

Beurteilung der Qualität von Safran mittels UV-Vis-Spektroskopie gemäß ISO 3632

Integrierte quantitative Analyse mit einem
Agilent Cary 3500 UV-Vis und der Agilent Cary UV
Workstation



Autor

Yasurika Heenatigala
Agilent Technologies, Inc.

Zusammenfassung

Safran ist ein hochpreisiges Gewürz, dessen Preis direkt durch die Produktqualität und Authentizität beeinflusst wird. Daher wird Safran häufig verfälscht und falsch ausgezeichnet. Handelsüblicher Safran kann basierend auf seinen UV-Vis-spektrophotometrischen Eigenschaften gemäß den Branchennormen ISO 3632-1:2025 und ISO 3632-2:2010 bewertet werden. Die Ergebnisse ermöglichen die Klassifizierung von Safran in vier Handelsqualitäten – Extraklasse, Klasse I, II und III –, was einen standardisierten Ansatz für die Qualitätssicherung bietet.

Gemäß den Methoden aus der ISO 3632-2, Klausel 7, 10 und 14, wurde das Agilent Cary 3500 Multiküvetten-UV-Vis-Spektralphotometer verwendet, um die Qualität einer Safranprobe durch die Quantifizierung bioaktiver Schlüsselmarker zu beurteilen. Die Probe wurde nach ISO 3632-1 als Extraklasse bewertet. Die Studie zeigt die Vorteile der Agilent Cary UV Workstation-Software auf, die in einer schnellen und rationalisierten Beurteilung der Qualität von Safran, der Unterstützung von routinemäßigen Arbeitsabläufen für die Qualitätskontrolle, der Verifizierung der Authentizität und der Verlässlichkeit für den Verbraucher bestehen.

Einführung

Safran ist das weltweit teuerste Gewürz, dessen Preis pro Gramm von der Qualität, dem Ursprung und der Reinheit abhängt. Er ist für seine lebhafte Farbe und sein besonderes Aroma bekannt – Eigenschaften, die in hohem Maße zu seiner kulinarischen Beliebtheit beitragen. Aufgrund seines hohen Marktwerts und der begrenzten Produktionsmengen ist Safran jedoch häufig Gegenstand von Verfälschung, verschlechterter Qualität und falscher Auszeichnung, die sämtlich ein Risiko für die Gesundheit, Sicherheit und das Vertrauen der Kunden darstellen.

Die Ultraviolett-Visible (UV-Vis)-Spektroskopie ist eine schnelle, zuverlässige Analysetechnik, die sich zur Beurteilung der Qualität von Gewürzen durch die Quantifizierung bioaktiver molekularer Marker eignet. In Safran ist Crocin die Carotinoidverbindung, die für die Farbintensität verantwortlich ist. Picrocrocin ist der primäre Bitterstoff und Safranal leistet den Hauptbeitrag zu dem Aroma.

In dieser Application Note haben wir ein Agilent Cary 3500 UV-Vis-Spektralphotometer und die Agilent Cary UV Workstation-Software verwendet, um eine gewerbliche Safranprobe zu analysieren. Das Ziel der Studie bestand in einer Bewertung der Qualität der Probe nach ISO 3632-1:2025 und ISO 3632-2:2010 Gewürze – Safran (*Crocus sativus* L.).^{1,2} Diese etablierten Normen bieten Spezifikationen und Testmethoden für die Analyse von getrocknetem Safran, einschließlich von Fäden, geschnittenen Fäden und Pulver. Die in der ISO 3632-2 beschriebenen Testmethoden unterstützen die Klassifizierung und Beurteilung der Qualität von Safran. Die Methoden beziehen sich auf die Bestimmung des Gehalts an Feuchtigkeit und flüchtigen Substanzen (Klausel 7), die Zerkleinerung und das Sieben von Proben für Tests (Klausel 10) und die Bestimmung der Hauptmerkmale mittels einer UV-Vis-spektrometrischen Methode (Klausel 14). Basierend auf diesen Beurteilungen und den in der ISO 3632-1:2025 definierten Kriterien können Safranproben in vier gewerbliche Güteklassen eingeteilt werden: Extraklasse (EC), I, II und III, wobei EC die höchste Qualität angibt.

