel immer mehr durchgesetzt (Rimbach et al. 2015, S. 303 ff).

Der immergrüne Kakaobaum blüht, mit einer oder zwei Hauptblütezeiten, das ganze Jahr über und trägt so gleichzeitig Blätter, Knospen, Blüten und Früchte (Abbildung 2 a-c). Die Zeit bis zur Fruchtreife nach der Bestäubung beträgt 4 - 8 Monate (Fincke 1965, S. 28 ff). Der volle Ertrag von etwa 20 - 40 Früchten wird häufig erst nach zehn Jahren erreicht, dann kann der Kakaobaum aber bis zu 50 Jahre abgeerntet werden und liefert etwa 0,5 - 2 kg Kakaobohnen (fermentiert und getrocknet) pro Jahr (Belitz et al. 2008, S. 992).



Abbildung 2 a) Kakaobäume auf einer Plantage; b) Kakaoblüten am Stamm des Baumes; c) Kakaofrüchte unterschiedlicher Reifestadien am Baumstamm (Miedaner 2018, S. 181).

Die Kakaofrüchte, welche botanisch als Beeren anzusehen sind, variieren je nach Sorte in Größe, Form, Farbe und Aussehen (Kongor et al. 2016, S. 45). Sie hängen in verschiedenen Reifestadien am Stamm, werden bis zu 30 cm lang, 7 - 10 cm dick, 500 g schwer und färben sich sortenabhängig mit zunehmender Reife von einem ursprünglichen Grün über verschiedene Farben, wie hellem Gelb über dunkles Orange, Hell- und Rotbraun bis hin zu kräftigem Lila (Fincke 1965, S. 29). Pro Jahr gibt es zwei Ernteperioden, die nach dem Ertrag in eine Haupt- und eine Nebenernte unterschieden werden. Für das Aroma des Kakaos ist es wichtig, die Früchte vollreif (nicht überreif) zu ernten.

Der Erntevorgang ist eine präzise Aufgabe, da die Bäume, die Früchte und damit auch die Samen nicht beschädigt werden dürfen (Belitz et al. 2008, S. 992). Die Früchte werden daher nicht maschinell, sondern von Hand geerntet, in dem die Früchte mit einer Machete vom Baum geschlagen werden, da diese sich auch im reifen Zustand nicht selbst vom Baum lösen (Coady op. 1998, S. 16).

2.1.2) Aufbereitung und Nacherntebehandlung

Die Kakaofrüchte werden zunächst in den Kakaoanbauländern aufgearbeitet. Hierzu gehören die Ernte, die Fermentation (auch Rotten) und die Trocknung. Dazu werden die Früchte innerhalb von 24 Stunden nach der Ernte von Hand mit der Machete aufgeschlagen. Das unter der 10 - 15 mm dicken Schale liegende weiße Fruchtfleisch, die sogenannte Pulpa, wird aus der Schale gelöst (Abbildung 3). In die Pulpa sind 20 bis 50 Samenkörner, die Kakaobohnen, eingebettet (Rimbach et al. 2015, S. 305). Die oval-abgeplattete Bohne (Abbildung 3) ist ca. 2 cm lang, 1 cm breit und wiegt (nach dem Trocknen) etwa 1 g (Belitz et al. 2008, S. 992). Sie ist von einer dünnen Samenschale überzogen und besteht aus zwei Keimblättern, den Kotyledonen, in denen mittig ein Keimwurzeln liegt (Fincke 1965, S. 32).



Abbildung 3 links) Pulpa und Samen einer geöffneten Kakaofrucht; mittig) Kakaobohnen mit Pulpa vor der Fermentation; rechts) getrocknete, rohe Kakaobohnen (Bundesverband der Deutschen Süßwarenindustrie e.V.; Miedaner 2018, S. 181).

Nach dem Herauslösen der Pulpa folgt die Fermentation, deren Ziel das Abtrennen der Pulpa von den Bohnen, das Abtöten des Samenkeimes sowie die Bildung von Aromastoffen bzw. deren Vorstufen ist (Rimbach et al. 2015, S. 305). Ohne die Fermentation würden die Bohnen kein Schokoladenaroma entwickeln (Afoakwa 2012, S. 2 ff). Dazu werden unterschiedliche Verfahren angewandt, bei denen die an der Pulpa haftenden Kakaobohnen auf großen Blättern (Haufenfermentation), in perforierten Holzkisten oder Körben (Kasten- / Korbfermentation) oder in Erdlöchern (Gärböden) aufgeschichtet und meist mit Bananenblättern oder Jute bedeckt werden. Die Nutzung der Gärböden wird jedoch kaum noch angewandt, da sie, im Gegensatz zu den anderen Methoden, keinen Schutz bei Regen bietet, die Pulpa während der Fermentation nicht abfließen lässt und keine ausreichende Durchlüftung ermöglicht (Fincke 1965, S. 49 ff).

Durch die in den Tropen allgegenwärtigen Hefen setzt bei einer Temperatur von über 40°C der Gärungsprozess ein. Dabei wird die zuckerhaltige Pulpa zu Alkohol und Kohlenstoffdioxid vergoren, verflüssigt sich und trennt sich als Gärstoff vom Samen ab (Miedaner 2018, S. 195). Durch das manuelle Umwälzen und / oder Umsetzen der Bohnen in neue Kästen bzw. Körbe in den ersten Tagen und die dadurch zugeführte Luft, setzt das Wachstum von Essigsäurebakterien ein. Die aus dem oxidierten Alkohol entstehende Essigsäure, ein daraus resultierender Temperaturanstieg bis zu 50°C und die Senkung des pH-Wertes lassen die Zellwände durchlässig werden, sodass Zellsaft den Kakaokern durchdringt und der Kakaosamen abstirbt. Durch diese Prozesse werden die adstringierenden und bitteren Geschmackstoffe gemindert sowie Vorstufen zu den späteren typischen Aromen gebildet (Belitz et al. 2008, S. 997).

Nach diesem Prozess bleiben die braunen Kakaobohnen übrig, die ihre typische Farbe sowie geschmacksentscheidende Aromavorstufen entwickelt haben. Die Fermentationszeit beträgt, je nach Sorte, zwischen zwei und acht Tage. Bei dem Edelkakao Criollo sind ca. 2 - 3 Tage erforderlich, während bei dem Konsumkakao Forastero meist 5 - 6 Tage üblich sind (Castro-Alayo et al. 2019, S. 11). Die Restfeuchte der Bohnen beträgt zu dem Zeitpunkt noch etwa 60 %. Diese wird im nachfolgenden Trocknungsprozess auf 5 - 7 % reduziert, um eine gute Lagerstabilität und Transportfähigkeit zu gewährleisten (Kadow et al. 2013, S. 90). Die Trocknung läuft traditionell schonend in der Sonne ab und kann bis zu zwei Wochen dauern (ICCO 2012). Es werden aber auch künstliche Trocknungsverfahren angewandt, bei denen die Kakaobohnen über Heizstäben getrocknet werden. Auch in diesem Prozessschritt vollzieht sich die Ausbildung der Aroma-, Geschmacks- und Farbstoffe weiterhin (Miedaner 2018, S. 195). Die Abbildung 4 fasst diese Verfahrensschritte in einer grafischen Übersicht zusammen.

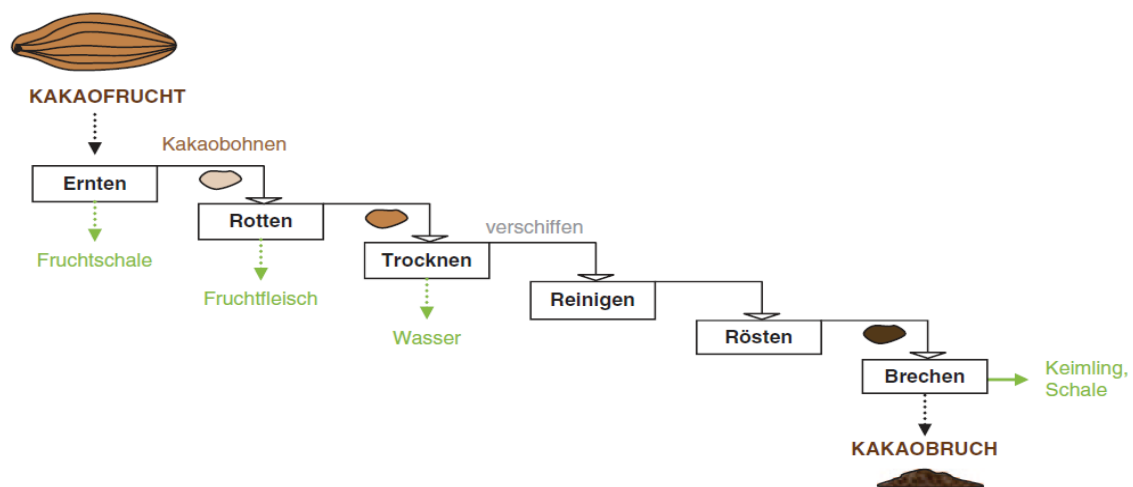


Abbildung 4 Verfahrensschritte zur Herstellung von Kakaobruch (Rimbach et al. 2015, S. 304).

Die Weiterverarbeitung des Kakaos erfolgt meist in den Verbraucherländern. Dort werden die Bohnen gereinigt, zur vollen Aromaentfaltung mild geröstet und anschließend von der Schale befreit, sodass nur der Kern bleibt. Dieser wird gebrochen und als Kernbruch, den sogenannten Nibs, beispielsweise zu gemahlenem Kakaopulver oder Schokolade weiterverarbeitet (Coady op. 1998, S. 17; Rimbach et al. 2015, S. 305 ff).

2.1.3) Aromabildung und -entwicklung

Die Qualität von Kakao steht im Verhältnis zu seinem Aroma. Die Vielfalt der Kakaoaromen ist eine komplexe Thematik, da ein Aroma nicht von einer einzelnen Komponente bestimmt wird, sondern ein Zusammenspiel von flüchtigen und nicht flüchtigen Stoffen ist, die durch chemische, biologische und physikalische Faktoren beeinflusst werden (Aprotosoie et al. 2016, S. 87 ff). Die Art und Menge der volatilen (flüchtigen) Aromastoffe ist der wichtigste Qualitätsindikator für Kakaobohnen (Kongor et al. 2016, S. 45). In dieser Arbeit werden nicht flüchtige Aromen nicht weiter thematisiert.

Der Kakao bildet und entfaltet sein Aroma unter den Einflüssen von Genotyp, Umwelt- und Anbaubedingungen, Ernte und Nachernteverfahren sowie den Verarbeitungsstufen. So berichtet AFOAKWA ET AL. (2012), dass eine Vorfermentationsbehandlungen durch eine Änderung der Lagerung und eine Reduzierung der Kakaopulpa zur Verringerung der Säurenote und einer Erhöhung des Kakaogeschmacks beiträgt. Zudem kann nach NAZARUDDIN ET AL. (2006) das Vorkonditionieren von Kakao die Polyphenolverbindungen verringern, was die Adstringenz und Bitterkeit senkt (Kongor et al. 2016, S. 48).

Der Einfluss von chemischen und biochemischen Reaktionen auf die Aromabildung ist noch nicht ganzheitlich erforscht. Erwiesen ist bisher, dass die Fermentation, die Trocknung sowie die Röstung eine entscheidende Rolle spielen, da während dieser Prozesse wichtige Aromavorstufen und Aromen gebildet werden und farbgebende Reaktionen ablaufen (Castro-Alayo et al. 2019, S. 11 ff).

Der Fermentationsprozess lässt sich in unterschiedliche Phasen einteilen. Diese haben bei der Bildung von Aromen eine hohe Relevanz, da sowohl in der anaeroben als auch in der aeroben Phase Aromavorstufen entstehen, zu denen u.a. freie Aminosäuren, Peptide und reduzierende Zucker gehören, aus denen sich flüchtige Geschmacksstoffe bilden (Kongor et al. 2016, S. 46). Nicht fermentierte Kakaobohnen hingegen würden nicht genügend Aromastoffe liefern. Sie sind im frischen Zustand eher bitter und adstringierend (Tran et al. 2015, S. 657). Die nachfolgenden zeitlichen Angaben des Fermentationsprozesses variieren mit den Kakaosorten und sind nur beispielhaft.

Tag 1: Die Fermentation beginnt in den ersten 24 Stunden nach dem Öffnen der Kakaofrüchte. Bis dahin sind die Bohnen mikrobiologisch unbeeinflusst (Castro-Alayo et al. 2019, S. 11). Die Pulpamasse samt Kakaobohnen ist ab diesem Zeitpunkt unterschiedlichen, natürlich in der Umwelt vorkommenden Organismen, wie Hefen, Bakterien und Pilzen ausgesetzt (Aprotosoie et al. 2016,

S. 74). Die Kakaobohnen sind in die Pulpa eingebettet, sodass anaerobe Bedingungen vorherrschen. Die in der Pulpa enthaltenen Zucker werden durch Hefen zu Ethanol und Kohlenstoffdioxid vergoren. Eine Milchsäuregärung kann in geringem Umfang ablaufen. Enzymatische Spaltungen der glycosidischen Bindungen führen durch den Abbau der Polysaccharide zu einer Verflüssigung der Pulpa, sodass diese abfließt (Belitz et al. 2008, S. 997).

Tag 2 - 4: Durch den Pulpaabfluss kommen die Kakaobohnen mit Luft in Berührung. Es herrschen zunehmend aerobe Bedingungen. Die Milchsäurebakterien werden von den Essigsäurebakterien verdrängt. Durch diese wird der Alkohol zu Essigsäure, der geruchsaktivsten Verbindung, oxidiert (Schwan und Fleet 2014, S.84). Der pH-Wert sinkt von 6,5 auf 4,6 ab. Da diese Prozesse exotherm sind, d.h. unter Freisetzung von Energie verlaufen, erfolgt ein Temperaturanstieg auf bis zu 50°C (Belitz et al. 2008, S. 997). Durch die Stoffwechselprodukte werden die Zellwände permeabel, sodass sich der Zellsaft im Kakaokern ausbreitet und der Kakaosamen abstirbt. Die oxidativen Vorgänge laufen durch das Durchmischen der Masse gleichmäßig ab (Fincke 1965, S. 57 ff).

Tag 5 - 8: In der aeroben Phase bewirken Oxidations- und Kondensationsreaktionen der vorhandenen phenolischen Verbindungen eine Braunfärbung der Bohnen. Die charakteristische Farbe wird über die Reaktion von Peptiden und Aminosäuren mit Phenoloxidaionsprodukten erreicht (Beckett 2009, S. 171). Durch diese Reaktionen verringert sich der Polyphenolgehalt. So entstehen weniger Polyphenolverbindungen, die sich an Aromen und deren Vorstufen binden, was ein besseres Kakaoaroma mit sich bringt sowie den adstringierenden und bitteren Geschmack im Prozessverlauf abschwächt (Leal et al. 2008, S. 789). Während des Verlaufes werden Proteine und Peptide hydrolysiert, sodass freie Aminosäuren entstehen, die wiederum kakaospezifische Vorläufer für das spätere Schokoladenaroma liefern. Die Konzentrationen und das Verhältnis dieser zueinander sind entscheidend für die Entwicklung der flüchtigen Aromen während der Röstung (Belitz et al. 2008, S. 997). Das Ende der Fermentation lässt sich nur abschätzen. Hierzu werden die sinkende Fermentationstemperatur, die Farben der Kakaobohnen und der Schalen sowie die Farb- und Geruchsentwicklungen der Pulpa herangezogen (Fincke 1965, S. 49).

Eine richtige Durchführung der Fermentation vermindert die Entstehung von unerwünschten Aromen, dem sogenannten Off-Flavour. Verschiedene Fehler während dieser Durchführung können das Aroma beeinträchtigen. Dazu gehört u.a. die Verarbeitung aufgrund ihres Reifegrades ungeeigneter Früchte. Unreife Früchte enthalten für die Fermentation zu wenig Zucker. Bei überreifen Früchten hingegen steigt die Wahrscheinlichkeit, dass die Bohnen bereits zu keimen begonnen haben. Zudem steigt die Gefahr des Schädlingsbefalls. Ein weiterer negativer Einfluss ist eine ungenügende Durchmischung der Bohnen, die eine unzureichende Luftzufuhr sowie eine ungleichmäßige Verteilung der Mikroorganismen zur Folge hat. Dies wiederum kann zu unfermentierten Bohnen führen, welche adstringierender und bitterer sind (Belitz et al. 2008, S. 996;

Fincke 1965, 45 ff). Ebenso kann eine Überfermentation zu Off-Flavour führen, in dem sich Fäulnisbakterien anreichern oder sich unerwünschte Amine durch enzymatische Prozesse aus Aminosäuren bilden (Lopez und Quesnel (1973), zitiert in Hegmann 2015, S. 22).

Die oxidativen Reaktionen der Fermentation setzen sich während des Trocknungsprozesses fort, sodass Aromastoffe und Vorstufen weiterhin gebildet werden (Afoakwa 2012, S. 2 ff). Die traditionelle Sonnentrocknung prägt den Schokoladengeschmack und wird daher bevorzugt angewandt, während das künstliche Trocknen durch die Anwendung von z.B. Öfen zu weiteren Off-Flavour führen kann (Off-Flavour durch Rauch wird meist als schinkenartig beschrieben), ebenso wie nicht ausreichend getrocknete Bohnen, welche durch Schimmelpilze und Fäulnisbakterien Fremdaromen annehmen (Aprotosoiaie et al. 2016, S. 76).

Ein weiterer entscheidender Schritt bei der Aromabildung / -entfaltung ist die Röstung. Wichtige Reaktionen sind dabei sowohl die Maillard-Reaktion, an der die Aromavorläufer beteiligt sind, als auch die Strecker-Reaktion, die zu dem typischen Schokoladengeschmack führt (Aprotosoiaie et al. 2016, 76 ff). Der Abbau der Aminosäuren zu Aldehyden und Aminen mit einzigartigen Aromen erfolgt vorwiegend während der Röstung (Belitz et al. 2008, S. 997). Zudem werden während des Röstprozesses viele Säuren eliminiert, wie ca. 70 % der gebildeten Essigsäure, wodurch die Kakaobohnen weniger sauer werden (Aprotosoiaie et al. 2016, S. 81). Die weniger flüchtigen Säuren bleiben weitgehend unverändert (Kongor et al. 2016, S. 49).

Bisher wurden ca. 500 flüchtige, aromagebende Komponenten identifiziert. Der Konsumkakao trägt dabei meist eine Basisnote, während der Edelkakao eher die aromatischen Geschmackseigenschaften aufweist (Aprotosoiaie et al. 2016, S. 73). Diese Komponenten, die zu den Aromen beitragen, werden in unterschiedliche chemische Stoffklassen eingeteilt, zu denen u.a.: Aldehyde, Ketone, Terpene, Ester, Ether, Alkohole und Phenole gehören (Afoakwa 2012, S. 9; Aprotosoiaie et al. 2016, S. 79 ff).

2.2) HS-SPME-GC-MS

Unter HS-SPME-GC-MS ist die Headspace-Solid-Phase-Mikroextraction-Gaschromatograph-Massspectrometrie zu verstehen, zu Deutsch die Kopfraum-Festphasenmikroextraktion-Gaschromatographie-Massenspektrometrie. Sie ist ein physikalisch-chemisches Trennverfahren, welches volatile Stoffgemische in zwei nicht miteinander mischbaren Phasen multiplikativ auftrennt und diese mittels eines nachgeschalteten Detektors erfasst. So können Stoffgemische quantitativ bestimmt werden. Die Auswertung erfolgt anhand von elektrischen Signalen in Form von Chromatogrammen (Matissek et al. 2014, S. 47 ff).

Der Aufbau dieser Apparatur, eine Zusammenführung mehrerer Geräte bzw. Gerätekomponenten, ist der Abbildung 5 zu entnehmen. Diese wird für ein besseres Verständnis der Erklärung vorangestellt.

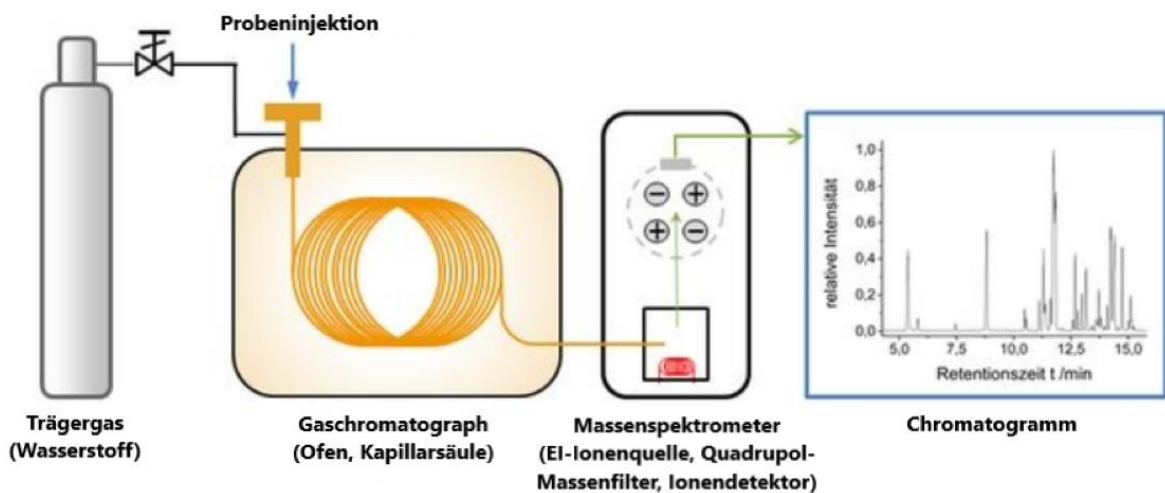


Abbildung 5 Schematische Übersicht des GC-Systems, vereinfachte Darstellung (FSKZ e. V. 2010).

Um die HS-SPME-GC-MS näher zu erläutern, wird der Weg der Probe nachvollzogen und die Komponenten der Methode einzeln erklärt.

Andere Analyseverfahren, unterschiedliche bauliche Ausführungen und verschiedene Methoden, die ebenfalls mittels der einzelnen Komponenten sowie weiterer Gerätekopplungen durchgeführt werden können, werden in dieser Arbeit nicht dargestellt. Nachfolgend werden ausschließlich die im Rahmen dieser Bachelorarbeit verwendeten Funktionen beschrieben.

2.2.1) Headspace-Analyse

Die Headspace-Analyse (HS), Kopf- oder auch Dampfraumanalyse, wird häufig zur Aromaanalyse im Lebensmittelbereich eingesetzt und dient der Abtrennung flüchtiger Stoffe von ihrer Probenmatrix sowie zu deren Anreicherung (Otto 2014, S. 16). Die Stoffgemische liegen in einer festen oder flüssigen Probe vor, die sich in einem Vial (einem Glasgefäß) befindet, welches mittels eines Septums und einer Aluminiumkappe gasdicht verschlossen ist. Zu Beginn der Analyse wird das Vial über einen festgelegten Zeitraum, der Equilibrierzeit, in einem Heizblock thermostatisiert, sodass der Partialdampfdruck steigt und die Nachweisempfindlichkeit erhöht wird. Dabei diffundieren die flüchtigen Substanzen aus der Probe und sammeln sich im Kopfraum des Vials, bis sich ein Gleichgewicht zwischen den Phasen einstellt (Kolb 1999, S. 125). Es erfolgt ein Transfer eines Aliquots der Stoffe aus der Gasphase in den Trägergasstrom des Gaschromatographen über die Solid-Phase-Mikroextraktion.

2.2.2) Solid-Phase-Mikroextraktion

Die Solid-Phase-Mikroextraktion (SPME), auch Festphasenmikroextraktion, adsorbiert und extrahiert Stoffgemische aus ihrer Matrix. Die Extraktion erfolgt direkt aus dem Kopfraum des Probenvials. Eine SPME-Faser wird mittels einer gasdichten Injektionsspritze durch das Septum gestochen und in das Vial eingebracht. Dies geschieht in dem vorliegenden Fall ohne dass die Faser

mit der Probenmatrix in Kontakt kommt, was eine Verunreinigung der Faser vorbeugt. Die Faser verweilt dort für einen festgelegten Zeitraum, der Extraktionszeit, bis sich ein Gleichgewicht des Stoffgemisches zwischen Kopfraum und Faser eingestellt hat. Nach dieser Zeit wird die Faser aus dem Vial gezogen (Kolb 1999, S. 173). Da es sich bei dem vorliegenden Stoffgemisch um ein Gas handelt, kann dieses direkt in den Trägergasstrom des Gaschromatographen injiziert werden. Feste und flüssige Stoffgemische müssen vor der Injektion, in einem sogenannten Einspritzblock, verdampft werden (Otto 2014, S. 388). Der Transfer erfolgt mittels eines automatischen Probensamplers, da die Reproduzierbarkeit gegenüber einer manuellen Injektion exakter ist.

2.2.3) Gaschromatographie

Die Gaschromatographie (GC) ist der Teil der Methode, der die Stoffgemische, welche gasförmig sind oder sich vollständig verdampfen lassen, in einzelne Substanzen auftrennt. Sie lässt sich im Wesentlichen in zwei Bereiche teilen: die mobile und die stationäre Phase. Erstere ist ein inertes Gas (meist Wasserstoff, Helium oder Stickstoff), welches über einen Strömungsregler als kontinuierlich fließendes Transportmittel die zu trennenden Stoffgemische durch die stationäre Phase trägt. Die Trennung erfolgt in der stationären Phase aufgrund der Eigenschaften der Substanzen und deren Wechselwirkungen mit dieser Phase. Die mobile Phase interagiert weder mit der stationären Phase, noch mit den Substanzen (Matissek et al. 2014, S. 58 ff).

Die stationäre Phase, die Trennstrecke, ist eine gepackte Säule bzw. eine Kapillarsäule, die mit einem Trägermaterial behaftet ist. Hier erfolgt die Auftrennung der Stoffgemische durch unterschiedliche Verfahren, abhängig von den jeweils spezifischen Verteilungskoeffizienten der Substanzen. Diese werden mittels des konstant fließenden Trägergases nach der Injektion durch die stationäre Phase bewegt, während sie von der Phase mehr oder weniger stark aufgehalten (retardiert) werden (Kolb 1999, S. 3 ff). Ist dieses Trägermaterial eine nichtflüchtige, chemisch und thermisch stabile Flüssigkeit, geschieht dies durch eine unterschiedliche Löslichkeit der Substanzen (Verteilungs-Gaschromatographie). Handelt es sich bei dem Trägermaterial um einen Feststoff, beruht die Trennung auf einer unterschiedlichen, reversiblen Adsorption (Adsorptions-Gaschromatographie). Die Säule sollte auf die Eigenschaften der Substanzen abgestimmt werden (Otto 2014, S. 396). Die Trennung kann durch eine kontrollierte Temperatur der Säule, welche sich baulich in einem Ofen befindet, verbessert werden (Kolb 1999, S. 3 ff; Matissek et al. 2014, S. 58 ff). Dazu wird die Temperatur stufenweise erhöht. So verdampfen die leichtflüchtigen Substanzen zuerst, während die Substanzen mit einem höheren Siedepunkt erst später in der Säule zu wandern beginnen (Otto 2014, S. 401). Das Temperaturprogramm sollte auf die zu untersuchenden Substanzen angepasst werden. Nach unterschiedlichen Aufenthaltszeiten in der stationären Phase, den Retentionszeiten (RT), welche von der Retardierung abhängig sind, erreichen die Substanzen nach der Trennung den Detektor, welcher mit der Säule verbunden bzw. dieser nachgeschaltet ist.

Der Detektor fungiert als Konverter. Er erzeugt aus den Änderungen der physikalischen Eigenschaften der Substanzen registrierbare Messwerte, welche als substanzabhängige Peaks verdeutlicht werden und die Signalintensität über die Peakhöhe bzw. die Peakfläche ausdrücken. Das Analysenergebnis bildet ein Chromatogramm der ausgetretenen Substanzen (Kolb 1999, S. 175). Zur Identifizierung dieses Chromatogrammes werden meist spektroskopische Verfahren als Detektionsmethode genutzt. Eine häufig eingesetzte Kombination ist die Kopplung einer GC mit einer Single-Quadrupol-MS.

2.2.4) Massenspektrometrie

Die Massenspektrometrie (MS) bzw. das Massenspektrometer trennt und misst Ionen unterschiedlicher Masse und Ladung in der Gasphase. Sie liefert Aussagen zu den relativen Mengen der entstandenen Ionen, bei Einzelsubstanzen zu deren Struktur sowie bei Gemischen zu deren qualitativen und quantitativen Zusammensetzung. Das System besteht aus einem Probeneinlass, durch welches die Substanzen in das Massenspektrometer eingebracht werden, einer Ionenquelle zur Ionisierung der Substanzen, einem Ionenanalysator, der die Ionen nach dem Masse-zu-Ladungsverhältnis auftrennt, sowie einem Ionendetektor, der dies erfasst und meist an eine Software gekoppelt ist, welche die Messergebnisse anzeigt und auswertet (Budzikiewicz 1998, S. 3).

Da es sich bei den Proben um gasförmige Substanzen handelt, müssen diese vor der Ionisierung nicht mehr verdampft werden. Sie gelangen durch die Kopplung mit der GC direkt über die Säule zur Ionenquelle des Massenspektrometers (Budzikiewicz 1998, S. 9 ff). Dort erfolgt die Ionisierung der Substanzen, in dem deren neutrale Atome oder Moleküle mittels Elektronenbeschuss in Ionen getrennt werden. Bevor die Ionen in den Analysator gelangen, werden diese durch zwei Linsen zu einem Ionenstrahl gebündelt (Matissek et al. 2014, S. 80).

Als Ionenanalysator wird im vorliegenden Fall ein Quadrupol eingesetzt, der die Ionen in einem erzeugten Magnetfeld nach ihrem Masse-zu-Ladungsverhältnis trennt. Dieser besteht aus vier im Quadrat angeordneten Stabelektroden, von denen kreuzweise jeweils zwei leitend miteinander verbunden sind. An die Stäbe wird eine Wechselspannung gelegt, sodass sich abwechselnd positive und negative Felder um die Mittelachse bilden, wodurch sich die Kationen und die Anionen in entgegengesetzte Richtungen beschleunigen und so getrennt werden. Überlagert wird dies durch eine positive Gleichspannung. Beide Spannungen sind so aufeinander abgestimmt, dass nur Ionen mit jeweils einem bestimmten Verhältnis von Masse-zu-Ladung zu einem bestimmten Zeitpunkt das Stabsystem passieren können und zu dem Ionendetektor gelangen (Budzikiewicz 1998, S. 32 ff).

Das Standard-Detektorsystem besteht aus in Reihe geschalteten Elektroden, den Dynoden, an denen eine Spannung anliegt. Sobald eine Ladung, wie hier die Ionen, auf die Dynoden trifft, emittieren diese selbst Elektronen und erzeugen ein elektronisch auswertbares Signal (Matissek et al. 2014, S. 76 ff).

Mittels einer Software werden die Substanzen anhand der jeweiligen Werte von Masse-zu-Ladung identifiziert. Dies geschieht mit Hilfe von Spektren-Datenbanken (wie der NIST-Datenbank), deren Spektren-Sammlung mit den Ergebnissen auf Übereinstimmung abgeglichen werden und in absteigender Wahrscheinlichkeit die Ausgangssubstanz angeben (Budzikiewicz 1998, S. 45). Das Detektorsignal, d.h. die Intensität, wird gegen die Retentionszeiten aufgetragen und es entsteht ein Chromatogramm. Die dort sichtbaren Peaks können zur Auswertung herangezogen werden (Matissek et al. 2014, S. 76 ff).

2.2.5) Auswertung

Die Kombination aus Trennverfahren und Massenspektrometrie erlaubt es, auch kleinste Mengen zu identifizieren und zu quantifizieren. Die Auswertung der Chromatogramme kann daher sowohl qualitativ als auch quantitativ erfolgen. Bei der qualitativen Analyse erfolgt die Identifizierung der Peaks über Vergleichsmessungen mit Referenzsubstanzen bzw. über eine Datenbank anhand der Retentionszeiten (ausschlaggebend ist der höchste Punkt des Peaks). Für die quantitative Analyse werden Kalibriermessungen durchgeführt, mit deren Konzentrationen die integrierten Peakflächen der Chromatogramme in Relation gesetzt werden, um die Menge oder Konzentration der Probe zu bestimmen (Matissek et al. 2014, S. 63).

2.3) Kalibrierung

Die Kalibrierung beschreibt eine Methode, welche die Verbindung zwischen der Stoffmenge bzw. der Konzentration und der Signalgröße, d.h. der Peakhöhe oder der Peakfläche, darstellt. Bei der quantitativen Analyse basiert die Auswertung auf dem Vergleich der Probensubstanz mit einer Standardsubstanz. Dabei werden die Peakhöhen bzw. wie in diesem Fall die Peakflächen, welche in den chromatographischen Bedingungen weniger anfällig gegenüber Schwankungen, unsymmetrischen Peaks und Überladungen sind, verglichen. Da unterschiedliche Substanzen bei gleicher Konzentration nicht zwingend die gleiche Fläche aufweisen, muss für jede Substanz der sogenannte Responsefaktor bestimmt werden. Dieser beschreibt das Verhältnis der Konzentration pro Peakfläche (Kolb 1999, S. 207).

Die Peakfläche wird zumeist mittels elektronischer Datenverarbeitung über festgelegte Integrationsparameter bestimmt und steigt mehrheitlich proportional zur Stoffmenge an. Entscheidend ist, dass sowohl der Peakanfang als auch das Peakende richtig erkannt werden, da anderenfalls Fehler in der Flächenbestimmung auftreten können. Mögliche Abweichungen der automatischen Integration können weitestgehend auch manuell eingestellt werden (Schwedt und Vogt 2010, S. 220). Eine eher selten angewandte, manuelle Flächenbestimmung erfolgt anhand eines gaußkurvenförmigen Peaks über die Betrachtung des Peaks als Dreieck und lässt sich als Produkt von Peakhöhe und Peakbreite in halber Höhe berechnen (Kolb 1999, S. 207).

Die Peakflächen der Standardsubstanzen bilden im Analysenreport die Ausgangsbasis der quantitativen Analyse. Über die daraus angefertigten Kalibriergeraden bzw. deren Kalibrierfunktionen werden die Stoffkonzentrationen der Proben bestimmt (Kolb 1999, S. 207). Die Funktion ($y = m * x + b$) drückt dabei den häufig bestehenden linearen Zusammenhang zwischen der Intensität der detektierten Signalgröße (y) und der Konzentration des Analyten (x) aus, wobei m die Steigung und b den y -Achsenabschnitt bezeichnen (Matissek et al. 2014, S. 17).

Bei der Kalibrierung werden zumeist die externe Standardmethode, die interne Standardmethode sowie die Standardadditionsmethode unterschieden, welche nachfolgend beschrieben sind. Ebenfalls erfolgt eine Anmerkung zur Mehrpunkt-Kalibrierungsmethode.

2.3.1) Externe Standardmethode:

Bei der externen Standardmethode wird eine bekannte Konzentration einer Standardprobe separat gemessen und das Ergebnis mit dem gemessenen Parameter der Probe in Relation gesetzt. Die Konzentration des Analyten in der Probe (w) kann zum einen über folgenden Zusammenhang ermittelt werden (Matissek et al. 2014, S. 63 ff):

$$w = \frac{A_{\text{Stoff}} * c_{\text{Std}} * F}{A_{\text{Std}} * m}$$

A_{Stoff} Peakfläche des untersuchten Analyten in der Probe

A_{Std} Peakfläche des Standards

c_{Std} Konzentration des Standards

F Umrechnungsfaktor auf entsprechende Einheit

m Einwaage der Probe

Zum anderen kann die Konzentration des Analyten in der Probe über eine Kalibrierreihe des Standards durch eine Kalibriergerade ermittelt werden, wie in Abbildung 6 dargestellt. Dieses Verfahren wird im Analyseteil dieser Bachelorarbeit angewandt.

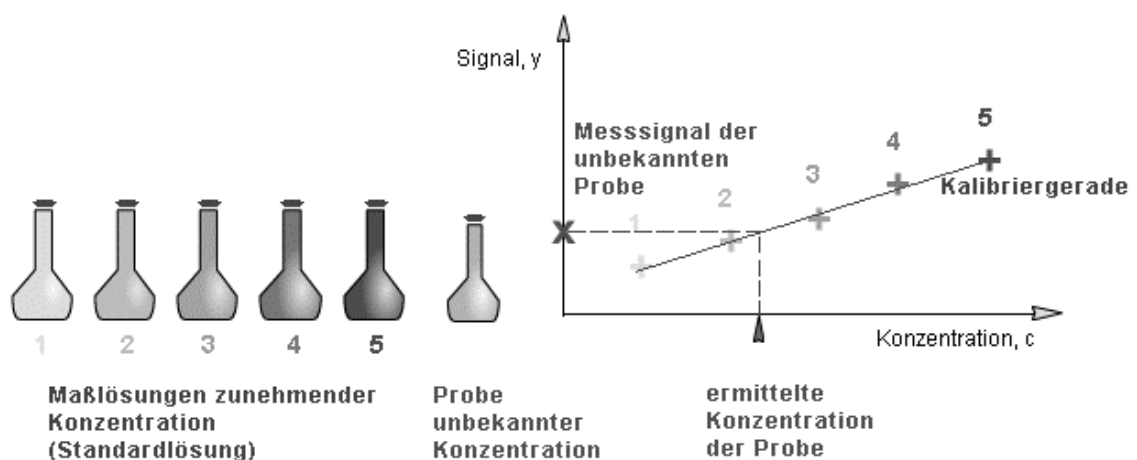


Abbildung 6 Schematische Darstellung der Umsetzung einer Kalibrierung (ChemgaPedia 2016).

Vorteile des externen Standards sind zum einen die Zeitersparnis im Routinebetrieb, da nicht zu jeder (vergleichbaren) Probe ein Standard pipettiert werden muss und zum anderen die Präzision, da der Autosampler meist genauer ist als eine manuelle Einspritzung. Ein Nachteil dieses Standards ist, dass das dosierte Volumen von Probe und Standard konstant sein muss. Ist dies nicht möglich, ist eine Korrektur über einen Hilfspeak (Normierungsstandard) möglich, der in beiden Substanzen gleich dosiert sein muss (eine bekannte Konzentration ist nicht erforderlich). Die Anpassung erfolgt über das Flächenverhältnis des Hilfspeaks mit der Fläche des Standards (Kolb 1999, S. 213).

2.3.2) Interne Standardmethode

Bei der internen Standardmethode wird sowohl der Probe als auch dem Kalibrierstandard, der die quantitativ zu bestimmenden Komponenten enthält, eine definierte, physikalisch-chemisch verwandte, aber probenfremde Komponente (der interne Standard) als relative Bezugsgröße zugefügt. Die Berechnung beruht darauf, dass sich die Massen zweier Stoffe wie ihre korrigierten Peakflächen verhalten, d.h. wenn sich die Konzentration des internen Standards verändert, kann davon ausgegangen werden, dass sich in gleicher Weise die Konzentration des Analyten in der Probe verändert hat (Kolb 1999, S. 215). Der interne Standard ermöglicht, aufgrund seines ähnlichen Verhaltens, eine Kompensation von möglichen systemischen Fehlern bei der Probenvorbereitung oder der Analyse. Die Anforderungen an diesen internen Standard sind eine größtmögliche Reinheit, eine bekannte Menge / Konzentration und die Abwesenheit in den zu untersuchenden Proben. Nachteilig ist bei dieser Methode ein erhöhter Zeitaufwand, da zu jeder Probe ein Standard pipettiert werden muss. Zudem ist die Einarbeitung in z.B. eine feste Matrix schwierig (Kolb 1999, S. 215). Dieses Verfahren kann in dem Analyseteil dieser Bachelorarbeit nicht angewandt werden, da die Kakaoproben bereits in einer anderen Bachelorarbeit ohne Standard analysiert wurden (siehe 3.1).

2.3.3) Standardadditionsmethode

Bei der Standardadditionsmethode, auch Aufstockmethode genannt, wird der Probe eine bekannte Menge der zu bestimmenden Komponente zugesetzt. Für jede Probe werden bei dieser Methode die Chromatogramme mindestens zweier Analysen benötigt. Zum einen das Chromatogramm der unveränderten Probe, zum anderen das mit dem zugesetzten Standard, bei dem der entsprechende Peak im Chromatogramm größer ausfällt. Die Menge der Probensubstanz kann über die Flächendifferenz berechnet werden. Diese Methode wird häufig verwendet, um Einflüsse der Probenmatrix weitestgehend auszuschließen. Nachteile bei der Standardadditionsmethode sind ein hoher Zeitaufwand sowie die Reproduzierbarkeit, da einerseits eine exakte Dosierbarkeit vorauszusetzen ist und andererseits zwei Chromatogramme mit unabhängig voneinander erfolgten Einspritzungen verglichen werden müssen (Kolb 1999, S. 219). Dieses Verfahren kann in dem Analyseteil dieser Bachelorarbeit ebenfalls nicht angewandt werden, da die Kakaoproben bereits in der Bachelorarbeit von KINKADE (2019) analysiert wurden (siehe 3.1).

2.3.4) Mehrpunkt-Kalibrierungsmethode

Da nicht immer davon ausgegangen werden kann, dass ein linearer Zusammenhang zwischen Probenmenge und Peakfläche besteht, ist eine statistische Absicherung wichtig. Diese kann durch Wiederholungsanalysen und die Bildung von Mittelwerten erfolgen oder durch variierende Konzentrationen der Standardkomponenten und deren Berechnung (Kolb 1999, S. 223). Bei einer Mehrpunkt-Kalibration werden mindestens zwei Standardkonzentrationen analysiert, die im Bereich der zu analysierenden Proben liegen sollten. Noch genauere Ergebnisse lassen sich erzielen, wenn eine ganze Kalibrierreihe durchgeführt wird, die den zu erwartenden Konzentrationsbereich umfasst. Aufgrund von Messungenauigkeiten wird hier meist eine Ausgleichsgerade (lineare Trendlinie) erstellt (Schwedt und Vogt 2010, S. 221).

3) Substanzen, Materialien und Geräte

Nachfolgend werden die verwendeten Kakaobohnen näher beschrieben. Zudem folgt eine Auflistung der genutzten Chemikalien, der Materialien sowie der verwendeten Geräte.

3.1) Kakaoproben

Im Fokus dieser Arbeit stehen „Chuncho“-Kakaobohnen aus Peru. Peru bietet eine hohe Vielfalt und genetische Variabilität an Kakao. Einer ist der sogenannte „Chuncho“-Kakao aus der Provinz La Convención in Cusco-Peru. Der „Chuncho“ (Abbildung 7) ist ein hochwertiger Edelkakao und zählt zu den ältesten Kakaos Perus. Sein Aroma ist fein und wird als blumig, fruchtig und süß, nussig, sowie mit einem niedrigen Säuregehalt, einer geringen Bitterkeit und Adstringenz beschrieben (Céspedes-Del Pozo et al. 2017).



Abbildung 7 Eine Vielfalt der Kakaofrüchte
"Chuncho" von Cusco (Rojas et al. 2018, S. 20).

Die beprobten Kakaobohnen wurden im Mai 2018 geerntet und fermentiert. Die Fermentation erfolgte bei der Cooperativa Agraria Cafetalera Macamango Ltd. in einem Greenhouse mit Plastikplane. Sie wurde in Holzboxen (75 x 75 x 75 cm) durchgeführt, welche mit Bananenblättern ausgelegt wurden. Die Füllmenge betrug 200 kg, die Füllhöhe lag bei 60 cm. Abgedeckt wurden die Kisten mit 4 - 6 Lagen Jute. Nach 48 Stunden wurden die Kakaobohnen das erste Mal in benachbarte Holzboxen umgeschichtet, danach alle 24 Stunden. Die Behandlung war jedes Mal identisch. Es wurden zwei unterschiedliche Fermentationsarten angewandt: eine natürliche bzw. spontane Fermentation sowie eine inokulierte Fermentation. Bei der inokulierten Fermentation wurden den Kakaobohnen Hefen (S.c. Zymaflore® X5) zugesetzt, von denen keine genauere Zusammensetzung

bekannt ist. Die Entnahme der Kakaoproben erfolgte am ersten, dritten sowie fünften Tag der Fermentation.

Die Analyse der aroma-flüchtigen Komponenten der verwendeten Kakaobohnen anhand der HS-SPME-GC-MS-Methode erfolgte in der Bachelorarbeit von KINKADE (2019). Die Arbeit beschreibt den „Aufbau eines kakaospezifischen Panels zur Analyse von aromaflüchtigen Komponenten in Kakaobohnen während der Nacherntebehandlung anhand einer HS-SPME-GC-MS/O-Methode“. Die aus der Arbeit stammenden Chromatogramme fließen in diese Bachelorarbeit ein und bilden die Grundlage der Auswertung hinsichtlich der quantitativen Kakaoanalyse.

3.2) Chemikalien

Die verwendeten Chemikalien sind analysenrein und können der nachfolgenden Tabelle 1 entnommen werden.

Tabelle 1 Übersicht über die verwendeten Chemikalien.

Chemikalien	Chem. Stoffklasse	CAS-Nr.	Hersteller
2,3-Butandiol (Mix aus meso- D- und L-form)	Alkohole / Phenole	513-85-9	MERCK
(-)- β -Pinen	Terpene	18172-67-3	ROTH
Essigsäure	Säuren	64-19-7	MERCK
Ethylacetat	Ester	141-78-6	SIGMA-ALDRICH
2-Heptanol	Alkohole / Phenole	543-49-7	MERCK
Isoamylalkohol	Alkohole / Phenole	123-51-3	SIGMA-ALDRICH
Methanol	Alkohole / Phenole	67-56-1	ROTH
2-Pentanol	Alkohole / Phenole	6032-29-7	MERCK
2-Pentanon	Ketone	107-87-9	SIGMA-ALDRICH
2-Phenylethanol	Alkohole / Phenole	60-12-8	SIGMA-ALDRICH
Schwefelsäure	Säuren	7664-93-9	neoLab
Wasserstoff	Gas	1333-74-0	Westfalen AG

Die Ester 2-Pentylacetat und 2-Heptylacetat werden vor der Analyse frisch angesetzt. Dabei wird zu 1 ml des jeweiligem Alkohols 1 ml Essigsäure gegeben, sowie 500 μ l Schwefelsäure zur Stabilisierung.

