Extraktive Gewinnung funktioneller Lebensmittelinhaltsstoffe mittels Natural Deep Eutectic Solvents (NADES)

Koordinierung:	Forschungskreis der Ernährungsindustrie e. V. (FEI), Bonn
Forschungseinrichtung(en):	Deutsches Institut für Lebensmitteltechnik e.V. (DIL), Quakenbrück Dr. Volker Heinz/Dr. Andreas Juadjur
	Technische Universität Braunschweig Institut für Lebensmittelchemie Prof. Dr. Peter Winterhalter/Dr. Gerold Jerz
Industriegruppe(n):	Deutscher Weinbauverband e. V., Bonn Verband der deutschen Fruchtsaft-Industrie e. V. (VdF), Bonn
Projektkoordinatorin:	Dr. Silke Hillebrand Symrise AG, Braunschweig
Laufzeit:	2021 – 2024
Zuwendungssumme:	€ 489.020,--

Ausgangssituation

Zur extraktiven Gewinnung wertgebender semipolarer und lipophiler Lebensmittelinhaltsstoffe werden derzeit organische Lösungsmittel eingesetzt. Diese haben jedoch z. T. nachteilige Eigenschaften, wie hohe Flüchtigkeit, Entflammbarkeit und Toxizität. Im Zuge aktueller Nachhaltigkeitsdiskussionen steigt der Bedarf an alternativen Extraktionsverfahren, die ohne umweltschädliche Chemikalien auskommen. In diesem Zusammenhang werden international vermehrt „*Natural Deep Eutectic Solvents*“ (NADES) erforscht, die als ein vielversprechender Lösungsansatz gelten. NADES-Systeme sind Gemische fester Metabolite des pflanzlichen Primärstoffwechsels, welche nach entsprechender Zubereitung bereits bei Raumtemperatur in einen flüssigen Zustand übergehen. Die Herstellung erfolgt durch die Kombination eines Wasserstoffbrücken-Akzeptors (HBA) mit einem -Donor (HBD). Dies führt zur Ausbildung eines supramolekularen Gitters, woraus die Erniedrigung des Schmelzpunkts resultiert. Natürliche Pflanzeninhaltsstoffe, welche als HBA oder HBD verwendet werden können, sind z.B. Betain, Glukose, Fruktose, Äpfelsäure oder Milchsäure.

Das Ziel des Forschungsvorhaben war das Schließen von Wissenslücken und die Etablierung computergestützter Methoden zur Vorauswahl der NADES-Systeme, die potenziell zur zielgerichteten Extraktion von Naturstoffen geeignet sind. Des Weiteren sollten Verfahren zur Abtrennung der extrahierten Naturstoffe vom NADES-System entwickelt werden. Ein zusätzlicher alternativer Lösungsansatz war zudem die Formulierung geeigneter NADES-Systeme, die grundsätzlich in lebensmittelrechtlicher, technologischer und sensorischer Hinsicht als NADES-Rohextrakte, einschließlich der Systemkomponenten, direkt in der Produktion bestimmter Lebensmittel eingesetzt werden können. Abschließend sollte ein Scale-Up-Konzept entwickelt werden, um die Eignung der neuen Extraktionsmethode im industriellen Maßstab zu evaluieren.

Forschungsergebnis

Im Rahmen des Projekts wurde eine computergestützte Methode unter Verwendung von COSMO-RS zur Vorauswahl der NADES-Systeme etabliert. Dabei konnte der mittels COSMO-RS berechnete Löslichkeitstrend der Naturstoffe in den jeweiligen NADES-Systemen durch Extraktionsversuche bestätigt werden, sodass eine zielgerichtete Vorauswahl der NADES-Systeme möglich ist. Ergänzend wurde eine Quantitative-Struktur-Eigenschafts-Beziehung (QSPR) erarbeitet, die zusätzlich eine *in silico*-Bestimmung der Viskosität zur Vorauswahl potentieller NADES ermöglicht. Es konnten zudem NADES-basierte Extraktionsverfahren für natürliche Farbpigmente (u.a. Anthocyane und Lutein) sowie antioxidativ wirksame Naturstoffe (u.a. oligomere Proanthocyanidine (OPCs) und Stilbenoide) entwickelt werden und es erfolgte eine Optimierung der jeweiligen Extraktionsverfahren. Dabei wurde beobachtet, dass im Vergleich zu konventionellen Gemischen aus organischen Lösemitteln mit Wasser bei Verwendung der NADES-Systeme als Extraktionsmittel signifikant höhere Extraktionsgehalte für die untersuchten Naturstoffe erzielt wurden. Bei der Extraktion von OPCs konnte zudem ein Einfluss des molaren Verhältnisses auf die Selektivität der Extraktion beobachtet werden. Dadurch war es möglich einen hochwertigen NADES-Extrakt zu erhalten, welcher weniger der nicht bioverfügbaren Polymere enthielt. Zudem wurden NADES identifiziert, in denen gelöste Anthocyane über einen Zeitraum von drei Monaten stabil blieben.