Experimentelles

Probenvorbereitung

Bestimmung des Gehalts an Feuchtigkeit und flüchtigen Substanzen

Zuerst wurden 2,5 mg Safranfäden (lokal beschafft) in einer sauberen, trockenen und tarierten Waagschale auf das nächste Zehntel Milligramm (2,5018 g) gerundet abgewogen. Diese Testportion wurde dann unabgedeckt in einem Ofen platziert und für 16 Stunden auf einer Temperatur von

100 ± 1 °C gehalten. Nach dem Abkühlen wurde die Probe erneut auf das nächste Zehntel Milligramm gerundet abgewogen. Der Gehalt an Feuchtigkeit und flüchtigen Substanzen (w_{MV}) wurde berechnet und als Prozentsatz der Ausgangsprobe ausgedrückt. Dieser Wert wurde mit vier Dezimalstellen angegeben und in nachfolgenden UV-Vis-spektrophotometrischen Analysen verwendet.

Bestimmung der Hauptmerkmale von Safran mittels UV-Vis

Blindprobe: Als Blindprobe wurde destilliertes Wasser (Milli-Q IQ 7005, Sigma-Aldrich, Merck) verwendet; 3 ml destilliertes Wasser wurden in eine 3,5-ml-Standard-Quarzküvette mit 10-mm-Strahlengang (Agilent Technologies, Bestellnummer 5061-3387) überführt.

Wässriges Extrakt der Probe: 1 g Safranfäden wurden mit einem Mörser und Stößel zerkleinert, bis 95 % der Massenfraktion durch ein Sieb mit Maschen mit einer Porengröße von 500 µm passiert werden konnte. Anschließend wurden 0,5 g der zerstoßenen Probe in einer sauberen, trockenen und tarierten Waagschale auf das nächste Zehntel Milligramm (0,5330 g) gerundet abgewogen; dies wurde als das Gewicht der Probestestportion festgelegt. Diese Testportion wurde in ein 1000-ml-Becherglas überführt, in das 900 ml destilliertes Wasser gegeben wurden. Die Lösung wurde mit einem Magnetrührer vor Licht geschützt eine Stunde lang gerührt. Danach wurde das Magnetrührstäbchen entfernt und das Becherglas bis zur Markierung mit destilliertem Wasser aufgefüllt und gemischt. Ein 20-ml-Aliquot wurde entnommen und in einen volumetrischen 200-ml-Kolben überführt, der bis zur Markierung mit destilliertem Wasser aufgefüllt wurde. Der Kolben wurde verschlossen und gemischt. Die Lösung wurde schnell durch eine Cellulose-Mischester (MCE)-Filtrationsmembran mit 0,45 µm Porengröße (HAWP02400, Sigma-Aldrich, Merck) vor Licht geschützt gefiltert. Abschließend wurden 3 ml der klaren Lösung (wässriger Extrakt der Probe) in eine 10-mm-Standard-Quarzküvette überführt und standen für die UV-Vis-Analyse bereit.

Geräte

Die Küvette mit der Blindprobe und die Küvette mit dem wässrigen Extrakt der Probe wurden in das Agilent Cary 3500 Multiküvetten-UV-Vis geladen (Abbildung 1), das mit den in Tabelle 1 aufgeführten Parametern betrieben wurde. Das Gerät verfügt über eine Xenon-Blitzlampe, die keine Aufwärmzeit erfordert und die Erfassung eines Scans für das gesamte Spektrum in weniger als einer Sekunde ermöglicht. Auf die Lampe wird eine 10-Jahres-Austauschgarantie gewährt, was die Häufigkeit und die Kosten für den Austausch minimiert. Der modulare Designansatz des Cary 3500 ermöglicht die Konfiguration der Spektralphotometer-

Modellreihe für unterschiedliche Bedürfnisse hinsichtlich der Flexibilität bei der Probenerfassung und Skalierbarkeit. Für Anwendungen mit nur einer Probe und Labors mit begrenzter Stellfläche ermöglicht das Cary 3500 Kompakt UV-Vis einem Anwender, eine einzelne Probe und Referenz in einer Konfiguration mit Umgebungstemperatur oder Temperaturregelung zu messen. Diese Anwendung kann auch auf dem Cary 3500 Flexible UV-Vis ausgeführt werden, das eine größere Kammer für die Messung von flüssigen und festen Proben sowie für die Verwendung von Zubehör aufweist.

Nach der Ermittlung der Basislinie durch Messung der Blindprobe wurde das UV-Vis-Profil des wässrigen Safranextrakts erfasst.



Abbildung 1. Das Agilent Cary 3500 Multiküvetten-UV-Vis-Spektralphotometer verfügt über acht stationäre Zellpositionen und ein optisches Doppelstrahl-Design mit Glasfasertechnologie sowie acht entsprechende Detektoren, was die gleichzeitige Messung von bis zu sieben Proben und einer Referenz ermöglicht.