Die Auswahl der Chemikalien für die quantitative Analyse erfolgt nach der Verfügbarkeit der Standardsubstanzen sowie den detektierten und identifizierten Substanzen aus der Arbeit von KINKADE (2019). Hier wurde eine Identifikation der aroma-aktiven Substanzen ab einer Wahrscheinlichkeit von 75 % angenommen (Kinkade 2019, S. 28).

3.3) Materialien

Die verwendeten Materialien können der nachfolgenden Tabelle 2 entnommen werden.

Tabelle 2 Übersicht über die verwendeten Materialien.

Materialien	Anmerkung	Hersteller
Vial / Probengefäß	20 ml Vial N20	Macherey-Nagel
Septum / Dichtscheibe	N19, Butyl beige, PTFE grau, 1,3 mm, Lot: 12028/16	Macherey-Nagel
Vial-Deckel / Aluminiumkappe	Magnetic Crimp Caps N 20, silber, Loch, Lot: 150704582	Macherey-Nagel

3.4) Geräte und Software

Die verwendeten Geräte bzw. Gerätekomponenten können der nachfolgenden Tabelle 3 entnommen werden. Der Aufbau ist in der nachfolgenden Abbildung 8 dargestellt.

Tabelle 3 Übersicht über die verwendeten Geräte.

Geräte	Anmerkung	Hersteller
Headspace-Autosampler	CONCEPT gesteuert	PAS Technologies
SPME-Faser	PDMS / DVB, Stableflex 23 Ga (Mantel: 50 / 30 µm, Länge: 1 cm)	Supelco, Sigma-Aldrich (Taufkirchen, Deutschland)
GC-Anlage	Säule: DB-WAX-Säule (250 µm, 25 µm Filmdicke bei 30 m Länge; Agilent Technologies, Waldbronn, Deutschland) Trägergas: Wasserstoff (Fließgeschwindigkeit 3,4 ml / min.)	Agilent Technologies (6890N Network GC-System)
Detektor	Massenspektrometer 5975C VL MSD with Triple Axis Detector; MS (Elektronenstoßionisation): 70mV Quadrupolmassenfilter	Agilent Technologies
Software	HP Chemstation, Version A.03.00	Agilent Technologies (zur GC)
	OpenChrom®, Lablicate Edition (Lawrence)	Lablicate GmbH (Wenig 2019)
	SPSS	IBM SPSS Statistics, Version 26



Abbildung 8 Aufbau des HS-SPME-GC-MS (eigene Aufnahme).

4) Methoden

Im Folgenden werden sowohl die Probenvorbereitung inklusive der Verdünnungsreihen, die analytischen Methoden sowie die statistischen Methoden dargestellt.

4.1) Probenvorbereitung

Die Chromatogramme der Kakaoproben liegen bereits aus der Arbeit von KINKADE (2019) vor. Diese werden übernommen und mittels der Kalibriergeraden (siehe 2.3.1 / 4.3.1) quantitativ ausgewertet.

Die Kakaobohnen wurden für die Analyse aus der Schale gelöst und mit einem Mörser zu Nibs zerkleinert. Die Einwaage pro Vial betrug ca. 2 g. Für jede Fermentationsart wurden je Fermentationstag drei Probenvials vorbereitet, welche je zweimal analysiert wurden. Die Proben wurden nach der Methode von TRABER (siehe 4.2.1) mit einer Equilibrierzeit von 10 min. und einer Extraktionszeit von 28 min. bearbeitet (Kinkade 2019, S. 26).



Abbildung 9 Präparation der Kakaobohnen (Kinkade 2019, S. 26).

Da die Kakaoproben bereits analysiert wurden, wird zur Erstellung der Kalibriergeraden die Methode des externen Standards gewählt (siehe 2.3.1). Für die Kalibriergeraden der zu untersuchenden Substanzen (Standards) wird jeweils eine Verdünnungsreihe erstellt. Die Substanzen werden trotz unterschiedlicher Retentionszeiten nicht kombiniert, jeder Standard wird separat gemessen. Damit die Konzentrationen möglichst äquidistant sind, d.h. die zu erwartenden Probenkonzentrationen liegen im Bereich der Kalibriergeraden, werden zunächst Verdünnungen von 1 %, 0,5 % sowie 0,1 % als Testmessungen analysiert, um eine Tendenz der Konzentrationen zu erhalten.

Das Gesamtvolumen der Proben (hier definiert als eingesetzter Standard bzw. dessen Verdünnungen) pro 20 ml Vial beträgt 200 µl. Als Lösemittel wird analysereines Methanol verwendet, welches in das Vial vorgelegt wird. Das Pipettierschema sieht bei den Testmessungen wie folgt aus:

Tabelle 4 Pipettierschema der Testmessungen.

Art der Verdünnung	Menge des Lösemittels	Menge des Standards
1 %	198 µl	2 µl
0,5 %	100 µl	100 µl*
0,1 %	180 µl	20 µl*

* Menge der Verdünnung von 1 %.

Nachdem beide Substanzen in das Vial pipettiert wurden, wird dieses mit einem Septum und einem Aluminiumdeckel gasdicht verschlossen.

Die Chromatogramme bzw. die Peaks der Testergebnisse werden für eine erste Übersicht mit den höchsten und niedrigsten Peaks der Kakao-Chromatogramme übereinandergelegt. Aus dieser ersten Übersicht der Ergebnisse werden der Stichprobenumfang sowie die Konzentrationsstufen der Standards für die Kalibriergerade ermittelt.

Für das Pipettierschema der Verdünnungen bildet der Standard (100 %) das Ausgangsmaterial, von dem aus eine Verdünnung von 1 % hergestellt und weiter verdünnt wird (Tabelle 5).

Tabelle 5 Pipettierschema der Verdünnungsreihen.

Art der Verdünnung	Menge des Lösemittels	Menge der Lösung (1 %)
0,75 %	150 µl	50 µl
0,50 %	100 µl	100 µl
0,25 %	50 µl	150 µl
0,10 %	20 µl	180 µl
Das Ausgangsmaterial für den nächsten Verdünnungsabschnitt bildet die Lösung von 0,1 %.		
Art der Verdünnung	Menge des Lösemittels	Menge der Lösung (0,1 %)
0,075 %	150 µl	50 µl
0,050 %	100 µl	100 µl
0,025 %	50 µl	150 µl
0,010 %	20 µl	180 µl

Dieses Schema wurde auf die meisten Substanzen angewandt. Teilweise erfolgte eine weitere Verdünnungsreihe bis 0,001 % mit dem Ausgangsmaterial der Lösung von 0,010 % sowie eine Verdünnungsreihe von 5 % auf 1 %, bei der die Lösung von 5 % das Ausgangsmaterial stellte. Eine Übersicht der Verdünnungen gibt Tabelle 6:

Tabelle 6 Übersicht über die Verdünnungen der Standards, alphabetisch geordnet.

Standards	Verdünnungen (Angaben in %)
2,3-Butandiol	0,10 0,075 0,050 0,025 0,010 (5,0 4,5 4,0 3,5 3,0 2,5 2,0 1,5 1,0 0,75 0,50 0,25) * *die Daten werden bei der Auswertung nicht verwendet (siehe 6.1)
Ethylacetat	1,0 0,75 0,50 0,25 0,10 0,075 0,050 0,025 0,010
2-Heptylacetat	1,0 0,50 0,10 0,075 0,050 0,025 0,010 0,005
Isoamylalkohol	1,0 0,50 0,10 0,075 0,050 0,025 0,010
2-Pentanol	1,0 0,50 0,10 0,075 0,050 0,025 0,010 0,005
2-Pentanon	1,0 0,50 0,10 0,075 0,050 0,025 0,010 0,005
2-Pentylacetat	1,0 0,50 0,10 0,075 0,050 0,025 0,010 0,005
Phenylethanol	1,0 0,50 0,10 0,075 0,050 0,025 0,010 0,005
(-)- β -Pinen	0,10 0,075 0,050 0,025 0,010 0,0075 0,0050 0,0025 0,0010

4.2) Analytische Methoden

Nachfolgend wird auf die Durchführung der analytischen Methode sowie die Integration der Peakflächen eingegangen.

4.2.1) Analytische Durchführung

Vor jeder Analyse werden ein Blank ohne Faserinjektion und ein Leerlauf zur Faserkonditionierung durchgeführt, um möglichen Verunreinigungen der Faser und der Säule entgegenzuwirken. Danach erfolgt die Analyse der Proben.

Pro Durchlauf werden zwei unterschiedliche Standardreihen gemessen. Die Vials beginnen mit der niedrigsten Konzentration und werden alternierend in das Template des Heizblocks gestellt. So wird die Messgenauigkeit verbessert, da hohe Konzentrationen nicht auf der Faser zurückbleiben und niedrige Konzentrationen so ggf. aufsummieren. Zudem wird die Faser durch den Wechsel der Substanzen etwas gereinigt, da die Retentionszeiten immer so gewählt wurden, dass diese weit auseinander liegen und somit der entsprechende Bereich nur bei jeder zweiten Messung belegt wird.

Die Equilibrierzeit der Proben beträgt 10 Minuten bei einer Temperatur von 60°C. Dabei diffundieren die flüchtigen Substanzen aus der Probe und sammeln sich im Kopfraum des Vials (Headspace). Nach dieser Zeit durchsticht die Injektionsspritze mit der SPME-Faser das Septum des Vialverschlusses. Die Faser verbleibt mit einer Extraktionszeit von 30 Sekunden im Vial und verlässt

dieses wieder (Festphasenmikroextraktion, SPME). Mittels Autosamplers werden die Substanzen in die GC-Säule überführt und bei einer Temperatur von 270°C in den Trägergasstrom splitlos injiziert. Als Trägergas wird Wasserstoff mit einer Fließgeschwindigkeit von 3,4 ml / min. eingesetzt. Die Heizraten des Temperaturverlaufes der GC-Säule sind der Tabelle 7 zu entnehmen.

Die Methode basiert auf dem Scientific Project „*Methodenentwicklung für die Analyse von Kakaomassen mittels HS-SPME-GC-MS/GC-O*“ von TRABER (2018). Diese ist an die Kakaoproben angepasst und bietet eine geeignete Peakflächenauftrennung (Traber 2018, S. 26). Zudem wurden die Kakaoproben von KINKADE (2019) ebenfalls nach dieser Methode analysiert, sodass die Retentionszeiten der Standards, durch den Einsatz der gleichen Methode, mit denen der Kakaoproben nahezu übereinstimmen, was den Vergleich der Analyse erleichtert.

Tabelle 7 Temperaturverlauf der GC-Methode nach TRABER (2018).

Anfangstemperatur	Zeit	Anstieg	Zieltemperatur
40°C	3,00 Minuten	-	40°C
40°C	2,33 Minuten	3°C / Minute	47°C
47°C	2,30 Minuten	10°C / Minute	70°C
70°C	12,33 Minuten	3°C / Minute	107°C
107°C	2,00 Minuten	-	107°C
107°C	4,46 Minuten	13°C / Minute	165°C
165°C	3,40 Minuten	25°C / Minute	250°C

Nach der Auftrennung der Substanzen werden diese am Ende der Analyse mittels der MS detektiert. Die Temperatur des Detektors liegt während der Analyse bei 230°C. Die Signale werden über die HP ChemStation Software aufgezeichnet. Die Auswertung der Chromatogramme erfolgt über die Software OpenChrom® (Wenig 2019).

4.2.2) Peakflächenintegration

Die Peaks der Kakaoproben wurden bereits in der Arbeit von KINKADE (2019) durch den Vergleich der Retentionszeiten mit der NIST-Datenbank (National Institute of Standards and Technology) identifiziert. Durch einen Abgleich mit den Peaks der Standards konnten diese Peaks ebenfalls bestätigt werden.

Für die quantitative Analyse werden alle Werte der Peakflächen in die Software OpenChrom® (Wenig 2019) übertragen. Die Peakflächen der Standards sowie der Kakaoproben werden manuell integriert. Dabei wird die Basislinie des jeweiligen Chromatogrammes vom Peakanfang zum Peakende verlängert und die so eingeschlossene Fläche mittels der Software berechnet. Zur Reduzierung von möglichen Fehlern / Abweichungen während der manuellen Integration und zur Annäherung an den wahren Wert, wird jeder Peak dreifach bestimmt (Kohn und

Öztürk 2017, S. 171). Weitere Berechnungen erfolgen anhand der Mittelwerte dieser Bestimmungen. Das Ergebnis der Integration sind die Flächenangaben der Peaks, die in Abhängigkeit zur Konzentration gesetzt werden, welche dem Anhang 2 entnommen werden können. Die Methode zur manuellen Integration in OpenChrom® ist im Anhang 1 hinterlegt.

4.3) Statistische Methoden

Nachfolgend werden die Grundlagen für die angewandten statistischen Verfahren aufgeführt. Es wird auf die Berechnung der Konzentrationen der aroma-aktiven Substanzen, die Signifikanztests und den Boxplot eingegangen.

4.3.1) Konzentrationsbestimmungen

Die Bestimmung der Konzentrationen der aroma-aktiven Substanzen der Kakaoproben erfolgt mittels Excel (MS Office 365). Das Ergebnis der Peakflächenintegration der Standards ist je Substanz eine Kalibriergerade, ausgedrückt durch die Fläche in Abhängigkeit von der Konzentration (diese sind dem Anhang 3 zu entnehmen). Dieser lineare Zusammenhang wird über die Kalibrierfunktion ausgedrückt, welche zur Berechnung der Konzentrationen der Kakaoproben herangezogen wird. Ebenfalls lässt sich der Geraden das Bestimmtheitsmaß (R^2) zur Beurteilung des linearen Zusammenhangs ($R^2 = 1$) entnehmen (Matissek et al. 2014, S. 17).

Die Konzentrationen der Standards werden mit den integrierten Peakflächen der Kakao-Chromatogramme in Relation gesetzt (siehe 2.3.1), um die Konzentrationen der Proben zu bestimmen. Diese werden auf je 2 g bezogen und können den Ergebnissen (siehe 5.1 bis 5.9) entnommen werden. Für die nachfolgenden Signifikanztests werden die Konzentrationen in SPSS überführt.

4.3.2) Signifikanztests

Eine Varianzanalyse wird u.a. durchgeführt, um die Wirkung mehrerer Einflussvariablen auf eine abhängige Variable zu prüfen (Zöfel 2006, S. 201). Die Voraussetzungen zur Durchführbarkeit werden durch den Test auf Normalverteilung (mittels Shapiro-Wilk Test) sowie den Test der Homogenität der Varianzen (mittels der Levene-Statistik) geprüft. Beide zeigen signifikante Abweichungen auf. Aufgrund dieser Abweichungen wird der H-Test nach Kruskal und Wallis als parameterfreier Test angewandt. Dieser bezieht sich auf den Vergleich von mehr als zwei unabhängigen Variablen hinsichtlich ihrer zentralen Tendenz (Zöfel 2006, S. 127 ff). Im Falle von signifikanten Ergebnissen des Kruskal-Wallis Tests, d.h. auftretender Unterschiede hinsichtlich der aroma-aktiven Substanzen in Bezug auf die Fermentation sowie die Tage der Probenentnahme, wird zur genaueren Aufklärung der Signifikanzen der Bonferroni-Test als Post-hoc Test durchgeführt. Die Durchführungen der Signifikanztests erfolgen in SPSS und sind dem Anhang 4 zu entnehmen.

4.3.3) Boxplot

Der Boxplot wird zur Veranschaulichung der Datenlage verwendet. Er stellt die Verteilung der Werte in einer Box dar. Der Darstellungsbereich, auch Interquartilsabstand, zeigt die Lage der mittleren 50 Prozent der Werte und reicht vom 25 Prozent-Quantil bis zum 75 Prozent-Quantil, wobei der Median das Zentrum der Verteilung der aufsteigend geordneten Merkmalswerte aufzeigt. An den Enden der Box geben sogenannte Whisker mit der 1,5-fachen Länge der Box die Randbereiche, d.h. den minimalen und den maximalen Wert der Stichprobe an. Ausreißer werden separat durch weitere Symbole gekennzeichnet. Der Boxplot eignet sich speziell für den visuellen Vergleich bei mehreren Messwertreihen (Kohn und Öztürk 2017, S. 53 ff).

5) Ergebnisse

Der Kruskal-Wallis Test mit anschließendem Post-hoc Test nach Bonferroni hat einen signifikanten Einfluss hinsichtlich der aroma-aktiven Substanzen in Bezug auf die Fermentation und die Tage der Probenentnahme ergeben. Im Folgenden werden die Ergebnisse der Substanzen (Aromastoffe) individuell vorgestellt und ihr Vorkommen in den untersuchten Kakaoproben beschrieben.

Dargelegt werden die Konzentrationen der Aromen im Kakao sowie der zugehörige Median (Med.), welcher in dieser Auswertung vorrangig verwendet wird, da er zum einen den Ausgangsparameter des Kruskal-Wallis Tests stellt und zum anderen weniger empfindlich gegenüber Extremwerten, wie z.B. Ausreißern, ist (Kohn und Öztürk 2017, S. 46). Zudem werden auf der Grundlage der metrischen Daten der Mittelwert (MW) und die Standardabweichung (SD) als allgemeine statistische Parameter angegeben (Matissek et al. 2014, S. 25 ff). Des Weiteren folgt eine Veranschaulichung der Datenlage durch den Boxplot und eine Aufführung der Ergebnisse aus den Signifikanztests (mit $\alpha = 0,05$), welche detaillierter dem Anhang 4 zu entnehmen sind. Ferner erfolgt die Angabe des Bestimmtheitsmaßes (R^2). Die ausgewerteten Aromakomponenten, welche je Kakaobohnen-Typ sechs Mal analysiert wurden (siehe 4.1), werden alphabetisch aufgezeigt.

5.1) 2,3-Butandiol



Sowohl in den Chromatogrammen der Standards als auch in den Chromatogrammen der Kakaoproben, zeichnen sich je zwei Peaks ab (RT 15,8 und RT 16,5), bei denen es sich gemäß der NIST-Datenbank um 2,3-Butandiol handelt. Da ein Mix-Standard (aus meso- D- und L-Form) verwendet wurde, ist dies zurückzuführen auf die strukturelle Form der Stereoisomere, die meist zu Mehrfachpeaks führen (BVL 2017). Die Peaks werden getrennt voneinander bewertet.

Nachfolgend dargestellt ist die Konzentration von 2,3-Butandiol (RT 15,8) im Kakao, sowie die signifikanten Unterschiede zwischen den Kakaoproben.

Tabelle 8 2,3-Butandiolkonzentration (in %) in den Kakaoproben (2 g).

2,3-Butandiol (RT 15,8)						
	natürlich Tag 1	natürlich Tag 3	natürlich Tag 5	inokuliert Tag 1	inokuliert Tag 3	inokuliert Tag 5
	0,017	0,252	0,223	0,060	0,324	0,398
	0,018	0,270	0,161	0,051	0,332	0,467
	0,014	0,272	0,408	0,058	0,396	0,386
	0,009	0,274	0,359	0,056	0,399	0,447
	0,013	0,240	1,036	0,057	0,426	0,447
	0,009	0,273	0,978	0,069	0,424	0,818
Med.	0,013	0,271	0,383	0,057	0,397	0,447
MW	0,013	0,264	0,527	0,058	0,383	0,494
SD	0,004	0,014	0,382	0,006	0,045	0,162

Der Aromastoff ist (gemäß dem Median) am inokulierten Tag 5 am stärksten, gefolgt vom inokulierten Tag 3 und dem natürlichen Tag 5. Am geringsten ist er am natürlichen Tag 1.

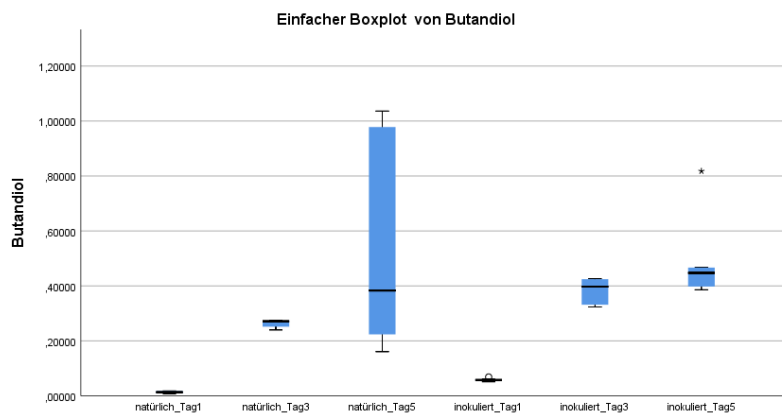


Abbildung 10 2,3-Butandiol (RT 15,8) in unterschiedlichen Kakaoproben.

Dargestellt sind die Konzentrationen 2,3-Butandiol (RT 15,8) in den Proben natürlichen und inokulierten Kakaos mit einer Entnahme der Kakaoproben am ersten, dritten und fünften Tag der Fermentation.

Boxplots Linie des Medians, Standardfehler (Box) und Standardabweichung (Whisker), Ausreißer (Kreis), extreme Ausreißer (Stern).

Die Konzentration von 2,3-Butandiol (RT 15,8) nimmt im Verlauf der Fermentation zu. Die natürliche Fermentation zeigt dabei einen Unterschied von Tag 1 mit einer mittleren Konzentration von 0,013 % zu Tag 3 mit 0,271 % und von Tag 3 zu Tag 5 mit 0,383 %. Die Tage 1 und 5 haben einen signifikanten Unterschied (p-Wert 0,0002), während der geringe Unterschied von Tag 3 zu Tag 5 nicht signifikant ist. Auffällig ist die starke Streuung der Werte an Tag 5. Bei der inokulierten Fermentation steigt der Gehalt signifikant von Tag 1 mit einem mittleren Gehalt von 0,057 % gegenüber Tag 3 mit 0,397 % (p-Wert 0,0377) und Tag 5 mit 0,447 % an. Dabei weist Tag 5 einen signifikanten Unterschied zu Tag 1 auf (p-Wert 0,0018), nicht aber zu Tag 3. Das Bestimmtheitsmaß beträgt $R^2 = 0,5952$.

Nachfolgend dargestellt ist die Konzentration von 2,3-Butandiol (RT 16,5) im Kakao, sowie die signifikanten Unterschiede zwischen den Kakaoproben.

Tabelle 9 2,3-Butandiolkonzentration (in %) in den Kakaoproben (2 g).

2,3-Butandiol (RT 16,5)						
	natürlich Tag 1	natürlich Tag 3	natürlich Tag 5	inokuliert Tag 1	inokuliert Tag 3	inokuliert Tag 5
	0,006	0,050	0,044	0,032	0,024	0,074
	0,006	0,050	0,014	0,025	0,031	0,059
	0,004	0,054	0,027	0,030	0,032	0,060
	0,003	0,044	0,013	0,030	0,034	0,065
	0,004	0,050	0,073	0,031	0,038	0,059
	0,002	0,050	0,062	0,040	0,041	0,107
Med.	0,004	0,050	0,035	0,031	0,033	0,063
MW	0,004	0,050	0,039	0,031	0,033	0,071
SD	0,002	0,003	0,025	0,005	0,006	0,019

Der Aromastoff ist (gemäß dem Median) am inokulierten Tag 5 am stärksten, gefolgt vom natürlichen Tag 3 und dem natürlichen Tag 5. Am geringsten ist er am natürlichen Tag 1.

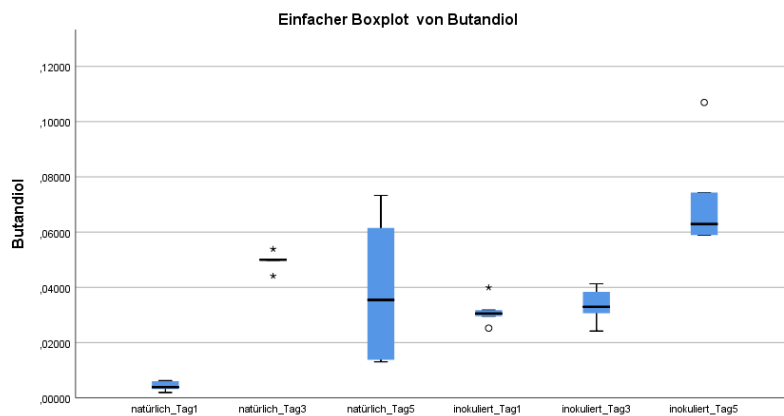


Abbildung 11 2,3-Butandiol (RT 16,5) in unterschiedlichen Kakaoproben.

Dargestellt sind die Konzentrationen 2,3-Butandiol (RT 16,5) in den Proben natürlichen und inokulierten Kakaos mit einer Entnahme der Kakaoproben am ersten, dritten und fünften Tag der Fermentation.

Boxplots Linie des Medians, Standardfehler (Box) und Standardabweichung (Whisker), Ausreißer (Kreis), extreme Ausreißer (Stern).

Der Gehalt an 2,3-Butandiol (RT 16,5) zeigt bei der natürlichen Fermentation zunächst einen signifikanten Anstieg von Tag 1 mit einem mittleren Gehalt von 0,004 % zu Tag 3 mit 0,050 % (p-Wert < 0,0001) und fällt zu Tag 5 mit 0,035 % wieder ab. Auffällig ist auch hier die starke Streuung der Werte an Tag 5. Die Tage 1 und 5 sind signifikant unterschiedlich (p-Wert 0,0013). Bei der inokulierten Fermentation steigt die mittlere Konzentration von Tag 1 mit 0,031 %, die ähnlich zu Tag 3 mit 0,033 % ist, zu Tag 5 mit 0,063 % an. Dabei gibt es signifikante Unterschiede zwischen Tag 5 und den Tagen 1 (p-Wert 0,0002) und 3 (p-Wert 0,0005). Das Bestimmtheitsmaß beträgt $R^2 = 0,5200$.

5.2) Ethylacetat



Nachfolgend dargestellt ist die Konzentration von Ethylacetat im Kakao, sowie die signifikanten Unterschiede zwischen den Kakaoproben.

Tabelle 10 Ethylacetatkonzentration (in %) in den Kakaoproben (2 g).

Ethylacetat (RT 1,2)						
	natürlich Tag 1	natürlich Tag 3	natürlich Tag 5	inokuliert Tag 1	inokuliert Tag 3	inokuliert Tag 5
	0,0007	0,0083	0,0004	0,0012	0,2969	0,1112
	0,0012	0,0053	0,1102	0,0017	0,1316	0,3304
	0,0005	0,0078	0,0831	0,0013	0,1029	0,2578
	0,0004	0,0063	0,2366	0,0018	0,1563	0,2571
	0,0007	0,0069	0,2415	0,0018	0,1323	0,1191
	0,0006	0,0084	0,2466	0,0023	0,0948	0,3605
Med.	0,0006	0,0074	0,1734	0,0018	0,1320	0,2574
MW	0,0007	0,0072	0,1531	0,0017	0,1525	0,2394
SD	0,0003	0,0012	0,1035	0,0004	0,0741	0,1044

Der Aromastoff ist (gemäß dem Median) am inokulierten Tag 5 am stärksten, gefolgt vom natürlichen Tag 5 und dem inokulierten Tag 3. Am geringsten ist er am natürlichen Tag 1.

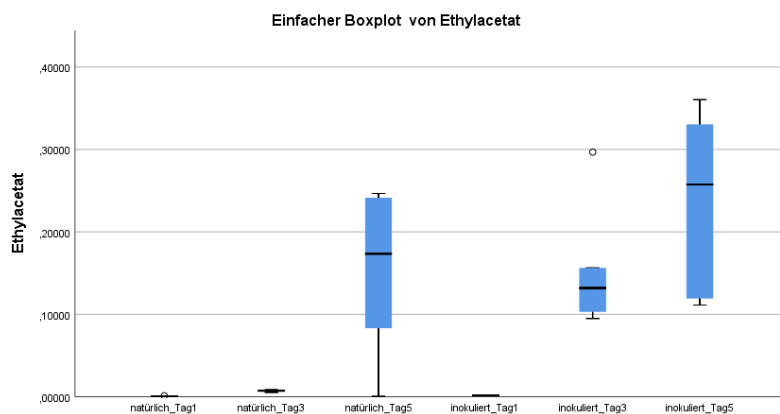


Abbildung 12 Ethylacetat in unterschiedlichen Kakaoproben.

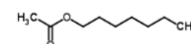
Dargestellt sind die Konzentrationen Ethylacetat in den Proben natürlichen und inokulierten Kakaos mit einer Entnahme der Kakaoproben am ersten, dritten und fünften Tag der Fermentation.

Boxplots Linie des Medians, Standardfehler (Box) und Standardabweichung (Whisker), Ausreißer (Kreis), extreme Ausreißer (Stern).

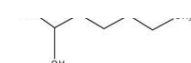
Ethylacetat weist einen Anstieg des Aromas bei beiden Fermentationsarten auf. Die natürliche Fermentation zeigt dabei signifikante Unterschiede von Tag 1 mit einer mittleren Konzentration von 0,0006 % zu Tag 5 mit einem Wert von 0,1734 % (p-Wert 0,0070) sowie von Tag 3 mit 0,0074 % zu Tag 5 (p-Wert 0,011) auf. Die Tage 1 und 3 unterscheiden sich nicht signifikant. Bei der inokulierten Fermentation gibt es signifikante Unterschiede von Tag 1 bis Tag 5. Dabei steigt die mittlere Konzentration von Tag 1 mit 0,0018 % signifikant über Tag 3 mit 0,1320 % (p-Wert 0,0078) bis Tag 5 mit einem Wert von 0,2574 %. Dabei weist Tag 5 einen signifikanten Unterschied zu Tag 1 auf (p-Wert < 0,0001), nicht aber zu Tag 3. Auffällig ist die Streuung bei beiden Fermentationen an Tag 5. Das Bestimmtheitsmaß beträgt $R^2 = 0,9757$.

5.3) 2-Heptylacetat / 2-Heptanol

Strukturformeln (Merck 2020): (1)



(2)



2-Heptylacetat (1) und 2-Heptanol (2) werden in der Auswertung nicht weiter berücksichtigt. Die Aromastoffe konnten in den Chromatogrammen der Kakaoproben nicht integriert werden, sodass diese als nicht nachweisbar (n.n.) angenommen werden.

Zudem ist die Verbindung von 2-Heptylacetat als angewandter Standard im niedrig-konzentrierten Bereich instabil, was die Erstellung der Kalibriergeraden aufzeigt (siehe Anhang 3). Das Bestimmtheitsmaß beträgt $R^2 = 0,1049$. Die nachfolgende Tabelle 8 zeigt hierzu die Konzentrationen pro Peakfläche.

Tabelle 11 Konzentrationen von 2-Heptylacetat pro Peakfläche.

2-Heptylacetat

Prozent [%]	0,005	0,01	0,025	0,05	0,075	0,1	0,5	1
Area	894597	1010281	1010144	1005794	924944	773107	949280	1211073

Deutlich sichtbar ist eine Schwankung der Peakflächen um $1E+06$ von der Konzentration 0,01 % über 0,025 % bis 0,05 %, gefolgt von einem Abfall der Flächensumme bei 0,075 %. Ab 0,1 % des Standards ist annehmbar ein linearer Anstieg zu ersehen, dies gilt es nachzuweisen. Dem wird jedoch in dieser Bachelorarbeit nicht weiter nachgegangen, da die Substanzen in den analysierten Kakaoproben nicht nachgewiesen werden konnten.

5.4) Isoamylalkohol



Nachfolgend dargestellt ist die Konzentration von Isoamylalkohol im Kakao, sowie die signifikanten Unterschiede zwischen den Kakaoproben.

Tabelle 12 Isoamylalkoholkonzentration (in %) in den Kakaoproben (2 g).

Isoamylalkohol (RT 6,8)						
	natürlich Tag 1	natürlich Tag 3	natürlich Tag 5	inokuliert Tag 1	inokuliert Tag 3	inokuliert Tag 5
	0,049	0,072	0,005	0,033	0,027	0,017
	0,038	0,072	0,002	0,032	0,029	0,020
	0,025	0,074	0,017	0,035	0,029	0,011
	0,030	0,080	0,034	0,032	0,026	0,019
	0,030	0,070	0,008	0,032	0,029	0,017
	0,023	0,081	0,035	0,042	0,020	0,023
Med.	0,030	0,073	0,013	0,032	0,028	0,018
MW	0,033	0,075	0,017	0,034	0,027	0,018
SD	0,010	0,005	0,015	0,004	0,003	0,004

Der Aromastoff ist (gemäß dem Median) am natürlichen Tag 3 am stärksten, gefolgt vom inokulierten Tag 1 und dem natürlichen Tag 1. Am geringsten ist er am natürlichen Tag 5.

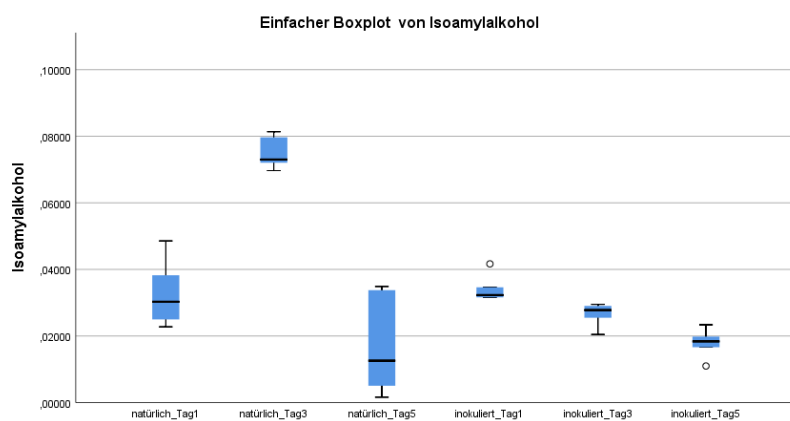


Abbildung 13 Isoamylalkohol in unterschiedlichen Kakaoproben.

Dargestellt sind die Konzentrationen Isoamylalkohol in den Proben natürlichen und inokulierten Kakaos mit einer Entnahme der Kakaoproben am ersten, dritten und fünften Tag der Fermentation.

Boxplots Linie des Medians, Standardfehler (Box) und Standardabweichung (Whisker), Ausreißer (Kreis), extreme Ausreißer (Stern).

Die Konzentration von Isoamylalkohol zeigt bei der natürlichen Fermentation zunächst einen signifikanten Anstieg von Tag 1 mit einer mittleren Konzentration von 0,030 % auf Tag 3 mit 0,073 % (p-Wert < 0,0001) und fällt zu Tag 5 mit 0,013 % signifikant wieder ab (p-Wert < 0,0001). Auch die Tage 1 und 5 weisen einen signifikanten Unterschied auf (p-Wert < 0,0223). Bei der inokulierten Fermentation nimmt die mittlere Konzentration von Tag 1 zu Tag 5 ab. Dabei sinkt diese von Tag 1 mit 0,032 %, über Tag 3 mit 0,028 % bis Tag 5 mit einem Wert von 0,018 %. Ein signifikanter Unterschied tritt zwischen Tag 1 und Tag 5 auf (p-Wert 0,0186), während der geringe Unterschied von Tag 3 zu Tag 5 nicht signifikant ist. Das Bestimmtheitsmaß beträgt $R^2 = 0,9993$.

5.5) 2-Pentanol



Nachfolgend dargestellt ist die Konzentration von 2-Pentanol im Kakao, sowie die signifikanten Unterschiede zwischen den Kakaoproben.

Tabelle 13 2-Pentanolkonzentration (in %) in den Kakaoproben (2 g).

2-Pentanol (RT 4,3)					
natürlich Tag 1	natürlich Tag 3	natürlich Tag 5	inokuliert Tag 1	inokuliert Tag 3	inokuliert Tag 5
0,057	0,039	0,003	0,054	0,016	0,012
0,048	0,043	0,009	0,058	0,018	0,018
0,042	0,041	0,021	0,064	0,021	0,012
0,032	0,042	0,023	0,057	0,012	0,016
0,042	0,045	0,006	0,067	0,019	0,013
0,029	0,044	0,002	0,093	0,022	0,023
Med.	0,042	0,007	0,061	0,018	0,014
MW	0,042	0,011	0,066	0,018	0,016
SD	0,010	0,002	0,014	0,004	0,004

Der Aromastoff ist (gemäß dem Median) am inokulierten Tag 1 am stärksten, gefolgt von den natürlichen Tagen 1 und 3. Am geringsten ist er am natürlichen Tag 5.

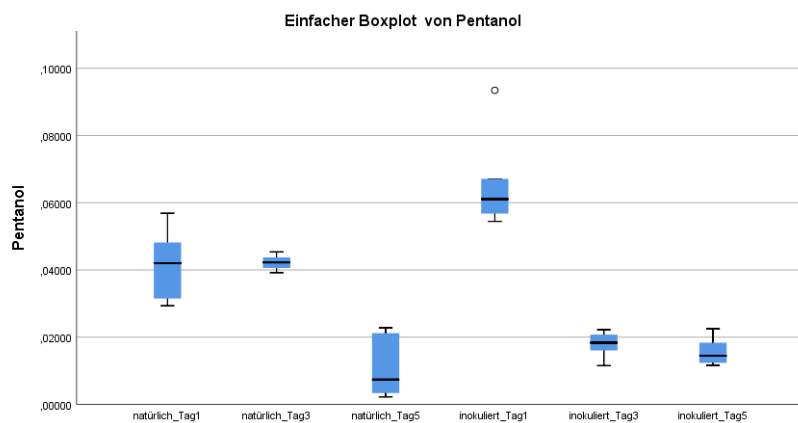


Abbildung 14 2-Pentanol in unterschiedlichen Kakaoproben.

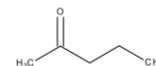
Dargestellt sind die Konzentrationen 2-Pentanol in den Proben natürlichen und inokulierten Kakaos mit einer Entnahme der Kakaoproben am ersten, dritten und fünften Tag der Fermentation.

Boxplots Linie des Medians, Standardfehler (Box) und Standardabweichung (Whisker), Ausreißer (Kreis), extreme Ausreißer (Stern).

Der Gehalt an 2-Pentanol nimmt von den Tagen 1 und 3 auf Tag 5 ab. Dabei liegen die mittleren Konzentrationen von Tag 1 und Tag 3 der natürlichen Fermentation bei 0,042 % und zeigen einen signifikanten Unterschied zu Tag 5 mit 0,007 % (p-Wert < 0,0001). Die inokulierte Fermentation zeigt einen signifikanten Unterschied von Tag 1 mit einer mittleren Konzentration von 0,061 % zu Tag 3 mit 0,018 % und zu Tag 5 mit 0,014 %, wobei sowohl Tag 3, als auch Tag 5 einen signifikanten Unterschied zu Tag 1 zeigen (p-Wert < 0,0001). Das Bestimmtheitsmaß beträgt $R^2 = 0,9958$.

5.6) 2-Pentanon

Strukturformel (Merck 2020):



Nachfolgend dargestellt ist die Konzentration von 2-Pentanon im Kakao, sowie die signifikanten Unterschiede zwischen den Kakaoproben.

Tabelle 14 2-Pentanonkonzentration (in %) in den Kakaoproben (2 g).

2-Pentanon (RT 1,8)						
	natürlich Tag 1	natürlich Tag 3	natürlich Tag 5	inokuliert Tag 1	inokuliert Tag 3	inokuliert Tag 5
	0,0900	0,0069	0,0028	0,0648	0,0068	0,0061
	0,0746	0,0069	0,0082	0,0599	0,0082	0,0085
	0,0351	0,0080	0,0018	0,0535	0,0078	0,0076
	0,0403	0,0091	0,0083	0,0629	0,0124	0,0043
	0,0631	0,0084	0,0102	0,0678	0,0070	0,0044
	0,0706	0,0105	0,0049	0,0858	0,0056	0,0092
Med.	0,0669	0,0082	0,0066	0,0638	0,0074	0,0069
MW	0,0623	0,0083	0,0060	0,0658	0,0080	0,0067
SD	0,0210	0,0014	0,0033	0,0109	0,0023	0,0021

Der Aromastoff ist (gemäß dem Median) am natürlichen Tag 1 am stärksten, gefolgt vom inokulierten Tag 1. Am geringsten ist er am natürlichen Tag 5.

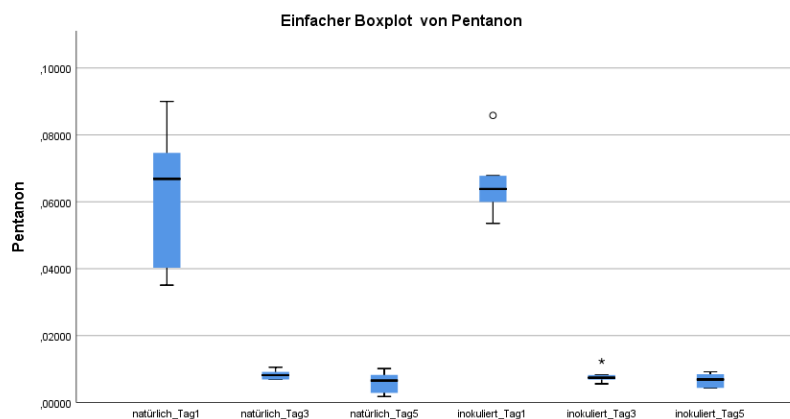


Abbildung 15 2-Pentanon in unterschiedlichen Kakaoproben.

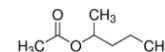
Dargestellt sind die Konzentrationen 2-Pentanon in den Proben natürlichen und inokulierten Kakaos mit einer Entnahme der Kakaoproben am ersten, dritten und fünften Tag der Fermentation.

Boxplots Linie des Medians, Standardfehler (Box) und Standardabweichung (Whisker), Ausreißer (Kreis), extreme Ausreißer (Stern).

Die Fermentationsarten weisen bei 2-Pentanon einen ähnlichen Verlauf auf, wie bei 2-Pentanol. Die höchste Konzentration ist an Tag 1 zu verzeichnen. Dabei liegt die mittlere Konzentration der natürlichen Fermentation bei 0,0669 % und die der inokulierten Fermentation bei 0,0638 %. Die Tage 3 und 5 weisen gegenüber Tag 1 bei beiden Fermentationsarten signifikante Unterschiede auf (p -Wert $< 0,0001$). Sie zeigen zudem ähnlich niedrige Werte, die bei der natürlichen Fermentation an Tag 3 bei 0,0082 % und an Tag 5 bei 0,0066 % sowie bei der inokulierten Fermentation an Tag 3 bei 0,0074 % und Tag 5 bei 0,0069 % liegen. Der geringe Unterschied von Tag 3 zu Tag 5 ist jeweils nicht signifikant. Das Bestimmtheitsmaß beträgt $R^2 = 0,9457$.

5.7) 2-Pentylacetat

Strukturformel (Merck 2020):



Nachfolgend dargestellt ist die Konzentration von 2-Pentylacetat im Kakao, sowie die signifikanten Unterschiede zwischen den Kakaoproben. Berücksichtigt werden muss dabei, dass 2-Pentylacetat nicht stabil ist, da ebenfalls bei 2-Pentanol ein Peak integriert werden konnte. Somit entspricht die Konzentration nicht zu 100 % der von 2-Pentylacetat (siehe 6.2).

Tabelle 15 2-Pentylacetatkonzentration (in %) in den Kakaoproben (2 g).

2-Pentylacetat (RT 3,1)						
	natürlich Tag 1	natürlich Tag 3	natürlich Tag 5	inokuliert Tag 1	inokuliert Tag 3	inokuliert Tag 5
	0,045	0,591	0,059	0,230	0,449	0,277
	0,037	0,562	0,101	0,244	0,478	0,501
	0,012	0,634	0,320	0,177	0,451	0,423
	0,015	0,655	0,195	0,262	0,375	0,507
	0,012	0,628	0,556	0,267	0,507	0,388
	0,014	0,597	0,615	0,337	0,196	0,448
Med.	0,014	0,613	0,257	0,253	0,450	0,435
MW	0,022	0,611	0,308	0,253	0,409	0,424
SD	0,015	0,034	0,234	0,053	0,113	0,085

Der Aromastoff ist (gemäß dem Median) am natürlichen Tag 3 am stärksten, gefolgt von den inokulierten Tagen 3 und 5. Am geringsten ist er am natürlichen Tag 1.

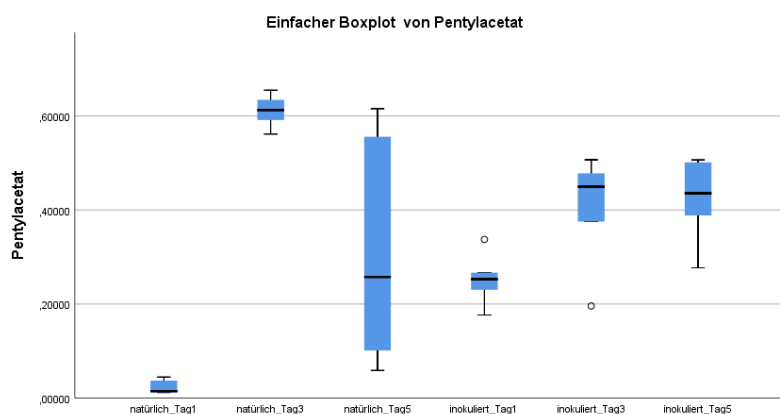


Abbildung 16 2-Pentylacetat in unterschiedlichen Kakaoproben.

Dargestellt sind die Konzentrationen 2-Pentylacetat in den Proben natürlichen und inokulierten Kakaos mit einer Entnahme der Kakaoproben am ersten, dritten und fünften Tag der Fermentation.

Boxplots Linie des Medians, Standardfehler (Box) und Standardabweichung (Whisker), Ausreißer (Kreis), extreme Ausreißer (Stern).

Die mittlere Konzentration von 2-Pentylacetat zeigt bei der natürlichen Fermentation zunächst einen signifikanten Anstieg von Tag 1 mit 0,014 % zu Tag 3 mit 0,613 % (p-Wert < 0,0001), gefolgt von einem signifikanten Abfall zu Tag 5 mit 0,257 % (p-Wert 0,0011). Auch die Tage 1 und 5 sind signifikant unterschiedlich (p-Wert 0,0025). Auffällig ist die starke Streuung der Werte an Tag 5. Bei der inokulierten Fermentation steigt die mittlere Konzentration von Tag 1 mit 0,253 % zu den Tagen 3 mit 0,450 % und 5 mit 0,435 %. Dabei gibt es keine signifikanten Unterschiede zwischen den Tagen. Das Bestimmtheitsmaß beträgt $R^2 = 0,9957$.