Ein Meilenstein war die Erkenntnis, dass es mit einem Gemisch aus Betain und 1,2-Propandiol ein für viele Naturstoffe universell einsetzbares NADES-System gibt. Zudem konnten spezielle NADES-Systeme im Hinblick auf einen potentiellen *ready-to-use* Einsatz getestet werden. Am Beispiel der Extraktion von OPCs aus Traubenkernen mit einem Glucose/Äpfelsäure-basierten NADES-System konnte gezeigt werden, dass naturstoffhaltige NADES-Extrakte, einschließlich der Systemkomponenten, als gebrauchsfertige Formulierungen für die Lebensmittel- oder Kosmetikproduktion hergestellt werden können. Die Entwicklungen von Adsorptionsverfahren zur Abtrennung der NADES-Komponenten aus dem Extrakt wurden etabliert. Abschließend konnte am Beispiel des Scale-Up Versuchs des Carotinooids Lutein gezeigt werden, dass die NADES-Extraktion im Industriemaßstab technologisch umsetzbar ist. Somit wurde erfolgreich ein Workflow für die NADES-Extraktion erarbeitet, welcher die Schritte der *in silico*-Berechnung, die Extraktionsversuche, eine Optimierung des Extraktionsverfahrens sowie ein mögliches Scale-up enthält.

Wirtschaftliche Bedeutung

Die Extraktion ist als Gewinnungsverfahren für wertgebende Naturstoffe in fast allen Bereichen der Konsumgüterindustrie von Relevanz: Sowohl bioaktive Verbindungen für Nahrungsergänzungsmittel (3,1 Mrd. € Jahresumsatz in Deutschland 2024) und pflanzliche Arzneimittel (1,0 Mrd. € Jahresumsatz in Deutschland 2023) als auch natürliche Aroma- und Farbstoffauszüge für kosmetische Produkte (18,6 Mrd. € Jahresumsatz in Deutschland 2024) und Lebensmittel (205 Mrd. € Jahresumsatz deutscher Unternehmen 2024) werden mit extraktiven Verfahren hergestellt. Die NADES-Extraktion bietet dabei alle Vorteile eines lösungsmittelfreien Extraktionsverfahrens. Dieses Forschungsvorhaben macht das Potential der NADES-Extraktion für einen breiteren Anwenderkreis sichtbar, wodurch erzielten Ergebnisse in vielerlei Hinsicht einen Beitrag zur Leistungs- und Wettbewerbsfähigkeit kleiner und mittlerer Unternehmen leisten können.

Durch den Einsatz der NADES-Systeme ergeben sich völlig neue Applikationsmöglichkeiten für Naturstoffextrakte, da im Gegensatz zu konventionellen Lösungsmitteln keine Entfernung der NADES-Komponenten nach der Extraktion erfolgen muss. Durch die geschickte Auswahl lebensmittelrechtlicher, technologischer und sensorisch unbedenklicher NADES-Systeme können so gebrauchsfertige (*ready-to-use*), naturstoffhaltige NADES-Extrakte hergestellt werden.

Denkbare Anwendungsmöglichkeiten ergeben sich in der Entwicklung von Erfrischungsgetränken, kosmetischen Produkten und färbenden oder antioxidativ wirksamen Extrakten. Die erzielten Ergebnisse bilden eine Basis für die zukünftige Entwicklung und Markteinführung von nachhaltigen, d.h. ohne die Verwendung von organischen Lösungsmitteln hergestellten Naturstoffextrakten. Damit wird dem wachsenden Bewusstsein für Umwelt, Gesundheit und Nachhaltigkeit Rechnung getragen. Durch die Etablierung NADES-basierter

Extraktionsverfahren stehen künftig potentielle Alternativverfahren zur lösungsmittelfreien Gewinnung wertvoller Naturstoffextrakte im Sinne der „Green Chemistry“ zur Verfügung, die sich angesichts aktueller Nachhaltigkeitsdiskussionen zudem auch werbewirksam vermarkten lassen.