Tabelle 1. Parameter der UV-Vis-Datenerfassung für die Safrananalyse mit einem Agilent Cary 3500 Multiküvetten-UV-Vis-Spektralphotometer.

Einstellung	Parameter
Wellenlängenbereich	200–700 nm
Wellenlängen der Analyse	257, 330, 440 nm
Signalmittlungszeit	0,020 s
Datenintervall	1 nm
Spektrale Bandbreite	2 nm

Ergebnisse und Diskussion

Bestimmung des Gehalts an Feuchtigkeit und flüchtigen Substanzen

Der Gehalt an Feuchtigkeit und flüchtigen Substanzen der Probe (w_{MV}) wurde als 6,43 % des Anfangsgewichts berechnet. Gemäß ISO 3632-1:2025 ist die Safranprobe mit diesem Wert als EC einzustufen (siehe Tabelle 2). Der w_{MV} -Wert wird auch zur Bestimmung der Hauptmerkmale von Safran verwendet, wie im nächsten Abschnitt beschrieben.

Tabelle 2. Berechnung des Gehalts an Feuchtigkeit und flüchtigen Substanzen.

Merkmal	Probe	Einheit		
Testportion (m0)	2,5018	g		
Trockenrückstand (m4)	2,3410	g		
Gehalt an Feuchtigkeit und flüchtigen Substanzen (w_{MV})	6,4274	%		
Bewertung				
Spezifikationskategorien	EC	I	II	III
Fadenförmig	< 12 %			
Pulverförmig	< 10 %			
Kategorisierung der Probenspezifikation	Extra-Klasse			

Bestimmung der Hauptmerkmale von Safran mittels einer UV-Vis-spektrometrischen Methode

Das UV-Vis-Spektrum von Safran wurde mit dem Cary 3500 Multiküvetten-UV-Vis über den Wellenlängenbereich von 200 bis 700 nm erfasst (siehe Abbildung 2). Die Ergebnisse der drei primären Bestandteile von Safran wurden durch direkte Ablesung der spezifischen Extinktion bei den folgenden drei Wellenlängen ermittelt:

- $A_{1\text{ cm}}^{1\%}$ (257 nm): Extinktion bei ~ 257 nm (λ_{max} von Picrocrocin)
- $A_{1\text{ cm}}^{1\%}$ (330 nm): Extinktion bei ~ 330 nm (λ_{max} von Safranal)
- $A_{1\text{ cm}}^{1\%}$ (440 nm): Extinktion bei ~ 440 nm (λ_{max} von Crocin)

Die quantitative Bewertung der Safranprobe wurde gemäß ISO 3632-1:2025 durchgeführt, die Qualitätsparameter basierend auf der Extinktionsstärke der drei Bestandteile definiert. Nach der Aufzeichnung der Extinktionswerte bei diesen Wellenlängen mit vier Dezimalstellen wurden die Stärkewerte mit der in der ISO 3632-2:2010 beschriebenen Methodik berechnet.