5.8) 2-Phenylethanol



Nachfolgend dargestellt ist die Konzentration von 2-Phenylethanol im Kakao, sowie die signifikanten Unterschiede zwischen den Kakaoproben.

Tabelle 16 2-Phenylethanolkonzentration (in %) in den Kakaoproben (2 g).

2-Phenylethanol (RT 21,5)						
	natürlich Tag 1	natürlich Tag 3	natürlich Tag 5	inokuliert Tag 1	inokuliert Tag 3	inokuliert Tag 5
	0,026	0,047	0,003	0,015	0,025	0,029
	0,024	0,047	0,005	0,016	0,021	0,011
	0,016	0,046	0,008	0,016	0,028	0,027
	0,018	0,047	0,035	0,014	0,026	0,026
	0,016	0,055	0,029	0,016	0,025	0,025
	0,017	0,051	0,043	0,019	0,025	0,039
Med.	0,017	0,047	0,018	0,016	0,025	0,027
MW	0,019	0,049	0,020	0,016	0,025	0,026
SD	0,005	0,004	0,017	0,002	0,002	0,009

Der Aromastoff ist (gemäß dem Median) am natürlichen Tag 3 am stärksten, gefolgt vom inokulierten Tag 5 und dem inokulierten Tag 3. Am geringsten ist er am inokulierten Tag 1.

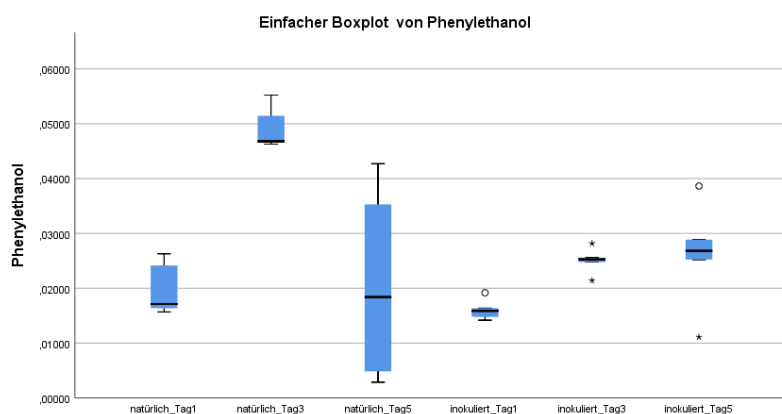


Abbildung 17 2-Phenylethanol in unterschiedlichen Kakaoproben.

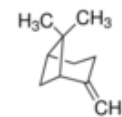
Dargestellt sind die Konzentrationen 2-Phenylethanol in den Proben natürlichen und inokulierten Kakaos mit einer Entnahme der Kakaoproben am ersten, dritten und fünften Tag der Fermentation.

Boxplots Linie des Medians, Standardfehler (Box) und Standardabweichung (Whisker), Ausreißer (Kreis), extreme Ausreißer (Stern).

2-Phenylethanol weist einen vergleichbaren Verlauf der Konzentrationen auf, wie 2-Pentylacetat. Die mittlere Konzentration zeigt bei der natürlichen Fermentation zunächst einen signifikanten Anstieg von Tag 1 mit 0,017 % zu Tag 3 mit 0,047 % (p-Wert < 0,0001), gefolgt von einem signifikanten Abfall zu Tag 5 mit 0,018 % (p-Wert < 0,0001). Die Tage 1 und 5 zeigen keine signifikanten Unterschiede. Auffällig ist bei der Messung die Streuung der Werte an Tag 5. Bei der inokulierten Fermentation steigt die mittlere Konzentration von Tag 1 mit 0,016 % zu den Tagen 3 mit 0,025 % und 5 mit 0,027 %. Die geringen Unterschiede sind dabei nicht signifikant. Das Bestimmtheitsmaß beträgt $R^2 = 0,7754$.

5.9) (-)- β -Pinen

Strukturformel (Merck 2020):



Nachfolgend dargestellt ist die Konzentration von (-)- β -Pinen (RT 3,7) im Kakao, sowie die signifikanten Unterschiede zwischen den Kakaoproben.

Tabelle 17 (-)- β -Pinenkonzentration (in %) in den Kakaoproben (2 g).

(-)- β -Pinen (RT 3,7)						
	natürlich Tag 1	natürlich Tag 3	natürlich Tag 5	inokuliert Tag 1	inokuliert Tag 3	inokuliert Tag 5
	0,00045	0,00030	0,00003	0,00018	0,00010	0,00009
	0,00168	0,00041	0,00004	0,00328	0,00016	0,00009
	0,00220	0,00238	0,00010	0,00265	0,00062	0,00019
	0,00318	0,00138	0,00016	0,00154	0,00024	0,00039
	0,00222	0,00033	n.n	0,00271	0,00010	0,00041
	0,00296	n.n	n.n	0,00278	0,00044	0,00011
Med.	0,00221	0,00041	0,00007	0,00268	0,00020	0,00015
MW	0,00211	0,00096	0,00008	0,00219	0,00028	0,00022
SD	0,00099	0,00091	0,00006	0,00114	0,00021	0,00015

Der Aromastoff ist (gemäß dem Median) am inokulierten Tag 1 am stärksten, gefolgt von den natürlichen Tagen 1 und 3. Am geringsten ist er am natürlichen Tag 5.

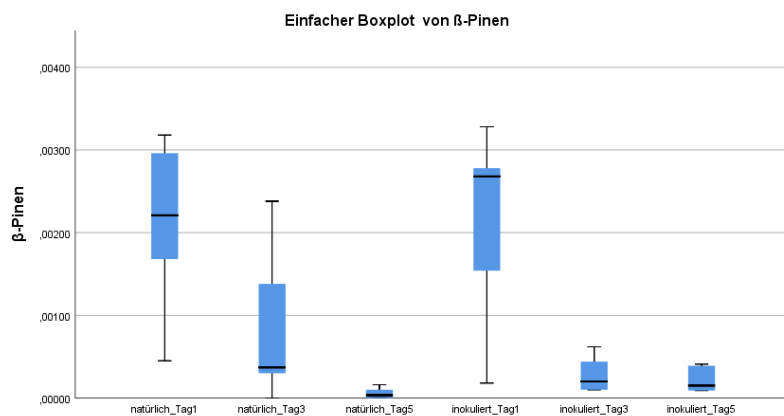


Abbildung 18 (-)- β -Pinen in unterschiedlichen Kakaoproben.

Dargestellt sind die Konzentrationen (-)- β -Pinen in den Proben natürlichen und inokulierten Kakaos mit einer Entnahme der Kakaoproben am ersten, dritten und fünften Tag der Fermentation.

Boxplots Linie des Medians, Standardfehler (Box) und Standardabweichung (Whisker), Ausreißer (Kreis), extreme Ausreißer (Stem).

Bei (-)- β -Pinen nimmt der Gehalt von Tag 1 bis Tag 5 ab. So weist Tag 1 der natürlichen Fermentation noch einen mittleren Wert von 0,00221 % auf, während die Konzentration an Tag 3 bei 0,00041 % und an Tag 5 bei 0,00007 % liegt. Einen signifikanten Unterschied gibt es zwischen Tag 1 und Tag 5 (p-Wert 0,0004), während der Tag 3 zu den Tagen 1 und 5 nicht signifikant unterschiedlich ist. Auffällig ist die Streuung der Werte an Tag 1 und 3, ebenso wie an Tag 1 der inokulierten Fermentation. Der Gehalt der inokulierten Fermentation verläuft ebenfalls abnehmend. So zeigt Tag 1 eine mittlere Konzentration von 0,00268 % gegenüber Tag 3 mit 0,00020 % (p-Wert 0,0012) sowie gegenüber Tag 5 mit 0,00015 % (p-Wert 0,0008) auf. Die Tage 3 und 5 sind dabei nicht signifikant. Das Bestimmtheitsmaß beträgt $R^2 = 0,9888$.

6) Diskussion

Nachfolgend werden sowohl die Methode, die vorangegangenen Ergebnisse, als auch die Literatur dieser Bachelorarbeit diskutiert.

6.1) Methodendiskussion

Die angewandte Methode der HS-SPME-GC-MS war bereits vorhanden und basiert auf dem Scientific Project „*Methodenentwicklung für die Analyse von Kakaomassen mittels HS-SPME-GC-MS/GC-O*“ von TRABER (2018). In der Arbeit wurde die Methode entwickelt und speziell an die Kakaoproben angepasst, sodass eine geeignete Peakflächenauftrennung zu Grunde lag (Traber 2018, S. 26). Zukünftig sollte die Methode bzw. deren Heizraten, jedoch weiter angepasst werden, um auftretende Überlagerungen der Peaks in den Chromatogrammen zu verhindern. Einzelne Substanzen, wie beispielsweise 2,3-Butandiol (RT 16,5) und Isoamylalkohol, zeigen bei der Integration teilweise Überlagerungen der Peaks, welche jedoch durch die manuelle Integration weitestgehend differenziert werden konnten.

Ein weiteres Augenmerk bzgl. der Methode gilt der Trennleistung der MS, welche bei einigen Substanzen nicht ausreichend war. So konnte (-)- β -Pinen als Standard bei einer RT von 3,7 mit einer Wahrscheinlichkeit von knapp 50 % detektiert werden, wohingegen die Kakaoproben laut der NIST-Datenbank bei < 4 % lagen und somit nicht eindeutig identifiziert wurden. Bei den Kakaoproben sowie bei dem Standard gab es zudem eine Identifizierung von (-)- β -Pinen anhand der NIST-Datenbank bei einer RT von 5,1 mit einer Wahrscheinlichkeit von ca. 12 %. Dieser wurde aufgrund der starken Differenz bzgl. der Wahrscheinlichkeit zur RT von 3,7 nicht weiter nachgegangen. Um die Selektivität und die Nachweisempfindlichkeit zu erhöhen, kann u.a. eine Tandem-Massenspektrometrie angewandt werden. Bei so genannten Triple-Quadrupol-Geräten werden dabei zwei MS hintereinander geschaltet und erhöhen somit die Trennleistung (Hartwig 2016, S. 395 ff).

Ein zusätzlicher Faktor, der zu Unstimmigkeiten hinsichtlich der Konzentrationen führen könnte, ist die Equilibrierzeit (siehe 4.1 und 4.2.1). Der Kakao hatte eine Equilibrierzeit von 10 Minuten, während die Equilibrierzeit der Standards aufgrund der Zusammensetzung bei 30 Sekunden lag. Eine Versuchsreihe, ob sich die Equilibrierzeit auf die Konzentrationen auswirken, ist empfehlenswert. Ebenso wie eine Analyse bzgl. der unterschiedlichen Matrices (Kakao: fest, Standards: flüssig), welche die Messergebnisse beeinflussen könnten.

Zur Erstellung der Kalibriergeraden (siehe 2.3 und 4.3.1) wurde jeder Standard in unterschiedlichen Konzentrationen gemessen. Bei 2,3-Butandiol fanden dabei drei Messungen statt, die eine Messung der Konzentrationen 1,0 | 0,75 | 0,50 | 0,25 | 0,10 | 0,075 | 0,050 | 0,025 | 0,010 sowie in zwei aufeinanderfolgenden Tagen je die Konzentrationen von 5,0 | 4,5 | 4,0 | 3,5 | 3,0 | 2,5 | 2,0 | 1,5 | 1,0 umfassten (alle Angaben in %). Zur Erstellung der Kalibriergeraden wurden die Werte > 0,1 % nicht

verwendet, da diese in beiden Messungen sehr breit gestreut hatten. Trotz dieser Selektion ist die allgemeine Datenlage mit einem Bestimmtheitsmaß von $R^2 = 0,5952$ bei der RT 15,8 sowie von $R^2 = 0,5200$ bei der RT 16,5 nicht sehr aussagekräftig. Die Annahme für die breite Streuung war, dass 2,3-Butandiol sehr flüchtig ist. Mit einer Verdunstungszahl (je niedriger die Verdunstungszahl, desto flüchtiger ist ein Stoff) von 33 ist dies jedoch nicht der Fall, wenn beispielsweise ein Vergleich zu Ethylacetat (Verdunstungszahl 3) gezogen wird, dessen Messungen mit $R^2 = 0,9757$ nahezu keine Schwankungen aufwiesen (Brenntag GmbH 2014). Da die Butandiol-Verdünnungen jedoch aus einem Ansatz pipettiert wurden, bei dem das Gefäß häufig geöffnet und wieder verschlossen wurde, ist es wahrscheinlich, dass sich das Methanol mit einer Verdunstungszahl von 0,79 verflüchtigt hat und durch die Konzentrationsschwankungen zu der Streuung beitrug. Daraufhin wurden bei den nachfolgenden Standards neben der Verdünnung von 1 % auch eine Verdünnung von 0,1 % sowie von 0,01 % angesetzt, aus denen in Teilschritten die weiteren Verdünnungen entstanden sind. So wurden das häufige Öffnen und Schließen und damit auch die Wahrscheinlichkeit der Verflüchtigung der Substanzen minimiert. Die Standards Ethylacetat, Isoamylalkohol, 2-Pentanol und 2-Pentanon sowie 2-Phenylethanol wurden in zwei Messungen geteilt, wobei die Konzentrationen 1,0 | 0,50 | 0,10 (alle Angaben in %) am ersten Durchlauf gemessen wurden (siehe 4.1). Bei den Messungen sind keine Abweichungen im Vergleich zur zweiten Messung der weiteren Verdünnungsstufen aufgetreten. Um mögliche Pipettierfehler sowie Umgebungseinflüsse zu vermeiden, wurden bei den Stoffen 2-Heptylacetat, 2-Pentylacetat und (-)- β -Pinen alle Konzentrationen einer Substanz in einem Durchgang gemessen, d.h. in einem GC-Lauf. Diese Variante ist für weitere Messungen zu empfehlen. Generell muss berücksichtigt werden, dass sich die flüchtigen Stoffe sowohl beim Pipettieren der Standards als auch bei der Vorbereitung der Kakaobohnen verflüchtigen und die Peakflächenbestimmungen dadurch Abweichungen aufweisen können.

Für die Integration der Peaks ist meist eine automatische Integration empfehlenswert, da diese auf identische Peakanfänge und -enden zurückgreift und unabhängig von der Subjektivität des Anwenders agiert, sodass eine bessere Reproduzierbarkeit gegeben ist. Dies war jedoch aufgrund der großen Peakflächenunterschiede durch einen weitgefassten Bereich der Konzentrationen nicht möglich, sodass die Integration manuell anhand der Software OpenChrom® erfolgte. Um mögliche Fehler / Abweichungen dabei zu reduzieren, erfolgte jeweils eine Dreifachbestimmung der Chromatogramme, mit deren Mittelwerten weitere Berechnungen durchgeführt wurden. Dabei wurde die Basislinie über die Software festgelegt (siehe Anhang 1). Um die Reproduzierbarkeit der Messungen zu verbessern und den erhöhten Zeitaufwand durch die manuelle Integration sowie die Dreifachbestimmung zu minimieren, ist für weitere Analysen die Programmierung einer geeigneten automatischen Integration empfehlenswert. Aufgrund der Ergebnisse dieser Bachelorarbeit können die Konzentrationsbereiche der Aromen deutlich besser eingegrenzt werden, sodass die bisher

auftretenden Schwankungen der Peakflächen kleiner sind und die Umsetzung der automatischen Integration besser gelingt.

Ergänzende Maßnahmen, wie z.B. die Festlegung der Nachweis- und Bestimmungsgrenzen und die Wiederfindungsrate, als Interpretationshilfe bei kleinen Messwerten, wären weitere Optionen, um die Analyse zu optimieren (Matissek et al. 2014, S. 20 ff).

6.2) Ergebnisdiskussion

Die analysierten Aromen konnten bereits in vorherigen Studien wie u.a. bei APROTOSOAIE ET AL. (2016), KADOW ET AL. (2013), RODRIGUEZ-CAMPOS ET AL. (2012) und ROJAS ET AL. (2018) als aroma-aktive Substanz in Kakaobohnen identifiziert werden.

Der Gehalt an **2,3-Butandiol (RT 15,8)** nimmt im Verlauf der Fermentation zu, wobei die Fermentationsarten einen ähnlichen Verlauf aufweisen. Sowohl bei der natürlichen als auch bei der inokulierten Fermentation zeigt sich ein Konzentrationsanstieg von Tag 1 zu Tag 3, welcher jedoch nur bei der inokulierten Fermentation signifikant ist. Der Anstieg der Konzentration von Tag 3 zu Tag 5 ist bei beiden Arten nicht signifikant. Auffällig ist an Tag 5 der natürlichen Fermentation die starke Streuung der Werte. Die drei gemessenen Kakaoproben liegen in ihren Aromagehalten weit auseinander. Empfehlenswert ist es, weitere Bohnen zu analysieren, um ein besseres Datenbild zu erlangen und die Abweichungen zu minimieren. Im Vergleich der Fermentationsarten lässt der Zusatz der Hefen einen etwas schnelleren Anstieg erkennen, der jedoch keine signifikanten Unterschiede zwischen den Tagen natürlich 3 und inokuliert 3 sowie den Tagen natürlich 5 und inokuliert 5 zeigt. Das bereits unter 6.1 erwähnte auffällige Bestimmtheitsmaß von $R^2 = 0,5952$ gibt Anlass zu einer wiederholten Durchführung einer Kalibrierreihe, sodass der Gehalt von 2,3-Butanediol erneut bestimmt werden kann. Dies sollte ebenfalls bei den Werten der RT 16,5 mit einem Bestimmtheitsmaß von $R^2 = 0,5200$ erfolgen. Die Aromakonzentration bei der natürlichen Fermentation (**RT 16,5**) zeigt zunächst einen signifikanten Anstieg von Tag 1 zu Tag 3, gefolgt von einem Abfall zu Tag 5. Auffällig ist auch hier die Streuung an Tag 5, die ebenfalls mit einer größeren Probenanzahl erneut durchgeführt werden sollte. Eine solche Schwankung ist bei der inokulierten Fermentation nicht zu verzeichnen. Sie weist einen leichten Anstieg von Tag 1 zu Tag 3 und nachfolgend einen signifikanten Anstieg zu Tag 5 auf. Im Vergleich der Fermentationsarten lässt der Zusatz der Hefen eine grundsätzlich erhöhte Konzentration des Aromas erkennen, die signifikante Unterschiede sowohl an den Tagen natürlich 1 und inokuliert 1 sowie den Tagen natürlich 5 und inokuliert 5 zeigt. Bezüglich der beiden auftretenden Retentionszeiten ist es ratsam, die Mehrfachpeaks zu entschlüsseln, um eindeutig eine Differenzierung der unterschiedlichen Strukturformen des 2,3-Butandiols zu bekommen. Gerade im Bereich der Aromen können Strukturunterschiede sich stark auf das Resultat auswirken. So schmecken bspw. D-Aminosäuren eher süß, während L-Aminosäuren schwach bitter sind (Habermehl et al. 2008, S. 252).

Ethylacetat weist im Verlauf ebenfalls einen Anstieg der Aromakonzentration auf. Bei der natürlichen Fermentation zeigen die Werte von Tag 1 und Tag 3 eine ähnliche Konzentration, wohingegen diese signifikant zu Tag 5 steigt. Die inokulierte Fermentation zeigt bereits einen signifikanten Anstieg zwischen Tag 1 und Tag 3, ebenso wie zu Tag 5. Im Vergleich der Fermentationsarten lässt der Zusatz der Hefen auf einen schnelleren Anstieg und eine erhöhte Konzentration des Aromas ab dem dritten Tag schließen. Es zeigt sich ein signifikanter Unterschied zwischen den Tagen natürlich 3 und inokuliert 3. Die Konzentration des natürlichen Tages 5 liegt zwischen den inokulierten Tagen 3 und 5, zeigt jedoch keine signifikanten Unterschiede zu diesen Tagen. Auffällig ist bei beiden Fermentationen die Streuung der Werte an Tag 5. Empfehlenswert ist eine Analyse weiterer Kakaobohnen, um ein besseres Datenbild zu erhalten. Möglicherweise könnte somit ein signifikanter Unterschied vom natürlichen Tag 5 zum inokulierten Tag 5 entstehen, da der natürliche Tag 5 bereits durch den unteren Whisker eine Tendenz zu einer niedrigeren Konzentration zeigt. Dadurch würde der Effekt der Hefen bestärkt werden.

Die Konzentration von **Isoamylalkohol** zeigt bei der natürlichen Fermentation zunächst einen signifikanten Anstieg von Tag 1 zu Tag 3, gefolgt von einem signifikanten Abfall zu Tag 5. Diese Schwankung ist bei der inokulierten Fermentation nicht zu verzeichnen. Sie weist nahezu einen linearen Abfall der Konzentration auf, welcher zwischen den Tagen 1 und 5 signifikant ist. Im Vergleich der Fermentationsarten lässt der Zusatz der Hefen einen gleichmäßigeren Abbau des Aromas erkennen sowie eine positive Auswirkung auf die Reduzierung der Streuung. Die inokulierte Fermentation liefert ein kontinuierlicheres Ergebnis. Interessant wäre der Endpunkt der Fermentation, da die Hefen den Abbauprozess möglicherweise verlangsamen könnten.

Der Gehalt an **2-Pentanol** nimmt über den Verlauf der Fermentation ab. Bei der natürlichen Fermentation zeigt sich kein signifikanter Unterschied zwischen Tag 1 und Tag 3, die Konzentration ist ähnlich. Hingegen ist eine signifikante Abnahme der Konzentration zu Tag 5 erkennbar. Bei der inokulierten Fermentation zeigt sich dagegen ein signifikanter Unterschied bereits zwischen Tag 1 und Tag 3. Hier weisen Tag 3 und Tag 5 keine signifikanten Unterschiede auf. Im Vergleich der Fermentationsarten lässt der Zusatz der Hefen an Tag 1 zunächst einen signifikanten Anstieg des Aromas erkennen sowie anschließend einen vorzeitigen signifikanten Abbau des Aromas hin zu Tag 3. Die Konzentrationen an Tag 5, sowohl bei der natürlichen als auch bei der inokulierten Fermentation, unterscheiden sich jedoch nicht signifikant. Dennoch wäre der Endpunkt der Fermentation interessant, da die Hefen den Abbauprozess möglicherweise verlangsamen könnten.

Die Fermentationsarten bei **2-Pentanon** haben einen ähnlichen Verlauf sowie eine ähnliche Konzentration. Sowohl bei der natürlichen als auch bei der inokulierten Fermentation zeigt sich ein signifikanter Abfall der Konzentration von Tag 1 zu Tag 3, wohingegen Tag 3 und Tag 5 eine

ähnliche Konzentration aufweisen. Im Vergleich der Fermentationsarten lässt der Zusatz der Hefen keinen Effekt erkennen. Sie unterscheiden sich nicht signifikant.

Die Konzentration von **2-Pentylacetat** zeigt bei der natürlichen Fermentation zunächst einen signifikanten Anstieg von Tag 1 zu Tag 3, gefolgt von einem signifikanten Abfall zu Tag 5. Auffällig ist auch hier die Streuung an Tag 5, die ebenfalls mit einer größeren Probenanzahl erneut durchgeführt werden sollte. Eine solche Schwankung ist bei der inokulierten Fermentation nicht zu verzeichnen. Tag 1 weist einen nicht signifikanten Konzentrationsanstieg zu Tag 3 auf, wohingegen Tag 3 und Tag 5 eine ähnliche Konzentration zeigen. Im Vergleich der Fermentationsarten lässt der Zusatz der Hefen auf eine erhöhte Konzentration des Aromas schließen, die signifikante Unterschiede an den Tagen natürlich 1 und inokuliert 1 zeigt. Zudem bewirken die Hefen, dass die Aromakonzentration auf einem konstant erhöhten Level bleibt. Weitere Messwerte über die Dauer der Fermentation wären hier von Interesse, da die Hefen den Abbauprozess möglicherweise verlangsamen könnten. Obwohl das Bestimmtheitsmaß $R^2 = 0,9957$ beträgt, wäre es sinnvoll, die Analyse des Standards zu wiederholen, da im Chromatogramm nicht nur dieser, sondern auch 2-Pentanol integriert werden konnte (siehe 5.1), was darauf hindeutet, dass 2-Pentylacetat im Ansatz nicht gänzlich stabil ist. Hier wären sowohl die Peakfläche von 2-Pentanol, als auch die der Essigsäure interessant, um Rückschlüsse auf die eigentliche Peakfläche von 2-Pentylacetat zu ziehen.

2-Phenylethanol zeigt einen vergleichbaren Konzentrationsverlauf wie 2-Pentylacetat. Bei der natürlichen Fermentation gibt es einen signifikanten Anstieg von Tag 1 zu Tag 3, gefolgt von einem signifikanten Abfall zu Tag 5. Auffällig ist auch hier die Streuung an Tag 5, die ebenfalls mit einer größeren Probenanzahl erneut durchgeführt werden sollte. Eine solche Schwankung ist bei der inokulierten Fermentation nicht zu verzeichnen. Tag 1 der inokulierten Fermentation weist eine ähnliche Konzentration wie Tag 1 der natürlichen Fermentation auf. Die Konzentration steigt bei der inokulierten Fermentation ebenfalls an, jedoch nicht signifikant. Ferner erfolgt bei der inokulierten Fermentation an Tag 5 ein weiterer Konzentrationsanstieg. Im Vergleich der Fermentationsarten lässt der Zusatz der Hefen eine leicht erhöhte Konzentration des Aromas ab Tag 5 erkennen, wobei es keine signifikanten Unterschiede gibt. Des Weiteren bewirken die Hefen, dass die Aromakonzentration auf einem konstant erhöhten Level bleibt. Weitere Messwerte über die Dauer der Fermentation wären hier von Interesse, da die Hefen den Abbauprozess möglicherweise verlangsamen könnten. Das Bestimmtheitsmaß von 2-Phenylethanol beträgt $R^2 = 0,7754$. Dies liegt bei der Kalibriergeraden an den Abweichungen der Konzentrationsmessungen von 0,5 % und 1 %, welche im Vergleich zu den anderen Konzentrationen an einem anderen Tag gemessen wurden. Hier könnte eine erneute Analyse eine Annäherung der Werte an das Bestimmtheitsmaß von 1 ermöglichen.

Die Fermentationsarten bei **(-)- β -Pinen** haben einen ähnlichen Verlauf. Sowohl bei der natürlichen als auch bei der inokulierten Fermentation zeigt sich ein signifikanter Abfall der Konzentration von Tag 1 zu Tag 3, wohingegen kein weiterer signifikanter Unterschied zu Tag 5 erkennbar ist. Auffällig ist die Streuung der Werte an den Tagen 1 und 3 der natürlichen sowie an Tag 1 der inokulierten Fermentation. Für eine bessere Datenlage empfiehlt sich eine erneute Analyse mit größerer Probenanzahl. Im Vergleich der Fermentationsarten lässt der Zusatz der Hefen keinen Effekt erkennen. Sie unterscheiden sich nicht signifikant.

Zusammenfassend lässt sich sagen, dass sich durch die Analyse innerhalb der Fermentationsarten, anhand der Entnahmetage, Aussagen zum Verlauf der Fermentation treffen lassen. So kann beispielsweise ein Rückschluss auf die optimale Dauer der Fermentation getroffen und diese abgebrochen werden, wenn die meisten für den Kakao wichtigen Aromen eine entsprechende Konzentration aufweisen. Zwischen den Fermentationsarten, bezugnehmend auf die zugesetzten Hefen, können mehrere Aussagen getroffen werden. Zum einen sorgen die Hefen bei 2,3-Butandiol (RT 15,8) und Ethylacetat für einen schnelleren Anstieg der Aromakonzentrationen sowie bei Ethylacetat zusätzlich für eine erhöhte Konzentration ab Tag 3. Eine höhere Konzentration der Aromen zeigt sich ebenfalls bei 2,3-Butandiol (RT 16,5), 2-Pentylacetat und 2-Phenylethanol. Zum anderen lässt die Zugabe der Hefen eine Reduzierung der Streuung gegenüber dem natürlichen Tag 5 bei 2,3-Butandiol (RT 15,8), 2,3-Butandiol (RT 16,5), Isoamylalkohol, 2-Pentanon, 2-Pentylacetat und 2-Phenylethanol vermuten. Des Weiteren zeigt sich durch die Hefen ein gleichmäßigerer Verlauf, d.h. weniger extreme Schwankungen zwischen den Tagen, bei den Aromen 2,3-Butandiol (RT 16,5), Isoamylalkohol, 2-Pentylacetat sowie 2-Phenylethanol. Keine Effekte der zugesetzten Hefen ergeben sich bei 2-Pentanon und **(-)- β -Pinen**, die einen ähnlichen Verlauf aufweisen. Für einen weiteren denkbaren Einfluss der Hefen wären die letzten Tage der Fermentationen interessant (siehe 7). Die Daten über die vollständigen Fermentationen könnten Auskunft über einen möglichen verlangsamten Abbau der Aromakonzentrationen, wie er sich bei Isoamylalkohol, 2-Pentanol, 2-Pentylacetat und 2-Phenylethanol vermuten lässt, geben.

6.3) Literaturhinweise

Die verwendete Literatur besteht zu ca. 28 % aus wissenschaftlichen Fachartikeln, die Paper und Studien entnommen wurden. Bücher und Artikel machen ca. 41 % aus. Diese wurden hauptsächlich zur Bearbeitung der theoretischen Grundlagen herangezogen. Ergänzt wird die Literatur durch ca. 8 % Hochschulschriften. Die Verfasser haben zum Teil ebenfalls an der HAW Hamburg mit denselben Analysegeräten gearbeitet, wie z.B. TRABER (2018), woraus die Methodenentwicklung der HS-SPME-GC-MS stammt. Weitere Quellen (ca. 23 %) sind Internetseiten, wie u.a. die des Bundesverbandes der Deutschen Süßwarenindustrie e.V. und des Forschungskreises der Ernährungsindustrie e.V. sowie Auszüge aus der International Cocoa Organization.

7) Fazit

Das Ziel dieser Arbeit war es, durch die quantitative Analyse der Kakaobohnen festzustellen, ob eine inokulierte Fermentation mittels zugesetzter Hefen die Bildung und Ausprägung von Kakaoaromen und deren Vorstufen begünstigt.

Allgemein lässt sich dazu sagen, dass die analysierten Substanzen nur eine kleine Auswahl der Aromen sind, die in dem „Chuncho“-Kakao aus Peru detektiert wurden. Somit gibt es Potential für weitere quantitative Analysen. Zudem würde eine Betrachtung der oben genannten Ergebnisse in Verbindung mit der Bachelorarbeit von KINKADE (2019), in der die identischen Kakaoproben mittels Olfaktometrie analysiert wurden, eine zusätzliche Möglichkeit bieten, um Aussagen zu der Aromaaktivität der Substanzen zu treffen.

Auf Basis der Analyse dieser Arbeit können innerhalb der Fermentationsarten Aussagen zum Verlauf der Fermentation getroffen werden. Bezugnehmen auf die Diskussion der Ergebnisse (siehe 6.2) sollten weitere Fermentationstage inklusive des jeweils letzten Tages analysiert werden, um einen abgeschlossenen Datensatz über den Fermentationsverlauf zu erlangen und um somit Aussagen bzgl. der Hefen über einen möglicherweise verlangsamten Abbau der Aromakonzentrationen über einen längeren Zeitraum treffen zu können.

Eine zusammenfassende Aussage über die Auswirkungen des Hefestammes S.c. Zymaflore® X5 auf die Nacherntebehandlung (insbesondere die Fermentation) bezüglich der Bildung und Ausprägung von Kakaoaromen und deren Vorstufen lässt sich nach der quantitativen Analyse nicht treffen. Bei den ausgewählten Aromen zeigen sich mehrere meist unabhängige Auswirkungen der Hefen, wie ein schnellerer Konzentrationsanstieg bei zwei von neun Aromen sowie eine allgemein erhöhte Konzentration bei vier von neun Aromen. Des Weiteren zeigen sich eine Reduzierung der Streuung bei sechs von neun Aromen sowie ein begünstigter, gleichmäßiger Fermentationsverlauf bei vier von neun Aromen. Zwei von neun Aromen zeigen keinen Effekt bzgl. der zugesetzten Hefen.

Bei den gewonnenen Ergebnissen der Analyse sollte allgemein berücksichtigt werden, dass es sich bei Kakao um ein Naturprodukt mit natürlichen Schwankungen handelt. Um ein verbessertes Datenbild zu erhalten und die Streuung zu minimieren, sollte der Stichprobenumfang von drei Probenvials je Fermentationstag vergrößert werden. Zudem sollte sichergestellt werden, dass die Umwälzung des Kakaos gleichmäßig verläuft, sodass die Durchmischung und somit eine gute Verteilung der Mikroorganismen gegeben ist. Ferner darf nicht vernachlässigt werden, dass es sich bei der Fermentation um einen Prozess in einer natürlichen Umgebung handelt und nicht um ein kontrolliertes / steriles Umfeld, sodass auch weitere in der Natur vorkommende Mikroorganismen unbeabsichtigt Einfluss auf die Fermentation nehmen können.

Zusammenfassung

Das Ziel dieser Arbeit ist es, durch eine quantitative Analyse von Kakaoaromen festzustellen, ob eine Inokulation, d.h. ein Eingreifen in die Nacherntebehandlung, speziell in die Fermentation mittels zugesetzter Hefen, die Bildung und Ausprägung von Kakaoaromen und deren Vorstufen begünstigt.

Die aroma-flüchtigen Verbindungen der Kakaoproben, werden mittels HS-SPME-GC-MS analysiert. Die Kakaoproben („Chuncho“-Kakao aus Peru) unterliegen dabei zwei unterschiedlichen Fermentationsarten, einer natürlichen / spontanen und einer inokulierten Fermentation. Ferner erfolgt die Kakaoprobenentnahme während der Fermentation an unterschiedlichen Tagen, um den Verlauf der Aromabildung aufzuzeigen. Die Ergebnisse werden dabei auf die Unterschiede zwischen den Fermentationsarten, als auch auf die unterschiedlichen Fermentationstage bezogen.

Die statistische Auswertung erfolgt mittels Kruskal-Wallis Test und anschließendem Post-hoc Test nach Bonferroni bzgl. eines möglichen, signifikanten Einflusses hinsichtlich der aroma-aktiven Substanzen. Dabei wurden neun Aromen analysiert.

Bezüglich der Fermentationstage ergaben sich dabei sowohl erkennbare, zusammenhängende Anstiege / Abfälle der Aromakonzentrationen als auch nicht zusammenhängende Unterschiede. Die Analyse lässt eine Aussage zum Verlauf der Fermentation zu. Die Fermentationsarten zeigen für die ausgewählten Aromen bei zwei von neun Aromen einen schnelleren Konzentrationsanstieg sowie eine erhöhte Konzentration bei vier von neun Aromen. Des Weiteren wird die Streuung bei sechs von neun Aromen reduziert und bei vier von neun Aromen ein gleichmäßigerer Verlauf begünstigt. zwei von neun Aromen zeigen keinen Effekt bzgl. der zugesetzten Hefen.

Abstract

The aim of this work is to determine by quantitative analysis of cocoa aroma, whether inoculation, i.e. intervention in post-harvest treatment, especially in fermentation using added yeasts, favours the formation and expression of cocoa aroma and their precursors.

The aroma-volatile compounds of the cocoa samples are analysed by HS SPME GC MS. The cocoa samples ("Chuncho" Cocoa from Peru) are subjected in two different types, natural / spontaneous and inoculated fermentation. Furthermore, the cocoa samples are taken on different days during the fermentation process in order to follow the progress of the aroma formation. The results are related to the differences between the fermentation types as well as to the different fermentation days.

The statistical evaluation is carried out by Kruskal-Wallis test followed by a post hoc test according to Bonferroni with regard to a possible significant influence on the aroma-active substances. Nine aromas were analysed.

With regard to the fermentation days, there were recognizable, coherent increases / decreases of the aroma concentrations as well as unrelated differences. The analysis allows a statement about the course of the fermentation. The fermentation types show a faster increase in concentration for the selected flavours in two out of nine flavours and an increased concentration in four out of nine flavours. In addition, the dispersion is reduced in six out of nine flavours and a more even course is favoured in four out of nine flavours. Two out of nine flavours show no effect on yeast.

Literaturverzeichnis

Afoakwa, Emmanuel Ohene (2010): *Chocolate Science and Technology*. 1. Aufl. s.l.: Wiley-Blackwell. Online verfügbar unter

<http://search.ebscohost.com/login.aspx?direct=true&scope=site&db=nlebk&db=nlabk&AN=312284>, zuletzt geprüft am 16.02.2020.

Afoakwa, Emmanuel Ohene (2012): *Chocolate and Cocoa, Flavor and Quality*. In: *Kirk-Othmer Encyclopedia of Chemical Technology*. Hoboken, NJ, USA: John Wiley & Sons, Inc.

Aprotosoiaie, Ana Clara; Luca, Simon Vlad; Miron, Anca (2016): *Flavor Chemistry of Cocoa and Cocoa Products-An Overview*. In: *COMPREHENSIVE REVIEWS IN FOOD SCIENCE AND FOOD SAFETY* 15 (1), S. 73–91. DOI: 10.1111/1541-4337.12180.

Beckett, Stephen T. (2009): *Industrial chocolate manufacture and use*. 4. ed., [elektronische Ressource]. Hoboken, NJ, Chichester, UK, Ames, Iowa: Wiley; Wiley-Blackwell. Online verfügbar unter <http://site.ebrary.com/lib/alltitles/docDetail.action?docID=10301305>, zuletzt geprüft am 27.01.2020.

Belitz, Hans-Dieter; Grosch, Werner; Schieberle, Peter (2008): *Lehrbuch der Lebensmittelchemie*. Mit 634 Tabellen. Sechste, vollständig überarbeitete Auflage. Berlin, Heidelberg: Springer (Springer-Lehrbuch).

Brenntag GmbH (2014): *Lösemittel*. Hg. v. Brenntag GmbH. Mühlheim an der Ruhr. Online verfügbar unter https://www.brenntag.com/media/documents/germany/broschueren/kenndaten_ausgewaehlter_loesemittel.pdf, zuletzt geprüft am 06.03.2020.

Budzikiewicz, Herbert (1998): *Massenspektrometrie. Eine Einführung*. 4. Aufl. Weinheim: Wiley-VCH.

Bundesverband der Deutschen Süßwarenindustrie e.V.: *Infografik "Rohkakaolieferländer Deutschlands"*. Hg. v. Bundesverband der Deutschen Süßwarenindustrie e.V. Bundesverband der Deutschen Süßwarenindustrie e.V. Bonn. Online verfügbar unter https://www.bdsi.de/fileadmin/redaktion/Grafik___Statistik/190806_BDSI_Infografik_Rohkakaolieferländer2018_RZ_quer.jpg, zuletzt geprüft am 03.01.2020.

BVL (2017): *Pestizide mit Isomerenpeaks bei der Bestimmung mit GC und HPLC*. Hg. v. Bundesamt für Verbraucherschutz und Lebensmittelsicherheit. Braunschweig. Online verfügbar unter https://www.bvl.bund.de/SharedDocs/Downloads/04_Pflanzenschutzmittel/pestizide_mit_Isomerenpeaks.pdf?__blob=publicationFile&v=3, zuletzt geprüft am 03.2020.

Castro-Alayo, Efraín M.; Idrogo-Vásquez, Guillermo; Siche, Raúl; Cardenas-Toro, Fiorella P. (2019): Formation of aromatic compounds precursors during fermentation of Criollo and Forastero cocoa. In: *Heliyon* 5 (1). DOI: 10.1016/j.heliyon.2019.e01157.

Céspedes-Del Pozo, W.H.; Blas-Sevillano, R.; Zhang, D. (2017): ASSESING GENETIC DIVERSITY OF CACAO (*Theobroma cacao* L.) NATIVO CHUNCHO IN LA CONVENCION, CUSCO-PERÚ. International Symposium on Cocoa Research (ISCR). Lima, Peru, 13.11.2017.

ChemgaPedia (2016): Kalibrierung. Kalibrierung mit Standardlösungen (externe Standards). Hg. v. Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA. Berlin. Online verfügbar unter <http://www.chemgapedia.de/vsengine/vlu/vsc/de/ch/3/anc/croma/kalibrierung.vlu/Page/vsc/de/ch/3/anc/croma/datenauswertung/quantitativ/externerstandard/extstandrdm80ht0801.vscml.html>, zuletzt geprüft am 03.01.2020.

Coady, Chantal (op. 1998): Schokolade. Das Handbuch für Geniesser. Köln: Evergreen.

Ducki, Sylvie; Miralles-Garcia, Javier; Zumbé, Albert; Tornero, Antonio; Storey, David M. (2008): Evaluation of solid-phase micro-extraction coupled to gas chromatography-mass spectrometry for the headspace analysis of volatile compounds in cocoa products. In: *Talanta* 74 (5), S. 1166–1174. DOI: 10.1016/j.talanta.2007.08.034.

Fincke, Heinrich (1965): Handbuch der Kakaoerzeugnisse. Unter Mitarbeit von Dr. rer. nat. Albrecht Fincke. 2. Aufl. Berlin/Heidelberg/New York: Springer.

Forschungskreis der Ernährungsindustrie e.V. (FEI) (2010-2013): Evaluierung chemisch-analytischer und molekularbiologischer Methoden zur Differenzierung von hochwertigem Arriba Edelkakao und Konsumkakao (CCN51). Hg. v. Industrielle Gemeinschaftsforschung. Bonn (AiF 16796 N).

FSKZ e. V. (2010): Schematischer Aufbau einer gaschromatographischen Anlage. Hg. v. Fördergemeinschaft für das Süddeutsche Kunststoff-Zentrum e.V. Online verfügbar unter <https://www.skz.de/de/newsaktuelles/7775.Schaedlichen-Emissionen-auf-der-Spur.html>, zuletzt geprüft am 03.01.2020.

Habermehl, Gerhard G. K.; Hammann, Peter E.; Krebs, Hans Christoph; Ternes, Waldemar (2008): Naturstoffchemie. Eine Einführung. 3., vollst. überarb. und erw. Aufl. Berlin, Heidelberg: Springer (Springer-Lehrbuch). Online verfügbar unter <http://site.ebrary.com/lib/alltitles/docDetail.action?docID=10253560>.

Hartwig, Andrea (Hg.) (2016): Analytische Methoden zur Prüfung gesundheitsschädlicher Arbeitsstoffe. Analysen in Biologischem Material. Band 2 (1-21). Weinheim: Wiley-VCH.

Hegmann, Elsa C. (2015): Qualitätsbedingende Eigenschaften neuer Kakao-Genotypen und deren Verhalten im Nachernteverfahren – eine Analyse neuer Kakao-Selektionen aus Costa Rica.

Dissertation. Universität Hamburg, Hamburg. Fachbereich Biologie. Online verfügbar unter <https://ediss.sub.uni-hamburg.de/volltexte/2015/7513/pdf/Dissertation.pdf>.

ICCO (2012): International Cocoa Organization. Hg. v. International Cocoa Organization. Côte d'Ivoire. Online verfügbar unter https://www.icco.org/images/video_new/Cocoa_harvest_fermentation_drying_t3v2.mp4, zuletzt aktualisiert am 01.04.2012, zuletzt geprüft am 02.03.2020.

Kadow, D.; Bohlmann, J.; Phillips, W.; Lieberei, R. (2013): Identification of main fine or flavour components in two genotypes of the cocoa tree (*Theobroma cacao* L.). In: *Journal of Applied Botany and Food Quality* (86), S. 90–98. DOI: 10.5073/JABFQ.2013.086.013.

Kinkade, Kelly Maria (2019): Aufbau eines kakaospezifischen Panels zur Analyse von aromaflüchtigen Komponenten in Kakaobohnen während der Nacherntebehandlung anhand einer HS-SPME-GC-MS/O-Methode. Hamburg University of Applied Science, Hamburg. Department of Life Science, Ökotröphologie.

Kohn, Wolfgang; Öztürk, Riza (2017): Statistik für Ökonomen. Datenanalyse mit R und SPSS. 3., überarbeitete Auflage. Berlin, Heidelberg: Springer Gabler (Springer-Lehrbuch).

Kolb, Bruno (1999): Gaschromatographie in Bildern. Weinheim: Wiley-VCH.

Kongor, John Edem; Hinneha, Michael; Van de Walle, Davy; Afoakwa, Emmanuel Ohene; Pascal Boeckxc, Pascal; Dewettinck, Koen (2016): Factors influencing quality variation in cocoa (*Theobroma cacao*) bean flavour profile — A review (82), S. 44–52. DOI: 10.1016/j.foodres.2016.01.012.

Leal, Gildemberg Amorim; Gomes, Luiz Humberto; Efraim, Priscilla; Almeida Tavares, Flavio Cesar de; Figueira, Antonio (2008): Fermentation of cacao (*Theobroma cacao* L.) seeds with a hybrid *Kluyveromyces marxianus* strain improved product quality attributes. In: *FEMS yeast research* 8 (5), S. 788–798. DOI: 10.1111/j.1567-1364.2008.00405.x.

Matissek, Reinhard; Steiner, Gabriele; Fischer, Markus (2014): Lebensmittelanalytik. 5., vollst. überarb. u. akt. Aufl. 2014. Berlin, Heidelberg: Imprint: Springer Spektrum (Springer-Lehrbuch).

Merck (2020). Hg. v. Merck KGaA, Darmstadt, Germany. Merck Chemicals GmbH. Online verfügbar unter <https://www.merckmillipore.com/DE/de/products>, zuletzt aktualisiert am 2020, zuletzt geprüft am 20.03.2020.

Miedaner, Thomas (Hg.) (2018): Genusspflanzen. Berlin, Heidelberg: Springer.

Otto, Matthias (2014): Analytische Chemie. 4., überarb. und erg. Aufl., 1. Nachdruck. Weinheim: Wiley-VCH (Bachelor).

Rimbach, Gerald; Nagursky, Jennifer; Erbersdobler, Helmut F. (2015): Lebensmittel-Warenkunde für Einsteiger. 2. Aufl. 2015. Berlin: Springer Spektrum (Springer-Lehrbuch). Online verfügbar unter <http://dx.doi.org/10.1007/978-3-662-46280-5>.

