

## Erstellung eines Compartmentmodells des Süßrezeptors zur Vorhersage der Süßintensität beliebiger Mischungen ausgewählter süßer Verbindungen in wässriger Lösung

<b>Koordinierung:</b>	Forschungskreis der Ernährungsindustrie e.V. (FEI), Bonn
<b>Forschungsstelle:</b>	Deutsches Institut für Ernährungsforschung (DIFE), Nuthetal Prof. Dr. C. A. Barth/ Dr. K. Hoppe
<b>Industriegruppe:</b>	Süßstoff-Verband e.V., Köln
	Projektkoordinator: H. Mund, Sara Lee HBC Deutschland GmbH, Köln
<b>Laufzeit:</b>	1999 - 2001
<b>Zuwendungssumme:</b>	€ 170.030,-- (Förderung durch BMWi via AiF/FEI)

### Ausgangssituation:

Seit der Entdeckung des Saccharins im Jahre 1879 werden anstelle der Süßintensität die Konzentrationen  $S_i$  gleicher Empfindungsintensität mit Saccharose  $S_0$  als Bezugssubstanz experimentell bestimmt. Als Wirksamkeitsmaß dient der Quotient  $S_0/S_i = SK$ , der als Süßkraft bezeichnet wird. Bei Mischungen wird ebenso verfahren, jedoch wird als Wirksamkeitsmaß der Quotient aus experimentell bestimmter Konzentration  $S_0$  der Mischung und der Summe der partiell durch die Einzelsubstanzen erzielbaren Konzentrationen  $S_0$  berechnet. Bei Verhältnissen größer 1 wird von Synergie, bei solchen gleich 1 von Additivität und bei solchen kleiner 1 von Suppression gesprochen.

Bereits 1979 wurde seitens der Arbeitsgruppe HOPPE eine allgemeine Skalierung der Süßintensität  $R$  als Funktion der Konzentration  $S$  durch eine differenzierte Bestimmung (modifizierte Fechnerskalierung) valide durchgeführt. Es gilt die Exponentialfunktion:  $R = R_m(1 - \exp(-bS/R_m))$ , mit den Parametern maximale Süßintensität  $R_m$  und Konzentrationskoeffizient  $b$ . Eine Vorausberechnung der Süßintensität von Mischungen war aber auch jetzt nur in Einzelfällen, ansonsten jedoch nur sehr unbefriedigend oder gar nicht möglich.

Ziel des Forschungsvorhabens war deshalb die Herstellung der Berechenbarkeit der Saccharose-äquivalentkonzentrationen bzw. der Süßinten-

sitäten von binären und ternären Mischungen ausgewählter süßer Verbindungen (Glucose G, Saccharose Z, Fructose F, Cyclamat C, Aspartam As, Acesulfam Ac und Saccharin Sa). Zur Erklärung der Mischeffekte war vorgesehen, ein passendes Compartmentmodell der Süßperzeption und das entsprechende Differentialgleichungssystem aufzustellen. Für den Einsatz in der Praxis sollte eine skalare Ersatzformel auf der Basis des passenden Modells in allgemeiner Form erstellt werden.

### Forschungsergebnis:

Die Parameter der Exponentialfunktion wurden für Fructose und Glucose neu bestimmt. Wesentliche Abweichungen gegenüber früheren Untersuchungen wurden für Fructose gefunden. Diese zeigen sich sehr deutlich auch in einer kleineren Süßkraft ( $SK = 1,05$  bei  $S_0 = 30$  g/l).

Die kinetische Modellierung auf der Basis dieser Exponentialfunktion ist gelungen. Das kinetische System berücksichtigt unbesetzte ( $c_2$ ), besetzte aktive ( $c_3$ ) und besetzte inaktive ( $c_4$ ) Sinneszellen. Die Zahl der aktiven Sinneszellen soll der Empfindungsintensität proportional sein. Da die Zustände der Sinneszellen ( $c_2$ - $c_4$ ) stationär sind, ist auch das Adsorptionsgleichgewicht zwischen der Konzentration  $S$  der Lösung und der adsorbierten Stoffmenge ( $c_1$ ) konstant. Das bedingt eine Anfangseinstellung von  $c_1$  ohne weiteren Zufluss. Damit wird die gefundene Exponen-