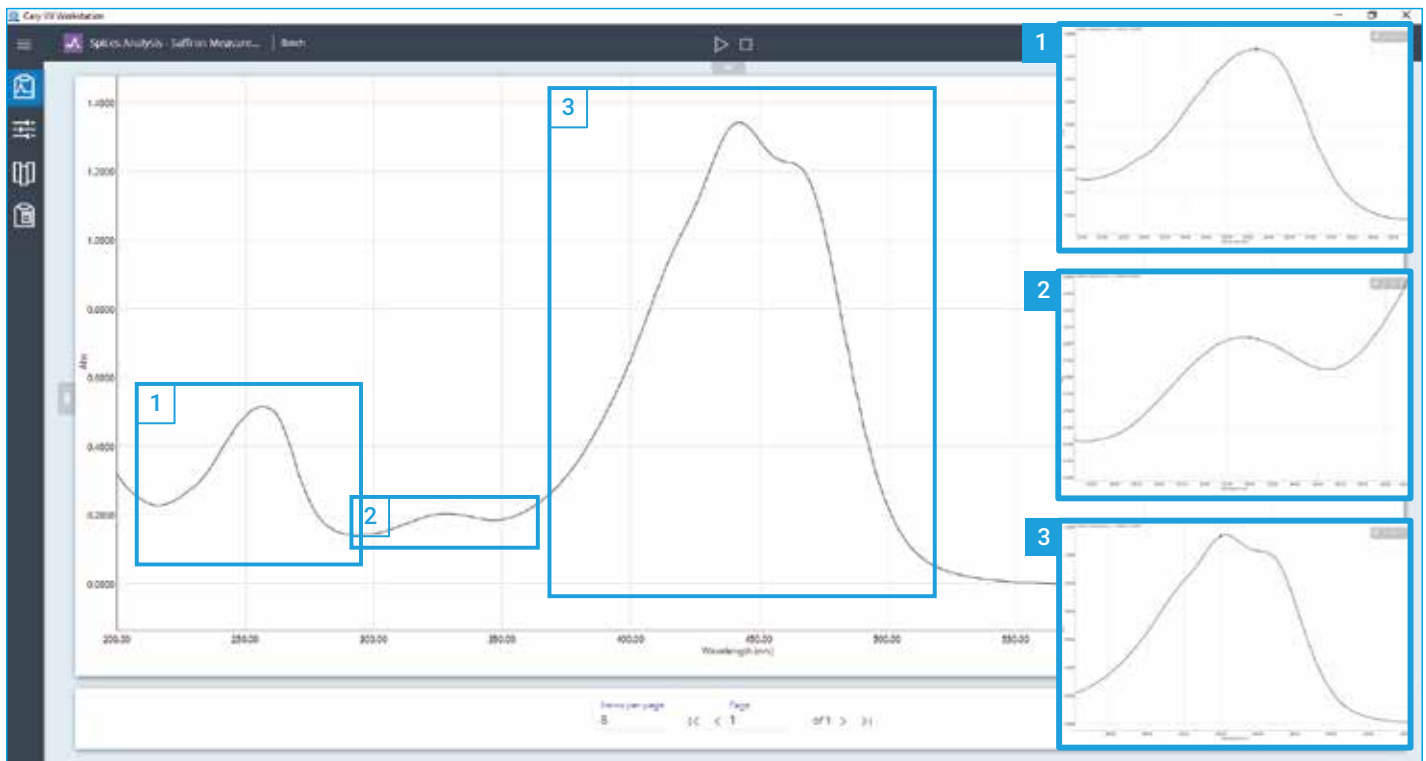


Abbildung 2. UV-Vis-Spektrum von wässrigem Safran-Extrakt von 200 bis 700 nm. (1) zeigt das Extinktionsmaximum von Picrocrocin, (2) zeigt die charakteristische Schulterform von Safranal im Bereich um 330 nm und (3) zeigt die charakteristische Spektrenform der Crocin-Extinktion.

Die Stärke eines Safranbestandteils kann mit Gleichung 1 berechnet werden.

Gleichung 1.

$$A_{1\text{ cm}}(\lambda_{\text{max}}) = \frac{D \times 10\,000}{m \times (100 - w_{\text{MV}})}$$

Es gilt Folgendes:

D = die spezifische Extinktion des Bestandteils

10 000 = der Einheiten-Umrechnungsfaktor, der einen Vergleich über verschiedene Safranproben hinweg ermöglicht

m = die Masse der Testportion in Gramm

w_{MV} = der Gehalt an Feuchtigkeit und flüchtigen Substanzen der Probe, als Prozentsatz der Massenfraktion ausgedrückt.

Die Berechnungen der Bestandteile wurden mit den folgenden Gleichungen ausgedrückt:

Gleichung 2.

$$(\text{Picrocrocin, Geschmacksstoff}) = \frac{D(257\text{ nm}) \times 10\,000}{0,5330 \times (100 - 6,4274)}$$

Gleichung 3.

$$(\text{Safranal, Aromastoff}) = \frac{D(330\text{ nm}) \times 10\,000}{0,5330 \times (100 - 6,4274)}$$

Gleichung 4.

$$(\text{Crocin, Farbstoff}) = \frac{D(440\text{ nm}) \times 10\,000}{0,5330 \times (100 - 6,4274)}$$

Diese Berechnungen liefern Werte für die Klassifizierung von Geschmack, Aroma und Farbstärke der Safranprobe, so dass sie gemäß den Spezifikationen der ISO 3632-1:2025 als EC, I, II oder III bewertet werden kann.

Die Analyse der Daten wurde mit der Cary UV Workstation-Software durchgeführt, die sowohl die Datenakquisition als auch die automatisierte Berechnung von Stärkewerten innerhalb derselben Plattform ermöglichte.