Rodriguez-Campos, J.; Escalona-Buendía, H. B.; Contreras-Ramos, S. M.; Orozco-Avila, I.; Jaramillo-Flores, E.; Lugo-Cervantes, E. (2012): Effect of fermentation time and drying temperature on volatile compounds in cocoa. In: *Food chemistry* 132 (1), S. 277–288. DOI: 10.1016/j.foodchem.2011.10.078.

Rojas, Rosario; Rodríguez, Carlos; Ruiz, Candy; Portales, Rosario; Neyra, Edgar; Patel, Kirti et al. (2018): Cacao Chuncho del Cuzco. Lima, Peru: Universidad Peruana Cayetano Heredia.

Schwan, Rosane F.; Fleet, Graham H. (2014): Cocoa and Coffee Fermentations. Hoboken: Taylor and Francis (Fermented Foods and Beverages Series). Online verfügbar unter <http://gbv.ebib.com/patron/FullRecord.aspx?p=1385028>.

Schwedt, Georg; Vogt, Carla (2010): Analytische Trennmethoden. Weinheim: Wiley (Master).

Traber, Sandra (2018): Methodenentwicklung für die Analyse von Kakaomassen mittels HS-SPME-GC-MS/GC-O. Masterarbeit. Hochschule für Angewandte Wissenschaften Hamburg, Hamburg. Life Science.

Tran, Phuong Diem; Van de Walle, Davy; Clercq, Nathalie de; Winne, Ann de; Kadow, Daniel; Lieberei, Reinhard et al. (2015): Assessing cocoa aroma quality by multiple analytical approaches. In: *Food Research International* 77, S. 657–669. DOI: 10.1016/j.foodres.2015.09.019.

Wenig, Philip (2019): OpenChrom®. Version 2019. Hamburg: Lablicate GmbH. Online verfügbar unter <https://lablicate.com/>, zuletzt geprüft am 19.01.2020.

Zöfel, Peter (2006): Statistik für Wirtschaftswissenschaftler. Im Klartext. [Nachdr.]. München: Pearson Studium (Wi - Wirtschaft).

Anhang

Anhang 1: Methode zur Peakflächenintegration in OpenChrom®.....	i
Anhang 2: Flächenangaben der Peaks.....	ii
Teil 1: Standards.....	ii
Teil 2: Kakaoproben.....	vii
Anhang 3: Kalibriergeraden der Standards.....	xix
Anhang 4: Signifikanztests.....	xxi
Teil 1: Shapiro-Wilk Test.....	xxi
Teil 2: Levene Test.....	xxiii
Teil 3: Kruskal-Wallis-Test.....	xxiv
Teil 4: Post-hoc Test nach Bonferroni.....	xxv

Anhang 1: Methode zur Peakflächenintegration in OpenChrom® (Wenig 2019)

OpenChrom Lablicate Edition (1.4.0.202001031827)

File Chromatogram Processors Spectrum Controls Plug-ins Window Help

KakaoManuell.ocm [MSD, WSD, CSD]

Name	Description	Type
SNIP Baseline Detector	This baseline detector uses the SNIP algorithm.	[MSD, CSD, WSD]
Chromatogram Baseline Subtract Filter	This filter enables to remove the baseline from the chromatogram.	[MSD, CSD, WSD]
Set Chromatogram Selection	This filter selects the chromatogram range.	[MSD, CSD, WSD]
Savitzky-Golay Smoothing	This filter applies the Savitzky-Golay filter.	[MSD, CSD, WSD]
Peak Detector First Derivative (MSD)	Implementation of a first derivative peak detector.	[MSD]
Set Chromatogram Selection	This filter selects the chromatogram range.	[MSD, CSD, WSD]
Template Peak Detector UI (MSD)	This is the template UI peak detector (MSD).	[MSD]
Template Peak Identifier (MSD)	This peak identifier tries to identify peaks by using ranges from a template.	[MSD]
Peak Integrator Trapezoid	This extension point tries to implement a ChemStation similar peak integrator.	[MSD, CSD]
OpenChrom Chromatogram (*.ocb)	Reads and writes OpenChrom chromatograms	[MSD]

Settings:

SNIP Baseline Detector	Window Size:WIDTH_7,Number of Iterations:100	
Chromatogram Baseline Subtract Filter	not configurable	
Set Chromatogram Selection	defaults	
Savitzky-Golay Smoothing	Order:2,Width:5	
Peak Detection First Derivate (MSD)	Include Background (VV: true, BV VB: false):false,Use Noise-Segments_false,Window Size:WIDTH_9,Min S/N Ratio:2.0,m/z values to filter:,Filter Mode:INCLUDE, Threshold:OFF	
Set Chromatogram Selection	Start RT (Minutes):0.0,Use relative Start RT:false, Use relative Stop RT:false,Stop RT (Minutes):28.0	
Template Peak Detector UI (MSD)	Detector Settings: 1.182 1.298 VV true 1.770 1.872 VV true 3.056 3.199 VV true 3.555 3.727 VV true 4.290 4.548 VV true 5.000 5.500 VV true	6.711 6.959 VV true 8.473 8.672 VV true 11.150 11.235 VV true 15.629 15.843 VV true 16.398 16.945 VV true 21.451 21.575 VV true
Template Peak Identifier (MSD)	Identifier Settings: 1.182 1.298 Ethylacetat 1.770 1.872 Pentanon 3.056 3.199 Pentylacetat 3.555 3.727 β -Pinen 4.290 4.548 Pentanol 5.000 5.500 β -Pinen	6.711 6.959 Isoamylalkohol 8.473 8.672 Heptylacetat 11.150 11.235 Heptanol 15.629 15.843 Butanediol(1) 16.398 16.945 Butanediol(2) 21.451 21.575 Phenylethanol
Peak Integrator Trapezoid	Include Background:false	
OpenChrom Chromatogram (*.ocb)		

Anhang 2: Teil 1: Flächenangaben der Peaks – Standards

2,3-Butandiol (RT 15,8)

Prozent	Type	RT (min)	Start RT	Stop RT	Area	Name	S/N	Area Percent	Scan# at Peak Maximum	Width	RRT (min)	RI	Leading	Tailing
0,01	PEAK	15.764	15.708	15.798	140942	Butanediol(1)	8.232	20.495	4161	0.030	0.000	0	1.074	0.931
0,01	PEAK	15.764	15.708	15.798	141012	Butanediol(1)	7.966	14.502	4141	0.030	0.000	0	1.075	0.931
0,01	PEAK	15.764	15.712	15.798	141338	Butanediol(1)	8.326	12.689	4116	0.030	0.000	0	1.074	0.931
0,025	PEAK	15.772	15.715	15.824	257309	Butanediol(1)	13.178	27.384	4059	0.027	0.000	0	1.050	0.953
0,025	PEAK	15.772	15.715	15.824	257371	Butanediol(1)	13.151	27.791	4111	0.027	0.000	0	1.049	0.953
0,025	PEAK	15.772	15.715	15.824	257362	Butanediol(1)	13.131	19.234	4088	0.027	0.000	0	1.049	0.953
0,05	PEAK	15.779	15.723	15.824	755305	Butanediol(1)	46.181	27.222	4181	0.027	0.000	0	0.872	1.147
0,05	PEAK	15.779	15.727	15.824	738049	Butanediol(1)	47.006	13.593	4118	0.027	0.000	0	0.864	1.158
0,05	PEAK	15.779	15.727	15.824	740440	Butanediol(1)	48.666	26.895	4145	0.027	0.000	0	0.861	1.162
0,075	PEAK	15.779	15.727	15.817	1110914	Butanediol(1)	74.970	19.051	4180	0.027	0.000	0	1.131	0.884
0,075	PEAK	15.779	15.730	15.820	1145551	Butanediol(1)	73.479	19.631	4147	0.027	0.000	0	1.099	0.910
0,075	PEAK	15.779	15.734	15.820	1104231	Butanediol(1)	77.224	13.531	4122	0.027	0.000	0	1.086	0.921
0,1	PEAK	15.783	15.723	15.824	3078940	Butanediol(1)	198.203	13.282	4080	0.027	0.000	0	1.256	0.796
0,1	PEAK	15.783	15.723	15.824	3076944	Butanediol(1)	191.341	23.452	4105	0.027	0.000	0	1.256	0.796
0,1	PEAK	15.783	15.719	15.839	3283953	Butanediol(1)	196.817	25.018	4129	0.028	0.000	0	1.246	0.803

2,3-Butandiol (RT 16,5)

Prozent	Type	RT (min)	Start RT	Stop RT	Area	Name	S/N	Area Percent	Scan# at Peak Maximum	Width	RRT (min)	RI	Leading	Tailing
0,01	PEAK	16.499	16.465	16.544	284709	Butanediol(2)	19.854	28.883	4350	0.025	0.000	0	0.889	1.124
0,01	PEAK	16.499	16.465	16.544	284709	Butanediol(2)	20.005	24.680	4340	0.025	0.000	0	0.889	1.124
0,01	PEAK	16.499	16.465	16.544	284709	Butanediol(2)	19.732	42.472	4334	0.025	0.000	0	0.889	1.124
0,025	PEAK	16.510	16.476	16.574	442598	Butanediol(2)	29.180	47.103	4248	0.028	0.000	0	0.938	1.066
0,025	PEAK	16.510	16.476	16.574	442624	Butanediol(2)	29.072	33.079	4278	0.028	0.000	0	0.938	1.066
0,025	PEAK	16.510	16.473	16.574	437523	Butanediol(2)	29.008	39.227	4326	0.028	0.000	0	0.933	1.072
0,05	PEAK	16.518	16.469	16.566	2011862	Butanediol(2)	143.077	37.053	4299	0.026	0.000	0	1.187	0.842
0,05	PEAK	16.518	16.469	16.566	2012680	Butanediol(2)	148.497	73.105	4332	0.026	0.000	0	1.184	0.845
0,05	PEAK	16.518	16.465	16.570	2019262	Butanediol(2)	140.635	72.778	4373	0.026	0.000	0	1.182	0.846
0,075	PEAK	16.521	16.473	16.574	3556546	Butanediol(2)	237.111	60.991	4373	0.027	0.000	0	1.401	0.714
0,075	PEAK	16.521	16.473	16.574	3555958	Butanediol(2)	228.082	60.939	4333	0.027	0.000	0	1.401	0.714
0,075	PEAK	16.521	16.469	16.574	3554831	Butanediol(2)	243.112	43.560	4304	0.027	0.000	0	1.403	0.713
0,1	PEAK	16.540	16.469	16.589	10043709	Butanediol(2)	598.724	43.326	4262	0.029	0.000	0	2.923	0.342
0,1	PEAK	16.540	16.469	16.589	10043476	Butanediol(2)	578.021	76.548	4290	0.029	0.000	0	2.913	0.343
0,1	PEAK	16.540	16.469	16.589	10043613	Butanediol(2)	590.842	75.328	4379	0.029	0.000	0	2.914	0.343

Ethylacetat

Prozent	Type	RT (min)	Start RT	Stop RT	Area	Name	S/N	Area Percent	Scan# at Peak Maximum	Width	RRT (min)	RI	Leading	Tailing
0,01	PEAK	1.246	1.223	1.279	991545	Ethylacetat	98.169	49.981	281	0.017	0.000	0	0.755	1.325
0,01	PEAK	1.246	1.219	1.279	995142	Ethylacetat	95.740	100.000	273	0.017	0.000	0	0.791	1.264
0,01	PEAK	1.246	1.219	1.279	999376	Ethylacetat	96.913	100.000	253	0.018	0.000	0	0.832	1.202
0,025	PEAK	1.249	1.219	1.279	2594097	Ethylacetat	262.407	100.000	293	0.017	0.000	0	0.772	1.295
0,025	PEAK	1.249	1.219	1.279	2601892	Ethylacetat	259.339	100.000	250	0.018	0.000	0	0.787	1.270
0,025	PEAK	1.249	1.219	1.279	2615466	Ethylacetat	257.890	51.101	226	0.019	0.000	0	0.827	1.209
0,05	PEAK	1.249	1.223	1.298	5167759	Ethylacetat	488.281	100.000	265	0.018	0.000	0	0.808	1.238
0,05	PEAK	1.249	1.223	1.298	5176419	Ethylacetat	471.593	100.000	258	0.019	0.000	0	0.813	1.229
0,05	PEAK	1.249	1.219	1.298	5184844	Ethylacetat	479.819	100.000	252	0.019	0.000	0	0.817	1.223
0,075	PEAK	1.249	1.216	1.298	7493722	Ethylacetat	663.753	100.000	286	0.018	0.000	0	0.752	1.331
0,075	PEAK	1.249	1.216	1.298	7496903	Ethylacetat	648.440	100.000	269	0.019	0.000	0	0.764	1.308
0,075	PEAK	1.249	1.216	1.298	7497820	Ethylacetat	637.032	100.000	256	0.019	0.000	0	0.777	1.287
0,1	PEAK	1.249	1.219	1.339	11253484	Ethylacetat	871.703	100.000	286	0.019	0.000	0	0.738	1.356
0,1	PEAK	1.249	1.216	1.339	11312966	Ethylacetat	881.997	100.000	269	0.019	0.000	0	0.764	1.309
0,1	PEAK	1.249	1.219	1.343	11358279	Ethylacetat	902.159	100.000	251	0.020	0.000	0	0.781	1.281
0,1	PEAK	1.257	1.212	1.351	11659797	Ethylacetat	565.922	100.000	280	0.034	0.000	0	1.035	0.966
0,1	PEAK	1.257	1.212	1.343	11550078	Ethylacetat	590.382	100.000	260	0.034	0.000	0	1.055	0.948
0,1	PEAK	1.257	1.204	1.347	11637783	Ethylacetat	549.503	100.000	254	0.034	0.000	0	1.060	0.943
0,25	PEAK	1.249	1.219	1.339	27208804	Ethylacetat	2.240.309	100.000	250	0.020	0.000	0	0.845	1.184
0,25	PEAK	1.249	1.216	1.336	27225520	Ethylacetat	2.169.922	100.000	242	0.021	0.000	0	0.845	1.184
0,25	PEAK	1.249	1.216	1.339	27440057	Ethylacetat	2.206.042	100.000	231	0.021	0.000	0	0.842	1.188
0,5	PEAK	1.246	1.212	1.336	35920026	Ethylacetat	2.695.083	100.000	280	0.020	0.000	0	0.904	1.106
0,5	PEAK	1.246	1.212	1.336	35939654	Ethylacetat	2.738.841	100.000	272	0.020	0.000	0	0.895	1.117
0,5	PEAK	1.246	1.212	1.336	35959945	Ethylacetat	2.782.055	100.000	263	0.021	0.000	0	0.887	1.127
0,75	PEAK	1.253	1.216	1.343	58692895	Ethylacetat	4.183.444	100.000	289	0.023	0.000	0	1.134	0.882
0,75	PEAK	1.253	1.216	1.343	58735414	Ethylacetat	3.959.788	100.000	279	0.023	0.000	0	1.110	0.901
0,75	PEAK	1.253	1.216	1.343	58783088	Ethylacetat	4.090.475	100.000	263	0.023	0.000	0	1.066	0.938
1	PEAK	1.253	1.212	1.343	69502287	Ethylacetat	4.900.503	100.000	295	0.023	0.000	0	1.270	0.787
1	PEAK	1.253	1.212	1.343	69541996	Ethylacetat	5.015.970	100.000	286	0.023	0.000	0	1.240	0.807
1	PEAK	1.253	1.212	1.343	69597915	Ethylacetat	4.784.428	100.000	276	0.024	0.000	0	1.215	0.823

Anhang 2 (Fortsetzung): Teil 1: Flächenangaben der Peaks – Standards

2-Heptylacetat

Prozent	Type	RT (min)	Start RT	Stop RT	Area	Name	S/N	Area Percent	Scan# at Peak Maximum	Width	RRT (min)	RI	Leading	Tailing
0,005	PEAK	8.657	8.589	8.735	893474	Heptylacetat	36.593	43.656	2217	0.044	0.000	0	0.857	1.167
0,005	PEAK	8.657	8.589	8.735	895930	Heptylacetat	34.923	81.944	2255	0.044	0.000	0	0.861	1.161
0,005	PEAK	8.657	8.589	8.735	894386	Heptylacetat	34.365	79.069	2239	0.044	0.000	0	0.853	1.172
0,01	PEAK	8.664	8.593	8.762	1015183	Heptylacetat	39.085	74.877	2265	0.046	0.000	0	0.847	1.180
0,01	PEAK	8.664	8.589	8.762	1009002	Heptylacetat	37.995	59.769	2198	0.047	0.000	0	0.819	1.221
0,01	PEAK	8.664	8.585	8.762	1006657	Heptylacetat	39.592	74.713	2184	0.047	0.000	0	0.819	1.222
0,025	PEAK	8.660	8.593	8.750	1013792	Heptylacetat	35.054	44.909	2271	0.046	0.000	0	0.843	1.186
0,025	PEAK	8.660	8.593	8.750	1007609	Heptylacetat	38.082	28.708	2201	0.049	0.000	0	0.755	1.324
0,025	PEAK	8.660	8.593	8.750	1009030	Heptylacetat	34.146	44.617	2258	0.048	0.000	0	0.776	1.288
0,05	PEAK	8.664	8.586	8.751	999874	Heptylacetat	38.962	35.615	2194	0.048	0.000	0	0.798	1.253
0,05	PEAK	8.664	8.586	8.754	1015433	Heptylacetat	37.447	37.381	2212	0.048	0.000	0	0.804	1.244
0,05	PEAK	8.664	8.586	8.751	1002075	Heptylacetat	36.902	35.938	2229	0.047	0.000	0	0.815	1.227
0,075	PEAK	8.664	8.597	8.747	923237	Heptylacetat	34.379	24.005	2154	0.047	0.000	0	0.814	1.228
0,075	PEAK	8.664	8.593	8.747	925922	Heptylacetat	33.517	25.783	2176	0.047	0.000	0	0.815	1.227
0,075	PEAK	8.668	8.593	8.747	925672	Heptylacetat	34.163	16.625	2198	0.047	0.000	0	0.815	1.227
0,1	PEAK	8.661	8.604	8.735	772579	Heptylacetat	30.127	18.442	2268	0.045	0.000	0	0.898	1.113
0,1	PEAK	8.661	8.597	8.735	773323	Heptylacetat	31.201	15.506	2228	0.046	0.000	0	0.802	1.248
0,1	PEAK	8.661	8.597	8.735	773420	Heptylacetat	31.699	49.107	2192	0.046	0.000	0	0.797	1.254
0,5	PEAK	8.661	8.559	8.739	948853	Heptylacetat	32.155	4.568	2220	0.051	0.000	0	0.975	1.025
0,5	PEAK	8.661	8.563	8.739	948390	Heptylacetat	31.507	4.550	2236	0.050	0.000	0	0.970	1.031
0,5	PEAK	8.661	8.559	8.739	950596	Heptylacetat	30.747	4.587	2252	0.050	0.000	0	0.968	1.033
1	PEAK	8.657	8.544	8.739	1210533	Heptylacetat	35.949	2.672	2263	0.056	0.000	0	1.370	0.730
1	PEAK	8.657	8.544	8.743	1220298	Heptylacetat	35.925	2.678	2225	0.057	0.000	0	1.335	0.749
1	PEAK	8.657	8.548	8.739	1202389	Heptylacetat	35.155	2.673	2208	0.057	0.000	0	1.343	0.744

2-Heptanol

Prozent	Type	RT (min)	Start RT	Stop RT	Area	Name	S/N	Area Percent	Scan# at Peak Maximum	Width	RRT (min)	RI	Leading	Tailing
0,005	PEAK	11.243	11.194	11.318	236674	Heptanol	10.312	11.564	2899	0.037	0.000	0	0.670	1.492
0,005	PEAK	11.243	11.194	11.318	236761	Heptanol	9.678	20.931	2922	0.037	0.000	0	0.670	1.493
0,005	PEAK	11.243	11.194	11.318	236660	Heptanol	10.121	100.000	2877	0.037	0.000	0	0.670	1.492
0,01	PEAK	11.251	11.198	11.300	340676	Heptanol	17.079	21.773	2898	0.034	0.000	0	0.971	1.030
0,01	PEAK	11.251	11.198	11.300	340711	Heptanol	17.983	25.287	2864	0.034	0.000	0	0.970	1.031
0,01	PEAK	11.251	11.198	11.300	340686	Heptanol	17.236	20.181	2880	0.034	0.000	0	0.971	1.030
0,025	PEAK	11.243	11.191	11.311	1249941	Heptanol	55.685	36.439	2905	0.038	0.000	0	0.838	1.194
0,025	PEAK	11.243	11.191	11.311	1250097	Heptanol	55.951	55.068	2924	0.038	0.000	0	0.838	1.194
0,025	PEAK	11.243	11.191	11.311	1249869	Heptanol	60.375	35.611	2882	0.038	0.000	0	0.838	1.194
0,05	PEAK	11.247	11.187	11.315	1786491	Heptanol	82.085	100.000	2813	0.038	0.000	0	0.992	1.008
0,05	PEAK	11.247	11.187	11.315	1786476	Heptanol	89.690	100.000	2738	0.038	0.000	0	0.992	1.008
0,05	PEAK	11.247	11.187	11.315	1786235	Heptanol	82.924	64.062	2911	0.038	0.000	0	0.992	1.008
0,075	PEAK	11.251	11.191	11.322	2922842	Heptanol	136.948	75.995	2832	0.035	0.000	0	1.174	0.852
0,075	PEAK	11.251	11.191	11.322	2922439	Heptanol	129.990	78.259	2900	0.035	0.000	0	1.174	0.852
0,075	PEAK	11.251	11.195	11.322	2907662	Heptanol	128.515	75.215	2923	0.035	0.000	0	1.173	0.853
0,1	PEAK	11.255	11.195	11.333	3447552	Heptanol	169.670	69.128	2912	0.037	0.000	0	1.168	0.856
0,1	PEAK	11.255	11.195	11.330	3416671	Heptanol	163.111	81.558	2959	0.037	0.000	0	1.171	0.854
0,1	PEAK	11.255	11.191	11.330	3427597	Heptanol	167.335	81.287	2891	0.037	0.000	0	1.172	0.853
0,5	PEAK	11.292	11.191	11.352	19897972	Heptanol	867.176	95.536	2850	0.040	0.000	0	2.885	0.347
0,5	PEAK	11.292	11.191	11.352	19897785	Heptanol	848.622	95.319	2891	0.040	0.000	0	2.885	0.347
0,5	PEAK	11.292	11.191	11.352	19897452	Heptanol	822.841	95.450	2931	0.040	0.000	0	2.885	0.347
1	PEAK	11.333	11.198	11.374	44343965	Heptanol	1.536.147	97.322	2930	0.049	0.000	0	6.071	0.165
1	PEAK	11.333	11.195	11.371	44089853	Heptanol	1.462.915	97.413	2958	0.049	0.000	0	6.090	0.164
1	PEAK	11.333	11.195	11.371	44089565	Heptanol	1.534.970	97.328	2976	0.049	0.000	0	6.090	0.164

Anhang 2 (Fortsetzung): Teil 1: Flächenangaben der Peaks – Standards

Isoamylalkohol

Prozent	Type	RT (min)	Start RT	Stop RT	Area	Name	S/N	Area Percent	Scan# at Peak Maximum	Width	RRT (min)	Rt	Leading	Tailing
0,01	PEAK	6.906	6.850	6.981	684814	Isoamylalkohol	27.294	50.073	1791	0.041	0.000	0	0.674	1.484
0,01	PEAK	6.906	6.850	6.981	683109	Isoamylalkohol	27.861	100.000	1773	0.041	0.000	0	0.719	1.390
0,01	PEAK	6.906	6.850	6.985	687789	Isoamylalkohol	27.971	100.000	1748	0.041	0.000	0	0.718	1.392
0,025	PEAK	6.914	6.854	7.004	1731981	Isoamylalkohol	67.987	100.000	1787	0.043	0.000	0	0.812	1.232
0,025	PEAK	6.914	6.854	7.000	1720220	Isoamylalkohol	68.000	100.000	1773	0.043	0.000	0	0.815	1.227
0,025	PEAK	6.914	6.854	7.000	1719966	Isoamylalkohol	71.245	100.000	1757	0.043	0.000	0	0.828	1.208
0,05	PEAK	6.914	6.842	7.022	4074706	Isoamylalkohol	168.326	100.000	1751	0.042	0.000	0	0.977	1.023
0,05	PEAK	6.914	6.846	7.026	4082471	Isoamylalkohol	173.288	100.000	1733	0.042	0.000	0	0.977	1.024
0,05	PEAK	6.914	6.842	7.026	4089956	Isoamylalkohol	174.726	100.000	1695	0.042	0.000	0	0.976	1.025
0,075	PEAK	6.917	6.846	7.000	5383179	Isoamylalkohol	222.360	100.000	1804	0.041	0.000	0	1.313	0.762
0,075	PEAK	6.917	6.842	6.985	5360565	Isoamylalkohol	223.257	100.000	1758	0.042	0.000	0	1.306	0.766
0,075	PEAK	6.917	6.846	6.996	5345583	Isoamylalkohol	223.012	100.000	1742	0.042	0.000	0	1.294	0.773
0,1	PEAK	6.925	6.839	6.985	8917075	Isoamylalkohol	372.387	100.000	1688	0.044	0.000	0	1.880	0.532
0,1	PEAK	6.925	6.839	6.985	8917303	Isoamylalkohol	371.462	100.000	1669	0.044	0.000	0	1.876	0.533
0,1	PEAK	6.925	6.842	6.985	8916438	Isoamylalkohol	375.605	100.000	1600	0.044	0.000	0	1.859	0.538
0,5	PEAK	7.004	6.850	7.041	40232151	Isoamylalkohol	1.180.572	100.000	1818	0.065	0.000	0	6.455	0.155
0,5	PEAK	7.004	6.850	7.041	40232952	Isoamylalkohol	1.207.000	100.000	1798	0.066	0.000	0	6.458	0.155
0,5	PEAK	7.000	6.846	7.041	40193149	Isoamylalkohol	1.240.932	50.202	1715	0.068	0.000	0	6.456	0.155
1	PEAK	7.060	6.857	7.090	77083209	Isoamylalkohol	1.657.871	100.000	1838	0.069	0.000	0	11.772	0.085
1	PEAK	7.060	6.854	7.090	77185186	Isoamylalkohol	1.562.028	100.000	1821	0.092	0.000	0	12.082	0.083
1	PEAK	7.060	6.857	7.090	77381861	Isoamylalkohol	1.678.814	49.897	1786	0.078	0.000	0	9.918	0.101

2-Pentanol

Prozent	Type	RT (min)	Start RT	Stop RT	Area	Name	S/N	Area Percent	Scan# at Peak Maximum	Width	RRT (min)	Rt	Leading	Tailing
0,005	PEAK	4.398	4.346	4.462	530260	Pentanol	29.975	100.000	1131	0.033	0.000	0	0.828	1.207
0,005	PEAK	4.398	4.346	4.462	526884	Pentanol	30.201	100.000	1120	0.034	0.000	0	0.791	1.264
0,005	PEAK	4.398	4.346	4.462	525770	Pentanol	31.771	100.000	1108	0.034	0.000	0	0.821	1.218
0,01	PEAK	4.409	4.357	4.473	1316232	Pentanol	74.728	100.000	1129	0.032	0.000	0	0.905	1.105
0,01	PEAK	4.409	4.361	4.473	1320110	Pentanol	77.233	49.723	1117	0.032	0.000	0	0.887	1.128
0,01	PEAK	4.409	4.357	4.473	1316928	Pentanol	79.280	48.293	1102	0.032	0.000	0	0.889	1.125
0,025	PEAK	4.417	4.357	4.481	3185829	Pentanol	189.904	48.361	1126	0.033	0.000	0	1.051	0.952
0,025	PEAK	4.417	4.361	4.481	3192792	Pentanol	179.647	48.393	1114	0.033	0.000	0	1.040	0.962
0,025	PEAK	4.417	4.357	4.481	3189701	Pentanol	191.935	50.666	1037	0.033	0.000	0	1.012	0.988
0,05	PEAK	4.421	4.361	4.481	6936142	Pentanol	427.389	49.710	1138	0.033	0.000	0	1.363	0.734
0,05	PEAK	4.421	4.357	4.481	6938950	Pentanol	402.123	100.000	1127	0.033	0.000	0	1.348	0.742
0,05	PEAK	4.421	4.361	4.481	6939644	Pentanol	394.683	100.000	1115	0.033	0.000	0	1.349	0.741
0,075	PEAK	4.428	4.353	4.500	10008531	Pentanol	543.749	100.000	1123	0.035	0.000	0	1.757	0.569
0,075	PEAK	4.428	4.357	4.503	10063771	Pentanol	555.445	51.291	1108	0.035	0.000	0	1.757	0.569
0,075	PEAK	4.428	4.357	4.503	10062910	Pentanol	561.027	100.000	1094	0.035	0.000	0	1.756	0.570
0,1	PEAK	4.402	4.335	4.455	8541423	Pentanol	427.826	100.000	1134	0.034	0.000	0	1.675	0.597
0,1	PEAK	4.402	4.335	4.455	8552661	Pentanol	446.925	100.000	1093	0.035	0.000	0	1.639	0.610
0,1	PEAK	4.402	4.335	4.455	8554855	Pentanol	443.163	100.000	1080	0.035	0.000	0	1.623	0.616
0,5	PEAK	4.469	4.346	4.511	42658308	Pentanol	1.506.172	100.000	1145	0.054	0.000	0	6.512	0.154
0,5	PEAK	4.469	4.346	4.514	42981664	Pentanol	1.500.681	100.000	1129	0.056	0.000	0	6.363	0.157
0,5	PEAK	4.469	4.349	4.511	42625001	Pentanol	1.565.428	100.000	1096	0.057	0.000	0	6.073	0.165
1	PEAK	4.526	4.346	4.552	94283267	Pentanol	2.343.583	100.000	1029	0.068	0.000	0	7.816	0.128
1	PEAK	4.526	4.350	4.552	94309051	Pentanol	2.393.203	100.000	1010	0.067	0.000	0	7.509	0.133
1	PEAK	4.526	4.350	4.552	94332823	Pentanol	2.315.223	100.000	993	0.067	0.000	0	7.278	0.137

2-Pentanon

Prozent	Type	RT (min)	Start RT	Stop RT	Area	Name	S/N	Area Percent	Scan# at Peak Maximum	Width	RRT (min)	Rt	Leading	Tailing
0,005	PEAK	1.872	1.849	1.898	1072815	Pentanon	118.985	100.000	448	0.016	0.000	0	0.915	1.093
0,005	PEAK	1.872	1.849	1.898	1075953	Pentanon	117.764	31.130	438	0.016	0.000	0	0.934	1.071
0,005	PEAK	1.872	1.849	1.898	1079764	Pentanon	115.926	49.205	430	0.016	0.000	0	0.943	1.060
0,01	PEAK	1.849	1.819	1.894	2016211	Pentanon	155.422	48.052	454	0.021	0.000	0	0.734	1.362
0,01	PEAK	1.849	1.819	1.891	1969789	Pentanon	151.901	47.182	445	0.021	0.000	0	0.746	1.341
0,01	PEAK	1.849	1.819	1.891	1968949	Pentanon	159.427	100.000	435	0.021	0.000	0	0.749	1.335
0,025	PEAK	1.853	1.819	1.917	5723467	Pentanon	420.258	50.255	440	0.021	0.000	0	0.835	1.198
0,025	PEAK	1.853	1.819	1.917	5727290	Pentanon	422.369	100.000	432	0.021	0.000	0	0.830	1.205
0,025	PEAK	1.853	1.819	1.917	5731549	Pentanon	435.413	100.000	424	0.021	0.000	0	0.828	1.207
0,05	PEAK	1.853	1.819	1.905	10854120	Pentanon	841.264	100.000	434	0.021	0.000	0	0.895	1.118
0,05	PEAK	1.853	1.819	1.913	11110793	Pentanon	868.739	100.000	424	0.022	0.000	0	0.890	1.124
0,05	PEAK	1.853	1.819	1.909	11019016	Pentanon	865.272	100.000	407	0.022	0.000	0	0.892	1.121
0,075	PEAK	1.853	1.816	1.898	15305414	Pentanon	1.292.491	100.000	451	0.021	0.000	0	0.994	1.006
0,075	PEAK	1.853	1.816	1.898	15329932	Pentanon	1.284.420	100.000	427	0.021	0.000	0	0.974	1.026
0,075	PEAK	1.853	1.819	1.898	15309449	Pentanon	1.268.280	48.846	417	0.022	0.000	0	0.969	1.032
0,1	PEAK	1.879	1.849	1.932	14475284	Pentanon	1.377.119	51.655	451	0.016	0.000	0	1.224	0.817
0,1	PEAK	1.879	1.849	1.928	14372431	Pentanon	1.443.958	53.252	432	0.017	0.000	0	1.179	0.848
0,1	PEAK	1.879	1.849	1.924	14333910	Pentanon	1.431.456	51.857	358	0.018	0.000	0	1.044	0.958
0,5	PEAK	1.872	1.819	1.920	61737203	Pentanon	4.318.587	54.180	449	0.028	0.000	0	2.907	0.344
0,5	PEAK	1.872	1.815	1.920	61878273	Pentanon	4.166.776	53.259	437	0.029	0.000	0	2.750	0.364
0,5	PEAK	1.872	1.815	1.920	61909122	Pentanon	4.267.065	53.038	423	0.029	0.000	0	2.553	0.392
1	PEAK	1.887	1.815	1.905	84942139	Pentanon	4.670.063	100.000	454	0.035	0.000	0	4.023	0.249
1	PEAK	1.887	1.815	1.905	85551271	Pentanon	4.637.401	100.000	444	0.035	0.000	0	3.836	0.261
1	PEAK	1.883	1.819	1.905	85602538	Pentanon	4.685.398	100.000	434	0.035	0.000	0	3.682	0.272

Anhang 2 (Fortsetzung): Teil 1: Flächenangaben der Peaks – Standards

2-Pentylacetat

Prozent	Type	RT (min)	Start RT	Stop RT	Area	Name	S/N	Area Percent	Scan# at Peak Maximum	Width	RRT (min)	Ri	Leading	Tailing
0,005	PEAK	3.180	3.169	3.188	1501	Pentylacetat	0.344	100.000	766	0.009	0.000	0	1.461	0.684
0,005	PEAK	3.180	3.173	3.188	1530	Pentylacetat	0.419	2.026	791	0.008	0.000	0	1.005	0.995
0,005	PEAK	3.180	3.169	3.188	1468	Pentylacetat	0.325	100.000	677	0.009	0.000	0	1.392	0.718
0,01	PEAK	3.184	3.139	3.214	52757	Pentylacetat	3.557	10.623	786	0.029	0.000	0	1.404	0.712
0,01	PEAK	3.180	3.131	3.214	54716	Pentylacetat	3.538	16.669	806	0.029	0.000	0	1.407	0.711
0,01	PEAK	3.184	3.131	3.214	54188	Pentylacetat	3.526	21.341	798	0.029	0.000	0	1.447	0.691
0,025	PEAK	3.180	3.139	3.221	144269	Pentylacetat	9.674	7.397	764	0.029	0.000	0	0.977	1.023
0,025	PEAK	3.180	3.135	3.218	145466	Pentylacetat	9.739	17.281	791	0.029	0.000	0	1.045	0.957
0,025	PEAK	3.180	3.135	3.218	143003	Pentylacetat	9.643	13.170	775	0.029	0.000	0	1.014	0.986
0,05	PEAK	3.188	3.154	3.236	361304	Pentylacetat	23.445	9.078	810	0.028	0.000	0	0.788	1.270
0,05	PEAK	3.188	3.146	3.236	365342	Pentylacetat	24.191	15.690	792	0.028	0.000	0	0.785	1.274
0,05	PEAK	3.188	3.150	3.236	365961	Pentylacetat	23.522	12.479	801	0.028	0.000	0	0.782	1.279
0,075	PEAK	3.184	3.139	3.251	504210	Pentylacetat	31.478	8.654	769	0.031	0.000	0	0.791	1.264
0,075	PEAK	3.184	3.135	3.251	509787	Pentylacetat	31.229	14.063	790	0.031	0.000	0	0.779	1.283
0,075	PEAK	3.184	3.135	3.251	509155	Pentylacetat	30.079	14.148	784	0.031	0.000	0	0.792	1.262
0,1	PEAK	3.184	3.143	3.232	526743	Pentylacetat	34.157	15.969	809	0.029	0.000	0	0.804	1.244
0,1	PEAK	3.184	3.139	3.232	524585	Pentylacetat	34.533	15.952	794	0.030	0.000	0	0.806	1.240
0,1	PEAK	3.184	3.143	3.236	531198	Pentylacetat	33.420	12.127	801	0.030	0.000	0	0.789	1.268
0,5	PEAK	3.180	3.135	3.244	2444834	Pentylacetat	153.742	19.323	808	0.030	0.000	0	0.856	1.168
0,5	PEAK	3.180	3.131	3.244	2447639	Pentylacetat	150.464	6.541	768	0.030	0.000	0	0.880	1.137
0,5	PEAK	3.180	3.131	3.248	2480609	Pentylacetat	150.208	14.261	792	0.030	0.000	0	0.871	1.149
1	PEAK	3.180	3.131	3.262	4517515	Pentylacetat	262.065	17.741	811	0.030	0.000	0	0.957	1.045
1	PEAK	3.180	3.131	3.262	4522965	Pentylacetat	267.619	17.337	802	0.030	0.000	0	0.953	1.050
1	PEAK	3.180	3.131	3.262	4523809	Pentylacetat	274.122	16.954	791	0.030	0.000	0	0.945	1.058

2-Phenylethanol

Prozent	Type	RT (min)	Start RT	Stop RT	Area	Name	S/N	Area Percent	Scan# at Peak Maximum	Width	RRT (min)	Ri	Leading	Tailing
0,005	PEAK	21.537	21.499	21.582	1265179	Phenylethanol	96.042	100.000	5661	0.024	0.000	0	0.739	1.354
0,005	PEAK	21.537	21.499	21.582	1265158	Phenylethanol	100.778	100.000	5634	0.024	0.000	0	0.739	1.354
0,005	PEAK	21.537	21.496	21.582	1257231	Phenylethanol	96.813	100.000	5578	0.024	0.000	0	0.737	1.356
0,01	PEAK	21.544	21.511	21.586	1587376	Phenylethanol	122.712	100.000	5695	0.023	0.000	0	0.830	1.205
0,01	PEAK	21.544	21.507	21.586	1584543	Phenylethanol	121.614	100.000	5669	0.023	0.000	0	0.829	1.206
0,01	PEAK	21.544	21.511	21.586	1587369	Phenylethanol	129.051	100.000	5648	0.023	0.000	0	0.830	1.205
0,025	PEAK	21.548	21.507	21.589	6049912	Phenylethanol	470.031	100.000	5694	0.024	0.000	0	0.974	1.027
0,025	PEAK	21.548	21.507	21.589	6049903	Phenylethanol	509.881	100.000	5616	0.024	0.000	0	0.974	1.027
0,025	PEAK	21.548	21.507	21.589	6049897	Phenylethanol	503.761	100.000	5591	0.024	0.000	0	0.974	1.027
0,05	PEAK	21.548	21.511	21.590	13513408	Phenylethanol	1.076.176	100.000	5695	0.023	0.000	0	1.158	0.864
0,05	PEAK	21.548	21.507	21.590	13530892	Phenylethanol	1.136.744	100.000	5676	0.023	0.000	0	1.159	0.863
0,05	PEAK	21.548	21.507	21.590	13530823	Phenylethanol	1.065.247	100.000	5644	0.023	0.000	0	1.159	0.863
0,075	PEAK	21.556	21.507	21.608	29204214	Phenylethanol	2.254.378	100.000	5699	0.023	0.000	0	1.323	0.756
0,075	PEAK	21.556	21.507	21.608	29204170	Phenylethanol	2.349.648	100.000	5672	0.023	0.000	0	1.323	0.756
0,075	PEAK	21.556	21.507	21.608	29204205	Phenylethanol	2.392.719	100.000	5644	0.023	0.000	0	1.323	0.756
0,1	PEAK	21.556	21.507	21.601	27813995	Phenylethanol	2.195.028	100.000	5648	0.023	0.000	0	1.383	0.723
0,1	PEAK	21.556	21.507	21.601	27813949	Phenylethanol	2.152.846	100.000	5623	0.023	0.000	0	1.383	0.723
0,1	PEAK	21.556	21.511	21.601	27744695	Phenylethanol	2.219.935	49.624	5536	0.023	0.000	0	1.382	0.724
0,5	PEAK	21.635	21.515	21.653	303809801	Phenylethanol	9.048.272	100.000	5718	0.056	0.000	0	6.390	0.156
0,5	PEAK	21.635	21.515	21.653	303810236	Phenylethanol	8.971.787	100.000	5653	0.056	0.000	0	6.390	0.156
0,5	PEAK	21.635	21.515	21.653	303810491	Phenylethanol	9.302.639	49.262	5594	0.056	0.000	0	6.390	0.156
1	PEAK	21.623	21.515	21.646	254939519	Phenylethanol	8.772.582	99.712	5717	0.051	0.000	0	8.306	0.120
1	PEAK	21.623	21.515	21.650	257087309	Phenylethanol	9.329.810	51.027	5692	0.051	0.000	0	8.271	0.121
1	PEAK	21.623	21.515	21.646	254940171	Phenylethanol	9.290.682	32.728	5663	0.051	0.000	0	8.306	0.120

Anhang 2 (Fortsetzung): Teil 1: Flächenangaben der Peaks – Standards

(-)- β -Pinen

Prozent	Type	RT (min)	Start RT	Stop RT	Area	Name	S/N	Area Percent	Scan# at Peak Maximum	Width	RRT (min)	Rf	Leading	Tailing
0,001	PEAK	3.663	3.607	3.768	2229102	β -Pinen	67.589	49.769	935	0.050	0.000	0	0.517	1.933
0,001	PEAK	3.663	3.607	3.768	2234047	β -Pinen	72.937	48.961	879	0.052	0.000	0	0.492	2.032
0,001	PEAK	3.663	3.607	3.768	2234490	β -Pinen	74.092	48.857	864	0.053	0.000	0	0.493	2.027
0,0025	PEAK	3.630	3.581	3.663	1875597	β -Pinen	100.768	51.827	924	0.031	0.000	0	1.259	0.794
0,0025	PEAK	3.630	3.585	3.663	1874612	β -Pinen	102.922	100.000	916	0.031	0.000	0	1.244	0.804
0,0025	PEAK	3.630	3.581	3.663	1874643	β -Pinen	107.533	50.281	893	0.032	0.000	0	1.250	0.800
0,005	PEAK	3.634	3.577	3.667	3791051	β -Pinen	209.042	100.000	934	0.032	0.000	0	1.159	0.863
0,005	PEAK	3.634	3.577	3.667	3790994	β -Pinen	208.653	100.000	919	0.032	0.000	0	1.154	0.866
0,005	PEAK	3.634	3.577	3.667	3787587	β -Pinen	207.581	100.000	904	0.032	0.000	0	1.157	0.864
0,0075	PEAK	3.637	3.588	3.671	4887903	β -Pinen	276.117	50.615	929	0.032	0.000	0	1.350	0.741
0,0075	PEAK	3.637	3.588	3.671	4891813	β -Pinen	279.687	47.997	917	0.032	0.000	0	1.324	0.755
0,0075	PEAK	3.637	3.588	3.671	4885578	β -Pinen	286.686	100.000	899	0.032	0.000	0	1.323	0.756
0,01	PEAK	3.641	3.585	3.675	7528934	β -Pinen	398.877	100.000	922	0.033	0.000	0	1.337	0.748
0,01	PEAK	3.641	3.589	3.675	7571090	β -Pinen	421.537	100.000	905	0.033	0.000	0	1.342	0.745
0,01	PEAK	3.641	3.589	3.675	7568066	β -Pinen	424.893	50.423	875	0.033	0.000	0	1.341	0.746
0,025	PEAK	3.667	3.581	3.750	47918297	β -Pinen	1.418.807	100.000	923	0.058	0.000	0	1.018	0.983
0,025	PEAK	3.667	3.581	3.750	47921410	β -Pinen	1.488.644	100.000	909	0.058	0.000	0	1.019	0.981
0,025	PEAK	3.667	3.577	3.750	48011488	β -Pinen	1.458.586	48.532	889	0.058	0.000	0	1.019	0.982
0,05	PEAK	3.705	3.585	3.761	96044650	β -Pinen	2.800.419	51.207	937	0.062	0.000	0	2.796	0.358
0,05	PEAK	3.705	3.581	3.761	96229057	β -Pinen	2.859.553	31.766	917	0.062	0.000	0	2.854	0.350
0,05	PEAK	3.705	3.581	3.761	96259478	β -Pinen	2.896.231	31.983	840	0.063	0.000	0	2.919	0.343
0,075	PEAK	3.731	3.581	3.799	139338592	β -Pinen	3.569.167	49.380	954	0.072	0.000	0	5.457	0.183
0,075	PEAK	3.731	3.581	3.788	137206046	β -Pinen	3.559.506	100.000	940	0.072	0.000	0	5.440	0.184
0,075	PEAK	3.731	3.589	3.803	139262280	β -Pinen	3.526.466	51.226	925	0.072	0.000	0	5.265	0.190
0,1	PEAK	3.768	3.611	3.802	169273540	β -Pinen	4.343.265	100.000	967	0.075	0.000	0	8.205	0.122
0,1	PEAK	3.768	3.615	3.798	169116996	β -Pinen	4.544.540	100.000	880	0.077	0.000	0	7.421	0.135
0,1	PEAK	3.768	3.611	3.798	169881661	β -Pinen	4.557.167	100.000	866	0.077	0.000	0	7.301	0.137