tialfunktion anstelle der bei Enzymkinetik gültigen Hyperbel erzielt. Mit der adsorbierten Stoffmenge ( $c_1$ ) als Stimulus hat das Modell vier Compartments und damit vier Differentialgleichungen zur Lösung der zeitlichen Änderungen. Das Maximum der aktiven Sinneszellanzahl ( $c_3$ ) ist die gesuchte Süßintensität. Bei Richtigkeit des Modells und seiner Parameter müssen die adsorbierte Stoffmenge ( $c_1$ ) und die Konzentration  $S$  bei gleicher berechneter Süßintensität eine lineare Gemeinsamkeitskorrelation aufweisen. Die stoffspezifische Maximalintensität als Wirkungsgrad ist vom Verhältnis der aktiven und inaktiven Sinneszellen abhängig. Einstellung nur des Zerfallsgeschwindigkeitskoeffizienten  $k_{42}$  für die inaktiven Sinneszellen ( $c_4$ ) genügt zur Erklärung dieser Stoffspezifität, während in Mischungen über die einfache Superposition hinaus, stoff- und konzentrationsabhängige Effekte eintreten. Die Anpassung der Koeffizienten ist möglich, aber unterschiedlich aufwändig.

Einfacher für binäre Mischungen ist eine dem Modell entsprechende Berechnung der süßgleichen Saccharosekonzentrationen  $S_0$  aus den partiellen Konzentrationen  $S_i, S_j$  durch multiple Regression nach:  $S_0 = f(S_i, S_j, S_i^2, S_j^2, S_i S_j)$ , aus Ergebnissen bei entsprechender Versuchsplanung. Für 17 der 21 binären Mischungen, die in  $4^2$ -Plänen untersucht wurden, lässt sich  $S_0$  durch einfachste multiple Regression aus  $S_i$  und  $S_j$  berechnen. Die binären Mischungen C/Sa oder C/Ac oder C/As benötigen zusätzlich das multiplikative und die quadratischen Glieder, C/F zusätzlich nur das multiplikative Glied. Die ternäre Mischung Sa/C/Z wurde in einem  $3^3$ -Plan untersucht. Es genügt der Einsatz der linearen Glieder. Die Konzentrationen  $S_0$  können in guter Näherung bereits aus der Summe der Produkte der partiellen Konzentrationen mit den jeweiligen Konzentrationskoeffizienten  $b$  erhalten werden. Auf dieser Basis kann ein neues Kriterium für Synergie diskutiert werden. Bei Untersuchung von Dreistoffmischungen aus Ac, As, C und Sa auf zwei Konzentrationsniveaus in  $2^3$ -Plänen wurden für Ac/As/C-Mischungen jedoch über diese Produktsumme hinausgehende synergistische Effekte mit deutlichen Hinweisen auf zusätzliche Einflussvariablen gefunden. Eine Überprüfung aller 35 ternären Mischungen in zwei Eckpunkten des Versuchsraums weist auf weitere synergistische Effekte hin. Diese müssten bei Bedarf experimentell in genügend großen Versuchsplänen untersucht werden.

#### Wirtschaftliche Bedeutung:

Eine einfache computergestützte Berechnung der Mischeffekte von süßen Substanzen in flüssigen Systemen, wie beispielsweise Erfrischungsgetränken, Säften u. a., gibt der anwendenden Industrie, meist kleinen und mittleren Unternehmen (kmU), die Möglichkeit eines optimalen Einsatzes bei gleichzeitig schneller Reaktionsfähigkeit auf Änderungen der Markt- und/oder der Rechtslage. Die zu erwartenden Qualitätserhöhungen versprechen bei Berücksichtigung des Trends der Verbraucher zu energiereduzierter, gesundheitsfördernder Nahrung eine hohe Wirtschaftlichkeit. Die Entwicklung neuer Produkte kann auf einem wesentlich höheren Niveau erfolgen. Letztlich können gesundheitliche Effekte (Kariesprävention, Abbau von Übergewicht) erzielt und die Lebensqualität von Diabetikern verbessert werden.

#### Publikationen (Auswahl):

1. FEI-Schlussbericht 2001.
2. Hoppe, K.: Erstellung eines Compartmentmodells des Süßrezeptors zur Vorhersage der Süßintensität beliebiger Mischungen ausgewählter süßer Verbindungen in wässriger Lösung. Tagungsband 59. Diskussionstagung des Forschungskreises der Ernährungsindustrie, 144 (2001).

#### Weiteres Informationsmaterial:

Deutsches Institut für Ernährungsforschung e.V. (DIFE)  
Arthur-Scheunert-Allee 114-116  
14558 Nuthetal  
Tel.: 033200/88-0, Fax: 033 200/88-444  
E-Mail: presse@dife.de

Forschungskreis der Ernährungsindustrie e.V. (FEI)  
Godesberger Allee 142-148, 53175 Bonn  
Tel.: 0228/372031, Fax: 0228/376150  
E-Mail: fei@fei-bonn.de