Wie in Abbildung 3 gezeigt, ermöglichte die Sequenzkonfigurationsseite die Integration benutzerspezifischer Parameter wie der Probenmasse sowie die Implementierung der folgenden drei Berechnungen mit dem Analysewerkzeug „End of Sequence Analysis“ (Analyse zum Sequenzende):

- Analyse 1: Geschmacksstärke (Picrocrocin)
- Analyse 2: Aromastärke (Safranal)
- Analyse 3: Farbstärke (Crocine)

Nach Abschluss des Scans erzeugte die Cary UV Workstation ein skalierbares Spektrum und Analysetabellen, die die Extinktion und die berechneten Stärkewerte für jede Verbindung zeigten. Die für Picrocrocin-, Safranal- und Crocinverbindungen in der Testprobe (0,5330 g) erhaltenen Extinktionswerte sind in Tabelle 3 aufgeführt.

Tabelle 3. Extinktionsergebnisse der Verbindungen Picrocrocin, Safranal und Crocin im wässrigen Safranextrakt (0,5330 g Probe).

Analyt	λ	Abs
Picrocrocin	257	0,5156
Safranal	330	0,2035
Crocine	440	1,3351

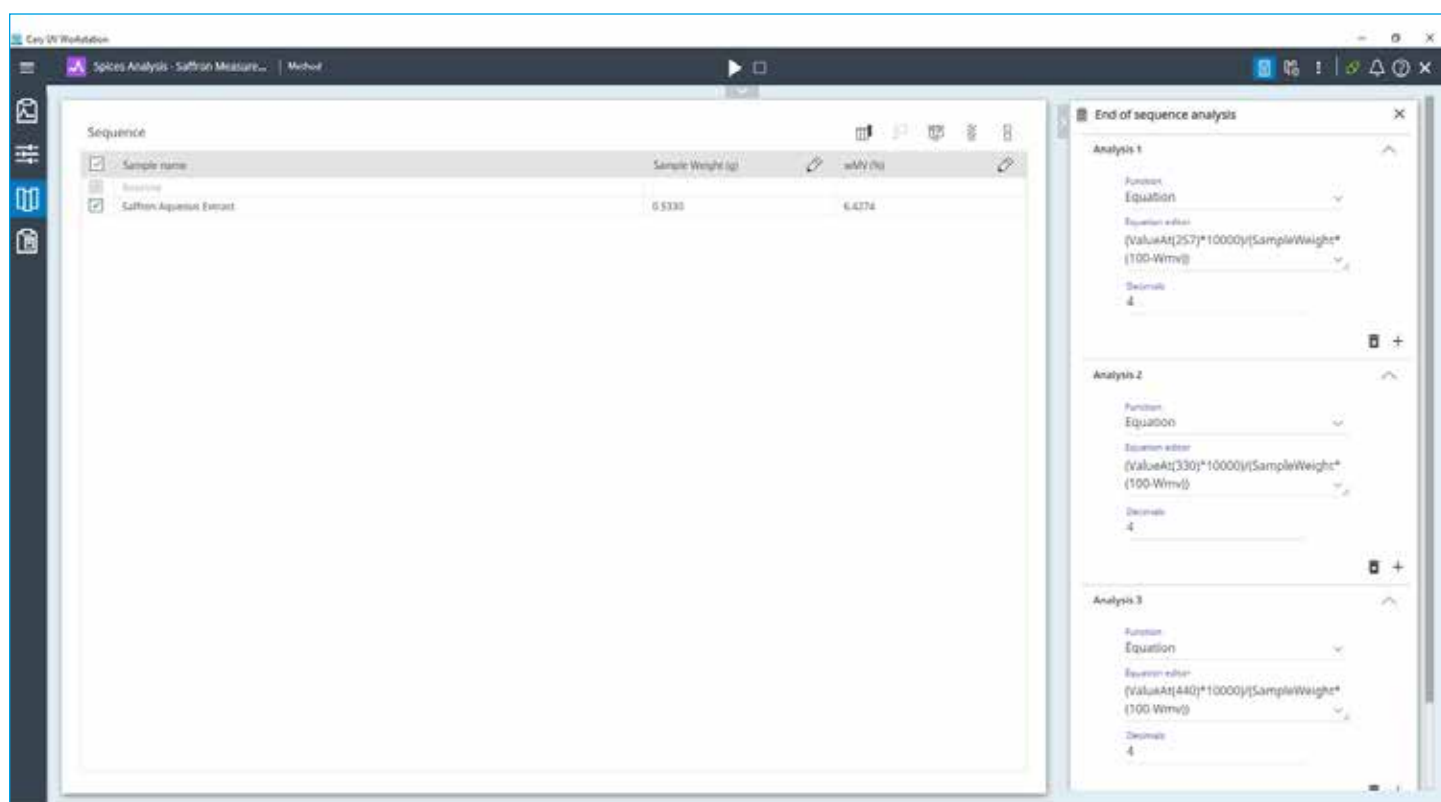


Abbildung 3. Die Sequenzkonfigurationsseite in der Agilent Cary UV Workstation, auf der Anwender die Test- und Berechnungsmethoden erstellen können. Das Probengewicht wurde als benutzerdefinierter Parameter hinzugefügt und drei Berechnungen wurden in die Funktion „End of Sequence Analysis“ (Analyse zum Sequenzende) eingegeben. Dies ermöglichte die automatische Berechnung der Hauptmerkmale von Safran.

Diese Extinktionswerte wurden verarbeitet, um die Klassifizierung der Safranprobe basierend auf den von der ISO definierten Anforderungen für die minimale (und maximale) Stärke zu bestimmen. Es werden die Extinktionswerte (Abbildung 4, Wellenlängen-Scan) und ein Beispiel für die Berechnung der Geschmacksstärke basierend auf der Extinktion bei 257 nm für Picrocrocin (Abbildung 4, Analyse 1) gezeigt.

Die Cary UV Workstation wandelte die UV-Vis-Spektroskopiedaten in wirtschaftlich nutzbare Informationen um. Mit der automatisierten quantitativen Analyse, die als leicht zugängliche Methode gespeichert werden kann, lieferte die Software eine numerische Bewertung der Probe nach dem in der ISO 3632 definierten gewerblichen Klassifizierungssystem.