Anhang 2 (Fortsetzung): Teil 2: Flächenangaben der Peaks – Kakaoproben

- Natürliche Fermentation, Tag 1

Kakao	Type	RT (min)	Start RT	Stop RT	Area	Name	S/N	Area Percent	Scan# at Peak Maximum	Width	RRT (min)	Rf	Leading	Tailing
6482	PEAK	1.220	1.197	1.235	76148	Ethylacetat	9.237	0.186	267	0.014	0.000	0	1.173	0.852
6482	PEAK	1.220	1.197	1.235	75593	Ethylacetat	8.216	0.168	256	0.015	0.000	0	1.211	0.826
6482	PEAK	1.220	1.197	1.235	75166	Ethylacetat	9.061	0.188	247	0.015	0.000	0	1.240	0.806
6483	PEAK	1.220	1.197	1.238	127031	Ethylacetat	12.281	0.290	285	0.016	0.000	0	0.743	1.346
6483	PEAK	1.220	1.197	1.238	126844	Ethylacetat	12.030	0.291	270	0.016	0.000	0	0.832	1.202
6483	PEAK	1.220	1.197	1.235	110248	Ethylacetat	11.664	0.249	260	0.015	0.000	0	0.931	1.075
6486	PEAK	1.220	1.201	1.235	46487	Ethylacetat	6.798	0.171	285	0.014	0.000	0	1.020	0.980
6486	PEAK	1.220	1.201	1.235	46460	Ethylacetat	6.603	0.175	272	0.014	0.000	0	1.094	0.914
6486	PEAK	1.220	1.201	1.235	46376	Ethylacetat	6.640	0.175	263	0.014	0.000	0	1.125	0.889
6487	PEAK	1.220	1.205	1.231	42951	Ethylacetat	8.492	0.141	302	0.011	0.000	0	0.906	1.103
6487	PEAK	1.220	1.205	1.231	42987	Ethylacetat	8.236	0.150	286	0.011	0.000	0	0.998	1.002
6487	PEAK	1.220	1.201	1.231	42951	Ethylacetat	8.103	0.152	276	0.012	0.000	0	1.128	0.886
6492	PEAK	1.220	1.205	1.235	71116	Ethylacetat	11.545	0.208	267	0.013	0.000	0	1.042	0.960
6492	PEAK	1.220	1.205	1.235	70878	Ethylacetat	11.541	0.159	257	0.013	0.000	0	1.086	0.921
6492	PEAK	1.220	1.205	1.235	70575	Ethylacetat	11.140	0.204	250	0.013	0.000	0	1.106	0.904
6489	PEAK	1.224	1.209	1.235	57163	Ethylacetat	9.700	0.158	286	0.012	0.000	0	1.016	0.984
6489	PEAK	1.224	1.209	1.235	56483	Ethylacetat	9.594	0.147	276	0.012	0.000	0	1.131	0.884
6489	PEAK	1.224	1.209	1.235	56073	Ethylacetat	9.295	0.135	266	0.012	0.000	0	1.167	0.857
6483	PEAK	1.808	1.778	1.853	9337575	Pentanon	595.514	21.303	434	0.020	0.000	0	0.871	1.147
6483	PEAK	1.808	1.778	1.853	9347417	Pentanon	659.791	21.426	427	0.021	0.000	0	0.873	1.145
6483	PEAK	1.808	1.778	1.853	9357835	Pentanon	695.285	21.167	417	0.021	0.000	0	0.876	1.142
6482	PEAK	1.812	1.778	1.857	7810893	Pentanon	614.415	19.102	425	0.021	0.000	0	0.859	1.164
6482	PEAK	1.812	1.778	1.853	7718871	Pentanon	552.061	17.190	414	0.021	0.000	0	0.865	1.156
6482	PEAK	1.812	1.778	1.853	7726253	Pentanon	616.641	19.353	405	0.021	0.000	0	0.866	1.154
6486	PEAK	1.812	1.786	1.853	3541582	Pentanon	331.698	13.060	443	0.020	0.000	0	0.866	1.155
6486	PEAK	1.812	1.786	1.853	3543504	Pentanon	352.347	13.406	435	0.020	0.000	0	0.853	1.172
6486	PEAK	1.812	1.786	1.853	3550280	Pentanon	337.402	13.384	421	0.021	0.000	0	0.848	1.180
6487	PEAK	1.812	1.782	1.849	4095695	Pentanon	406.236	14.292	444	0.020	0.000	0	0.871	1.149
6487	PEAK	1.812	1.782	1.849	4100735	Pentanon	407.694	14.503	434	0.021	0.000	0	0.876	1.142
6487	PEAK	1.812	1.786	1.849	4006280	Pentanon	395.648	13.232	423	0.021	0.000	0	0.872	1.146
6492	PEAK	1.812	1.786	1.849	6487977	Pentanon	662.074	16.912	433	0.020	0.000	0	0.900	1.111
6492	PEAK	1.812	1.786	1.849	6495662	Pentanon	655.220	19.009	425	0.020	0.000	0	0.891	1.122
6492	PEAK	1.812	1.786	1.846	6309155	Pentanon	656.656	14.162	415	0.020	0.000	0	0.895	1.117
6489	PEAK	1.816	1.786	1.853	7180037	Pentanon	675.235	18.678	434	0.020	0.000	0	0.928	1.078
6489	PEAK	1.816	1.786	1.853	7188804	Pentanon	667.582	17.301	424	0.020	0.000	0	0.916	1.092
6489	PEAK	1.816	1.786	1.853	7197502	Pentanon	651.376	13.074	415	0.021	0.000	0	0.907	1.102
6483	PEAK	3.116	3.086	3.150	230809	Pentylacetat	13.529	0.526	791	0.024	0.000	0	1.010	0.990
6483	PEAK	3.116	3.086	3.150	228611	Pentylacetat	13.459	0.524	776	0.025	0.000	0	1.022	0.978
6483	PEAK	3.116	3.086	3.154	238125	Pentylacetat	14.488	0.539	766	0.026	0.000	0	0.983	1.017
6482	PEAK	3.120	3.087	3.150	196326	Pentylacetat	12.827	0.480	774	0.027	0.000	0	0.952	1.050
6482	PEAK	3.120	3.090	3.150	191803	Pentylacetat	11.520	0.427	763	0.026	0.000	0	0.936	1.069
6482	PEAK	3.120	3.090	3.150	191398	Pentylacetat	12.868	0.479	754	0.026	0.000	0	0.940	1.064
6487	PEAK	3.124	3.105	3.146	60453	Pentylacetat	6.806	0.198	810	0.018	0.000	0	0.792	1.262
6487	PEAK	3.124	3.105	3.143	51279	Pentylacetat	6.151	0.179	794	0.018	0.000	0	0.902	1.108
6487	PEAK	3.124	3.102	3.146	65738	Pentylacetat	7.085	0.232	784	0.020	0.000	0	0.898	1.114
6492	PEAK	3.124	3.105	3.143	70614	Pentylacetat	7.747	0.190	793	0.018	0.000	0	1.221	0.819
6492	PEAK	3.124	3.101	3.143	77928	Pentylacetat	8.621	0.228	775	0.019	0.000	0	1.337	0.748
6492	PEAK	3.124	3.101	3.143	78596	Pentylacetat	8.812	0.176	765	0.019	0.000	0	1.278	0.782
6486	PEAK	3.128	3.109	3.154	60921	Pentylacetat	5.887	0.225	794	0.020	0.000	0	0.791	1.264
6486	PEAK	3.128	3.109	3.154	63375	Pentylacetat	6.644	0.240	786	0.020	0.000	0	0.653	1.532
6486	PEAK	3.128	3.105	3.150	58938	Pentylacetat	6.116	0.222	772	0.020	0.000	0	0.788	1.268
6489	PEAK	3.132	3.109	3.147	71916	Pentylacetat	7.775	0.198	795	0.017	0.000	0	1.588	0.630
6489	PEAK	3.132	3.109	3.147	71628	Pentylacetat	7.841	0.186	785	0.017	0.000	0	1.700	0.588
6489	PEAK	3.132	3.109	3.147	71844	Pentylacetat	7.881	0.173	775	0.017	0.000	0	1.655	0.604
6483	PEAK	3.660	3.623	3.694	774499	β-Pinen	40.063	1.767	925	0.027	0.000	0	0.997	1.003
6483	PEAK	3.660	3.623	3.694	772808	β-Pinen	44.420	1.771	913	0.027	0.000	0	1.003	0.997
6483	PEAK	3.660	3.623	3.694	771953	β-Pinen	46.920	1.746	900	0.027	0.000	0	0.998	1.002
6486	PEAK	3.705	3.653	3.754	2829811	β-Pinen	148.610	10.436	948	0.037	0.000	0	0.961	1.041
6486	PEAK	3.705	3.645	3.754	2832753	β-Pinen	150.249	10.667	926	0.037	0.000	0	0.978	1.023
6486	PEAK	3.705	3.656	3.754	2797745	β-Pinen	152.420	10.547	913	0.037	0.000	0	0.978	1.022
6487	PEAK	3.743	3.683	3.806	3768050	β-Pinen	179.329	13.148	959	0.043	0.000	0	0.930	1.076
6487	PEAK	3.743	3.683	3.803	3705296	β-Pinen	179.246	13.105	947	0.043	0.000	0	0.935	1.069
6487	PEAK	3.743	3.683	3.799	3630596	β-Pinen	174.918	11.991	931	0.043	0.000	0	0.954	1.048
6489	PEAK	3.750	3.698	3.814	5437174	β-Pinen	249.198	14.985	960	0.042	0.000	0	0.964	1.038
6489	PEAK	3.750	3.698	3.810	5342575	β-Pinen	251.993	13.898	950	0.042	0.000	0	0.961	1.040
6489	PEAK	3.750	3.698	3.814	5436781	β-Pinen	247.013	9.876	924	0.042	0.000	0	0.957	1.045
6482	PEAK	3.754	3.671	3.817	3859231	β-Pinen	128.891	9.438	938	0.048	0.000	0	1.335	0.749
6482	PEAK	3.754	3.671	3.817	3861423	β-Pinen	116.703	8.600	923	0.048	0.000	0	1.341	0.746
6482	PEAK	3.754	3.675	3.817	3822938	β-Pinen	130.290	9.576	909	0.048	0.000	0	1.338	0.748
6492	PEAK	3.757	3.682	3.817	5049772	β-Pinen	231.576	13.163	949	0.046	0.000	0	1.336	0.748
6492	PEAK	3.757	3.686	3.817	5012430	β-Pinen	233.226	11.251	926	0.046	0.000	0	1.338	0.747
6492	PEAK	3.757	3.686	3.817	5012306	β-Pinen	228.725	14.498	915	0.046	0.000	0	1.343	0.745

Anhang 2 (Fortsetzung): Teil 2: Flächenangaben der Peaks – Kakaoproben

- Natürliche Fermentation, Tag 1 (Fortsetzung)

Kakao	Type	RT (min)	Start RT	Stop RT	Area	Name	S/N	Area Percent	Scan# at Peak Maximum	Width	RRT (min)	Rf	Leading	Tailing	
6483	PEAK	4.361	4.309	4.417	5916987	Pentanol	252.348	13.499		1112	0.031	0.000	0	1.286	0.778
6483	PEAK	4.361	4.309	4.421	5980138	Pentanol	281.694	13.707		1100	0.031	0.000	0	1.283	0.779
6483	PEAK	4.361	4.309	4.413	5831616	Pentanol	295.327	13.191		1087	0.031	0.000	0	1.291	0.775
6482	PEAK	4.391	4.335	4.432	4961075	Pentanol	278.461	12.133		1098	0.030	0.000	0	1.284	0.779
6482	PEAK	4.391	4.339	4.432	4954895	Pentanol	251.771	11.035		1081	0.030	0.000	0	1.278	0.783
6482	PEAK	4.391	4.342	4.440	5094786	Pentanol	285.369	12.762		1067	0.031	0.000	0	1.251	0.800
6492	PEAK	4.398	4.350	4.440	4244397	Pentanol	280.378	11.393		1133	0.031	0.000	0	1.360	0.735
6492	PEAK	4.398	4.350	4.440	4244463	Pentanol	293.960	12.421		1105	0.031	0.000	0	1.327	0.753
6492	PEAK	4.398	4.346	4.440	4283189	Pentanol	299.590	9.614		1090	0.031	0.000	0	1.326	0.754
6487	PEAK	4.399	4.342	4.432	3198835	Pentanol	217.546	10.468		1150	0.030	0.000	0	1.350	0.741
6487	PEAK	4.399	4.346	4.432	3186188	Pentanol	222.052	11.269		1117	0.030	0.000	0	1.336	0.748
6487	PEAK	4.399	4.350	4.432	3160154	Pentanol	218.011	10.437		1100	0.030	0.000	0	1.325	0.755
6489	PEAK	4.410	4.357	4.447	4252590	Pentanol	267.845	11.721		1136	0.031	0.000	0	1.471	0.680
6489	PEAK	4.414	4.357	4.451	4382087	Pentanol	276.765	11.399		1124	0.031	0.000	0	1.410	0.709
6489	PEAK	4.414	4.357	4.447	4258723	Pentanol	270.448	10.249		1109	0.031	0.000	0	1.434	0.697
6486	PEAK	4.436	4.384	4.481	3008844	Pentanol	181.885	11.096		1142	0.033	0.000	0	1.091	0.916
6486	PEAK	4.436	4.384	4.477	2942868	Pentanol	181.585	11.082		1114	0.033	0.000	0	1.095	0.913
6486	PEAK	4.436	4.384	4.477	2943856	Pentanol	185.056	11.098		1098	0.033	0.000	0	1.094	0.914
6483	PEAK	6.831	6.745	6.944	5081229	Isoamylalkohol	131.426	11.581		1774	0.053	0.000	0	1.703	0.587
6483	PEAK	6.831	6.741	6.936	5069304	Isoamylalkohol	118.431	11.565		1758	0.055	0.000	0	1.890	0.529
6483	PEAK	6.831	6.738	6.921	4979298	Isoamylalkohol	130.947	11.413		1741	0.058	0.000	0	1.897	0.527
6482	PEAK	6.846	6.760	6.903	3919670	Isoamylalkohol	126.854	9.586		1742	0.056	0.000	0	1.904	0.525
6482	PEAK	6.846	6.760	6.903	3919873	Isoamylalkohol	114.867	8.730		1716	0.056	0.000	0	1.924	0.520
6482	PEAK	6.846	6.756	6.910	4079819	Isoamylalkohol	131.342	10.219		1697	0.057	0.000	0	1.912	0.523
6487	PEAK	6.846	6.756	6.918	2524638	Isoamylalkohol	92.016	8.262		1803	0.056	0.000	0	1.514	0.661
6487	PEAK	6.846	6.756	6.918	2521631	Isoamylalkohol	94.242	8.918		1758	0.057	0.000	0	1.618	0.618
6487	PEAK	6.846	6.756	6.918	2521169	Isoamylalkohol	92.868	8.327		1734	0.057	0.000	0	1.646	0.607
6492	PEAK	6.850	6.760	6.918	3076212	Isoamylalkohol	112.250	8.257		1781	0.057	0.000	0	1.942	0.515
6492	PEAK	6.854	6.764	6.918	3054642	Isoamylalkohol	118.295	7.963		1759	0.057	0.000	0	1.924	0.520
6492	PEAK	6.854	6.760	6.918	3075960	Isoamylalkohol	117.614	8.897		1702	0.057	0.000	0	1.916	0.522
6489	PEAK	6.865	6.771	6.925	3094944	Isoamylalkohol	108.798	8.530		1785	0.056	0.000	0	1.915	0.522
6489	PEAK	6.865	6.779	6.940	3188151	Isoamylalkohol	112.603	8.294		1768	0.056	0.000	0	1.804	0.554
6489	PEAK	6.865	6.771	6.921	3025709	Isoamylalkohol	108.511	7.282		1750	0.056	0.000	0	1.881	0.532
6486	PEAK	6.869	6.775	6.936	2922446	Isoamylalkohol	85.374	8.672		1766	0.057	0.000	0	1.632	0.613
6486	PEAK	6.869	6.775	6.940	2323727	Isoamylalkohol	81.386	8.750		1748	0.057	0.000	0	1.572	0.636
6486	PEAK	6.869	6.779	6.936	2280078	Isoamylalkohol	82.263	8.596		1728	0.057	0.000	0	1.603	0.624
6483	PEAK	15.719	15.686	15.753	454054	Butanediol(1)	23.497	1.036		4115	0.026	0.000	0	0.825	1.211
6483	PEAK	15.719	15.686	15.753	453971	Butanediol(1)	26.152	1.041		4092	0.026	0.000	0	0.825	1.211
6483	PEAK	15.719	15.686	15.753	453917	Butanediol(1)	27.684	1.027		4066	0.026	0.000	0	0.825	1.212
6482	PEAK	15.723	15.686	15.764	511531	Butanediol(1)	32.219	1.251		4074	0.026	0.000	0	0.830	1.205
6482	PEAK	15.723	15.686	15.757	452881	Butanediol(1)	27.686	1.009		4039	0.024	0.000	0	0.881	1.136
6482	PEAK	15.723	15.682	15.753	409667	Butanediol(1)	29.646	1.026		4016	0.023	0.000	0	0.883	1.132
6487	PEAK	15.723	15.689	15.753	329497	Butanediol(1)	28.058	1.078		4171	0.024	0.000	0	0.970	1.031
6487	PEAK	15.723	15.689	15.757	361627	Butanediol(1)	29.752	1.262		4141	0.025	0.000	0	0.924	1.082
6487	PEAK	15.723	15.689	15.757	361852	Butanediol(1)	30.031	1.280		4117	0.025	0.000	0	0.922	1.085
6492	PEAK	15.723	15.693	15.749	241540	Butanediol(1)	20.764	0.648		4140	0.022	0.000	0	0.790	1.266
6492	PEAK	15.723	15.697	15.749	235318	Butanediol(1)	21.570	0.689		4089	0.022	0.000	0	0.777	1.287
6492	PEAK	15.723	15.697	15.749	235435	Butanediol(1)	21.543	0.681		4028	0.022	0.000	0	0.777	1.287
6486	PEAK	15.727	15.693	15.761	317821	Butanediol(1)	24.482	1.172		4142	0.024	0.000	0	1.085	0.921
6486	PEAK	15.727	15.693	15.761	318038	Butanediol(1)	24.755	1.198		4090	0.024	0.000	0	1.086	0.921
6486	PEAK	15.727	15.693	15.761	317915	Butanediol(1)	25.245	1.198		4064	0.024	0.000	0	1.087	0.920
6489	PEAK	15.731	15.701	15.761	217574	Butanediol(1)	17.649	0.600		4145	0.023	0.000	0	0.874	1.144
6489	PEAK	15.731	15.701	15.761	217574	Butanediol(1)	17.972	0.566		4122	0.023	0.000	0	0.874	1.144
6489	PEAK	15.731	15.701	15.761	217572	Butanediol(1)	17.847	0.524		4096	0.023	0.000	0	0.874	1.144
6483	PEAK	16.454	16.420	16.488	621357	Butanediol(2)	36.337	1.416		4333	0.026	0.000	0	0.809	1.235
6483	PEAK	16.454	16.420	16.492	637860	Butanediol(2)	33.152	1.455		4309	0.026	0.000	0	0.798	1.252
6483	PEAK	16.454	16.420	16.488	621251	Butanediol(2)	36.442	1.424		4283	0.026	0.000	0	0.809	1.235
6482	PEAK	16.458	16.420	16.499	659264	Butanediol(2)	42.705	1.612		4264	0.025	0.000	0	0.621	1.611
6482	PEAK	16.458	16.424	16.499	656780	Butanediol(2)	38.609	1.463		4227	0.025	0.000	0	0.620	1.613
6482	PEAK	16.458	16.424	16.495	632631	Butanediol(2)	42.636	1.585		4203	0.025	0.000	0	0.631	1.584
6487	PEAK	16.458	16.424	16.488	385827	Butanediol(2)	33.485	1.263		4354	0.023	0.000	0	0.993	1.007
6487	PEAK	16.458	16.424	16.488	385829	Butanediol(2)	33.975	1.346		4320	0.023	0.000	0	0.992	1.008
6487	PEAK	16.458	16.428	16.484	353539	Butanediol(2)	32.687	1.250		4289	0.022	0.000	0	1.045	0.957
6486	PEAK	16.462	16.432	16.488	293039	Butanediol(2)	26.428	1.109		4312	0.021	0.000	0	0.868	1.153
6486	PEAK	16.462	16.432	16.492	323346	Butanediol(2)	26.422	1.218		4282	0.022	0.000	0	0.824	1.214
6486	PEAK	16.462	16.436	16.495	348860	Butanediol(2)	28.011	1.315		4256	0.023	0.000	0	0.768	1.302
6492	PEAK	16.462	16.428	16.495	430494	Butanediol(2)	36.059	1.260		4281	0.024	0.000	0	0.845	1.184
6492	PEAK	16.462	16.428	16.492	412732	Butanediol(2)	35.954	0.926		4245	0.024	0.000	0	0.864	1.158
6492	PEAK	16.462	16.432	16.492	391316	Butanediol(2)	34.417	1.132		4218	0.023	0.000	0	0.837	1.194
6489	PEAK	16.465	16.428	16.488	213546	Butanediol(2)	20.014	0.589		4341	0.020	0.000	0	1.175	0.851
6489	PEAK	16.465	16.435	16.484	189009	Butanediol(2)	18.830	0.455		4288	0.019	0.000	0	1.269	0.788
6489	PEAK	16.465	16.439	16.484	190166	Butanediol(2)	18.505	0.345		4260	0.019	0.000	0	1.275	0.785
6483	PEAK	21.504	21.470	21.549	9151765	Phenylethanol	593.557	20.859		5674	0.022	0.000	0	0.793	1.262
6483	PEAK	21.504	21.470	21.545	8990154	Phenylethanol	531.710	20.511		5644	0.022	0.000	0	0.797	1.254
6483	PEAK	21.504	21.470	21.549	9151779	Phenylethanol	630.204	20.701		5582	0.022	0.000	0	0.793	1.262
6482	PEAK	21.507	21.470	21.575	8697429	Phenylethanol	631.760	21.271		5594	0.022	0.000	0	0.984	1.016
6482	PEAK	21.507	21.466	21.575	8738417	Phenylethanol	573.063	19.461		5553	0.022	0.000	0	0.986	1.015
6482	PEAK	21.507	21.470	21.541	7647620	Phenylethanol	617.153	19.156		5524	0.021	0.000	0	1.022	0.979
6487															

Anhang 2 (Fortsetzung): Teil 2: Flächenangaben der Peaks – Kakaoproben

- Natürliche Fermentation, Tag 3

Kakao	Type	RT (min)	Start RT	Stop RT	Area	Name	S/N	Area Perc	Scan# at Peak	Width	RRT (min)	Rf	Leading	Tailing
6517	PEAK	1.212	1.189	1.242	835495	Ethylacetat	64.603	1.164	284	0.016	0.000	0	0.984	1.016
6517	PEAK	1.212	1.186	1.242	845442	Ethylacetat	61.939	1.463	260	0.017	0.000	0	0.990	1.010
6517	PEAK	1.212	1.189	1.242	837033	Ethylacetat	64.983	1.359	250	0.018	0.000	0	0.984	1.016
6522	PEAK	1.212	1.193	1.231	501751	Ethylacetat	51.409	1.109	283	0.014	0.000	0	0.904	1.107
6522	PEAK	1.212	1.193	1.234	557424	Ethylacetat	46.645	1.227	274	0.015	0.000	0	0.870	1.149
6522	PEAK	1.212	1.193	1.234	551734	Ethylacetat	47.551	1.168	265	0.015	0.000	0	0.895	1.117
6521	PEAK	1.216	1.197	1.249	775285	Ethylacetat	63.539	1.676	285	0.015	0.000	0	0.767	1.304
6521	PEAK	1.216	1.193	1.246	799701	Ethylacetat	61.846	1.587	276	0.016	0.000	0	0.832	1.203
6521	PEAK	1.216	1.193	1.246	803250	Ethylacetat	62.466	1.729	267	0.016	0.000	0	0.827	1.209
6526	PEAK	1.216	1.193	1.242	669110	Ethylacetat	60.153	1.409	285	0.016	0.000	0	0.846	1.182
6526	PEAK	1.216	1.193	1.238	626698	Ethylacetat	57.195	1.210	268	0.016	0.000	0	0.928	1.078
6526	PEAK	1.216	1.193	1.238	629226	Ethylacetat	57.689	0.921	259	0.016	0.000	0	0.946	1.057
6527	PEAK	1.216	1.189	1.234	696762	Ethylacetat	65.587	1.189	287	0.015	0.000	0	0.905	1.106
6527	PEAK	1.216	1.193	1.234	693109	Ethylacetat	64.326	1.429	272	0.015	0.000	0	0.889	1.125
6527	PEAK	1.216	1.193	1.234	696420	Ethylacetat	70.854	1.426	263	0.016	0.000	0	0.886	1.128
6528	PEAK	1.216	1.186	1.246	854782	Ethylacetat	61.030	1.688	282	0.017	0.000	0	0.972	1.029
6528	PEAK	1.216	1.186	1.249	877892	Ethylacetat	67.556	1.505	258	0.017	0.000	0	0.911	1.098
6528	PEAK	1.216	1.189	1.246	838083	Ethylacetat	58.846	1.429	251	0.018	0.000	0	0.906	1.104
6522	PEAK	1.800	1.770	1.834	693670	Pentanon	39.073	1.527	431	0.023	0.000	0	0.866	1.155
6522	PEAK	1.800	1.770	1.834	694696	Pentanon	40.786	1.471	422	0.023	0.000	0	0.874	1.145
6517	PEAK	1.804	1.770	1.834	700269	Pentanon	41.765	0.975	442	0.022	0.000	0	0.880	1.136
6517	PEAK	1.804	1.770	1.834	696153	Pentanon	38.671	1.107	434	0.023	0.000	0	0.896	1.115
6517	PEAK	1.804	1.770	1.834	696513	Pentanon	40.969	1.038	428	0.023	0.000	0	0.899	1.113
6521	PEAK	1.804	1.770	1.834	805649	Pentanon	48.281	1.742	442	0.022	0.000	0	0.776	1.289
6521	PEAK	1.804	1.770	1.834	808141	Pentanon	46.710	1.603	433	0.022	0.000	0	0.761	1.315
6521	PEAK	1.804	1.770	1.834	808513	Pentanon	49.296	1.769	415	0.023	0.000	0	0.789	1.268
6522	PEAK	1.804	1.770	1.834	695492	Pentanon	38.153	1.572	416	0.023	0.000	0	0.873	1.146
6527	PEAK	1.804	1.770	1.838	921531	Pentanon	59.920	1.572	444	0.023	0.000	0	0.805	1.242
6527	PEAK	1.804	1.770	1.838	920138	Pentanon	57.823	1.881	437	0.023	0.000	0	0.791	1.264
6527	PEAK	1.804	1.770	1.838	919830	Pentanon	55.853	1.896	429	0.023	0.000	0	0.810	1.234
6526	PEAK	1.808	1.774	1.838	850119	Pentanon	55.037	1.791	443	0.022	0.000	0	0.851	1.175
6526	PEAK	1.808	1.774	1.838	846107	Pentanon	56.832	1.771	432	0.022	0.000	0	0.886	1.129
6526	PEAK	1.808	1.774	1.838	847512	Pentanon	55.170	1.637	426	0.022	0.000	0	0.889	1.124
6528	PEAK	1.808	1.770	1.838	1073643	Pentanon	60.284	2.121	440	0.022	0.000	0	0.838	1.193
6528	PEAK	1.808	1.774	1.838	1064685	Pentanon	67.194	2.104	426	0.022	0.000	0	0.855	1.170
6528	PEAK	1.808	1.770	1.838	1071473	Pentanon	59.971	1.827	409	0.022	0.000	0	0.860	1.163
6522	PEAK	3.105	3.060	3.142	2982328	Pentylacetat	153.667	6.592	788	0.028	0.000	0	0.908	1.102
6522	PEAK	3.105	3.060	3.142	2981508	Pentylacetat	142.120	6.313	770	0.028	0.000	0	0.936	1.069
6522	PEAK	3.105	3.060	3.142	2981638	Pentylacetat	133.263	6.740	763	0.028	0.000	0	0.940	1.063
6517	PEAK	3.109	3.060	3.161	2848607	Pentylacetat	120.587	4.531	782	0.028	0.000	0	0.977	1.023
6517	PEAK	3.109	3.060	3.161	2850294	Pentylacetat	126.815	4.933	766	0.029	0.000	0	0.990	1.010
6517	PEAK	3.109	3.060	3.161	2851170	Pentylacetat	134.583	4.628	756	0.029	0.000	0	0.990	1.010
6521	PEAK	3.109	3.060	3.161	3316892	Pentylacetat	146.935	7.171	790	0.029	0.000	0	0.929	1.077
6521	PEAK	3.109	3.060	3.154	3209911	Pentylacetat	140.310	6.368	781	0.028	0.000	0	0.976	1.025
6521	PEAK	3.109	3.064	3.150	3128491	Pentylacetat	147.245	6.846	763	0.028	0.000	0	0.970	1.031
6527	PEAK	3.109	3.064	3.154	3315029	Pentylacetat	158.927	5.655	792	0.029	0.000	0	0.923	1.083
6527	PEAK	3.109	3.064	3.154	3313915	Pentylacetat	164.481	6.773	785	0.029	0.000	0	0.941	1.063
6527	PEAK	3.109	3.067	3.154	3274441	Pentylacetat	176.209	6.704	768	0.029	0.000	0	0.944	1.059
6526	PEAK	3.112	3.071	3.157	3187536	Pentylacetat	156.859	6.714	791	0.028	0.000	0	0.973	1.028
6526	PEAK	3.112	3.071	3.157	3185994	Pentylacetat	157.838	6.153	774	0.028	0.000	0	0.957	1.045
6526	PEAK	3.112	3.071	3.157	3187910	Pentylacetat	160.939	4.665	765	0.028	0.000	0	0.952	1.050
6528	PEAK	3.112	3.071	3.154	3097229	Pentylacetat	140.116	6.117	788	0.028	0.000	0	0.980	1.020
6528	PEAK	3.112	3.067	3.146	2930130	Pentylacetat	152.939	5.791	774	0.027	0.000	0	1.013	0.987
6528	PEAK	3.112	3.067	3.150	3052499	Pentylacetat	139.131	5.206	757	0.028	0.000	0	1.007	0.993
6522	PEAK	3.645	3.611	3.667	509507	β -Pinen	27.889	1.122	923	0.024	0.000	0	1.273	0.785
6522	PEAK	3.645	3.611	3.667	508246	β -Pinen	29.127	1.076	910	0.024	0.000	0	1.254	0.798
6522	PEAK	3.645	3.611	3.667	507349	β -Pinen	27.240	1.147	894	0.024	0.000	0	1.255	0.797
6527	PEAK	3.652	3.618	3.682	669629	β -Pinen	37.142	1.142	937	0.025	0.000	0	1.092	0.916
6527	PEAK	3.652	3.618	3.686	711002	β -Pinen	39.702	1.453	930	0.026	0.000	0	1.015	0.986
6527	PEAK	3.652	3.618	3.682	669293	β -Pinen	37.286	1.380	919	0.025	0.000	0	1.044	0.958
6517	PEAK	3.660	3.604	3.720	3990711	β -Pinen	136.300	5.559	937	0.038	0.000	0	0.888	1.126
6517	PEAK	3.660	3.604	3.727	4077992	β -Pinen	128.560	6.486	928	0.038	0.000	0	0.888	1.126
6517	PEAK	3.660	3.607	3.724	4008671	β -Pinen	135.987	5.974	919	0.038	0.000	0	0.874	1.144
6528	PEAK	3.663	3.607	3.716	2352442	β -Pinen	79.185	4.646	935	0.037	0.000	0	0.994	1.006
6528	PEAK	3.663	3.611	3.716	2316184	β -Pinen	88.138	3.971	908	0.037	0.000	0	0.913	1.095
6528	PEAK	3.663	3.611	3.716	2313664	β -Pinen	78.713	3.946	897	0.037	0.000	0	0.893	1.120
6521	PEAK	3.667	3.637	3.693	558451	β -Pinen	29.998	1.108	930	0.024	0.000	0	1.203	0.831
6521	PEAK	3.671	3.637	3.693	560986	β -Pinen	30.742	1.208	918	0.024	0.000	0	1.198	0.835
6521	PEAK	3.671	3.637	3.693	562395	β -Pinen	32.196	1.231	906	0.024	0.000	0	1.197	0.835

Anhang 2 (Fortsetzung): Teil 2: Flächenangaben der Peaks – Kakaoproben

- Natürliche Fermentation, Tag 3 (Fortsetzung)

Kakao	Type	RT (min)	Start RT	Stop RT	Area	Name	S/N	Area Perci	Scan# at Peak	Width	RRT (min)	Rl	Leading	Tailing
6522	PEAK	4.342	4.297	4.380	3950209	Pentanol	169.794	8.695	1109	0.030	0.000	0	1.270	0.787
6522	PEAK	4.342	4.297	4.380	3950715	Pentanol	177.783	8.365	1096	0.030	0.000	0	1.258	0.795
6522	PEAK	4.342	4.297	4.380	3951450	Pentanol	166.720	8.932	1080	0.030	0.000	0	1.252	0.799
6527	PEAK	4.349	4.308	4.387	4242358	Pentanol	208.430	8.671	1115	0.029	0.000	0	1.272	0.786
6527	PEAK	4.349	4.301	4.387	4375840	Pentanol	204.705	9.021	1101	0.030	0.000	0	1.292	0.774
6527	PEAK	4.349	4.308	4.387	4246195	Pentanol	224.689	8.693	1087	0.030	0.000	0	1.265	0.790
6521	PEAK	4.357	4.308	4.391	4124697	Pentanol	184.947	8.917	1123	0.029	0.000	0	1.353	0.739
6521	PEAK	4.357	4.308	4.391	4126905	Pentanol	179.524	8.187	1109	0.029	0.000	0	1.333	0.750
6521	PEAK	4.357	4.312	4.391	4102749	Pentanol	190.051	8.978	1079	0.029	0.000	0	1.314	0.761
6526	PEAK	4.379	4.327	4.421	4293458	Pentanol	197.534	9.043	1127	0.030	0.000	0	1.170	0.855
6526	PEAK	4.379	4.331	4.421	4245103	Pentanol	203.463	8.884	1109	0.030	0.000	0	1.192	0.839
6526	PEAK	4.379	4.331	4.421	4247089	Pentanol	197.659	8.202	1093	0.030	0.000	0	1.189	0.841
6517	PEAK	4.425	4.380	4.473	4536988	Pentanol	179.757	6.320	1139	0.033	0.000	0	0.944	1.060
6517	PEAK	4.425	4.372	4.473	4660879	Pentanol	181.458	6.946	1110	0.034	0.000	0	1.008	0.992
6517	PEAK	4.425	4.376	4.473	4622157	Pentanol	189.887	7.503	1076	0.034	0.000	0	1.018	0.983
6528	PEAK	4.428	4.379	4.473	4446362	Pentanol	169.516	8.782	1137	0.033	0.000	0	1.132	0.883
6528	PEAK	4.428	4.379	4.473	4451785	Pentanol	190.301	7.633	1099	0.033	0.000	0	1.137	0.879
6528	PEAK	4.428	4.383	4.473	4406749	Pentanol	169.383	7.515	1082	0.033	0.000	0	1.128	0.887
6522	PEAK	6.820	6.719	6.876	7290909	Isoamylalkohol	218.207	16.115	1774	0.045	0.000	0	1.727	0.579
6522	PEAK	6.820	6.722	6.876	7249207	Isoamylalkohol	192.618	15.957	1753	0.046	0.000	0	1.769	0.565
6522	PEAK	6.820	6.722	6.876	7250842	Isoamylalkohol	189.179	16.390	1705	0.046	0.000	0	1.751	0.571
6527	PEAK	6.824	6.734	6.869	7175283	Isoamylalkohol	224.506	14.665	1762	0.045	0.000	0	2.016	0.496
6527	PEAK	6.824	6.730	6.872	7453910	Isoamylalkohol	222.157	15.366	1741	0.045	0.000	0	1.993	0.502
6527	PEAK	6.824	6.730	6.869	7218785	Isoamylalkohol	242.776	14.779	1721	0.045	0.000	0	2.001	0.500
6521	PEAK	6.827	6.734	6.891	7591484	Isoamylalkohol	205.851	16.412	1779	0.044	0.000	0	1.665	0.601
6521	PEAK	6.827	6.734	6.887	7487296	Isoamylalkohol	198.102	14.854	1762	0.044	0.000	0	1.670	0.599
6521	PEAK	6.827	6.730	6.884	7401005	Isoamylalkohol	200.621	15.933	1743	0.044	0.000	0	1.698	0.589
6526	PEAK	6.842	6.741	6.891	8177084	Isoamylalkohol	245.450	17.223	1780	0.043	0.000	0	1.931	0.518
6526	PEAK	6.842	6.745	6.887	7930770	Isoamylalkohol	251.571	16.597	1757	0.043	0.000	0	2.023	0.494
6526	PEAK	6.842	6.745	6.891	8139902	Isoamylalkohol	248.076	15.719	1738	0.044	0.000	0	1.989	0.503
6517	PEAK	6.854	6.756	6.902	7003538	Isoamylalkohol	186.911	11.139	1765	0.042	0.000	0	1.761	0.568
6517	PEAK	6.854	6.752	6.902	7036744	Isoamylalkohol	199.727	10.487	1747	0.042	0.000	0	1.755	0.570
6517	PEAK	6.854	6.752	6.906	7174088	Isoamylalkohol	212.045	11.646	1701	0.043	0.000	0	1.733	0.577
6528	PEAK	6.861	6.764	6.906	8322456	Isoamylalkohol	227.812	16.437	1783	0.042	0.000	0	1.943	0.515
6528	PEAK	6.861	6.764	6.906	8339760	Isoamylalkohol	256.900	14.300	1735	0.042	0.000	0	1.957	0.511
6528	PEAK	6.861	6.764	6.902	8094361	Isoamylalkohol	226.033	13.804	1710	0.042	0.000	0	1.984	0.504
6522	PEAK	15.719	15.670	15.760	6397353	Butanediol(1)	309.100	14.140	4143	0.029	0.000	0	1.667	0.600
6522	PEAK	15.719	15.670	15.760	6397081	Butanediol(1)	273.391	14.082	4107	0.029	0.000	0	1.667	0.600
6522	PEAK	15.719	15.674	15.757	6239440	Butanediol(1)	266.105	14.103	4043	0.029	0.000	0	1.683	0.594
6521	PEAK	15.723	15.678	15.760	6975660	Butanediol(1)	315.760	15.081	4144	0.028	0.000	0	1.410	0.709
6521	PEAK	15.723	15.678	15.757	6781416	Butanediol(1)	301.197	13.454	4117	0.028	0.000	0	1.429	0.700
6521	PEAK	15.723	15.674	15.757	6825562	Butanediol(1)	308.739	14.694	4090	0.028	0.000	0	1.433	0.698
6527	PEAK	15.723	15.678	15.760	6851727	Butanediol(1)	330.452	14.004	4119	0.028	0.000	0	1.392	0.718
6527	PEAK	15.723	15.678	15.760	6851532	Butanediol(1)	320.538	14.124	4086	0.028	0.000	0	1.391	0.719
6527	PEAK	15.723	15.674	15.760	6905364	Butanediol(1)	357.628	14.138	4055	0.028	0.000	0	1.396	0.716
6517	PEAK	15.727	15.678	15.764	6949398	Butanediol(1)	306.975	11.053	4118	0.026	0.000	0	1.458	0.686
6517	PEAK	15.727	15.678	15.764	6948949	Butanediol(1)	327.468	10.356	4091	0.026	0.000	0	1.458	0.686
6517	PEAK	15.727	15.678	15.764	6947801	Butanediol(1)	344.279	11.278	4017	0.026	0.000	0	1.457	0.686
6526	PEAK	15.727	15.682	15.760	6017508	Butanediol(1)	304.907	12.675	4143	0.027	0.000	0	1.453	0.688
6526	PEAK	15.727	15.682	15.760	6017292	Butanediol(1)	308.016	11.620	4081	0.027	0.000	0	1.453	0.688
6526	PEAK	15.727	15.682	15.764	6226309	Butanediol(1)	319.575	9.111	4048	0.028	0.000	0	1.429	0.700
6528	PEAK	15.730	15.682	15.760	6925583	Butanediol(1)	308.457	13.679	4142	0.027	0.000	0	1.668	0.600
6528	PEAK	15.730	15.682	15.760	6924903	Butanediol(1)	346.095	13.686	4104	0.027	0.000	0	1.668	0.600
6528	PEAK	15.730	15.682	15.760	6923961	Butanediol(1)	310.083	11.808	4036	0.027	0.000	0	1.668	0.600
6517	PEAK	16.458	16.424	16.506	5063608	Butanediol(2)	273.112	7.546	4286	0.024	0.000	0	1.593	0.628
6517	PEAK	16.458	16.424	16.503	5040237	Butanediol(2)	269.897	8.723	4246	0.024	0.000	0	1.595	0.627
6517	PEAK	16.458	16.424	16.506	5063265	Butanediol(2)	287.155	8.219	4212	0.024	0.000	0	1.592	0.628
6522	PEAK	16.458	16.413	16.503	5039702	Butanediol(2)	287.083	11.139	4340	0.025	0.000	0	1.957	0.511
6522	PEAK	16.458	16.413	16.503	5039137	Butanediol(2)	266.230	10.669	4274	0.025	0.000	0	1.957	0.511
6522	PEAK	16.458	16.413	16.506	5050752	Butanediol(2)	250.145	11.417	4240	0.025	0.000	0	1.955	0.512
6521	PEAK	16.461	16.420	16.499	5394603	Butanediol(2)	292.307	11.663	4341	0.023	0.000	0	1.790	0.559
6521	PEAK	16.461	16.420	16.503	5436324	Butanediol(2)	284.490	10.785	4314	0.023	0.000	0	1.785	0.560
6521	PEAK	16.461	16.416	16.499	5562480	Butanediol(2)	304.658	12.173	4260	0.024	0.000	0	1.807	0.553
6526	PEAK	16.461	16.424	16.491	4440798	Butanediol(2)	258.614	8.576	4277	0.024	0.000	0	1.543	0.648
6526	PEAK	16.461	16.420	16.491	4542737	Butanediol(2)	260.845	8.773	4277	0.024	0.000	0	1.560	0.641
6526	PEAK	16.461	16.424	16.491	4440797	Butanediol(2)	263.964	6.499	4244	0.024	0.000	0	1.542	0.648
6527	PEAK	16.461	16.416	16.488	5036772	Butanediol(2)	293.397	10.294	4316	0.024	0.000	0	1.740	0.575
6527	PEAK	16.461	16.416	16.488	5036697	Butanediol(2)	284.596	10.383	4283	0.024	0.000	0	1.740	0.575
6527	PEAK	16.461	16.416	16.488	5036672	Butanediol(2)	316.565	10.312	4252	0.024	0.000	0	1.740	0.575
6528	PEAK	16.465	16.427	16.491	5064532	Butanediol(2)	272.115	10.003	4338	0.024	0.000	0	2.087	0.479
6528	PEAK	16.465	16.427	16.495	5146909	Butanediol(2)	307.828	10.172	4300	0.024	0.000	0	2.068	0.484
6528	PEAK	16.465	16.427	16.491	5064254	Butanediol(2)	305.843	8.684	4268	0.024	0.000	0	2.087	0.479
6521	PEAK	21.492	21.458	21.522	15761487	Phenylethanol	975.938	34.075	5676	0.022	0.000	0	0.884	1.131
6521	PEAK	21.492	21.458	21.522	15761440	Phenylethanol	947.086	31.269	5646	0.022	0.000	0	0.884	1.131
6521	PEAK	21.492	21.458	21.522	15761437	Phenylethanol	965.308	33.931	5615	0.022	0.000	0	0.884	1.131
6522	PEAK	21.492	21.458	21.522	15728137	Phenylethanol	881.267	34.622	5637	0.022	0.000	0	1.175	0.851
6522	PEAK	21.492	21.458	21.522	15728177	Phenylethanol	924.006	33.301	5601	0.022	0.000	0	1.175	0.851
6522	PEAK	21.492	21.458	21.522	15728154	Phenylethanol	867.515	35.551	5559	0.022	0.000	0	1.175	0.851
6517	PEAK	21.496	21.458	21.530	15469205	Phenylethanol	918.719	21.547	5677	0.023	0.000	0	1.162	0.861
6517	PEAK	21.496	21.458	21.533	157472									