Publikationen (Auswahl)

1. FEI-Schlussbericht 2024.
2. Kiene, M., Jerz, G., Januschewski, E., Juadjur, A. & Winterhalter, P.: Natural Deep Eutectic Solvents: Modulierbare und nachhaltige Extraktionsmittel aus Komponenten des pflanzlichen Stoffwechsels. *Der Lebensmittelbrief* 1, 30-34 (2025).
3. Kiene, M., Zaremba, M., Januschewski, E., Juadjur, A., Jerz, G. & Winterhalter, P.: Sustainable In Silico-Supported Ultrasonic-Assisted Extraction of Oligomeric Stilbenoids from Grapevine Roots Using Natural Deep Eutectic Solvents (NADES) and Stability Study of Potential Ready-to-Use Extracts. *Foods* 13 (2), 324 (2024).
4. Kiene, M., Zaremba, M., Fellensiek, H., Januschewski, E., Juadjur, A., Jerz, G. & Winterhalter, P.: In Silico-Assisted Isolation of trans-Resveratrol and trans-ε-Viniferin from Grapevine Canes and Their Sustainable Extraction Using Natural Deep Eutectic Solvents (NADES). *Foods* 12 (22), 4184 (2023).
5. Kiene, M., Meier, L., Wüstner, J., Jerz, G., Januschewski, E., Juadjur, A., & Winterhalter, P.: Nachhaltige Extraktionsmethode von oligomeren Proanthocyanidinen aus Nebenströmen der Weinproduktion mittels Honig sowie weiteren Natural Deep Eutectic Solvents (NADES). *Lebensmittelchem.* 77, S3-040(2023).
6. Kiene, M., Blum, S., Jerz, G. & Winterhalter, P.: A Comparison between High-Performance Countercurrent Chromatography and Fast-Centrifugal Partition Chromatography for a One-Step Isolation of Flavonoids from Peanut Hulls Supported by a Conductor like Screening Model for Real Solvents. *Molecules* 28 (13), 5111 (2023).
7. Januschewski, E., Bischof, G., Heinz, V. & Juadjur, A.: COSMO-basierte in silico-Bestimmung der Viskosität von Natural Deep Eutectic Solvents. *Lebensmittelchem.* 76, S2-351 (2022).

Weiteres Informationsmaterial

Deutsches Institut für Lebensmitteltechnik e.V. (DIL)
Prof.-von-Klitzing-Straße 7, 49610 Quakenbrück
Tel.: +49 5431 183-224
Fax: +49 5431 183-114
E-Mail: a.juadjur@dil-ev.de

Technische Universität Braunschweig
Institut für Lebensmittelchemie
Schleinitzstraße 20, 38106 Braunschweig
Tel.: +49 531 391-7202
Fax: +49 531 391-7230
E-Mail: p.winterhalter@tu-bs.de

Forschungskreis der Ernährungsindustrie e.V. (FEI)
Godesberger Allee 125, 53175 Bonn
Tel.: +49 228 3079699-0
Fax: +49 228 3079699-9
E-Mail: fei@fei-bonn.de

Förderhinweis

… ein Projekt der ***Industriellen Gemeinschaftsforschung (IGF)***

Gefördert durch:

Bundesministerium für Wirtschaft und Klimaschutz

aufgrund eines Beschlusses des Deutschen Bundestages

FORSCHUNGSKREIS DER ERNÄHRUNGSINDUSTRIE E.V.

INDUSTRIELLE GEMEINSCHAFTSFORSCHUNG

Das o. g. IGF-Vorhaben der Forschungsvereinigung Forschungskreis der Ernährungsindustrie e. V. (FEI), Godesberger Allee 125, 53175 Bonn, wird/wurde im Rahmen des Programms zur Förderung der Industriellen Gemeinschaftsforschung (IGF) vom Bundesministerium für Wirtschaft und Klimaschutz aufgrund eines Beschlusses des Deutschen Bundestages gefördert.

Bildnachweis - Seite 1: © svf74 - stock.adobe.com # 185284188

Stand: 27. Mai 2025