Wie in Tabelle 4 gezeigt, erfüllten alle Merkmale des Safranextrakts die Anforderungen für die Klasse EC nach der ISO 3632-1:2025, was die hohe Qualität der Probe bestätigt. Der Gehalt an Feuchtigkeit und flüchtigen Substanzen (w_{MV}), separat als 6,43 % bestimmt, lag ebenfalls innerhalb der akzeptablen Grenzwerte für die Klassifizierung als EC. Dieser Wert wurde auch in die Stärkeberechnungen einbezogen.

Insgesamt bot die Cary UV Workstation einen rationalisierten, benutzerfreundlichen Arbeitsablauf, indem sie die Datenerfassung, Spektrenanalyse und ISO-kompatible Berechnungen in einer einzigen Plattform integrierte. Dieser automatisierte Ansatz reduziert manuelle Fehler und vereinfacht die Bewertung von Safran für Anwendungen in der Forschung und gewerblichen Qualitätskontrolle.

Analysis 1 results (2025-08-18 22:44:16 (-07:00))

(ValueAt(257)*10000)/(SampleWeight*(100-Wmv))

Sample name	Results			
Saffron Aqueous Extract	103.3773			

Wavelength scan (2025-08-18 22:44:16 (-07:00))

Sample	257.00 nm	330.00 nm	440.00 nm	Y mode
	Value	Value	Value	
Saffron Aqueous Extract	0.5156	0.2035	1.3351	Abs

Abbildung 4. Die Ergebnisse von Analyse 1, die Geschmacksstärke des wässrigen Safran-Extrakts und die spezifische Extinktion der drei Hauptbestandteile von Safran, automatisch berechnet mit der Agilent Cary UV Workstation Software.

Tabelle 4. Stärken und Bewertungsergebnisse der Verbindungen Picrocrocin, Safranal und Crocin im wässrigen Safranextrakt.

Merkmal	λ (nm)	Stärkenspezifikationen nach ISO	EC	I	II	III	Berechnete Stärke	Probenbewertung
Geschmacksstärke	257	Minimum	80	70	55	40	103,3773	Extra-Klasse
Aromastärke	330	Minimum	30	20	20	20	40,8105	Extra-Klasse
		Maximum	50	50	50	50		
Farbstärke	440	Minimum	230	200	170	120	267,6997	Extra-Klasse

Qualifizierungsberichte

Eine präzise, rückverfolgbare Dokumentation ist für die analytische Reproduzierbarkeit, Qualitätssicherung und Compliance entscheidend. Die Cary UV Workstation ermöglicht diese Rückverfolgbarkeit durch ein integriertes Berichtssystem. Diese Berichte können im PDF- und/oder CSV-Format erstellt werden, was Transkriptionsfehler minimiert.