Anhang 2 (Fortsetzung): Teil 2: Flächenangaben der Peaks – Kakaoproben

- Natürliche Fermentation, Tag 5

Kakao	Type	RT (min)	Start RT	Stop RT	Area	Name	S/N	Area Perci	Scan# at Peal	Width	RRT (min)	Ri	Leading	Tailing
6456	PEAK	1.216	1.197	1.246	42854	Ethylacetat	2.011	0.350	275	0.020	0.000	0	0.687	1.456
6456	PEAK	1.216	1.197	1.242	38293	Ethylacetat	1.919	0.313	275	0.019	0.000	0	0.740	1.352
6456	PEAK	1.216	1.197	1.246	43119	Ethylacetat	2.080	0.358	265	0.020	0.000	0	0.652	1.534
6461	PEAK	1.220	1.193	1.253	11215606	Ethylacetat	823.447	51.808	279	0.016	0.000	0	0.915	1.093
6461	PEAK	1.220	1.193	1.253	11215606	Ethylacetat	823.447	51.808	279	0.016	0.000	0	0.915	1.093
6461	PEAK	1.220	1.190	1.253	11293999	Ethylacetat	886.753	51.080	265	0.017	0.000	0	0.957	1.044
6460	PEAK	1.223	1.197	1.257	8827358	Ethylacetat	663.218	34.568	278	0.017	0.000	0	0.997	1.003
6460	PEAK	1.223	1.197	1.257	8834590	Ethylacetat	697.223	23.553	269	0.017	0.000	0	1.004	0.996
6460	PEAK	1.223	1.197	1.246	7791461	Ethylacetat	637.202	29.191	261	0.017	0.000	0	1.061	0.943
6467	PEAK	1.223	1.197	1.261	25304257	Ethylacetat	1.801.495	25.960	280	0.018	0.000	0	0.982	1.018
6467	PEAK	1.223	1.197	1.257	24653805	Ethylacetat	1.852.151	25.578	272	0.018	0.000	0	0.996	1.004
6467	PEAK	1.223	1.193	1.250	22795814	Ethylacetat	1.782.490	20.226	252	0.018	0.000	0	1.044	0.958
6469	PEAK	1.224	1.197	1.257	24139559	Ethylacetat	1.746.905	38.025	284	0.017	0.000	0	0.980	1.021
6469	PEAK	1.224	1.194	1.261	25236280	Ethylacetat	1.471.608	39.722	269	0.018	0.000	0	1.010	0.990
6469	PEAK	1.224	1.194	1.257	24490477	Ethylacetat	1.572.710	42.621	258	0.018	0.000	0	1.022	0.979
6471	PEAK	1.227	1.197	1.265	25491887	Ethylacetat	1.556.622	30.656	288	0.018	0.000	0	1.004	0.996
6471	PEAK	1.227	1.197	1.265	25516408	Ethylacetat	1.655.147	30.347	279	0.018	0.000	0	1.020	0.981
6471	PEAK	1.227	1.197	1.261	24811937	Ethylacetat	1.626.531	30.335	255	0.018	0.000	0	1.013	0.987
6461	PEAK	1.816	1.778	1.849	290339	Pentanon	14.061	1.341	438	0.024	0.000	0	1.191	0.840
6461	PEAK	1.816	1.778	1.849	290339	Pentanon	14.061	1.341	438	0.024	0.000	0	1.191	0.840
6461	PEAK	1.816	1.774	1.849	289874	Pentanon	15.205	1.311	424	0.024	0.000	0	1.237	0.808
6467	PEAK	1.816	1.778	1.853	840439	Pentanon	36.546	0.954	420	0.031	0.000	0	0.970	1.031
6467	PEAK	1.816	1.778	1.853	839033	Pentanon	36.844	0.744	410	0.031	0.000	0	0.975	1.026
6467	PEAK	1.819	1.778	1.853	842838	Pentanon	34.892	0.865	439	0.031	0.000	0	0.940	1.063
6456	PEAK	1.820	1.786	1.850	183632	Pentanon	7.623	1.486	442	0.022	0.000	0	1.079	0.927
6456	PEAK	1.820	1.782	1.850	181634	Pentanon	7.225	1.483	436	0.023	0.000	0	1.026	0.975
6456	PEAK	1.820	1.782	1.850	180793	Pentanon	7.356	1.502	426	0.023	0.000	0	0.990	1.010
6469	PEAK	1.823	1.778	1.853	843397	Pentanon	35.709	1.283	438	0.026	0.000	0	1.074	0.931
6469	PEAK	1.823	1.778	1.853	840681	Pentanon	34.848	1.323	429	0.026	0.000	0	1.072	0.933
6469	PEAK	1.823	1.778	1.853	840761	Pentanon	37.896	1.463	418	0.026	0.000	0	1.074	0.931
6471	PEAK	1.823	1.782	1.865	1044033	Pentanon	36.848	1.256	447	0.031	0.000	0	0.910	1.098
6471	PEAK	1.823	1.778	1.865	1039877	Pentanon	36.306	1.139	424	0.032	0.000	0	0.907	1.103
6471	PEAK	1.823	1.778	1.865	1037644	Pentanon	39.663	1.269	414	0.032	0.000	0	0.916	1.091
6460	PEAK	1.827	1.778	1.872	502870	Pentanon	21.877	1.983	448	0.028	0.000	0	1.128	0.887
6460	PEAK	1.827	1.778	1.872	505019	Pentanon	21.638	1.978	439	0.028	0.000	0	1.192	0.839
6460	PEAK	1.827	1.778	1.872	502414	Pentanon	22.135	1.882	422	0.029	0.000	0	1.180	0.848
6456	PEAK	3.128	3.090	3.162	300388	Pentylacetat	10.914	2.432	791	0.027	0.000	0	0.945	1.059
6456	PEAK	3.128	3.090	3.162	300823	Pentylacetat	10.515	2.456	785	0.028	0.000	0	0.932	1.073
6456	PEAK	3.128	3.090	3.162	299102	Pentylacetat	10.757	2.485	774	0.028	0.000	0	0.897	1.115
6461	PEAK	3.128	3.090	3.158	514729	Pentylacetat	24.567	2.378	788	0.028	0.000	0	1.202	0.832
6461	PEAK	3.128	3.090	3.158	514729	Pentylacetat	24.567	2.378	788	0.028	0.000	0	1.202	0.832
6461	PEAK	3.128	3.090	3.158	515779	Pentylacetat	26.958	2.333	774	0.028	0.000	0	1.200	0.834
6469	PEAK	3.135	3.094	3.192	1660217	Pentylacetat	72.621	2.615	794	0.029	0.000	0	0.871	1.148
6469	PEAK	3.135	3.098	3.188	1615174	Pentylacetat	62.035	2.457	788	0.029	0.000	0	0.871	1.148
6469	PEAK	3.135	3.094	3.184	1615099	Pentylacetat	60.788	2.542	779	0.029	0.000	0	0.882	1.133
6460	PEAK	3.139	3.098	3.188	992846	Pentylacetat	46.451	3.915	798	0.028	0.000	0	0.920	1.087
6460	PEAK	3.139	3.098	3.188	997306	Pentylacetat	46.018	3.905	789	0.028	0.000	0	0.922	1.085
6460	PEAK	3.139	3.098	3.188	996066	Pentylacetat	47.312	3.732	772	0.028	0.000	0	0.915	1.093
6467	PEAK	3.139	3.090	3.180	2831156	Pentylacetat	137.190	2.937	783	0.028	0.000	0	0.988	1.012
6467	PEAK	3.139	3.094	3.184	2875778	Pentylacetat	138.214	3.266	773	0.029	0.000	0	0.971	1.030
6467	PEAK	3.139	3.090	3.180	2835433	Pentylacetat	138.245	2.516	763	0.029	0.000	0	0.983	1.018
6471	PEAK	3.147	3.105	3.188	3183891	Pentylacetat	128.000	3.829	800	0.028	0.000	0	0.947	1.056
6471	PEAK	3.147	3.105	3.184	3087314	Pentylacetat	135.909	3.672	791	0.028	0.000	0	0.966	1.035
6471	PEAK	3.147	3.105	3.188	3189339	Pentylacetat	138.987	3.899	767	0.028	0.000	0	0.951	1.051
6461	PEAK	3.667	3.645	3.690	57395	β-Pinen	3.433	0.260	903	0.021	0.000	0	1.081	0.925
6461	PEAK	3.671	3.645	3.690	59139	β-Pinen	3.139	0.273	929	0.021	0.000	0	1.035	0.966
6461	PEAK	3.671	3.645	3.690	59139	β-Pinen	3.139	0.273	929	0.021	0.000	0	1.035	0.966
6456	PEAK	3.690	3.656	3.735	65547	β-Pinen	2.471	0.531	941	0.024	0.000	0	0.458	2.185
6456	PEAK	3.690	3.675	3.735	47703	β-Pinen	2.010	0.389	935	0.022	0.000	0	0.389	2.572
6456	PEAK	3.690	3.656	3.735	65622	β-Pinen	2.452	0.545	924	0.026	0.000	0	0.427	2.343
6469	PEAK	3.694	3.664	3.720	173838	β-Pinen	9.152	0.274	943	0.023	0.000	0	0.998	1.002
6469	PEAK	3.694	3.664	3.720	171261	β-Pinen	7.706	0.270	925	0.024	0.000	0	1.052	0.951
6469	PEAK	3.694	3.656	3.720	180686	β-Pinen	8.615	0.314	907	0.025	0.000	0	1.114	0.897
6471	PEAK	3.720	3.690	3.739	263572	β-Pinen	14.861	0.317	953	0.021	0.000	0	1.467	0.682
6471	PEAK	3.720	3.690	3.739	266032	β-Pinen	16.042	0.316	941	0.021	0.000	0	1.391	0.719
6471	PEAK	3.720	3.690	3.739	268769	β-Pinen	14.897	0.294	920	0.021	0.000	0	1.371	0.729

Anhang 2 (Fortsetzung): Teil 2: Flächenangaben der Peaks – Kakaoproben

- Natürliche Fermentation, Tag 5 (Fortsetzung)

Kakao	Type	RT (min)	Start RT	Stop RT	Area	Name	S/N	Area Perci	Scan# at Peak	Width	RRT (min)	Ri	Leading	Tailing
6461	PEAK	4.361	4.324	4.391	347363	Pentanol	15.212	1.605	1112	0.028	0.000	0	0.974	1.026
6461	PEAK	4.361	4.324	4.391	347363	Pentanol	15.212	1.605	1112	0.028	0.000	0	0.974	1.026
6461	PEAK	4.361	4.327	4.391	334376	Pentanol	16.328	1.512	1087	0.028	0.000	0	1.011	0.989
6469	PEAK	4.384	4.346	4.414	921919	Pentanol	37.548	1.402	1115	0.028	0.000	0	0.977	1.024
6469	PEAK	4.384	4.346	4.414	923414	Pentanol	36.774	1.453	1098	0.028	0.000	0	0.963	1.038
6469	PEAK	4.384	4.346	4.414	923604	Pentanol	40.006	1.607	1075	0.028	0.000	0	0.972	1.029
6471	PEAK	4.406	4.365	4.436	2173018	Pentanol	89.800	2.613	1133	0.028	0.000	0	1.032	0.969
6471	PEAK	4.406	4.365	4.436	2170172	Pentanol	96.232	2.581	1117	0.028	0.000	0	1.036	0.965
6471	PEAK	4.406	4.365	4.436	2168232	Pentanol	88.622	2.374	1093	0.028	0.000	0	1.038	0.964
6467	PEAK	4.413	4.372	4.447	2311856	Pentanol	106.347	2.372	1129	0.029	0.000	0	1.102	0.908
6467	PEAK	4.413	4.368	4.447	2349720	Pentanol	111.982	2.668	1100	0.030	0.000	0	1.109	0.902
6467	PEAK	4.413	4.368	4.447	2349495	Pentanol	112.753	2.085	1079	0.030	0.000	0	1.108	0.902
6460	PEAK	4.421	4.376	4.458	593518	Pentanol	26.779	2.324	1126	0.029	0.000	0	0.854	1.172
6460	PEAK	4.421	4.380	4.458	588301	Pentanol	28.196	1.568	1114	0.029	0.000	0	0.836	1.197
6460	PEAK	4.421	4.383	4.458	572210	Pentanol	26.983	2.144	1103	0.029	0.000	0	0.826	1.210
6456	PEAK	4.429	4.376	4.477	224142	Pentanol	6.070	1.814	1132	0.029	0.000	0	1.205	0.830
6456	PEAK	4.429	4.376	4.477	226130	Pentanol	5.852	1.846	1122	0.031	0.000	0	1.034	0.967
6456	PEAK	4.429	4.376	4.477	225537	Pentanol	6.064	1.874	1107	0.032	0.000	0	1.035	0.966
6461	PEAK	6.846	6.753	6.921	515771	Isoamylalkohol	9.937	2.336	1780	0.052	0.000	0	0.625	1.600
6461	PEAK	6.850	6.749	6.921	515298	Isoamylalkohol	9.850	2.380	1768	0.054	0.000	0	0.614	1.628
6461	PEAK	6.850	6.749	6.921	515298	Isoamylalkohol	9.850	2.380	1768	0.054	0.000	0	0.614	1.628
6456	PEAK	6.854	6.786	6.906	161497	Isoamylalkohol	3.229	1.307	1773	0.043	0.000	0	1.434	0.698
6456	PEAK	6.854	6.786	6.910	169261	Isoamylalkohol	3.146	1.382	1760	0.044	0.000	0	1.427	0.701
6456	PEAK	6.854	6.783	6.910	167023	Isoamylalkohol	3.207	1.388	1743	0.044	0.000	0	1.243	0.805
6469	PEAK	6.858	6.768	6.963	1702686	Isoamylalkohol	26.719	2.590	1771	0.068	0.000	0	0.764	1.310
6469	PEAK	6.858	6.772	6.963	1691095	Isoamylalkohol	26.060	2.662	1753	0.068	0.000	0	0.755	1.325
6469	PEAK	6.858	6.768	6.966	1716285	Isoamylalkohol	28.597	2.987	1727	0.069	0.000	0	0.753	1.328
6467	PEAK	6.869	6.783	6.974	3423040	Isoamylalkohol	77.724	3.512	1778	0.051	0.000	0	1.057	0.946
6467	PEAK	6.873	6.783	6.981	3491046	Isoamylalkohol	81.668	3.964	1743	0.052	0.000	0	1.105	0.905
6467	PEAK	6.873	6.786	6.981	3462474	Isoamylalkohol	82.066	3.072	1720	0.052	0.000	0	1.106	0.904
6460	PEAK	6.876	6.783	6.981	858705	Isoamylalkohol	18.647	3.363	1778	0.050	0.000	0	0.785	1.274
6460	PEAK	6.876	6.775	6.985	869881	Isoamylalkohol	19.794	2.319	1763	0.051	0.000	0	0.785	1.275
6460	PEAK	6.876	6.783	6.981	859116	Isoamylalkohol	19.025	3.219	1748	0.051	0.000	0	0.788	1.268
6471	PEAK	6.876	6.790	6.963	3598399	Isoamylalkohol	68.605	4.327	1786	0.056	0.000	0	0.797	1.254
6471	PEAK	6.876	6.790	6.963	3590097	Isoamylalkohol	74.019	4.270	1765	0.059	0.000	0	0.752	1.330
6471	PEAK	6.876	6.786	6.959	3533924	Isoamylalkohol	67.838	3.869	1739	0.058	0.000	0	0.768	1.302
6456	PEAK	15.753	15.697	15.776	5713890	Butanediol(1)	255.300	44.081	4154	0.022	0.000	0	1.904	0.525
6456	PEAK	15.753	15.697	15.776	5713299	Butanediol(1)	239.815	46.639	4112	0.022	0.000	0	1.904	0.525
6456	PEAK	15.753	15.701	15.776	5689115	Butanediol(1)	246.866	47.266	4088	0.022	0.000	0	1.900	0.526
6461	PEAK	15.753	15.708	15.783	4176502	Butanediol(1)	207.650	19.293	4122	0.025	0.000	0	1.835	0.545
6461	PEAK	15.753	15.708	15.783	4176502	Butanediol(1)	207.650	19.293	4122	0.025	0.000	0	1.835	0.545
6461	PEAK	15.753	15.704	15.776	3956128	Butanediol(1)	221.154	17.892	4067	0.025	0.000	0	1.911	0.523
6469	PEAK	15.765	15.720	15.798	10378330	Butanediol(1)	499.355	16.348	4149	0.025	0.000	0	2.004	0.499
6469	PEAK	15.765	15.712	15.795	10448587	Butanediol(1)	431.884	15.895	4126	0.025	0.000	0	2.055	0.487
6469	PEAK	15.765	15.716	15.795	10352474	Butanediol(1)	459.425	18.016	4052	0.025	0.000	0	2.047	0.489
6460	PEAK	15.779	15.719	15.802	9095018	Butanediol(1)	474.335	35.865	4160	0.022	0.000	0	2.419	0.413
6460	PEAK	15.779	15.716	15.802	9186871	Butanediol(1)	500.962	24.492	4111	0.022	0.000	0	2.425	0.412
6460	PEAK	15.779	15.716	15.802	9186622	Butanediol(1)	485.785	34.418	4082	0.022	0.000	0	2.425	0.412
6467	PEAK	15.794	15.719	15.813	26494292	Butanediol(1)	1.048.811	27.180	4149	0.030	0.000	0	4.501	0.222
6467	PEAK	15.794	15.716	15.813	26572868	Butanediol(1)	1.100.356	30.174	4086	0.030	0.000	0	4.508	0.222
6467	PEAK	15.794	15.716	15.813	26571466	Butanediol(1)	1.109.203	23.575	4049	0.030	0.000	0	4.508	0.222
6471	PEAK	15.798	15.727	15.817	24585929	Butanediol(1)	854.050	29.566	4156	0.034	0.000	0	5.139	0.195
6471	PEAK	15.798	15.727	15.821	25507602	Butanediol(1)	942.239	30.336	4123	0.034	0.000	0	5.024	0.199
6471	PEAK	15.798	15.731	15.821	25102141	Butanediol(1)	866.471	27.485	4081	0.034	0.000	0	4.980	0.201
6456	PEAK	16.484	16.443	16.514	4572255	Butanediol(2)	190.906	37.012	4330	0.023	0.000	0	2.089	0.479
6456	PEAK	16.484	16.443	16.507	4392792	Butanediol(2)	179.790	35.860	4307	0.023	0.000	0	2.133	0.469
6456	PEAK	16.484	16.443	16.507	4392787	Butanediol(2)	185.246	36.496	4283	0.023	0.000	0	2.133	0.469
6461	PEAK	16.484	16.462	16.514	1401656	Butanediol(2)	105.009	100.000	4340	0.017	0.000	0	1.259	0.794
6461	PEAK	16.484	16.462	16.514	1401632	Butanediol(2)	103.907	100.000	4317	0.017	0.000	0	1.259	0.794
6461	PEAK	16.484	16.462	16.514	1401604	Butanediol(2)	112.020	100.000	4288	0.017	0.000	0	1.259	0.794
6469	PEAK	16.495	16.473	16.526	2795095	Butanediol(2)	217.104	51.070	4344	0.016	0.000	0	1.567	0.638
6469	PEAK	16.495	16.473	16.526	2795013	Butanediol(2)	188.132	100.000	4321	0.016	0.000	0	1.567	0.638
6469	PEAK	16.499	16.477	16.522	2765049	Butanediol(2)	183.662	100.000	4291	0.016	0.000	0	1.501	0.666
6460	PEAK	16.507	16.477	16.525	2562489	Butanediol(2)	199.683	100.000	4354	0.017	0.000	0	1.798	0.556
6460	PEAK	16.507	16.477	16.529	2521769	Butanediol(2)	196.287	100.000	4331	0.017	0.000	0	1.810	0.552
6460	PEAK	16.507	16.477	16.525	2562403	Butanediol(2)	216.852	100.000	4254	0.017	0.000	0	1.798	0.556
6467	PEAK	16.514	16.480	16.540	7418323	Butanediol(2)	514.476	100.000	4341	0.021	0.000	0	2.378	0.420
6467	PEAK	16.514	16.480	16.537	7561887	Butanediol(2)	545.438	100.000	4313	0.021	0.000	0	2.348	0.426
6467	PEAK	16.514	16.480	16.537	7561784	Butanediol(2)	546.007	51.095	4278	0.021	0.000	0	2.348	0.426
6471	PEAK	16.522	16.492	16.544	6304671	Butanediol(2)	404.720	100.000	4349	0.018	0.000	0	1.773	0.564
6471	PEAK	16.522	16.492	16.544	6304513	Butanediol(2)	435.340	100.000	4316	0.018	0.000	0	1.773	0.564
6471	PEAK	16.522	16.492	16.544	6304415	Butanediol(2)	401.729	50.623	4274	0.018	0.000	0	1.773	0.564
6456	PEAK	21.507	21.474	21.537	973351	Phenylethanol	44.657	7.509	5687	0.022	0.000	0	0.790	1.266
6456	PEAK	21.507	21.474	21.537	973376	Phenylethanol	43.657	7.879	5664	0.022	0.000	0	0.790	1.266
6456	PEAK	21.507	21.474	21.537	973317	Phenylethanol	41.995	7.945	5634	0.022	0.000	0	0.790	1.266
6461	PEAK	21.507	21.477	21.541	1644916	Phenylethanol	98.168	7.450	5676	0.021	0.000	0	0.860	1.163
6461	PEAK	21.507	21.477	21.541	1644892	Phenylethanol	97.138	7.598	5650	0.021	0.000	0	0.860	1.163
6461	PEAK	21.507	21.477	21.541	1644896	Phenylethanol	107.005	7.439	5582	0.021	0.000	0	0.860	1.163
6460	PEAK	21.518	21.481	21.560	2643333	Phenylethanol	164.945	10.424	5689	0.021	0.000	0	0.979	1.021
6460	PEAK	21.518	21.481	21.560	2643310	Phenylethanol	173.854	7.047	5630	0.021	0.000			

Anhang 2 (Fortsetzung): Teil 2: Flächenangaben der Peaks – Kakaoproben

- Inokulierte Fermentation, Tag 1

Kakao	Type	RT (min)	Start RT	Stop RT	Area	Name	S/N	Area Perci	Scan# at Peal	Width	RRT (min)	Ri	Leading	Tailing
6493	PEAK	1.220	1.201	1.235	118736	Ethylacetat	17.500	0.454	287	0.014	0.000	0	1.132	0.883
6493	PEAK	1.220	1.197	1.235	121943	Ethylacetat	17.124	0.462	277	0.015	0.000	0	1.109	0.902
6493	PEAK	1.220	1.201	1.235	117622	Ethylacetat	16.305	0.356	261	0.015	0.000	0	1.081	0.925
6496	PEAK	1.220	1.201	1.239	175810	Ethylacetat	23.041	0.577	286	0.015	0.000	0	0.924	1.082
6496	PEAK	1.220	1.201	1.239	178980	Ethylacetat	22.014	0.539	269	0.015	0.000	0	0.951	1.052
6496	PEAK	1.220	1.205	1.239	160917	Ethylacetat	20.759	0.470	260	0.015	0.000	0	0.888	1.125
6497	PEAK	1.220	1.205	1.235	120489	Ethylacetat	16.940	0.441	284	0.013	0.000	0	1.009	0.992
6497	PEAK	1.220	1.201	1.235	135320	Ethylacetat	18.312	0.489	276	0.014	0.000	0	1.003	0.997
6497	PEAK	1.220	1.201	1.235	135185	Ethylacetat	15.779	0.426	258	0.014	0.000	0	0.986	1.014
6500	PEAK	1.220	1.197	1.235	169242	Ethylacetat	24.441	0.569	281	0.014	0.000	0	1.001	0.999
6500	PEAK	1.220	1.201	1.238	185192	Ethylacetat	26.153	0.542	263	0.015	0.000	0	0.988	1.012
6500	PEAK	1.220	1.201	1.238	185628	Ethylacetat	25.777	0.548	253	0.015	0.000	0	0.990	1.010
6501	PEAK	1.220	1.201	1.238	179852	Ethylacetat	23.113	0.508	284	0.015	0.000	0	1.020	0.980
6501	PEAK	1.220	1.201	1.238	182165	Ethylacetat	24.958	0.523	266	0.015	0.000	0	1.048	0.954
6501	PEAK	1.220	1.201	1.238	182812	Ethylacetat	23.921	0.516	255	0.016	0.000	0	1.034	0.967
6504	PEAK	1.227	1.208	1.246	233109	Ethylacetat	25.160	0.505	285	0.015	0.000	0	0.940	1.064
6504	PEAK	1.227	1.208	1.246	235545	Ethylacetat	29.799	0.526	277	0.015	0.000	0	0.949	1.053
6504	PEAK	1.227	1.204	1.242	223580	Ethylacetat	25.678	0.498	257	0.015	0.000	0	1.048	0.955
6493	PEAK	1.808	1.778	1.849	6506484	Pentanon	614.803	24.856	444	0.020	0.000	0	0.879	1.138
6493	PEAK	1.808	1.778	1.849	6509820	Pentanon	599.857	24.667	434	0.020	0.000	0	0.869	1.151
6493	PEAK	1.808	1.778	1.849	6517703	Pentanon	592.879	19.713	418	0.021	0.000	0	0.855	1.169
6497	PEAK	1.808	1.778	1.850	6021596	Pentanon	517.028	22.017	441	0.020	0.000	0	0.874	1.144
6497	PEAK	1.808	1.778	1.850	6027572	Pentanon	534.241	21.783	433	0.020	0.000	0	0.873	1.146
6497	PEAK	1.808	1.778	1.850	6031738	Pentanon	496.794	22.030	423	0.020	0.000	0	0.875	1.143
6496	PEAK	1.812	1.778	1.850	5401772	Pentanon	486.353	17.715	444	0.020	0.000	0	0.923	1.083
6496	PEAK	1.812	1.782	1.850	5369911	Pentanon	469.627	18.287	438	0.020	0.000	0	0.918	1.089
6496	PEAK	1.812	1.782	1.850	5374915	Pentanon	466.779	16.201	427	0.021	0.000	0	0.920	1.087
6500	PEAK	1.812	1.782	1.849	6312299	Pentanon	594.295	21.207	439	0.020	0.000	0	0.923	1.083
6500	PEAK	1.812	1.782	1.849	6317313	Pentanon	585.664	21.728	430	0.020	0.000	0	0.928	1.077
6500	PEAK	1.812	1.782	1.849	6328820	Pentanon	617.400	18.687	411	0.021	0.000	0	0.934	1.070
6501	PEAK	1.812	1.782	1.849	6804710	Pentanon	640.810	18.715	434	0.020	0.000	0	0.964	1.037
6501	PEAK	1.812	1.782	1.849	6811704	Pentanon	658.434	19.539	424	0.020	0.000	0	0.961	1.041
6501	PEAK	1.812	1.778	1.849	6857552	Pentanon	635.979	19.345	413	0.021	0.000	0	0.958	1.044
6504	PEAK	1.823	1.793	1.860	8638881	Pentanon	640.321	18.731	444	0.021	0.000	0	0.979	1.021
6504	PEAK	1.823	1.793	1.860	8641675	Pentanon	763.669	19.313	436	0.021	0.000	0	0.972	1.029
6504	PEAK	1.823	1.793	1.860	8649888	Pentanon	718.281	19.261	428	0.021	0.000	0	0.967	1.035
6493	PEAK	3.120	3.079	3.162	1169452	Pentylacetat	82.115	4.431	784	0.028	0.000	0	0.952	1.050
6493	PEAK	3.120	3.079	3.162	1167943	Pentylacetat	82.852	3.673	776	0.028	0.000	0	0.946	1.057
6493	PEAK	3.120	3.075	3.158	1133634	Pentylacetat	80.338	3.429	768	0.028	0.000	0	0.963	1.038
6497	PEAK	3.120	3.075	3.154	1201892	Pentylacetat	82.112	4.344	783	0.027	0.000	0	0.997	1.003
6497	PEAK	3.120	3.075	3.158	1249232	Pentylacetat	78.179	4.563	773	0.028	0.000	0	0.979	1.021
6497	PEAK	3.120	3.079	3.158	1234981	Pentylacetat	73.943	3.887	765	0.027	0.000	0	0.983	1.018
6496	PEAK	3.124	3.079	3.158	890129	Pentylacetat	62.599	2.919	794	0.027	0.000	0	0.938	1.066
6496	PEAK	3.124	3.083	3.158	891304	Pentylacetat	60.956	3.035	788	0.027	0.000	0	0.951	1.051
6496	PEAK	3.124	3.087	3.158	882173	Pentylacetat	60.489	2.659	777	0.027	0.000	0	0.937	1.067
6500	PEAK	3.124	3.083	3.162	1318669	Pentylacetat	93.815	4.430	789	0.027	0.000	0	0.957	1.045
6500	PEAK	3.124	3.083	3.162	1313194	Pentylacetat	98.799	3.845	771	0.027	0.000	0	0.981	1.019
6500	PEAK	3.124	3.083	3.162	1312973	Pentylacetat	98.550	3.877	761	0.027	0.000	0	0.981	1.019
6501	PEAK	3.128	3.083	3.161	1348053	Pentylacetat	90.567	3.804	793	0.028	0.000	0	0.992	1.008
6501	PEAK	3.128	3.075	3.161	1353977	Pentylacetat	96.621	3.724	785	0.028	0.000	0	0.982	1.019
6501	PEAK	3.128	3.086	3.161	1327355	Pentylacetat	95.908	3.651	785	0.028	0.000	0	0.972	1.029
6504	PEAK	3.146	3.105	3.184	1691915	Pentylacetat	94.208	3.668	797	0.027	0.000	0	0.922	1.085
6504	PEAK	3.146	3.105	3.184	1690903	Pentylacetat	112.982	3.779	789	0.027	0.000	0	0.932	1.073
6504	PEAK	3.146	3.101	3.184	1712873	Pentylacetat	107.368	3.814	781	0.028	0.000	0	0.957	1.045
6493	PEAK	3.664	3.634	3.690	324737	β-Pinen	27.525	1.241	939	0.024	0.000	0	1.056	0.947
6493	PEAK	3.664	3.634	3.686	285311	β-Pinen	25.288	0.897	915	0.023	0.000	0	1.151	0.869
6493	PEAK	3.664	3.634	3.686	284539	β-Pinen	24.829	0.861	900	0.023	0.000	0	1.149	0.870
6504	PEAK	3.694	3.649	3.742	5478924	β-Pinen	278.552	12.245	934	0.036	0.000	0	0.971	1.030
6504	PEAK	3.694	3.645	3.742	5571652	β-Pinen	265.286	12.406	921	0.037	0.000	0	0.997	1.003
6504	PEAK	3.694	3.649	3.742	5475931	β-Pinen	254.762	12.204	907	0.037	0.000	0	0.997	1.003
6501	PEAK	3.697	3.645	3.750	4447540	β-Pinen	214.782	12.551	944	0.039	0.000	0	1.060	0.943
6501	PEAK	3.697	3.645	3.750	4447024	β-Pinen	228.604	12.231	934	0.039	0.000	0	1.078	0.927
6501	PEAK	3.697	3.645	3.750	4425039	β-Pinen	227.368	12.483	902	0.039	0.000	0	1.091	0.917
6496	PEAK	3.698	3.649	3.746	2585248	β-Pinen	128.451	8.804	937	0.037	0.000	0	0.971	1.030
6496	PEAK	3.698	3.649	3.746	2586623	β-Pinen	128.191	7.797	920	0.037	0.000	0	0.977	1.023
6496	PEAK	3.698	3.649	3.746	2587343	β-Pinen	129.449	7.556	906	0.037	0.000	0	0.981	1.019
6500	PEAK	3.716	3.656	3.799	4555146	β-Pinen	204.759	13.338	922	0.043	0.000	0	0.806	1.241
6500	PEAK	3.716	3.660	3.799	4521110	β-Pinen	203.798	13.349	906	0.043	0.000	0	0.800	1.250
6500	PEAK	3.716	3.656	3.799	4556548	β-Pinen	201.137	100.000	883	0.043	0.000	0	0.795	1.258
6497	PEAK	3.743	3.679	3.810	4681473	β-Pinen	183.279	100.000	957	0.045	0.000	0	1.174	0.852
6497	PEAK	3.743	3.679	3.810	4687420	β-Pinen	178.077	100.000	933	0.045	0.000	0	1.164	0.859
6497	PEAK	3.746	3.679	3.806	4620126	β-Pinen	189.257	100.000	948	0.045	0.000	0	1.172	0.853

Anhang 2 (Fortsetzung): Teil 2: Flächenangaben der Peaks – Kakaoproben

- Inokulierte Fermentation, Tag 1 (Fortsetzung)

Kakao	Type	RT (min)	Start RT	Stop RT	Area	Name	S/N	Area Perci	Scan# at Peak	Width	RRT (min)	Ri	Leading	Tailing
6493	PEAK	4.369	4.312	4.410	5487758	Pentanol	342.941	20.795	1115	0.031	0.000	0	1.447	0.691
6493	PEAK	4.369	4.316	4.410	5462113	Pentanol	346.436	17.176	1103	0.031	0.000	0	1.441	0.694
6493	PEAK	4.369	4.316	4.410	5463777	Pentanol	341.023	16.525	1088	0.031	0.000	0	1.434	0.697
6497	PEAK	4.395	4.339	4.436	5857366	Pentanol	334.497	21.417	1130	0.031	0.000	0	1.565	0.639
6497	PEAK	4.395	4.339	4.440	5947344	Pentanol	348.799	21.493	1116	0.031	0.000	0	1.563	0.640
6497	PEAK	4.395	4.339	4.432	5747652	Pentanol	305.011	18.092	1082	0.031	0.000	0	1.538	0.650
6500	PEAK	4.425	4.361	4.462	6432772	Pentanol	400.163	21.611	1133	0.032	0.000	0	1.771	0.565
6500	PEAK	4.425	4.365	4.462	6411592	Pentanol	396.401	22.052	1116	0.032	0.000	0	1.740	0.575
6500	PEAK	4.425	4.361	4.462	6440533	Pentanol	421.472	19.017	1075	0.032	0.000	0	1.711	0.585
6496	PEAK	4.436	4.380	4.481	5731940	Pentanol	323.604	18.798	1142	0.033	0.000	0	1.516	0.659
6496	PEAK	4.436	4.384	4.481	5694844	Pentanol	313.418	19.393	1130	0.033	0.000	0	1.478	0.677
6496	PEAK	4.436	4.384	4.481	5697187	Pentanol	315.976	16.637	1093	0.034	0.000	0	1.465	0.683
6501	PEAK	4.440	4.380	4.481	6729746	Pentanol	393.558	18.985	1093	0.033	0.000	0	1.534	0.652
6501	PEAK	4.443	4.383	4.485	6821978	Pentanol	372.176	19.252	1142	0.033	0.000	0	1.502	0.666
6501	PEAK	4.443	4.380	4.481	6723782	Pentanol	393.639	18.492	1130	0.033	0.000	0	1.535	0.652
6504	PEAK	4.488	4.428	4.533	9432850	Pentanol	501.169	21.082	1143	0.034	0.000	0	1.339	0.747
6504	PEAK	4.488	4.432	4.533	9369233	Pentanol	472.538	20.863	1129	0.034	0.000	0	1.326	0.754
6504	PEAK	4.488	4.428	4.533	9432145	Pentanol	458.967	21.021	1113	0.035	0.000	0	1.324	0.755
6493	PEAK	6.835	6.745	6.925	3351532	Isoamylalkohol	120.210	12.804	1778	0.052	0.000	0	1.475	0.678
6493	PEAK	6.835	6.745	6.914	3236010	Isoamylalkohol	116.452	12.262	1760	0.052	0.000	0	1.484	0.669
6493	PEAK	6.835	6.745	6.925	3342347	Isoamylalkohol	119.479	10.510	1742	0.052	0.000	0	1.495	0.674
6497	PEAK	6.839	6.745	6.906	3061820	Isoamylalkohol	102.433	11.195	1778	0.048	0.000	0	1.756	0.570
6497	PEAK	6.843	6.749	6.929	3265565	Isoamylalkohol	110.044	11.802	1761	0.049	0.000	0	1.687	0.593
6497	PEAK	6.843	6.753	6.925	3210844	Isoamylalkohol	102.277	11.727	1739	0.049	0.000	0	1.697	0.589
6500	PEAK	6.858	6.768	6.925	3435298	Isoamylalkohol	127.115	11.815	1758	0.049	0.000	0	1.913	0.523
6500	PEAK	6.858	6.768	6.940	3571951	Isoamylalkohol	137.683	10.459	1733	0.050	0.000	0	1.856	0.539
6500	PEAK	6.858	6.768	6.925	3430998	Isoamylalkohol	135.051	10.131	1707	0.050	0.000	0	1.898	0.527
6496	PEAK	6.865	6.783	6.948	3178556	Isoamylalkohol	113.833	8.052	1787	0.049	0.000	0	1.793	0.558
6496	PEAK	6.865	6.775	6.940	3184633	Isoamylalkohol	110.644	10.845	1772	0.050	0.000	0	1.807	0.553
6496	PEAK	6.865	6.775	6.940	3186917	Isoamylalkohol	110.488	9.606	1750	0.050	0.000	0	1.817	0.550
6501	PEAK	6.865	6.779	6.944	3327319	Isoamylalkohol	115.428	9.390	1784	0.048	0.000	0	1.627	0.615
6501	PEAK	6.865	6.779	6.921	3057113	Isoamylalkohol	121.704	8.769	1746	0.047	0.000	0	1.690	0.592
6501	PEAK	6.869	6.779	6.929	3167970	Isoamylalkohol	120.134	8.713	1770	0.047	0.000	0	1.621	0.617
6504	PEAK	6.910	6.820	6.970	4249647	Isoamylalkohol	154.806	9.498	1776	0.049	0.000	0	1.813	0.552
6504	PEAK	6.910	6.824	6.970	4204813	Isoamylalkohol	145.666	9.363	1757	0.049	0.000	0	1.785	0.560
6504	PEAK	6.910	6.824	6.966	4131274	Isoamylalkohol	139.787	9.207	1734	0.048	0.000	0	1.796	0.557
6497	PEAK	15.719	15.678	15.764	1510396	Butanediol(1)	95.028	5.523	4141	0.027	0.000	0	0.803	1.246
6497	PEAK	15.719	15.682	15.764	1516152	Butanediol(1)	98.934	5.479	4114	0.027	0.000	0	0.805	1.242
6497	PEAK	15.719	15.682	15.764	1516334	Butanediol(1)	88.064	4.773	4059	0.027	0.000	0	0.803	1.246
6493	PEAK	15.723	15.686	15.768	1282435	Butanediol(1)	89.360	4.899	4141	0.028	0.000	0	0.701	1.426
6493	PEAK	15.723	15.686	15.768	1281959	Butanediol(1)	87.642	4.858	4112	0.028	0.000	0	0.701	1.426
6493	PEAK	15.723	15.686	15.768	1282207	Butanediol(1)	88.754	4.032	4087	0.028	0.000	0	0.701	1.426
6500	PEAK	15.723	15.686	15.768	1429325	Butanediol(1)	96.574	4.916	4106	0.028	0.000	0	0.975	1.026
6500	PEAK	15.723	15.686	15.768	1429472	Butanediol(1)	102.938	4.186	4074	0.028	0.000	0	0.975	1.026
6500	PEAK	15.723	15.686	15.772	1483910	Butanediol(1)	104.272	4.381	4040	0.028	0.000	0	0.959	1.043
6496	PEAK	15.727	15.686	15.772	1411804	Butanediol(1)	92.108	3.576	4144	0.028	0.000	0	0.802	1.247
6496	PEAK	15.727	15.686	15.772	1411866	Butanediol(1)	89.642	4.808	4126	0.028	0.000	0	0.802	1.247
6496	PEAK	15.727	15.690	15.772	1404672	Butanediol(1)	90.220	4.102	4065	0.027	0.000	0	0.800	1.250
6501	PEAK	15.731	15.693	15.779	1441509	Butanediol(1)	89.215	4.068	4143	0.028	0.000	0	0.770	1.299
6501	PEAK	15.731	15.693	15.779	1441959	Butanediol(1)	98.358	4.136	4095	0.028	0.000	0	0.769	1.300
6501	PEAK	15.731	15.693	15.779	1441952	Butanediol(1)	95.258	4.068	4059	0.028	0.000	0	0.769	1.300
6504	PEAK	15.753	15.719	15.802	1724119	Butanediol(1)	112.717	3.853	4117	0.025	0.000	0	0.772	1.296
6504	PEAK	15.753	15.715	15.802	1750484	Butanediol(1)	107.381	3.898	4090	0.025	0.000	0	0.777	1.287
6504	PEAK	15.753	15.715	15.798	1706793	Butanediol(1)	103.106	3.804	4058	0.025	0.000	0	0.784	1.275
6497	PEAK	16.462	16.420	16.510	3179501	Butanediol(2)	210.072	11.625	4339	0.026	0.000	0	1.305	0.766
6497	PEAK	16.462	16.417	16.514	3276112	Butanediol(2)	220.705	11.840	4312	0.027	0.000	0	1.307	0.765
6497	PEAK	16.462	16.417	16.503	3122365	Butanediol(2)	193.090	9.828	4255	0.026	0.000	0	1.329	0.752
6493	PEAK	16.465	16.424	16.503	2545756	Butanediol(2)	187.312	9.725	4339	0.026	0.000	0	1.293	0.773
6493	PEAK	16.465	16.420	16.499	2495616	Butanediol(2)	184.227	7.848	4285	0.026	0.000	0	1.316	0.770
6493	PEAK	16.465	16.420	16.503	2570535	Butanediol(2)	183.952	7.775	4253	0.026	0.000	0	1.299	0.760
6500	PEAK	16.465	16.417	16.510	3142417	Butanediol(2)	226.018	10.808	4304	0.027	0.000	0	1.492	0.670
6500	PEAK	16.465	16.420	16.503	3024236	Butanediol(2)	237.302	8.855	4271	0.027	0.000	0	1.509	0.663
6500	PEAK	16.465	16.420	16.503	3024275	Butanediol(2)	237.016	8.930	4234	0.027	0.000	0	1.509	0.663
6496	PEAK	16.466	16.417	16.525	2999267	Butanediol(2)	206.294	9.836	4341	0.026	0.000	0	1.113	0.898
6496	PEAK	16.466	16.417	16.522	2952958	Butanediol(2)	199.885	10.056	4322	0.026	0.000	0	1.119	0.894
6496	PEAK	16.466	16.417	16.522	2952852	Butanediol(2)	199.571	8.901	4289	0.026	0.000	0	1.119	0.894
6501	PEAK	16.469	16.424	16.518	3059089	Butanediol(2)	199.201	8.633	4340	0.025	0.000	0	1.084	0.922
6501	PEAK	16.469	16.424	16.521	3099003	Butanediol(2)	213.514	8.523	4318	0.025	0.000	0	1.079	0.927
6501	PEAK	16.469	16.424	16.521	3098853	Butanediol(2)	213.616	8.742	4253	0.025	0.000	0	1.081	0.925
6504	PEAK	16.495	16.446	16.551	4060597	Butanediol(2)	216.241	8.804	4343	0.027	0.000	0	1.220	0.820
6504	PEAK	16.495	16.450	16.551	4000173	Butanediol(2)	257.814	8.940	4314	0.027	0.000	0	1.214	0.824
6504	PEAK	16.495	16.450	16.551	4000346	Butanediol(2)	243.822	8.908	4285	0.027	0.000	0	1.214	0.824
6497	PEAK	21.500	21.470	21.537	4987299	Phenylethanol	391.248	18.236	5679	0.021	0.000	0	0.876	1.142
6497	PEAK	21.500	21.466	21.534	4884581	Phenylethanol	403.517	17.653	5647	0.021	0.000	0	0.890	1.123
6497	PEAK	21.500	21.470	21.537	4987295	Phenylethanol	361.913	15.699	5583	0.021	0.000	0	0.876	1.142
6496	PEAK	21.504	21.470	21.545	5477670	Phenylethanol	443.797	13.876	5682	0.022	0.000	0	0.891	1.123
6496	PEAK	21.504	21.470	21.545	5477652	Phenylethanol	431.931	18.653	5660	0.022	0.000	0	0.891	1.123
6496	PEAK	21.504	21.474	21.549	5488085	Phenylethanol	435.282	16.027	5583	0.022	0.000	0	0.882	1.134
6500	PEAK	21.504	21.470	21.545	5353036	Phenylethanol	455.757	17.984	5672	0.023	0.000	0	0.980	1.021
6500	PEAK	21.504	21.470	21.541	5255985	Phenylethanol	478.727	15.39						