Zuerst wurde ein Bericht im CSV-Dateiformat (Abbildung 5) an einen benutzerdefinierten Speicherort exportiert, in dem die Methode, Sequenz und Probenparameter sowie die Berechnungsergebnisse aufgeführt waren. Der CSV-Export ermöglicht die Übertragung von Labordaten in ein Laborinformationsmanagementsystem, um Proben schnell nachverfolgen zu können, Arbeitsabläufe zu verwalten und eine hohe Datengenauigkeit sicherzustellen.

Die Software erzeugt darüber hinaus automatisch intuitive Scan-Berichte, in denen wichtige Informationen konsolidiert werden, wie z. B. Geräteparameter, Methodeneinrichtung, Probeninformationen, Extinktionsspektren für Zielanalyten und quantitative Ergebnisse (Abbildung 6).

Analysis 1 results	2025-08-18 22:44:16 (-07:00)		
(Value at(257) * 10000)/(SAMPLEWEIGHT*(100-WMV))			
Sample Name	Results		
Saffron Aqueous Extract	103.377		
Analysis 2 results	2025-08-18 22:44:16 (-07:00)		
(Value at(330) * 10000)/(SAMPLEWEIGHT*(100-WMV))			
Sample Name	Results		
Saffron Aqueous Extract	40.8105		
Analysis 3 results	2025-08-18 22:44:16 (-07:00)		
(Value at(440) * 10000)/(SAMPLEWEIGHT*(100-WMV))			
Sample Name	Results		
Saffron Aqueous Extract	267.7		
Wavelength scan	2025-08-18 22:44:16 (-07:00)		
Sample	257.00 nm 330.00 nm 440.00 nm Y mode		
	Value Value Value		
Saffron Aqueous Extract	0.51559 0.20354 1.33513 Abs		

Abbildung 5. Die Agilent Cary UV Workstation erzeugt einen Export im CSV-Format, der die Analysen zum Sequenzende und Ergebnisse enthält. Dieser Bericht hilft, Anforderungen an die Rückverfolgbarkeit zu erfüllen, und rationalisiert das Datenmanagement.

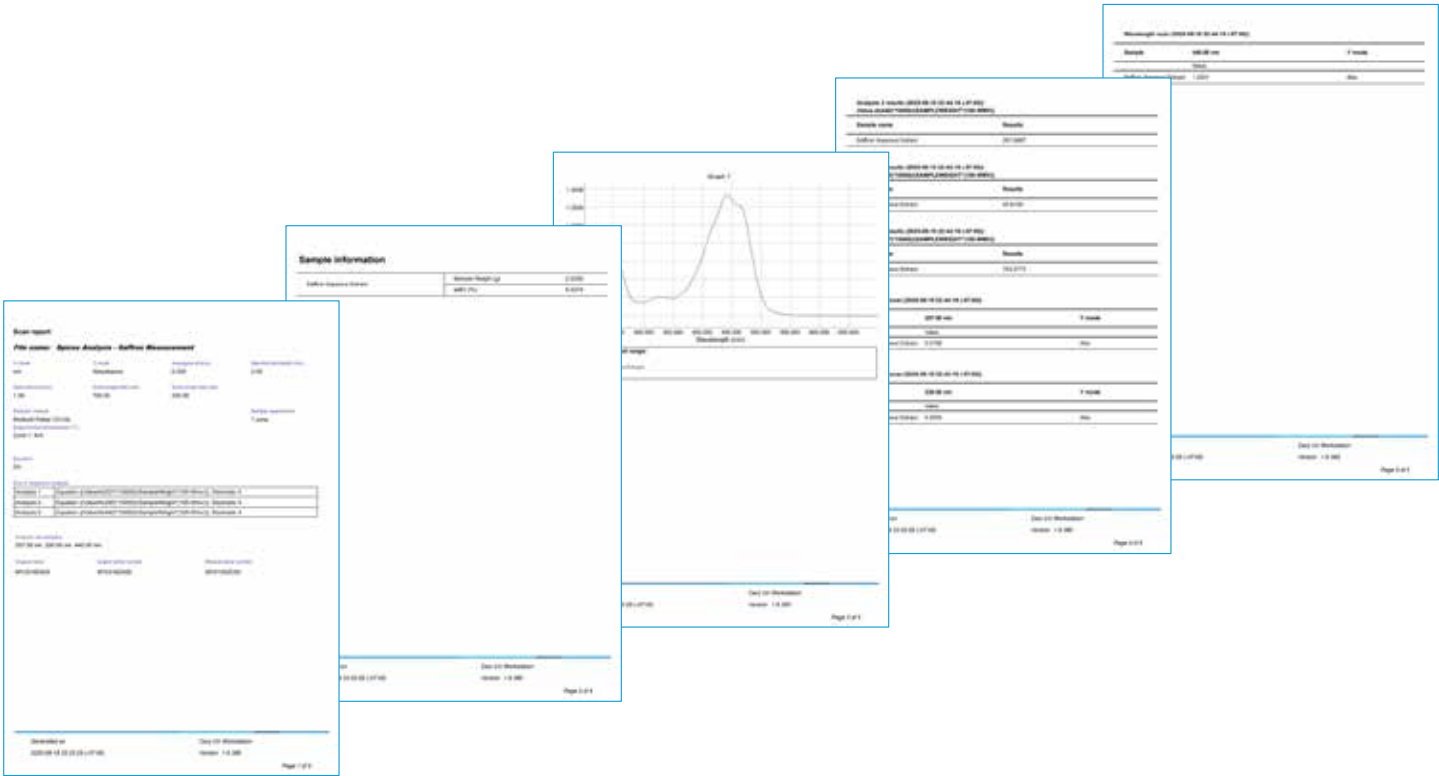


Abbildung 6. Beispiel eines detaillierten Scan-Berichts, der von der Agilent Cary UV Workstation-Software für eine Safran-Messung erstellt wurde.

Fazit

Das Agilent Cary 3500 Multiküvetten-UV-Vis-Spektralphotometer lieferte in Kombination mit der Agilent Cary UV Workstation-Software durch die Messung der Verbindungen Crocin, Picrocrocin und Safranal eine präzise Quantifizierung von Farbe, Geschmack und Aroma. Die Methode unterstützt die Beurteilung der Qualität von Safran gemäß der Branchennorm ISO 3632, was die zuverlässige Bewertung von gewerblichen Proben sowie die Erkennung potenzieller Fälle von Verfälschung, Verschlechterung oder falscher Auszeichnung ermöglicht.

Das Cary 3500 UV-Vis verwendet eine zuverlässige, langlebige Xenon-Blitzlampe, die keine Aufwärmzeit erfordert. Dies ermöglicht einen sofortigen Betrieb und die Erfassung von Scans des gesamten Spektrums von Blind- und Safranproben in weniger als einer Sekunde. Diese Funktionalitäten unterstützen die Analyse von Gewürzen durch die präzise Messung von verbindungs-spezifischen Extinktionspeaks mit hohem Durchsatz.

Mit integrierten Spektrenwerkzeugen, automatisierten Berechnungen und klaren Berichtsfunktionen vereinfachte die Cary UV Workstation den Arbeitsablauf für die Safrananalyse von der Probennahme bis zur Berichterstellung erheblich. In der ISO 3632 definierte spezifische Berechnungen beschleunigen die Datenverarbeitung und reduzieren Berechnungsfehler. Die Software zeigt die Ergebnisse in einer benutzerfreundlichen Oberfläche an, die sich ideal für die Rückverfolgung eignet.

Zusammen boten das Cary 3500 UV-Vis und die Cary UV Workstation signifikante Zeiteinsparungen, indem sie den Zeitaufwand für die Datenanalyse minimierten und mehr Zeit für die Qualitätssicherung von Proben erlaubten.

Das Cary 3500 System bietet eine effiziente Lösung für die Bestimmung der Hauptmerkmale von Safran gemäß Klausel 14 der ISO 3632-2:2010.

Referenzen

1. Internationale Organisation für Normung, ISO 3632-1:2025 – Gewürze – Safran (*Crocus sativus* L.), Teil 1: Spezifikation, ISO, Genf, Schweiz, 2025
2. Internationale Organisation für Normung, ISO 3632-2:2010 – Gewürze – Safran (*Crocus sativus* L.), Teil 2: Testmethoden, ISO, Genf, Schweiz, 2010

Weitere Informationen

- [Cary 3500 Multiküvetten-UV-Vis-Spektralphotometer](#)
- [Cary UV Workstation-Software](#)
- [Häufige Fragen zur UV-Vis-Spektroskopie und -Spektrophotometrie](#)

www.agilent.com

DE-009373

Änderungen vorbehalten.

© Agilent Technologies, Inc. 2025
Gedruckt in den USA, 12. September 2025
5994-8611DEE