Anhang 2 (Fortsetzung): Teil 2: Flächenangaben der Peaks – Kakaoproben

- Inokulierte Fermentation, Tag 3

Kakao	Type	RT (min)	Start RT	Stop RT	Area	Name	S/N	Area Perci	Scan# at Peak	Width	RRT (min)	Ri	Leading	Tailing
6511	PEAK	1.216	1.186	1.257	30385079	Ethylacetat	2.323.046	49.110	285	0.017	0.000	0	1.008	0.992
6511	PEAK	1.216	1.189	1.253	29256537	Ethylacetat	2.369.792	50.675	278	0.017	0.000	0	1.014	0.986
6511	PEAK	1.216	1.186	1.253	29681695	Ethylacetat	2.372.069	32.194	270	0.018	0.000	0	1.024	0.976
6512	PEAK	1.216	1.186	1.249	13022857	Ethylacetat	1.037.019	28.768	284	0.018	0.000	0	1.079	0.927
6512	PEAK	1.216	1.186	1.253	13319117	Ethylacetat	970.313	31.038	272	0.018	0.000	0	1.036	0.966
6512	PEAK	1.216	1.186	1.253	13341244	Ethylacetat	1.011.603	31.158	253	0.018	0.000	0	1.005	0.995
6515	PEAK	1.216	1.186	1.253	10357212	Ethylacetat	772.453	28.301	286	0.017	0.000	0	0.875	1.143
6515	PEAK	1.216	1.186	1.257	10577071	Ethylacetat	791.375	29.209	276	0.017	0.000	0	0.878	1.140
6515	PEAK	1.216	1.186	1.249	10099637	Ethylacetat	821.527	28.149	266	0.017	0.000	0	0.886	1.129
6516	PEAK	1.216	1.186	1.249	15788202	Ethylacetat	1.159.660	32.594	280	0.018	0.000	0	1.061	0.942
6516	PEAK	1.216	1.186	1.249	15806564	Ethylacetat	1.166.255	33.218	273	0.018	0.000	0	1.024	0.977
6516	PEAK	1.216	1.186	1.249	15829776	Ethylacetat	1.117.279	32.993	258	0.018	0.000	0	1.010	0.990
6520	PEAK	1.216	1.186	1.253	13571039	Ethylacetat	1.087.843	30.296	282	0.016	0.000	0	0.911	1.097
6520	PEAK	1.216	1.186	1.249	13268654	Ethylacetat	1.065.677	28.014	264	0.017	0.000	0	0.922	1.084
6520	PEAK	1.216	1.189	1.253	13308553	Ethylacetat	1.012.042	29.987	255	0.017	0.000	0	0.911	1.098
6505	PEAK	1.223	1.197	1.253	9832413	Ethylacetat	901.616	23.788	282	0.016	0.000	0	0.885	1.130
6505	PEAK	1.223	1.197	1.249	9344729	Ethylacetat	814.465	25.296	262	0.016	0.000	0	0.930	1.075
6505	PEAK	1.223	1.197	1.249	9358194	Ethylacetat	949.139	25.594	255	0.017	0.000	0	0.938	1.067
6515	PEAK	1.804	1.763	1.838	698744	Pentanon	35.069	1.930	433	0.028	0.000	0	1.190	0.840
6515	PEAK	1.804	1.763	1.834	663258	Pentanon	36.202	1.849	423	0.028	0.000	0	1.279	0.782
6515	PEAK	1.804	1.763	1.838	700509	Pentanon	36.052	1.970	413	0.028	0.000	0	1.241	0.806
6516	PEAK	1.804	1.767	1.838	824749	Pentanon	41.848	1.733	430	0.028	0.000	0	1.271	0.787
6516	PEAK	1.804	1.763	1.838	829101	Pentanon	41.606	1.753	423	0.028	0.000	0	1.337	0.748
6516	PEAK	1.804	1.763	1.838	829873	Pentanon	40.679	1.730	415	0.028	0.000	0	1.326	0.754
6520	PEAK	1.804	1.763	1.834	789891	Pentanon	42.821	1.759	430	0.027	0.000	0	1.182	0.864
6520	PEAK	1.804	1.763	1.834	789079	Pentanon	43.819	1.666	421	0.027	0.000	0	1.204	0.830
6520	PEAK	1.804	1.763	1.834	788335	Pentanon	41.929	1.776	412	0.027	0.000	0	1.193	0.838
6511	PEAK	1.808	1.763	1.842	1239280	Pentanon	66.373	2.003	443	0.026	0.000	0	1.152	0.868
6511	PEAK	1.808	1.763	1.842	1238748	Pentanon	69.265	2.146	436	0.026	0.000	0	1.161	0.862
6511	PEAK	1.808	1.767	1.842	1238017	Pentanon	69.247	1.343	428	0.027	0.000	0	1.175	0.851
6512	PEAK	1.808	1.767	1.842	707462	Pentanon	34.937	1.649	430	0.029	0.000	0	1.410	0.709
6512	PEAK	1.808	1.767	1.842	705985	Pentanon	36.247	1.722	419	0.029	0.000	0	1.381	0.724
6512	PEAK	1.808	1.763	1.842	708744	Pentanon	36.964	1.655	411	0.029	0.000	0	1.371	0.729
6505	PEAK	1.823	1.778	1.860	577659	Pentanon	32.207	1.398	442	0.028	0.000	0	1.084	0.922
6505	PEAK	1.823	1.778	1.857	553173	Pentanon	29.417	1.327	433	0.028	0.000	0	1.132	0.884
6505	PEAK	1.823	1.778	1.857	555095	Pentanon	29.577	1.503	422	0.028	0.000	0	1.136	0.881
6515	PEAK	3.105	3.067	3.150	2265896	Pentylacetat	109.717	6.257	780	0.028	0.000	0	0.942	1.061
6515	PEAK	3.105	3.064	3.146	2229886	Pentylacetat	115.926	6.215	770	0.028	0.000	0	0.954	1.048
6515	PEAK	3.105	3.067	3.150	2266982	Pentylacetat	112.884	6.376	760	0.028	0.000	0	0.936	1.069
6520	PEAK	3.105	3.064	3.154	2416542	Pentylacetat	120.488	5.395	786	0.028	0.000	0	0.865	1.156
6520	PEAK	3.105	3.064	3.154	2416107	Pentylacetat	118.092	5.381	777	0.028	0.000	0	0.861	1.162
6520	PEAK	3.105	3.064	3.154	2416338	Pentylacetat	116.283	5.444	759	0.029	0.000	0	0.877	1.141
6511	PEAK	3.109	3.071	3.161	2249927	Pentylacetat	107.033	6.636	790	0.029	0.000	0	0.847	1.181
6511	PEAK	3.109	3.071	3.161	2246228	Pentylacetat	111.776	3.891	783	0.029	0.000	0	0.851	1.175
6511	PEAK	3.109	3.067	3.161	2283911	Pentylacetat	113.248	2.477	775	0.029	0.000	0	0.865	1.156
6512	PEAK	3.112	3.067	3.154	1868480	Pentylacetat	96.034	4.127	790	0.028	0.000	0	0.952	1.051
6512	PEAK	3.112	3.071	3.157	1895458	Pentylacetat	90.798	4.417	778	0.028	0.000	0	0.950	1.053
6512	PEAK	3.112	3.071	3.157	1895369	Pentylacetat	94.384	4.624	767	0.028	0.000	0	0.942	1.062
6516	PEAK	3.112	3.067	3.157	2562537	Pentylacetat	119.459	5.290	786	0.028	0.000	0	0.909	1.101
6516	PEAK	3.112	3.067	3.157	2562636	Pentylacetat	121.270	5.385	779	0.028	0.000	0	0.936	1.068
6516	PEAK	3.112	3.067	3.157	2563671	Pentylacetat	120.617	5.419	772	0.028	0.000	0	0.930	1.075
6505	PEAK	3.135	3.090	3.172	985150	Pentylacetat	54.202	2.383	792	0.028	0.000	0	1.034	0.967
6505	PEAK	3.135	3.090	3.172	981090	Pentylacetat	50.704	2.354	783	0.028	0.000	0	1.005	0.995
6505	PEAK	3.135	3.090	3.172	979072	Pentylacetat	50.955	2.650	772	0.028	0.000	0	0.989	1.011
6515	PEAK	3.645	3.615	3.671	170899	β-Pinen	10.254	0.472	924	0.023	0.000	0	1.151	0.869
6515	PEAK	3.645	3.615	3.671	170149	β-Pinen	10.848	0.474	914	0.023	0.000	0	1.157	0.864
6515	PEAK	3.645	3.611	3.671	175157	β-Pinen	10.666	0.493	899	0.024	0.000	0	1.182	0.846
6520	PEAK	3.660	3.622	3.690	270284	β-Pinen	15.118	0.603	934	0.024	0.000	0	1.010	0.990
6520	PEAK	3.660	3.622	3.690	269005	β-Pinen	15.229	0.568	916	0.025	0.000	0	0.966	1.036
6520	PEAK	3.660	3.619	3.690	268050	β-Pinen	14.599	0.604	901	0.025	0.000	0	0.972	1.029
6516	PEAK	3.664	3.615	3.720	1044877	β-Pinen	37.934	2.196	926	0.037	0.000	0	0.876	1.142
6511	PEAK	3.667	3.630	3.701	402003	β-Pinen	21.881	0.696	932	0.027	0.000	0	1.039	0.962
6511	PEAK	3.667	3.626	3.701	409623	β-Pinen	22.162	0.444	921	0.027	0.000	0	1.034	0.967
6511	PEAK	3.667	3.626	3.701	408518	β-Pinen	23.568	0.709	901	0.027	0.000	0	1.032	0.969
6516	PEAK	3.667	3.619	3.720	1041513	β-Pinen	37.329	2.150	934	0.036	0.000	0	0.919	1.088
6516	PEAK	3.667	3.615	3.720	1041434	β-Pinen	37.707	2.201	917	0.037	0.000	0	0.880	1.136
6505	PEAK	3.671	3.634	3.697	173203	β-Pinen	10.627	0.416	926	0.024	0.000	0	1.052	0.950
6505	PEAK	3.671	3.637	3.697	171204	β-Pinen	12.373	0.468	900	0.025	0.000	0	1.203	0.831
6512	PEAK	3.671	3.619	3.720	747586	β-Pinen	28.574	1.651	939	0.035	0.000	0	0.803	1.246
6512	PEAK	3.671	3.619	3.720	745882	β-Pinen	26.711	1.738	926	0.035	0.000	0	0.815	1.227
6512	PEAK	3.671	3.619	3.720	738214	β-Pinen	28.174	1.724	900	0.036	0.000	0	0.806	1.241
6505	PEAK	3.675	3.637	3.697	172405	β-Pinen	11.252	0.417	936	0.024	0.000	0	0.987	1.013
6515	PEAK	4.338	4.301	4.376	1592513	Pentanol	74.385	4.352	1115	0.028	0.000	0	0.981	1.020
6515	PEAK	4.338	4.297	4.376	1624032	Pentanol	82.272	4.526	1080	0.029	0.000	0	0.999	1.001
6515	PEAK	4.338	4.297	4.376	1623777	Pentanol	79.668	4.567	1060	0.029	0.000	0	0.999	1.001
6520	PEAK	4.346	4.305	4.387	179804	Pentanol	87.933	3.973	1116	0.029	0.000	0	1.177	0.849
6520	PEAK	4.346	4.305	4.387	1787109	Pentanol	88.951	3.773	1080	0.029	0.000	0	1.131	0.884
6520	PEAK	4.346	4.305	4.391	1830725	Pentanol	86.167	4.125	1058	0.030	0.000	0	1.103	0.907
6511	PEAK	4.353	4.308	4.398	2102980	Pentanol	99.423	3.399	1118	0.030	0.000	0	1.072	0.933
6511	PEAK	4.353	4.308	4.394	2060830	Pentanol	102.820	3.570	1103	0.030	0.000	0	1.056	0.947
6511	PEAK	4.353	4.312	4.398	2082670	Pentanol	103.832	2.259	1086	0.030	0.000	0	1.028	0.972
6505	PEAK	4.372	4.331	4.410	1143901	Pentanol	60.150	2.767	1121	0.029	0.000	0	0.999	1.001
6505	PEAK	4.372	4.335	4.410	1123482									

Anhang 2 (Fortsetzung): Teil 2: Flächenangaben der Peaks – Kakaoproben

- Inokulierte Fermentation, Tag 3 (Fortsetzung)

Kakao	Type	RT (min)	Start RT	Stop RT	Area	Name	S/N	Area Perci	Scan# at Peal	Width	RRT (min)	Ri	Leading	Tailing
6515	PEAK	6.809	6.722	6.872	2696896	Isoamylalkohol	69.034	7.369	1771	0.050	0.000	0	1.350	0.741
6515	PEAK	6.809	6.719	6.869	2628931	Isoamylalkohol	74.689	7.327	1729	0.051	0.000	0	1.385	0.722
6515	PEAK	6.809	6.719	6.872	2698939	Isoamylalkohol	73.361	7.590	1706	0.051	0.000	0	1.361	0.735
6520	PEAK	6.812	6.726	6.902	3038465	Isoamylalkohol	77.997	6.767	1753	0.055	0.000	0	1.328	0.753
6520	PEAK	6.812	6.719	6.884	2874913	Isoamylalkohol	78.123	6.070	1731	0.054	0.000	0	1.388	0.720
6520	PEAK	6.812	6.722	6.884	2875025	Isoamylalkohol	74.853	6.478	1706	0.054	0.000	0	1.404	0.712
6511	PEAK	6.820	6.734	6.887	2914024	Isoamylalkohol	80.335	5.047	1752	0.052	0.000	0	1.301	0.768
6511	PEAK	6.820	6.734	6.898	3046531	Isoamylalkohol	82.421	3.304	1731	0.053	0.000	0	1.255	0.797
6511	PEAK	6.823	6.734	6.887	2911947	Isoamylalkohol	76.543	4.706	1772	0.051	0.000	0	1.251	0.799
6512	PEAK	6.842	6.760	6.932	2589884	Isoamylalkohol	71.130	5.721	1776	0.048	0.000	0	1.262	0.793
6512	PEAK	6.842	6.764	6.936	2570896	Isoamylalkohol	66.693	5.991	1754	0.048	0.000	0	1.230	0.813
6512	PEAK	6.842	6.760	6.925	2528324	Isoamylalkohol	69.006	6.168	1728	0.048	0.000	0	1.269	0.788
6516	PEAK	6.842	6.752	6.910	2927998	Isoamylalkohol	77.515	6.045	1775	0.045	0.000	0	1.323	0.756
6516	PEAK	6.842	6.752	6.910	2921468	Isoamylalkohol	78.770	6.140	1759	0.045	0.000	0	1.262	0.792
6516	PEAK	6.842	6.756	6.914	2953801	Isoamylalkohol	79.095	6.244	1740	0.046	0.000	0	1.299	0.770
6505	PEAK	6.857	6.771	6.932	2024297	Isoamylalkohol	54.381	4.857	1762	0.050	0.000	0	1.189	0.841
6505	PEAK	6.857	6.771	6.932	2021455	Isoamylalkohol	54.580	5.472	1741	0.051	0.000	0	1.223	0.817
6505	PEAK	6.857	6.771	6.944	2115917	Isoamylalkohol	65.408	5.787	1724	0.052	0.000	0	1.217	0.822
6515	PEAK	15.727	15.674	15.764	8131187	Butanediol(1)	376.640	22.219	4142	0.028	0.000	0	2.185	0.458
6515	PEAK	15.727	15.674	15.764	8131292	Butanediol(1)	413.024	22.663	4079	0.028	0.000	0	2.185	0.458
6515	PEAK	15.727	15.674	15.764	8131164	Butanediol(1)	400.258	22.868	4042	0.028	0.000	0	2.185	0.458
6511	PEAK	15.730	15.678	15.764	8314706	Butanediol(1)	431.972	14.402	4112	0.027	0.000	0	1.639	0.610
6511	PEAK	15.730	15.678	15.764	8315006	Butanediol(1)	434.316	9.019	4078	0.027	0.000	0	1.642	0.609
6511	PEAK	15.730	15.678	15.764	8315247	Butanediol(1)	469.099	14.431	4037	0.027	0.000	0	1.643	0.609
6520	PEAK	15.730	15.678	15.760	9926007	Butanediol(1)	496.304	22.159	4139	0.028	0.000	0	2.328	0.430
6520	PEAK	15.730	15.678	15.764	10160783	Butanediol(1)	492.854	22.628	4105	0.029	0.000	0	2.302	0.434
6520	PEAK	15.730	15.678	15.760	9924648	Butanediol(1)	500.393	20.954	4075	0.028	0.000	0	2.328	0.430
6512	PEAK	15.738	15.682	15.768	10021216	Butanediol(1)	465.144	23.353	4107	0.029	0.000	0	2.163	0.462
6512	PEAK	15.738	15.682	15.768	10021644	Butanediol(1)	484.529	24.447	4070	0.029	0.000	0	2.163	0.462
6512	PEAK	15.738	15.682	15.768	10021351	Butanediol(1)	494.625	23.404	4036	0.029	0.000	0	2.163	0.462
6516	PEAK	15.742	15.685	15.768	10739751	Butanediol(1)	490.341	22.570	4115	0.030	0.000	0	2.574	0.388
6516	PEAK	15.742	15.682	15.768	10822925	Butanediol(1)	489.771	22.877	4088	0.030	0.000	0	2.586	0.387
6516	PEAK	15.742	15.685	15.768	10739326	Butanediol(1)	478.728	22.383	4055	0.030	0.000	0	2.574	0.388
6505	PEAK	15.772	15.715	15.798	10642146	Butanediol(1)	534.757	25.536	4116	0.029	0.000	0	2.533	0.395
6505	PEAK	15.772	15.715	15.798	10641232	Butanediol(1)	538.047	28.806	4081	0.029	0.000	0	2.533	0.395
6505	PEAK	15.772	15.715	15.798	10640715	Butanediol(1)	633.505	29.101	4054	0.029	0.000	0	2.533	0.395
6515	PEAK	16.461	16.435	16.488	2435047	Butanediol(2)	184.839	50.521	4338	0.018	0.000	0	1.502	0.666
6515	PEAK	16.461	16.431	16.488	2425119	Butanediol(2)	190.207	50.419	4308	0.018	0.000	0	1.497	0.668
6515	PEAK	16.461	16.435	16.488	2435097	Butanediol(2)	202.686	50.521	4275	0.018	0.000	0	1.502	0.666
6511	PEAK	16.465	16.439	16.495	3072630	Butanediol(2)	244.325	100.000	4338	0.018	0.000	0	1.591	0.629
6511	PEAK	16.465	16.439	16.495	3072425	Butanediol(2)	255.209	100.000	4308	0.018	0.000	0	1.591	0.629
6511	PEAK	16.465	16.439	16.495	3072370	Butanediol(2)	256.595	50.494	4274	0.018	0.000	0	1.591	0.629
6520	PEAK	16.465	16.439	16.495	3202191	Butanediol(2)	248.369	32.504	4301	0.019	0.000	0	1.574	0.635
6520	PEAK	16.465	16.439	16.491	3259662	Butanediol(2)	251.070	33.087	4301	0.019	0.000	0	1.552	0.645
6520	PEAK	16.465	16.439	16.491	3259596	Butanediol(2)	258.111	49.021	4271	0.019	0.000	0	1.552	0.645
6512	PEAK	16.469	16.443	16.499	3405274	Butanediol(2)	258.697	100.000	4336	0.019	0.000	0	1.455	0.688
6512	PEAK	16.469	16.443	16.499	3405114	Butanediol(2)	253.588	100.000	4265	0.019	0.000	0	1.455	0.688
6512	PEAK	16.469	16.443	16.499	3405000	Butanediol(2)	246.490	32.777	4203	0.019	0.000	0	1.455	0.688
6516	PEAK	16.473	16.443	16.503	3880403	Butanediol(2)	273.105	100.000	4310	0.019	0.000	0	1.527	0.655
6516	PEAK	16.473	16.443	16.503	3880279	Butanediol(2)	272.211	49.533	4283	0.019	0.000	0	1.527	0.655
6516	PEAK	16.473	16.443	16.503	3880144	Butanediol(2)	266.644	49.532	4250	0.019	0.000	0	1.527	0.655
6505	PEAK	16.503	16.473	16.533	4142207	Butanediol(2)	335.239	100.000	4343	0.019	0.000	0	1.673	0.598
6505	PEAK	16.503	16.473	16.533	4141875	Butanediol(2)	314.921	100.000	4311	0.019	0.000	0	1.673	0.598
6505	PEAK	16.503	16.473	16.533	4141549	Butanediol(2)	316.870	100.000	4276	0.019	0.000	0	1.673	0.598
6511	PEAK	21.492	21.458	21.522	8283107	Phenylethanol	556.542	13.388	5673	0.021	0.000	0	1.052	0.951
6511	PEAK	21.492	21.458	21.522	8283085	Phenylethanol	581.362	14.347	5638	0.021	0.000	0	1.052	0.951
6511	PEAK	21.492	21.458	21.522	8283066	Phenylethanol	584.525	8.984	5601	0.021	0.000	0	1.052	0.951
6515	PEAK	21.492	21.458	21.526	7126239	Phenylethanol	446.561	19.473	5676	0.022	0.000	0	0.901	1.109
6515	PEAK	21.492	21.462	21.529	7266132	Phenylethanol	463.575	20.066	5642	0.022	0.000	0	0.885	1.130
6515	PEAK	21.492	21.458	21.526	7126246	Phenylethanol	489.676	19.862	5605	0.022	0.000	0	0.901	1.109
6520	PEAK	21.492	21.462	21.526	9309209	Phenylethanol	597.574	20.782	5674	0.023	0.000	0	0.997	1.003
6520	PEAK	21.492	21.458	21.526	9498136	Phenylethanol	591.308	21.152	5632	0.023	0.000	0	1.007	0.994
6520	PEAK	21.492	21.458	21.530	9692890	Phenylethanol	612.832	20.465	5596	0.023	0.000	0	0.998	1.002
6512	PEAK	21.496	21.462	21.530	8568237	Phenylethanol	550.744	18.927	5672	0.021	0.000	0	0.887	1.128
6512	PEAK	21.496	21.462	21.530	8568196	Phenylethanol	518.295	19.967	5632	0.021	0.000	0	0.887	1.128
6512	PEAK	21.496	21.462	21.530	8568170	Phenylethanol	551.166	20.011	5552	0.021	0.000	0	0.887	1.128
6516	PEAK	21.496	21.462	21.530	8469832	Phenylethanol	517.397	17.486	5668	0.023	0.000	0	0.833	1.200
6516	PEAK	21.496	21.462	21.530	8469817	Phenylethanol	526.416	17.800	5633	0.023	0.000	0	0.833	1.200
6516	PEAK	21.496	21.466	21.530	8371682	Phenylethanol	522.117	17.696	5599	0.023	0.000	0	0.829	1.207
6505	PEAK	21.515	21.481	21.556	8520178	Phenylethanol	537.097	20.444	5635	0.022	0.000	0	0.864	1.158
6505	PEAK	21.515	21.481	21.556	8520156	Phenylethanol	540.444	23.064	5594	0.022	0.000	0	0.864	1.158
6505	PEAK	21.515	21.481	21.556	8520143	Phenylethanol	636.372	23.302	5558	0.022	0.000	0	0.864	1.158

Anhang 2 (Fortsetzung): Teil 2: Flächenangaben der Peaks – Kakaoproben

- Inokulierte Fermentation, Tag 5

Kakao	Type	RT (min)	Start RT	Stop RT	Area	Name	S/N	Area Perci	Scan# at Peal	Width	RRT (min)	Rt	Leading	Tailing
6479	PEAK	1.216	1.186	1.253	11421381	Ethylacetat	898.802	24.541	272	0.017	0.000	0	0.936	1.068
6479	PEAK	1.216	1.190	1.250	11039788	Ethylacetat	789.650	23.798	263	0.017	0.000	0	0.950	1.053
6479	PEAK	1.216	1.190	1.253	11313768	Ethylacetat	857.490	24.293	256	0.018	0.000	0	0.945	1.058
6464	PEAK	1.220	1.193	1.253	33125897	Ethylacetat	1.562.087	53.215	284	0.015	0.000	0	1.093	0.915
6464	PEAK	1.220	1.190	1.250	33180974	Ethylacetat	1.472.836	53.853	270	0.016	0.000	0	1.037	0.964
6464	PEAK	1.220	1.190	1.250	33191493	Ethylacetat	1.418.636	51.311	266	0.016	0.000	0	1.012	0.989
6474	PEAK	1.220	1.190	1.261	26066515	Ethylacetat	1.786.442	41.412	280	0.018	0.000	0	1.081	0.925
6474	PEAK	1.220	1.182	1.257	25389651	Ethylacetat	1.735.371	40.912	270	0.018	0.000	0	1.092	0.915
6474	PEAK	1.220	1.190	1.261	26108425	Ethylacetat	1.930.430	40.123	248	0.019	0.000	0	1.099	0.910
6475	PEAK	1.220	1.190	1.261	25841424	Ethylacetat	1.963.696	39.701	279	0.018	0.000	0	1.032	0.969
6475	PEAK	1.220	1.190	1.261	25825468	Ethylacetat	1.786.577	39.257	271	0.018	0.000	0	1.019	0.981
6475	PEAK	1.220	1.186	1.257	25687229	Ethylacetat	2.101.436	39.343	265	0.019	0.000	0	1.021	0.979
6478	PEAK	1.220	1.193	1.257	12178345	Ethylacetat	986.500	27.224	285	0.017	0.000	0	1.012	0.988
6478	PEAK	1.220	1.193	1.253	11924289	Ethylacetat	971.499	26.848	273	0.018	0.000	0	1.050	0.952
6478	PEAK	1.220	1.190	1.253	12073439	Ethylacetat	945.562	26.931	255	0.018	0.000	0	1.053	0.950
6468	PEAK	1.223	1.193	1.265	36495729	Ethylacetat	2.338.054	38.573	274	0.020	0.000	0	1.267	0.789
6468	PEAK	1.223	1.197	1.268	36232716	Ethylacetat	2.394.152	38.416	265	0.020	0.000	0	1.201	0.832
6468	PEAK	1.223	1.193	1.261	35819850	Ethylacetat	2.277.389	38.298	255	0.020	0.000	0	1.189	0.841
6464	PEAK	1.804	1.771	1.849	611685	Pentanon	14.865	0.983	440	0.027	0.000	0	0.821	1.218
6464	PEAK	1.804	1.771	1.849	616812	Pentanon	14.308	1.055	431	0.029	0.000	0	0.683	1.465
6464	PEAK	1.804	1.771	1.849	614046	Pentanon	14.253	0.949	422	0.030	0.000	0	0.668	1.496
6475	PEAK	1.804	1.767	1.842	847149	Pentanon	38.518	1.288	427	0.030	0.000	0	0.904	1.106
6475	PEAK	1.804	1.767	1.842	847113	Pentanon	45.674	1.297	421	0.030	0.000	0	0.919	1.088
6474	PEAK	1.808	1.771	1.842	766604	Pentanon	33.989	1.218	437	0.029	0.000	0	0.912	1.096
6474	PEAK	1.808	1.771	1.842	765543	Pentanon	33.434	1.234	427	0.029	0.000	0	0.883	1.133
6474	PEAK	1.808	1.771	1.842	766450	Pentanon	33.583	1.204	413	0.029	0.000	0	0.887	1.127
6475	PEAK	1.808	1.767	1.842	849263	Pentanon	41.073	1.279	442	0.029	0.000	0	0.868	1.152
6479	PEAK	1.808	1.771	1.834	438440	Pentanon	24.310	0.942	430	0.027	0.000	0	1.452	0.689
6479	PEAK	1.808	1.771	1.834	437969	Pentanon	21.761	0.944	421	0.027	0.000	0	1.435	0.697
6479	PEAK	1.808	1.771	1.834	437604	Pentanon	23.681	0.940	414	0.027	0.000	0	1.427	0.701
6478	PEAK	1.812	1.774	1.842	438617	Pentanon	23.585	0.988	431	0.029	0.000	0	1.122	0.891
6478	PEAK	1.812	1.771	1.842	443995	Pentanon	25.036	0.997	424	0.029	0.000	0	1.172	0.853
6478	PEAK	1.812	1.774	1.842	440444	Pentanon	23.207	0.982	413	0.029	0.000	0	1.201	0.833
6468	PEAK	1.816	1.774	1.853	922461	Pentanon	39.169	0.975	432	0.030	0.000	0	0.892	0.921
6468	PEAK	1.816	1.771	1.853	921179	Pentanon	40.602	0.977	423	0.030	0.000	0	0.895	1.118
6468	PEAK	1.816	1.774	1.853	921682	Pentanon	38.872	0.985	413	0.030	0.000	0	0.914	1.094
6464	PEAK	3.120	3.075	3.161	1395336	Pentylacetat	37.073	2.242	791	0.027	0.000	0	0.951	1.052
6464	PEAK	3.120	3.075	3.165	1402569	Pentylacetat	35.557	2.400	782	0.027	0.000	0	0.959	1.043
6464	PEAK	3.120	3.079	3.161	1370472	Pentylacetat	35.840	2.224	777	0.027	0.000	0	0.919	1.089
6475	PEAK	3.120	3.079	3.161	2514788	Pentylacetat	133.352	3.864	786	0.028	0.000	0	0.971	1.030
6475	PEAK	3.120	3.079	3.161	2514868	Pentylacetat	122.317	3.823	778	0.028	0.000	0	0.964	1.038
6475	PEAK	3.120	3.079	3.161	2513904	Pentylacetat	144.930	3.850	772	0.028	0.000	0	0.957	1.044
6479	PEAK	3.120	3.079	3.158	2141616	Pentylacetat	113.258	4.550	789	0.028	0.000	0	0.875	1.142
6479	PEAK	3.120	3.079	3.158	2143267	Pentylacetat	101.101	4.620	771	0.028	0.000	0	0.902	1.108
6479	PEAK	3.120	3.079	3.158	2144251	Pentylacetat	110.144	4.604	764	0.028	0.000	0	0.915	1.093
6474	PEAK	3.124	3.079	3.165	2507652	Pentylacetat	116.516	3.984	788	0.028	0.000	0	0.978	1.023
6474	PEAK	3.124	3.083	3.169	2550424	Pentylacetat	116.167	4.110	778	0.029	0.000	0	0.929	1.077
6474	PEAK	3.124	3.086	3.173	2563118	Pentylacetat	116.399	4.027	764	0.029	0.000	0	0.901	1.109
6478	PEAK	3.128	3.086	3.173	1981288	Pentylacetat	100.665	4.461	782	0.028	0.000	0	0.870	1.150
6478	PEAK	3.128	3.086	3.173	1980845	Pentylacetat	106.642	4.447	775	0.028	0.000	0	0.878	1.139
6478	PEAK	3.128	3.086	3.169	1932682	Pentylacetat	98.288	4.311	764	0.028	0.000	0	0.888	1.126
6468	PEAK	3.139	3.098	3.188	2245671	Pentylacetat	100.976	2.373	785	0.028	0.000	0	0.920	1.087
6468	PEAK	3.139	3.098	3.188	2245880	Pentylacetat	104.637	2.381	776	0.028	0.000	0	0.918	1.089
6468	PEAK	3.139	3.098	3.188	2245850	Pentylacetat	100.066	2.401	766	0.028	0.000	0	0.921	1.086
6468	PEAK	3.697	3.660	3.731	159977	β -Pinen	6.862	0.173	941	0.030	0.000	0	0.776	1.289
6468	PEAK	3.697	3.645	3.731	154452	β -Pinen	6.687	0.164	920	0.031	0.000	0	0.891	1.122
6468	PEAK	3.697	3.660	3.735	161596	β -Pinen	6.475	0.173	905	0.032	0.000	0	0.894	1.118
6479	PEAK	3.698	3.664	3.728	158193	β -Pinen	9.254	0.336	943	0.024	0.000	0	1.219	0.820
6479	PEAK	3.698	3.664	3.728	158153	β -Pinen	9.361	0.340	934	0.024	0.000	0	1.174	0.852
6479	PEAK	3.698	3.664	3.728	159415	β -Pinen	9.201	0.342	916	0.025	0.000	0	1.127	0.887
6464	PEAK	3.724	3.683	3.773	314772	β -Pinen	7.105	0.506	950	0.030	0.000	0	0.519	1.927
6464	PEAK	3.724	3.675	3.769	322300	β -Pinen	6.945	0.551	938	0.030	0.000	0	0.642	1.558
6464	PEAK	3.724	3.675	3.769	318932	β -Pinen	7.009	0.518	928	0.030	0.000	0	0.642	1.558
6475	PEAK	3.724	3.679	3.787	653560	β -Pinen	25.209	0.985	953	0.037	0.000	0	0.782	1.278
6475	PEAK	3.724	3.679	3.787	649979	β -Pinen	23.643	0.988	936	0.038	0.000	0	0.764	1.309
6475	PEAK	3.724	3.679	3.787	649879	β -Pinen	28.018	0.995	924	0.038	0.000	0	0.752	1.329
6474	PEAK	3.731	3.679	3.791	685151	β -Pinen	21.405	1.089	950	0.040	0.000	0	1.026	0.974
6474	PEAK	3.735	3.679	3.791	685924	β -Pinen	21.397	1.078	922	0.041	0.000	0	0.995	1.005
6474	PEAK	3.735	3.679	3.795	698088	β -Pinen	24.127	1.073	908	0.041	0.000	0	0.963	1.038
6478	PEAK	3.772	3.739	3.825	199813	β -Pinen	9.001	0.449	942	0.035	0.000	0	0.693	1.443
6478	PEAK	3.776	3.739	3.821	189019	β -Pinen	8.325	0.423	967	0.033	0.000	0	0.757	1.321
6478	PEAK	3.776	3.739	3.821	188589	β -Pinen	8.263	0.425	955	0.033	0.000	0	0.732	1.366
6479	PEAK	4.372	4.335	4.406	1161152	Pentanol	60.852	2.495	1102	0.028	0.000	0	1.055	0.948
6479	PEAK	4.372	4.335	4.410	1234090	Pentanol	56.280	2.660	1086	0.029	0.000	0	1.024	0.977
6479	PEAK	4.372	4.339	4.406	1135126	Pentanol	58.933	2.437	1070	0.028	0.000	0	1.043	0.959
6475	PEAK	4.387	4.342	4.432	1846198	Pentanol	87.945	2.781	1129	0.031	0.000	0	0.999	1.001
6475	PEAK	4.387	4.342	4.432	1837676	Pentanol	82.414	2.793	1098	0.031	0.000	0	1.037	0.964
6475	PEAK	4.387	4.342	4.432	1835569	Pentanol	97.653	2.811	1080	0.031	0.000	0	1.036	0.966
6464	PEAK	4.395	4.354	4.436	1232967	Pentanol	30.628	1.981	1126	0.030	0.000	0	1.016	0.984
6464	PEAK	4.395	4.350	4.436	1249423	Pentanol	29.688	2.138	1113	0.030	0.000	0	1.047	0.958
6464	PEAK	4.395	4.350	4.436	1246491	Pentanol	30.054	2.023	1103	0.030	0.000	0	1.021	0.979
6474	PEAK	4.402	4.361	4.443	1654734	Pentanol	72.526	2.629	1122	0.030	0.000	0	1.081	0.925
6474	PEAK	4.402	4.365	4.443	1604642	Pentanol	70.808	2.521	1078					

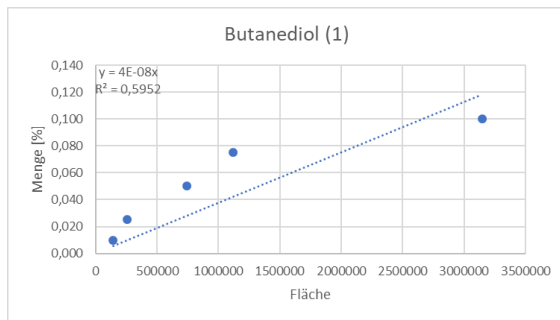
Anhang 2 (Fortsetzung): Teil 2: Flächenangaben der Peaks – Kakaoproben

- Inokulierte Fermentation, Tag 5 (Fortsetzung)

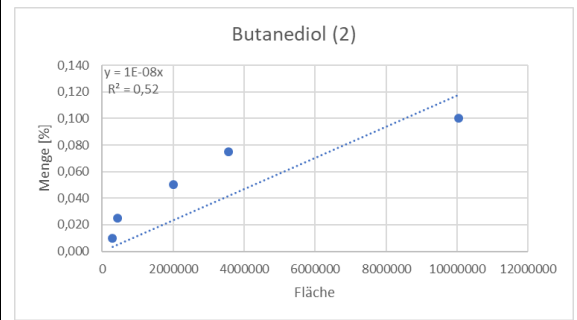
Kakao	Type	RT (min)	Start RT	Stop RT	Area	Name	S/N	Area Perci	Scan# at Peak	Width	RRT (min)	Rt	Leading	Tailing
6479	PEAK	6.835	6.749	6.925	1767710	Isoamylalkohol	45.272	3.798	1756	0.052	0.000	0	1.019	0.981
6479	PEAK	6.835	6.753	6.925	1757094	Isoamylalkohol	40.543	3.788	1736	0.053	0.000	0	1.009	0.991
6479	PEAK	6.835	6.749	6.925	1763713	Isoamylalkohol	44.339	3.787	1716	0.054	0.000	0	0.994	1.006
6475	PEAK	6.839	6.749	6.929	1998558	Isoamylalkohol	50.589	3.011	1780	0.051	0.000	0	1.200	0.833
6475	PEAK	6.839	6.749	6.929	1993158	Isoamylalkohol	51.778	3.062	1764	0.052	0.000	0	1.109	0.902
6475	PEAK	6.839	6.753	6.929	1971488	Isoamylalkohol	56.174	3.020	1718	0.052	0.000	0	1.082	0.924
6464	PEAK	6.846	6.768	6.936	1103587	Isoamylalkohol	15.120	1.773	1779	0.038	0.000	0	0.961	1.040
6464	PEAK	6.846	6.771	6.936	1096974	Isoamylalkohol	14.426	1.877	1764	0.040	0.000	0	0.968	1.033
6464	PEAK	6.846	6.768	6.936	1107637	Isoamylalkohol	14.662	1.798	1751	0.042	0.000	0	0.889	1.125
6474	PEAK	6.850	6.768	6.955	1910575	Isoamylalkohol	42.938	3.079	1749	0.048	0.000	0	1.274	0.785
6474	PEAK	6.850	6.764	6.959	1962154	Isoamylalkohol	43.570	3.083	1721	0.050	0.000	0	1.250	0.800
6474	PEAK	6.850	6.768	6.959	1946082	Isoamylalkohol	48.596	2.991	1699	0.050	0.000	0	1.245	0.803
6478	PEAK	6.861	6.768	6.962	1693729	Isoamylalkohol	44.844	3.813	1759	0.049	0.000	0	1.139	0.878
6478	PEAK	6.861	6.771	6.962	1678876	Isoamylalkohol	47.415	3.769	1739	0.049	0.000	0	1.117	0.895
6478	PEAK	6.861	6.771	6.962	1677442	Isoamylalkohol	44.095	3.742	1712	0.049	0.000	0	1.123	0.890
6468	PEAK	6.887	6.798	7.000	2330568	Isoamylalkohol	53.998	2.463	1764	0.047	0.000	0	1.457	0.686
6468	PEAK	6.887	6.794	7.000	2352165	Isoamylalkohol	56.202	2.494	1745	0.048	0.000	0	1.425	0.702
6468	PEAK	6.887	6.794	7.000	2350620	Isoamylalkohol	53.849	2.513	1718	0.048	0.000	0	1.420	0.704
6479	PEAK	15.749	15.697	15.779	10067327	Butanediol(1)	508.752	21.631	4112	0.029	0.000	0	2.292	0.436
6479	PEAK	15.749	15.697	15.779	10066421	Butanediol(1)	456.756	21.699	4079	0.029	0.000	0	2.292	0.436
6479	PEAK	15.749	15.697	15.779	10066051	Butanediol(1)	498.494	21.614	4045	0.029	0.000	0	2.292	0.436
6475	PEAK	15.757	15.697	15.779	11652099	Butanediol(1)	571.697	17.553	4150	0.030	0.000	0	3.131	0.319
6475	PEAK	15.757	15.697	15.779	11651061	Butanediol(1)	586.127	17.900	4127	0.030	0.000	0	3.131	0.319
6475	PEAK	15.757	15.689	15.779	11815361	Butanediol(1)	641.417	18.097	4056	0.030	0.000	0	3.152	0.317
6478	PEAK	15.757	15.701	15.787	9764825	Butanediol(1)	489.224	21.829	4150	0.028	0.000	0	2.435	0.411
6478	PEAK	15.757	15.701	15.787	9763296	Butanediol(1)	521.316	21.917	4082	0.028	0.000	0	2.435	0.411
6478	PEAK	15.757	15.701	15.787	9762599	Butanediol(1)	485.791	21.777	4044	0.028	0.000	0	2.435	0.411
6464	PEAK	15.761	15.701	15.783	11221232	Butanediol(1)	295.176	18.026	4152	0.027	0.000	0	2.607	0.384
6464	PEAK	15.761	15.701	15.783	11219844	Butanediol(1)	288.896	18.210	4106	0.027	0.000	0	2.607	0.384
6464	PEAK	15.761	15.701	15.783	11219817	Butanediol(1)	282.301	17.345	4085	0.027	0.000	0	2.607	0.384
6474	PEAK	15.761	15.701	15.783	11221668	Butanediol(1)	495.696	17.828	4138	0.030	0.000	0	2.710	0.369
6474	PEAK	15.761	15.701	15.783	11220234	Butanediol(1)	492.686	17.629	4063	0.030	0.000	0	2.710	0.369
6474	PEAK	15.761	15.701	15.783	11219736	Butanediol(1)	551.017	17.242	4025	0.030	0.000	0	2.710	0.369
6468	PEAK	15.787	15.719	15.809	20521371	Butanediol(1)	866.078	22.249	4143	0.031	0.000	0	3.440	0.291
6468	PEAK	15.787	15.719	15.809	20520164	Butanediol(1)	844.539	21.688	4116	0.031	0.000	0	3.440	0.291
6468	PEAK	15.787	15.719	15.809	20517945	Butanediol(1)	839.204	21.937	4044	0.031	0.000	0	3.440	0.291
6464	PEAK	16.507	16.477	16.525	7458064	Butanediol(2)	309.148	100.000	4323	0.017	0.000	0	1.964	0.509
6464	PEAK	16.507	16.477	16.525	7457921	Butanediol(2)	319.354	100.000	4302	0.017	0.000	0	1.964	0.509
6464	PEAK	16.507	16.477	16.525	7457765	Butanediol(2)	317.874	100.000	4282	0.017	0.000	0	1.964	0.509
6474	PEAK	16.507	16.480	16.525	5908302	Butanediol(2)	431.193	49.732	4337	0.018	0.000	0	2.126	0.470
6474	PEAK	16.507	16.480	16.525	5908259	Butanediol(2)	479.352	100.000	4224	0.018	0.000	0	2.126	0.470
6474	PEAK	16.507	16.480	16.525	5908268	Butanediol(2)	417.339	100.000	4086	0.018	0.000	0	2.126	0.470
6475	PEAK	16.507	16.477	16.525	6075811	Butanediol(2)	479.603	100.000	4350	0.019	0.000	0	2.317	0.432
6475	PEAK	16.507	16.477	16.522	6021497	Butanediol(2)	489.092	100.000	4327	0.019	0.000	0	2.330	0.429
6475	PEAK	16.507	16.477	16.525	6075747	Butanediol(2)	451.844	100.000	4288	0.019	0.000	0	2.317	0.432
6479	PEAK	16.507	16.477	16.525	6628377	Butanediol(2)	553.615	50.325	4345	0.019	0.000	0	2.315	0.432
6479	PEAK	16.507	16.477	16.525	6628325	Butanediol(2)	553.473	100.000	4314	0.019	0.000	0	2.315	0.432
6479	PEAK	16.507	16.477	16.525	6628301	Butanediol(2)	496.933	100.000	4281	0.019	0.000	0	2.315	0.432
6478	PEAK	16.510	16.480	16.529	5925172	Butanediol(2)	496.224	100.000	4351	0.018	0.000	0	2.542	0.393
6478	PEAK	16.510	16.480	16.525	5984382	Butanediol(2)	501.630	100.000	4315	0.018	0.000	0	2.523	0.396
6478	PEAK	16.510	16.480	16.525	5984353	Butanediol(2)	532.567	100.000	4283	0.018	0.000	0	2.523	0.396
6468	PEAK	16.533	16.503	16.551	10733204	Butanediol(2)	777.148	50.401	4342	0.019	0.000	0	2.491	0.401
6468	PEAK	16.533	16.503	16.551	10733145	Butanediol(2)	786.202	100.000	4283	0.019	0.000	0	2.491	0.401
6468	PEAK	16.533	16.503	16.551	10733116	Butanediol(2)	753.086	51.067	4243	0.019	0.000	0	2.491	0.401
6475	PEAK	21.504	21.474	21.541	9570588	Phenylethanol	629.430	14.704	5648	0.021	0.000	0	0.970	1.031
6475	PEAK	21.504	21.470	21.541	9685471	Phenylethanol	581.244	14.723	5599	0.021	0.000	0	0.974	1.026
6475	PEAK	21.504	21.470	21.541	9685477	Phenylethanol	690.064	14.835	5561	0.021	0.000	0	0.974	1.026
6464	PEAK	21.507	21.474	21.541	3714346	Phenylethanol	123.912	6.355	5653	0.021	0.000	0	0.928	1.077
6464	PEAK	21.507	21.474	21.541	3714317	Phenylethanol	125.860	6.028	5624	0.021	0.000	0	0.928	1.077
6464	PEAK	21.507	21.474	21.541	3714315	Phenylethanol	122.989	5.742	5598	0.021	0.000	0	0.928	1.077
6474	PEAK	21.507	21.473	21.545	9085017	Phenylethanol	544.851	14.433	5665	0.021	0.000	0	0.986	1.014
6474	PEAK	21.507	21.473	21.545	9085010	Phenylethanol	539.560	14.639	5623	0.021	0.000	0	0.986	1.014
6474	PEAK	21.507	21.473	21.545	9084944	Phenylethanol	605.704	13.962	5530	0.021	0.000	0	0.986	1.014
6479	PEAK	21.507	21.474	21.541	8926551	Phenylethanol	596.303	18.965	5676	0.022	0.000	0	1.111	0.900
6479	PEAK	21.507	21.474	21.541	8926472	Phenylethanol	535.251	19.242	5600	0.022	0.000	0	1.111	0.900
6479	PEAK	21.507	21.474	21.541	8926472	Phenylethanol	584.173	19.167	5559	0.022	0.000	0	1.111	0.900
6478	PEAK	21.511	21.473	21.545	8540048	Phenylethanol	548.405	19.228	5641	0.022	0.000	0	0.916	1.092
6478	PEAK	21.511	21.473	21.545	8540018	Phenylethanol	582.227	19.171	5604	0.022	0.000	0	0.916	1.092
6478	PEAK	21.511	21.477	21.545	8460625	Phenylethanol	540.587	18.872	5559	0.022	0.000	0	0.913	1.095
6468	PEAK	21.522	21.485	21.563	13245228	Phenylethanol	767.933	13.999	5633	0.021	0.000	0	0.927	1.079
6468	PEAK	21.522	21.485	21.560	12978817	Phenylethanol	791.047	13.761	5595	0.021	0.000	0	0.934	1.071
6468	PEAK	21.522	21.488	21.556	12556096	Phenylethanol	748.273	13.425	5543	0.021	0.000	0	0.939	1.065

Anhang 3: Kalibriergeraden der Standards

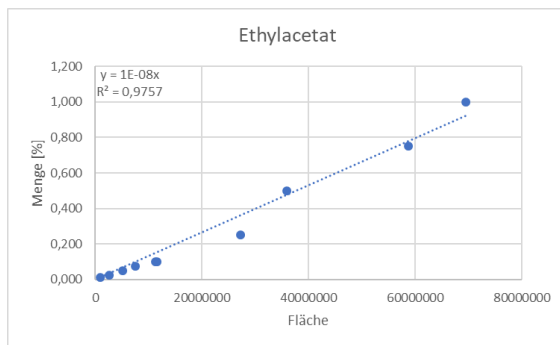
Butandiol (RT 15,8)



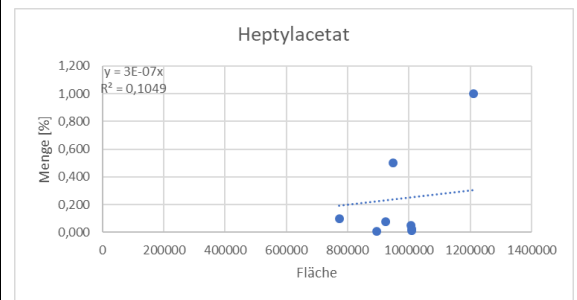
Butandiol (RT 16,5)



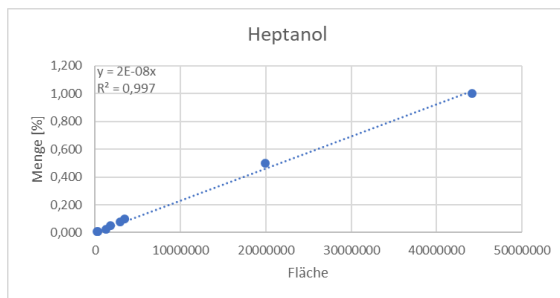
Ethylacetat



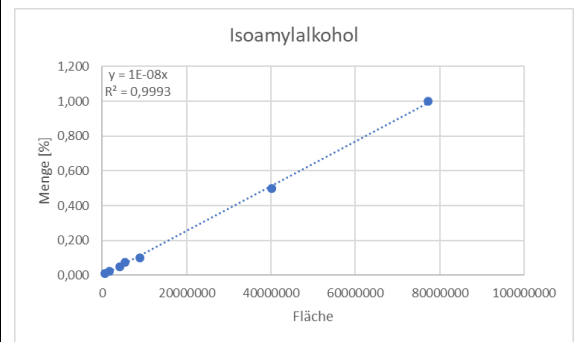
Heptylacetat



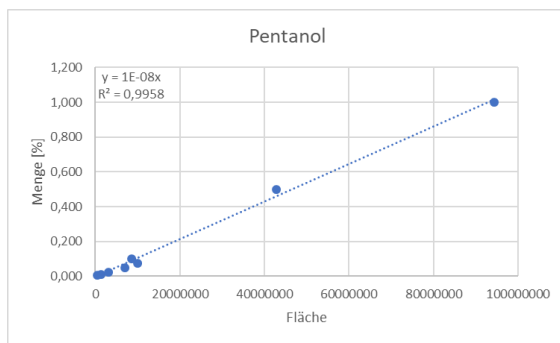
Heptanol



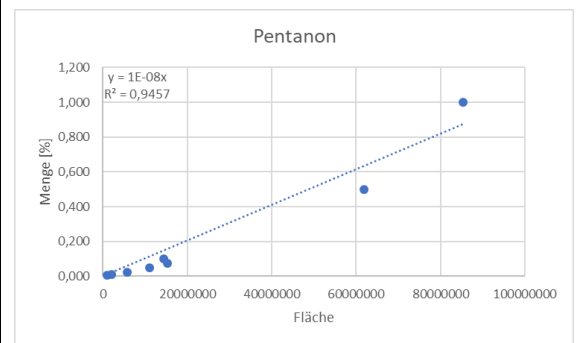
Isoamylalkohol



Pentanol

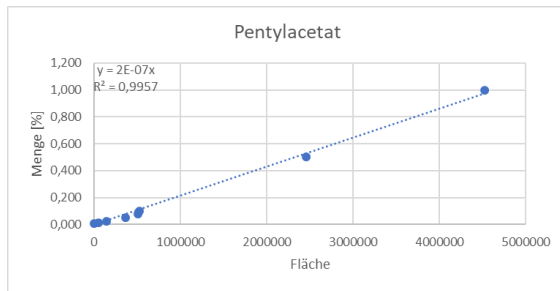


Pentanon

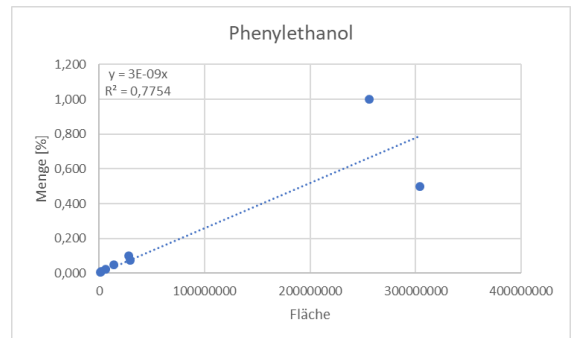


Anhang 3 (Fortsetzung): Kalibriergeraden der Standards

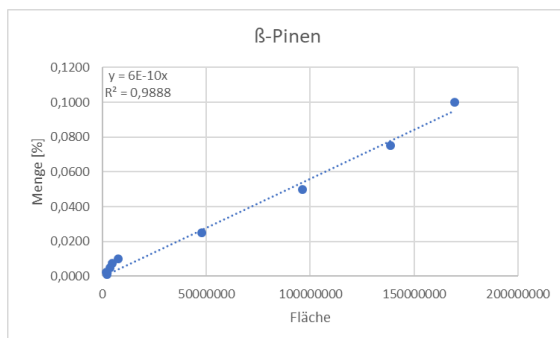
Pentylacetat



Phenylethanol



β -Pinen



Anhang 4: Signifikanztest

Teil 1: Shapiro-Wilk Test

Tests auf Normalverteilung							
Kakao		Kolmogorov-Smirnov ^a			Shapiro-Wilk		
		Statistik	df	Signifikanz	Statistik	df	Signifikanz
Butandiol_15.8	natürlich_Tag1	0,195	6	,200 [*]	0,901	6	0,382
	natürlich_Tag3	0,350	6	0,021	0,767	6	0,029
	natürlich_Tag5	0,290	6	0,126	0,829	6	0,106
	inokuliert_Tag1	0,227	6	,200 [*]	0,923	6	0,530
	inokuliert_Tag3	0,275	6	0,176	0,837	6	0,123
	inokuliert_Tag5	0,400	6	0,003	0,674	6	0,003
Butandiol_16.5	natürlich_Tag1	0,203	6	,200 [*]	0,928	6	0,566
	natürlich_Tag3	0,353	6	0,018	0,832	6	0,111
	natürlich_Tag5	0,176	6	,200 [*]	0,911	6	0,444
	inokuliert_Tag1	0,292	6	0,120	0,880	6	0,268
	inokuliert_Tag3	0,157	6	,200 [*]	0,979	6	0,945
	inokuliert_Tag5	0,279	6	0,157	0,732	6	0,013
Ethylacetat_1.2	natürlich_Tag1	0,253	6	,200 [*]	0,864	6	0,203
	natürlich_Tag3	0,197	6	,200 [*]	0,933	6	0,600
	natürlich_Tag5	0,290	6	0,125	0,854	6	0,169
	inokuliert_Tag1	0,214	6	,200 [*]	0,932	6	0,594
	inokuliert_Tag3	0,313	6	0,068	0,764	6	0,028
	inokuliert_Tag5	0,234	6	,200 [*]	0,885	6	0,295
Isoamylalkohol_6.8	natürlich_Tag1	0,252	6	,200 [*]	0,915	6	0,473
	natürlich_Tag3	0,250	6	,200 [*]	0,886	6	0,299
	natürlich_Tag5	0,216	6	,200 [*]	0,865	6	0,206
	inokuliert_Tag1	0,276	6	0,171	0,713	6	0,008
	inokuliert_Tag3	0,249	6	,200 [*]	0,836	6	0,120
	inokuliert_Tag5	0,210	6	,200 [*]	0,955	6	0,781
Pentanol_4.4	natürlich_Tag1	0,172	6	,200 [*]	0,950	6	0,737
	natürlich_Tag3	0,127	6	,200 [*]	0,993	6	0,995
	natürlich_Tag5	0,240	6	,200 [*]	0,839	6	0,127
	inokuliert_Tag1	0,293	6	0,117	0,782	6	0,040
	inokuliert_Tag3	0,157	6	,200 [*]	0,957	6	0,796
	inokuliert_Tag5	0,258	6	,200 [*]	0,893	6	0,334
Pentanon_1.8	natürlich_Tag1	0,186	6	,200 [*]	0,939	6	0,654
	natürlich_Tag3	0,174	6	,200 [*]	0,927	6	0,558
	natürlich_Tag5	0,242	6	,200 [*]	0,922	6	0,521
	inokuliert_Tag1	0,262	6	,200 [*]	0,892	6	0,330
	inokuliert_Tag3	0,296	6	0,110	0,848	6	0,151
	inokuliert_Tag5	0,202	6	,200 [*]	0,900	6	0,373

...

Anhang 4: Signifikanztest

Teil 1: Shapiro-Wilk Test (Fortsetzung)

Tests auf Normalverteilung							
Kakao		Kolmogorov-Smirnov ^a			Shapiro-Wilk		
		Statistik	df	Signifikanz	Statistik	df	Signifikanz
Pentylacetat_3.1	natürlich_Tag1	0,365	6	0,012	0,755	6	0,022
	natürlich_Tag3	0,194	6	,200 [*]	0,965	6	0,857
	natürlich_Tag5	0,189	6	,200 [*]	0,901	6	0,379
	inokuliert_Tag1	0,229	6	,200 [*]	0,960	6	0,819
	inokuliert_Tag3	0,303	6	0,091	0,816	6	0,082
	inokuliert_Tag5	0,171	6	,200 [*]	0,909	6	0,427
Phenylethanol_21.5	natürlich_Tag1	0,331	6	0,039	0,795	6	0,052
	natürlich_Tag3	0,378	6	0,008	0,751	6	0,020
	natürlich_Tag5	0,267	6	,200 [*]	0,865	6	0,206
	inokuliert_Tag1	0,260	6	,200 [*]	0,894	6	0,338
	inokuliert_Tag3	0,279	6	0,160	0,904	6	0,399
	inokuliert_Tag5	0,288	6	0,131	0,901	6	0,380
Pinen_3.6	natürlich_Tag1	0,201	6	,200 [*]	0,928	6	0,563
	natürlich_Tag3	0,333	6	0,036	0,827	6	0,101
	natürlich_Tag5	0,261	6	,200 [*]	0,871	6	0,231
	inokuliert_Tag1	0,324	6	0,049	0,850	6	0,156
	inokuliert_Tag3	0,236	6	,200 [*]	0,860	6	0,189
	inokuliert_Tag5	0,255	6	,200 [*]	0,791	6	0,049

*. Dies ist eine untere Grenze der echten Signifikanz.

a. Signifikanzkorrektur nach Lilliefors

Anhang 4: Signifikanztest

Teil 2: Levene Test

Test der Homogenität der Varianzen					
Kakao		Levene-Statistik	df1	df2	Signifikanz
Butandiol_15.8	Basiert auf dem Mittelwert	15,203	5	30	0,000
	Basiert auf dem Median	4,230	5	30	0,005
	Basierend auf dem Median und mit angepaßten df	4,230	5	7,640	0,038
	Basiert auf dem getrimmten Mittel	13,312	5	30	0,000
Butandiol_16.5	Basiert auf dem Mittelwert	7,756	5	30	0,000
	Basiert auf dem Median	4,922	5	30	0,002
	Basierend auf dem Median und mit angepaßten df	4,922	5	10,490	0,014
	Basiert auf dem getrimmten Mittel	7,222	5	30	0,000
Ethylacetat_1.2	Basiert auf dem Mittelwert	9,765	5	30	0,000
	Basiert auf dem Median	6,041	5	30	0,001
	Basierend auf dem Median und mit angepaßten df	6,041	5	13,618	0,004
	Basiert auf dem getrimmten Mittel	9,348	5	30	0,000
Isoamylalkohol_6.8	Basiert auf dem Mittelwert	5,106	5	30	0,002
	Basiert auf dem Median	3,281	5	30	0,018
	Basierend auf dem Median und mit angepaßten df	3,281	5	15,927	0,032
	Basiert auf dem getrimmten Mittel	4,912	5	30	0,002
Pentanol_4.4	Basiert auf dem Mittelwert	2,415	5	30	0,059
	Basiert auf dem Median	1,486	5	30	0,224
	Basierend auf dem Median und mit angepaßten df	1,486	5	12,039	0,265
	Basiert auf dem getrimmten Mittel	2,178	5	30	0,083
Pentanon_1.8	Basiert auf dem Mittelwert	7,106	5	30	0,000
	Basiert auf dem Median	5,391	5	30	0,001
	Basierend auf dem Median und mit angepaßten df	5,391	5	9,068	0,014
	Basiert auf dem getrimmten Mittel	7,003	5	30	0,000

...

Anhang 4: Signifikanztest

Teil 2: Levene Test (Fortsetzung)

Test der Homogenität der Varianzen					
Kakao		Levene-Statistik	df1	df2	Signifikanz
Pentylacetat_3.1	Basiert auf dem Mittelwert	7,221	5	30	0,000
	Basiert auf dem Median	5,275	5	30	0,001
	Basierend auf dem Median und mit angepaßten df	5,275	5	12,981	0,007
	Basiert auf dem getrimmten Mittel	7,038	5	30	0,000
Phenylethanol_21.5	Basiert auf dem Mittelwert	13,393	5	30	0,000
	Basiert auf dem Median	10,114	5	30	0,000
	Basierend auf dem Median und mit angepaßten df	10,114	5	17,010	0,000
	Basiert auf dem getrimmten Mittel	13,106	5	30	0,000
Pinen_3.6	Basiert auf dem Mittelwert	5,125	5	30	0,002
	Basiert auf dem Median	1,719	5	30	0,161
	Basierend auf dem Median und mit angepaßten df	1,719	5	14,142	0,194
	Basiert auf dem getrimmten Mittel	4,510	5	30	0,003

Anhang 4: Signifikanztest

Teil 3: Kruskal-Wallis Test

Statistik für Test ^{a,b}									
	Butandiol_15.8	Butandiol_16.5	Ethylacetat_1.2	Isoamylalkohol_6.8	Pentanol_4.4	Pentanon_1.8	Pentylacetat_3.1	Phenylethanol_21.5	Pinen_3.6
Kruskal-Wallis H	28,688	26,383	26,604	24,571	29,363	24,240	26,156	19,632	22,854
df	5	5	5	5	5	5	5	5	5
Asymptotische Signifikanz	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,001	0,000
a. Kruskal-Wallis-Test									
b. Gruppenvariable: Kakao									

Anhang 4: Signifikanztest

Teil 4: Post-hoc Test nach Bonferroni

Abhängige Variable			Mehrfachvergleiche						
			Test	Mittlere Differenz (I-J)	Std.-Fehler	Signifikanz	95%-Konfidenz-intervall		
							Untergrenze	Obergrenze	
Butandiol_15 8	natürlich_Tag1	natürlich_Tag3	Bonferroni	-0,25032833	0,09852320	0,247	-0,5644997	0,0638430	
		natürlich_Tag5	inokuliert_Tag1		-,51424833*	0,09852320	0,000	-0,8284197	-0,2000770
		inokuliert_Tag3	inokuliert_Tag5		-0,04522167	0,09852320	1,000	-0,3593930	0,2689497
		natürlich_Tag3	natürlich_Tag1		-,37009667*	0,09852320	0,011	-0,6842680	-0,0559253
		natürlich_Tag3	natürlich_Tag5		-,48057500*	0,09852320	0,000	-0,7947464	-0,1664036
		natürlich_Tag5	natürlich_Tag1		0,25032833	0,09852320	0,247	-0,0638430	0,5644997
	natürlich_Tag5	natürlich_Tag5		-0,26392000	0,09852320	0,178	-0,5780914	0,0502514	
	inokuliert_Tag1	inokuliert_Tag3		0,20510667	0,09852320	0,690	-0,1090647	0,5192780	
	inokuliert_Tag3	inokuliert_Tag5		-0,11976833	0,09852320	1,000	-0,4339397	0,1944030	
	inokuliert_Tag5	natürlich_Tag1		-0,23024667	0,09852320	0,395	-0,5444180	0,0839247	
	inokuliert_Tag5	natürlich_Tag3		,51424833*	0,09852320	0,000	0,2000770	0,8284197	
	inokuliert_Tag5	natürlich_Tag5		0,26392000	0,09852320	0,178	-0,0502514	0,5780914	
	inokuliert_Tag1	inokuliert_Tag1		,46902667*	0,09852320	0,001	0,1548553	0,7831980	
	inokuliert_Tag3	inokuliert_Tag3		0,14415167	0,09852320	1,000	-0,1700197	0,4583230	
	inokuliert_Tag5	inokuliert_Tag5		0,03367333	0,09852320	1,000	-0,2804980	0,3478447	
	inokuliert_Tag1	natürlich_Tag1		0,04522167	0,09852320	1,000	-0,2689497	0,3593930	
	inokuliert_Tag3	natürlich_Tag3		-0,20510667	0,09852320	0,690	-0,5192780	0,1090647	
	inokuliert_Tag5	natürlich_Tag5		-,46902667*	0,09852320	0,001	-0,7831980	-0,1548553	
	inokuliert_Tag1	inokuliert_Tag3		-,32487500*	0,09852320	0,038	-0,6390464	-0,0107036	
	inokuliert_Tag3	inokuliert_Tag5		-,43535333*	0,09852320	0,002	-0,7495247	-0,1211820	
	inokuliert_Tag5	natürlich_Tag1		,37009667*	0,09852320	0,011	0,0559253	0,6842680	
	inokuliert_Tag1	natürlich_Tag3		0,11976833	0,09852320	1,000	-0,1944030	0,4339397	
	inokuliert_Tag3	natürlich_Tag5		-0,14415167	0,09852320	1,000	-0,4583230	0,1700197	
	inokuliert_Tag5	inokuliert_Tag1		,32487500*	0,09852320	0,038	0,0107036	0,6390464	
	inokuliert_Tag1	inokuliert_Tag3		-0,11047833	0,09852320	1,000	-0,4246497	0,2036930	
	inokuliert_Tag3	inokuliert_Tag5		,48057500*	0,09852320	0,000	0,1664036	0,7947464	
	inokuliert_Tag5	natürlich_Tag1		0,23024667	0,09852320	0,395	-0,0839247	0,5444180	
	inokuliert_Tag3	natürlich_Tag3		-0,03367333	0,09852320	1,000	-0,3478447	0,2804980	
	inokuliert_Tag5	natürlich_Tag5		,43535333*	0,09852320	0,002	0,1211820	0,7495247	
	inokuliert_Tag1	inokuliert_Tag5		0,11047833	0,09852320	1,000	-0,2036930	0,4246497	

*. Die Differenz der Mittelwerte ist auf dem Niveau 0.05 signifikant.

Anhang 4: Signifikanztest

Teil 4: Post-hoc Test nach Bonferroni (Fortsetzung)

Abhängige Variable			Mehrfachvergleiche					
			Test	Mittlere Differenz (I-J)	Std.-Fehler	Signifikanz	95%-Konfidenz-intervall	
							Untergrenze	Obergrenze
Butandiol_16 5	natürlich_Tag1	natürlich_Tag3	Bonferroni	-,04546000*	0,00763829	0,000	-0,0698170	-0,0211030
		natürlich_Tag5		-,03455833*	0,00763829	0,001	-0,0589154	-0,0102013
		inokuliert_Tag1		-,02706667*	0,00763829	0,020	-0,0514237	-0,0027096
		inokuliert_Tag3		-,02921000*	0,00763829	0,009	-0,0535670	-0,0048530
		inokuliert_Tag5		-,06663167*	0,00763829	0,000	-0,0909887	-0,0422746
	natürlich_Tag3	natürlich_Tag1		,04546000*	0,00763829	0,000	0,0211030	0,0698170
		natürlich_Tag5		0,01090167	0,00763829	1,000	-0,0134554	0,0352587
		inokuliert_Tag1		0,01839333	0,00763829	0,336	-0,0059637	0,0427504
		inokuliert_Tag3		0,01625000	0,00763829	0,626	-0,0081070	0,0406070
		inokuliert_Tag5		-0,02117167	0,00763829	0,142	-0,0455287	0,0031854
	natürlich_Tag5	natürlich_Tag1		,03455833*	0,00763829	0,001	0,0102013	0,0589154
		natürlich_Tag3		-0,01090167	0,00763829	1,000	-0,0352587	0,0134554
		inokuliert_Tag1		0,00749167	0,00763829	1,000	-0,0168654	0,0318487
		inokuliert_Tag3		0,00534833	0,00763829	1,000	-0,0190087	0,0297054
		inokuliert_Tag5		-,03207333*	0,00763829	0,003	-0,0564304	-0,0077163
	inokuliert_Tag1	natürlich_Tag1		,02706667*	0,00763829	0,020	0,0027096	0,0514237
		natürlich_Tag3		-0,01839333	0,00763829	0,336	-0,0427504	0,0059637
		natürlich_Tag5		-0,00749167	0,00763829	1,000	-0,0318487	0,0168654
		inokuliert_Tag3		-0,00214333	0,00763829	1,000	-0,0265004	0,0222137
		inokuliert_Tag5		-,03956500*	0,00763829	0,000	-0,0639220	-0,0152080
	inokuliert_Tag3	natürlich_Tag1		,02921000*	0,00763829	0,009	0,0048530	0,0535670
		natürlich_Tag3		-0,01625000	0,00763829	0,626	-0,0406070	0,0081070
		natürlich_Tag5		-0,00534833	0,00763829	1,000	-0,0297054	0,0190087
		inokuliert_Tag1		0,00214333	0,00763829	1,000	-0,0222137	0,0265004
		inokuliert_Tag5		-,03742167*	0,00763829	0,000	-0,0617787	-0,0130646
	inokuliert_Tag5	natürlich_Tag1		,06663167*	0,00763829	0,000	0,0422746	0,0909887
		natürlich_Tag3		0,02117167	0,00763829	0,142	-0,0031854	0,0455287
		natürlich_Tag5		,03207333*	0,00763829	0,003	0,0077163	0,0564304
		inokuliert_Tag1		,03956500*	0,00763829	0,000	0,0152080	0,0639220
		inokuliert_Tag3		,03742167*	0,00763829	0,000	0,0130646	0,0617787

*. Die Differenz der Mittelwerte ist auf dem Niveau 0.05 signifikant.

Anhang 4: Signifikanztest

Teil 4: Post-hoc Test nach Bonferroni (Fortsetzung)

Abhängige Variable	Mehrfachvergleiche								
				Test	Mittlere Differenz (I-J)	Std.-Fehler	Signifikanz	95%-Konfidenzintervall	
								Untergrenze	Obergrenze
Ethylacetat_1.2	natürlich_Tag1	natürlich_Tag3	Bonferroni	-0,00650500	0,03881028	1,000	-0,1302634	0,1172534	
				natürlich_Tag5	-,15239000*	0,03881028	0,007	-0,2761484	-0,0286316
		inokuliert_Tag1			-0,00100500	0,03881028	1,000	-0,1247634	0,1227534
					inokuliert_Tag3	-,15181000*	0,03881028	0,007	-0,2755684
		inokuliert_Tag5		-,23868500*	0,03881028	0,000	-0,3624434	-0,1149266	
	natürlich_Tag3	natürlich_Tag1		0,00650500	0,03881028	1,000	-0,1172534	0,1302634	
				natürlich_Tag5	-,14588500*	0,03881028	0,011	-0,2696434	-0,0221266
		inokuliert_Tag1		0,00550000	0,03881028	1,000	-0,1182584	0,1292584	
				inokuliert_Tag3	-,14530500*	0,03881028	0,012	-0,2690634	-0,0215466
				inokuliert_Tag5	-,23218000*	0,03881028	0,000	-0,3559384	-0,1084216
	natürlich_Tag5	natürlich_Tag1		,15239000*	0,03881028	0,007	0,0286316	0,2761484	
				natürlich_Tag3	,14588500*	0,03881028	0,011	0,0221266	0,2696434
		inokuliert_Tag1		,15138500*	0,03881028	0,008	0,0276266	0,2751434	
				inokuliert_Tag3	0,00058000	0,03881028	1,000	-0,1231784	0,1243384
				inokuliert_Tag5	-0,08629500	0,03881028	0,508	-0,2100534	0,0374634
	inokuliert_Tag1	natürlich_Tag1		0,00100500	0,03881028	1,000	-0,1227534	0,1247634	
				natürlich_Tag3	-0,00550000	0,03881028	1,000	-0,1292584	0,1182584
		natürlich_Tag5		-,15138500*	0,03881028	0,008	-0,2751434	-0,0276266	
				inokuliert_Tag3	-,15080500*	0,03881028	0,008	-0,2745634	-0,0270466
				inokuliert_Tag5	-,23768000*	0,03881028	0,000	-0,3614384	-0,1139216
	inokuliert_Tag3	natürlich_Tag1		,15181000*	0,03881028	0,007	0,0280516	0,2755684	
				natürlich_Tag3	,14530500*	0,03881028	0,012	0,0215466	0,2690634
		natürlich_Tag5		-0,00058000	0,03881028	1,000	-0,1243384	0,1231784	
				inokuliert_Tag1	,15080500*	0,03881028	0,008	0,0270466	0,2745634
				inokuliert_Tag5	-0,08687500	0,03881028	0,491	-0,2106334	0,0368834
	inokuliert_Tag5	natürlich_Tag1		,23868500*	0,03881028	0,000	0,1149266	0,3624434	
				natürlich_Tag3	,23218000*	0,03881028	0,000	0,1084216	0,3559384
		natürlich_Tag5		0,08629500	0,03881028	0,508	-0,0374634	0,2100534	
				inokuliert_Tag1	,23768000*	0,03881028	0,000	0,1139216	0,3614384
				inokuliert_Tag3	0,08687500	0,03881028	0,491	-0,0368834	0,2106334

*. Die Differenz der Mittelwerte ist auf dem Niveau 0.05 signifikant.

Anhang 4: Signifikanztest

Teil 4: Post-hoc Test nach Bonferroni (Fortsetzung)

Abhängige Variable			Mehrfachvergleiche						
			Test	Mittlere Differenz (I-J)	Std.-Fehler	Signifikanz	95%-Konfidenzintervall		
							Untergrenze	Obergrenze	
Isoamylalkohol_6.8	natürlich_Tag1	natürlich_Tag3	Bonferroni	-,04227167*	0,00451262	0,000	-0,0566615	-0,0278818	
		natürlich_Tag5		,01578333*	0,00451262	0,022	0,0013935	0,0301732	
		inokuliert_Tag1		-0,00149500	0,00451262	1,000	-0,0158849	0,0128949	
		inokuliert_Tag3		0,00584500	0,00451262	1,000	-0,0085449	0,0202349	
		inokuliert_Tag5		,01459667*	0,00451262	0,044	0,0002068	0,0289865	
	natürlich_Tag3	natürlich_Tag1			,04227167*	0,00451262	0,000	0,0278818	0,0566615
		natürlich_Tag5			,05805500*	0,00451262	0,000	0,0436651	0,0724449
		inokuliert_Tag1			,04077667*	0,00451262	0,000	0,0263868	0,0551665
		inokuliert_Tag3			,04811667*	0,00451262	0,000	0,0337268	0,0625065
		inokuliert_Tag5			,05686833*	0,00451262	0,000	0,0424785	0,0712582
	natürlich_Tag5	natürlich_Tag1			-,01578333*	0,00451262	0,022	-0,0301732	-0,0013935
		natürlich_Tag3			-,05805500*	0,00451262	0,000	-0,0724449	-0,0436651
		inokuliert_Tag1			-,01727833*	0,00451262	0,009	-0,0316682	-0,0028885
		inokuliert_Tag3			-0,00993833	0,00451262	0,532	-0,0243282	0,0044515
		inokuliert_Tag5			-0,00118667	0,00451262	1,000	-0,0155765	0,0132032
	inokuliert_Tag1	natürlich_Tag1			0,00149500	0,00451262	1,000	-0,0128949	0,0158849
		natürlich_Tag3			-,04077667*	0,00451262	0,000	-0,0551665	-0,0263868
		natürlich_Tag5			,01727833*	0,00451262	0,009	0,0028885	0,0316682
		inokuliert_Tag3			0,00734000	0,00451262	1,000	-0,0070499	0,0217299
		inokuliert_Tag5			,01609167*	0,00451262	0,019	0,0017018	0,0304815
	inokuliert_Tag3	natürlich_Tag1			-0,00584500	0,00451262	1,000	-0,0202349	0,0085449
		natürlich_Tag3			-,04811667*	0,00451262	0,000	-0,0625065	-0,0337268
		natürlich_Tag5			0,00993833	0,00451262	0,532	-0,0044515	0,0243282
		inokuliert_Tag1			-0,00734000	0,00451262	1,000	-0,0217299	0,0070499
		inokuliert_Tag5			0,00875167	0,00451262	0,929	-0,0056382	0,0231415
	inokuliert_Tag5	natürlich_Tag1			-,01459667*	0,00451262	0,044	-0,0289865	-0,0002068
		natürlich_Tag3			-,05686833*	0,00451262	0,000	-0,0712582	-0,0424785
		natürlich_Tag5			0,00118667	0,00451262	1,000	-0,0132032	0,0155765
		inokuliert_Tag1			-,01609167*	0,00451262	0,019	-0,0304815	-0,0017018
		inokuliert_Tag3			-0,00875167	0,00451262	0,929	-0,0231415	0,0056382

*. Die Differenz der Mittelwerte ist auf dem Niveau 0.05 signifikant.

Anhang 4: Signifikanztest

Teil 4: Post-hoc Test nach Bonferroni (Fortsetzung)

Abhängige Variable	Mehrfachvergleiche							
			Test	Mittlere Differenz (I-J)	Std.-Fehler	Signifikanz	95%-Konfidenzintervall	
							Untergrenze	Obergrenze
Pentanol_4.4	natürlich_Tag1	natürlich_Tag3	Bonferroni	-0,00057833	0,00490270	1,000	-0,0162121	0,0150554
		natürlich_Tag5		,03093167*	0,00490270	0,000	0,0152979	0,0465654
		inokuliert_Tag1		-,02400000*	0,00490270	0,000	-0,0396337	-0,0083663
		inokuliert_Tag3		,02377167*	0,00490270	0,001	0,0081379	0,0394054
		inokuliert_Tag5		,02601667*	0,00490270	0,000	0,0103829	0,0416504
	natürlich_Tag3	natürlich_Tag1		0,00057833	0,00490270	1,000	-0,0150554	0,0162121
		natürlich_Tag5		,03151000*	0,00490270	0,000	0,0158763	0,0471437
		inokuliert_Tag1		-,02342167*	0,00490270	0,001	-0,0390554	-0,0077879
		inokuliert_Tag3		,02435000*	0,00490270	0,000	0,0087163	0,0399837
		inokuliert_Tag5		,02659500*	0,00490270	0,000	0,0109613	0,0422287
	natürlich_Tag5	natürlich_Tag1		-,03093167*	0,00490270	0,000	-0,0465654	-0,0152979
		natürlich_Tag3		-,03151000*	0,00490270	0,000	-0,0471437	-0,0158763
		inokuliert_Tag1		-,05493167*	0,00490270	0,000	-0,0705654	-0,0392979
		inokuliert_Tag3		-0,00716000	0,00490270	1,000	-0,0227937	0,0084737
		inokuliert_Tag5		-0,00491500	0,00490270	1,000	-0,0205487	0,0107187
	inokuliert_Tag1	natürlich_Tag1		,02400000*	0,00490270	0,000	0,0083663	0,0396337
		natürlich_Tag3		,02342167*	0,00490270	0,001	0,0077879	0,0390554
		natürlich_Tag5		,05493167*	0,00490270	0,000	0,0392979	0,0705654
		inokuliert_Tag3		,04777167*	0,00490270	0,000	0,0321379	0,0634054
		inokuliert_Tag5		,05001667*	0,00490270	0,000	0,0343829	0,0656504
	inokuliert_Tag3	natürlich_Tag1		-,02377167*	0,00490270	0,001	-0,0394054	-0,0081379
		natürlich_Tag3		-,02435000*	0,00490270	0,000	-0,0399837	-0,0087163
		natürlich_Tag5		0,00716000	0,00490270	1,000	-0,0084737	0,0227937
		inokuliert_Tag1		-,04777167*	0,00490270	0,000	-0,0634054	-0,0321379
		inokuliert_Tag5		0,00224500	0,00490270	1,000	-0,0133887	0,0178787
	inokuliert_Tag5	natürlich_Tag1		-,02601667*	0,00490270	0,000	-0,0416504	-0,0103829
		natürlich_Tag3		-,02659500*	0,00490270	0,000	-0,0422287	-0,0109613
		natürlich_Tag5		0,00491500	0,00490270	1,000	-0,0107187	0,0205487
		inokuliert_Tag1		-,05001667*	0,00490270	0,000	-0,0656504	-0,0343829
		inokuliert_Tag3		-0,00224500	0,00490270	1,000	-0,0178787	0,0133887

*. Die Differenz der Mittelwerte ist auf dem Niveau 0.05 signifikant.

Anhang 4: Signifikanztest

Teil 4: Post-hoc Test nach Bonferroni (Fortsetzung)

Abhängige Variable			Mehrfachvergleiche						
			Test	Mittlere Differenz (I-J)	Std.-Fehler	Signifikanz	95%-Konfidenz-intervall		
							Untergrenze	Obergrenze	
Pentanon_1 8	natürlich_Tag1	natürlich_Tag3	Bonferroni	,05399500*	0,00570166	0,000	0,0358135	0,0721765	
		natürlich_Tag5		,05626000*	0,00570166	0,000	0,0380785	0,0744415	
		inokuliert_Tag1		-0,00350000	0,00570166	1,000	-0,0216815	0,0146815	
		inokuliert_Tag3		,05431667*	0,00570166	0,000	0,0361352	0,0724982	
		inokuliert_Tag5		,05560667*	0,00570166	0,000	0,0374252	0,0737882	
	natürlich_Tag3	natürlich_Tag1			-,05399500*	0,00570166	0,000	-0,0721765	-0,0358135
		natürlich_Tag5			0,00226500	0,00570166	1,000	-0,0159165	0,0204465
		inokuliert_Tag1			-,05749500*	0,00570166	0,000	-0,0756765	-0,0393135
		inokuliert_Tag3			0,00032167	0,00570166	1,000	-0,0178598	0,0185032
		inokuliert_Tag5			0,00161167	0,00570166	1,000	-0,0165698	0,0197932
	natürlich_Tag5	natürlich_Tag1			-,05626000*	0,00570166	0,000	-0,0744415	-0,0380785
		natürlich_Tag3			-0,00226500	0,00570166	1,000	-0,0204465	0,0159165
		inokuliert_Tag1			-,05976000*	0,00570166	0,000	-0,0779415	-0,0415785
		inokuliert_Tag3			-0,00194333	0,00570166	1,000	-0,0201248	0,0162382
		inokuliert_Tag5			-0,00065333	0,00570166	1,000	-0,0188348	0,0175282
	inokuliert_Tag1	natürlich_Tag1			0,00350000	0,00570166	1,000	-0,0146815	0,0216815
		natürlich_Tag3			,05749500*	0,00570166	0,000	0,0393135	0,0756765
		natürlich_Tag5			,05976000*	0,00570166	0,000	0,0415785	0,0779415
		inokuliert_Tag3			,05781667*	0,00570166	0,000	0,0396352	0,0759982
		inokuliert_Tag5			,05910667*	0,00570166	0,000	0,0409252	0,0772882
	inokuliert_Tag3	natürlich_Tag1			-,05431667*	0,00570166	0,000	-0,0724982	-0,0361352
		natürlich_Tag3			-0,00032167	0,00570166	1,000	-0,0185032	0,0178598
		natürlich_Tag5			0,00194333	0,00570166	1,000	-0,0162382	0,0201248
		inokuliert_Tag1			-,05781667*	0,00570166	0,000	-0,0759982	-0,0396352
		inokuliert_Tag5			0,00129000	0,00570166	1,000	-0,0168915	0,0194715
	inokuliert_Tag5	natürlich_Tag1			-,05560667*	0,00570166	0,000	-0,0737882	-0,0374252
		natürlich_Tag3			-0,00161167	0,00570166	1,000	-0,0197932	0,0165698
		natürlich_Tag5			0,00065333	0,00570166	1,000	-0,0175282	0,0188348
		inokuliert_Tag1			-,05910667*	0,00570166	0,000	-0,0772882	-0,0409252
		inokuliert_Tag3			-0,00129000	0,00570166	1,000	-0,0194715	0,0168915

*. Die Differenz der Mittelwerte ist auf dem Niveau 0.05 signifikant.

Anhang 4: Signifikanztest

Teil 4: Post-hoc Test nach Bonferroni (Fortsetzung)

Abhängige Variable			Mehrfachvergleiche						
			Test	Mittlere Differenz (I-J)	Std.-Fehler	Signifikanz	95%-Konfidenzintervall		
							Untergrenze	Obergrenze	
Pentylacetat_3.1	natürlich_Tag1	natürlich_Tag3	Bonferroni	-,58870333*	0,06623071	0,000	-0,7999002	-0,3775065	
		natürlich_Tag5		-,28512000*	0,06623071	0,002	-0,4963169	-0,0739231	
		inokuliert_Tag1		-,23036500*	0,06623071	0,023	-0,4415619	-0,0191681	
		inokuliert_Tag3		-,38673833*	0,06623071	0,000	-0,5979352	-0,1755415	
		inokuliert_Tag5		-,40155167*	0,06623071	0,000	-0,6127485	-0,1903548	
	natürlich_Tag3	natürlich_Tag1			,58870333*	0,06623071	0,000	0,3775065	0,7999002
		natürlich_Tag5			,30358333*	0,06623071	0,001	0,0923865	0,5147802
		inokuliert_Tag1			,35833833*	0,06623071	0,000	0,1471415	0,5695352
		inokuliert_Tag3			0,20196500	0,06623071	0,071	-0,0092319	0,4131619
		inokuliert_Tag5			0,18715167	0,06623071	0,125	-0,0240452	0,3983485
	natürlich_Tag5	natürlich_Tag1			,28512000*	0,06623071	0,002	0,0739231	0,4963169
		natürlich_Tag3			-,30358333*	0,06623071	0,001	-0,5147802	-0,0923865
		inokuliert_Tag1			0,05475500	0,06623071	1,000	-0,1564419	0,2659519
		inokuliert_Tag3			-0,10161833	0,06623071	1,000	-0,3128152	0,1095785
		inokuliert_Tag5			-0,11643167	0,06623071	1,000	-0,3276285	0,0947652
	inokuliert_Tag1	natürlich_Tag1			,23036500*	0,06623071	0,023	0,0191681	0,4415619
		natürlich_Tag3			-,35833833*	0,06623071	0,000	-0,5695352	-0,1471415
		natürlich_Tag5			-0,05475500	0,06623071	1,000	-0,2659519	0,1564419
		inokuliert_Tag3			-0,15637333	0,06623071	0,374	-0,3675702	0,0548235
		inokuliert_Tag5			-0,17118667	0,06623071	0,223	-0,3823835	0,0400102
	inokuliert_Tag3	natürlich_Tag1			,38673833*	0,06623071	0,000	0,1755415	0,5979352
		natürlich_Tag3			-0,20196500	0,06623071	0,071	-0,4131619	0,0092319
		natürlich_Tag5			0,10161833	0,06623071	1,000	-0,1095785	0,3128152
		inokuliert_Tag1			0,15637333	0,06623071	0,374	-0,0548235	0,3675702
		inokuliert_Tag5			-0,01481333	0,06623071	1,000	-0,2260102	0,1963835
	inokuliert_Tag5	natürlich_Tag1			,40155167*	0,06623071	0,000	0,1903548	0,6127485
		natürlich_Tag3			-0,18715167	0,06623071	0,125	-0,3983485	0,0240452
		natürlich_Tag5			0,11643167	0,06623071	1,000	-0,0947652	0,3276285
		inokuliert_Tag1			0,17118667	0,06623071	0,223	-0,0400102	0,3823835
		inokuliert_Tag3			0,01481333	0,06623071	1,000	-0,1963835	0,2260102

*. Die Differenz der Mittelwerte ist auf dem Niveau 0.05 signifikant.

Anhang 4: Signifikanztest

Teil 4: Post-hoc Test nach Bonferroni (Fortsetzung)

Abhängige Variable	Mehrfachvergleiche								
	Test	Mittlere Differenz (I-J)	Std.-Fehler	Signifikanz	95%-Konfidenzintervall				
					Untergrenze	Obergrenze			
Phenylethanol_21.5	natürlich_Tag1	natürlich_Tag3	Bonferroni	-,02940500*	0,00483473	0,000	-0,0448220	-0,0139880	
		natürlich_Tag5		-0,00096500	0,00483473	1,000	-0,0163820	0,0144520	
		inokuliert_Tag1		0,00341000	0,00483473	1,000	-0,0120070	0,0188270	
		inokuliert_Tag3		-0,00562833	0,00483473	1,000	-0,0210454	0,0097887	
		inokuliert_Tag5		-0,00679167	0,00483473	1,000	-0,0222087	0,0086254	
	natürlich_Tag3	natürlich_Tag1			,02940500*	0,00483473	0,000	0,0139880	0,0448220
		natürlich_Tag5			,02844000*	0,00483473	0,000	0,0130230	0,0438570
		inokuliert_Tag1			,03281500*	0,00483473	0,000	0,0173980	0,0482320
		inokuliert_Tag3			,02377667*	0,00483473	0,000	0,0083596	0,0391937
		inokuliert_Tag5			,02261333*	0,00483473	0,001	0,0071963	0,0380304
	natürlich_Tag5	natürlich_Tag1			0,00096500	0,00483473	1,000	-0,0144520	0,0163820
		natürlich_Tag3			-,02844000*	0,00483473	0,000	-0,0438570	-0,0130230
		inokuliert_Tag1			0,00437500	0,00483473	1,000	-0,0110420	0,0197920
		inokuliert_Tag3			-0,00466333	0,00483473	1,000	-0,0200804	0,0107537
		inokuliert_Tag5			-0,00582667	0,00483473	1,000	-0,0212437	0,0095904
	inokuliert_Tag1	natürlich_Tag1			-0,00341000	0,00483473	1,000	-0,0188270	0,0120070
		natürlich_Tag3			-,03281500*	0,00483473	0,000	-0,0482320	-0,0173980
		natürlich_Tag5			-0,00437500	0,00483473	1,000	-0,0197920	0,0110420
		inokuliert_Tag3			-0,00903833	0,00483473	1,000	-0,0244554	0,0063787
		inokuliert_Tag5			-0,01020167	0,00483473	0,649	-0,0256187	0,0052154
	inokuliert_Tag3	natürlich_Tag1			0,00562833	0,00483473	1,000	-0,0097887	0,0210454
		natürlich_Tag3			-,02377667*	0,00483473	0,000	-0,0391937	-0,0083596
		natürlich_Tag5			0,00466333	0,00483473	1,000	-0,0107537	0,0200804
		inokuliert_Tag1			0,00903833	0,00483473	1,000	-0,0063787	0,0244554
		inokuliert_Tag5			-0,00116333	0,00483473	1,000	-0,0165804	0,0142537
	inokuliert_Tag5	natürlich_Tag1			0,00679167	0,00483473	1,000	-0,0086254	0,0222087
		natürlich_Tag3			-,02261333*	0,00483473	0,001	-0,0380304	-0,0071963
		natürlich_Tag5			0,00582667	0,00483473	1,000	-0,0095904	0,0212437
		inokuliert_Tag1			0,01020167	0,00483473	0,649	-0,0052154	0,0256187
		inokuliert_Tag3			0,00116333	0,00483473	1,000	-0,0142537	0,0165804

*. Die Differenz der Mittelwerte ist auf dem Niveau 0.05 signifikant.

Anhang 4: Signifikanztest

Teil 4: Post-hoc Test nach Bonferroni (Fortsetzung)

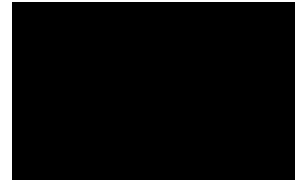
Abhängige Variable	Mehrfachvergleiche							
			Test	Mittlere Differenz (I-J)	Std.-Fehler	Signifikanz	95%-Konfidenzintervall	
							Untergrenze	Obergrenze
Pinen_3.6	natürlich_Tag1	natürlich_Tag3	Bonferroni	0,00131500	0,00041844	0,056	-0,0000193	0,0026493
		natürlich_Tag5		,00206000*	0,00041844	0,000	0,0007257	0,0033943
		inokuliert_Tag1		-0,00007500	0,00041844	1,000	-0,0014093	0,0012593
		inokuliert_Tag3		,00183833*	0,00041844	0,002	0,0005040	0,0031726
		inokuliert_Tag5		,00190167*	0,00041844	0,001	0,0005674	0,0032360
	natürlich_Tag3	natürlich_Tag1		-0,00131500	0,00041844	0,056	-0,0026493	0,0000193
		natürlich_Tag5		0,00074500	0,00041844	1,000	-0,0005893	0,0020793
		inokuliert_Tag1		-,00139000*	0,00041844	0,035	-0,0027243	-0,0000557
		inokuliert_Tag3		0,00052333	0,00041844	1,000	-0,0008110	0,0018576
		inokuliert_Tag5		0,00058667	0,00041844	1,000	-0,0007476	0,0019210
	natürlich_Tag5	natürlich_Tag1		-,00206000*	0,00041844	0,000	-0,0033943	-0,0007257
		natürlich_Tag3		-0,00074500	0,00041844	1,000	-0,0020793	0,0005893
		inokuliert_Tag1		-,00213500*	0,00041844	0,000	-0,0034693	-0,0008007
		inokuliert_Tag3		-0,00022167	0,00041844	1,000	-0,0015560	0,0011126
		inokuliert_Tag5		-0,00015833	0,00041844	1,000	-0,0014926	0,0011760
	inokuliert_Tag1	natürlich_Tag1		0,00007500	0,00041844	1,000	-0,0012593	0,0014093
		natürlich_Tag3		,00139000*	0,00041844	0,035	0,0000557	0,0027243
		natürlich_Tag5		,00213500*	0,00041844	0,000	0,0008007	0,0034693
		inokuliert_Tag3		,00191333*	0,00041844	0,001	0,0005790	0,0032476
		inokuliert_Tag5		,00197667*	0,00041844	0,001	0,0006424	0,0033110
	inokuliert_Tag3	natürlich_Tag1		-,00183833*	0,00041844	0,002	-0,0031726	-0,0005040
		natürlich_Tag3		-0,00052333	0,00041844	1,000	-0,0018576	0,0008110
		natürlich_Tag5		0,00022167	0,00041844	1,000	-0,0011126	0,0015560
		inokuliert_Tag1		-,00191333*	0,00041844	0,001	-0,0032476	-0,0005790
		inokuliert_Tag5		0,00006333	0,00041844	1,000	-0,0012710	0,0013976
	inokuliert_Tag5	natürlich_Tag1		-,00190167*	0,00041844	0,001	-0,0032360	-0,0005674
		natürlich_Tag3		-0,00058667	0,00041844	1,000	-0,0019210	0,0007476
		natürlich_Tag5		0,00015833	0,00041844	1,000	-0,0011760	0,0014926
		inokuliert_Tag1		-,00197667*	0,00041844	0,001	-0,0033110	-0,0006424
		inokuliert_Tag3		-0,00006333	0,00041844	1,000	-0,0013976	0,0012710

*. Die Differenz der Mittelwerte ist auf dem Niveau 0.05 signifikant.

Eidesstattliche Erklärung

Hiermit erkläre ich, dass ich die von mir eingerichtete Bachelorarbeit mit dem Title „Quantitative Analyse von aroma-flüchtigen Komponenten der Kakaobohne während der Nacherntebehandlung anhand einer HS SPME GC MS Methode“ selbständig verfasst und ausschließlich die angegebenen Hilfsmittel und Quellen verwendet habe. Wörtlich oder dem Sinn nach aus anderen Werken entnommene Stellen sind unter Angabe der Quellen kenntlich gemacht.

Hamburg, den 19.04.2020



Johanna Thoms