Департамент образования города Москвы

Государственное бюджетное общеобразовательное учреждение

города Москвы

«Школа № 1505 «Преображенская»»

**ДИПЛОМНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ**

на тему:

**Изучение содержания кофеина в кофе сорта Арабика с разных мест произрастания**

Выполнил (а):

Дроздова Дарья Андреевна, 10 «В» класс

Руководитель

Шипарева Галина Афанасьевна

подпись\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_

Рецензент:

ФИО (указать должность, при наличии – указать ученую степень, ученое звание)

подпись\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_

Москва

2017/2018 уч.г.

**Оглавление**

|  |  |
| --- | --- |
| **Введение**………………………………………………………………. | **3** |
| **Глава I. Химия кофе, произрастающего на разных территориях……………………………………** ……………………… |  |
| * 1. Вещества, входящие в состав кофе……………………………. | **5** |
| * 1. География произрастания кофе сорта Арабика……………….   2. Методы анализа кофеина………………………………………. | **9**  **12** |
| **Глава II. Определение химического состава кофе сорта Арабика с разных мест произрастания**…..........………………………………. | **14** |
| **Приложение**……………………………………………………………. | **16** |
| **Литература**……………………………………………………………. | **20** |

**Введение**

Актуальность:

Кофе всё больше и больше набирает популярность в России. По словам Рамаза Чантурия, руководителя ассоциации «Росчайкофе», потребление кофе за последние 13 лет в России выросло на 85% [2]. У многих людей уже вошло в привычку начинать утро с кофе, ведь этот напиток любят не только за его вкус и аромат, но по большей части за бодрящие свойства, которые придаёт ему кофеин. Поэтому некоторые отдают предпочтение кофе с наибольшим содержанием кофеина. По этим причинам стоит разобраться, от чего зависит количество кофеина в кофейных зернах и отличается ли оно в кофе с разных мест произрастания?

Гипотеза:

Количество кофеина в кофе одного сорта с разных мест произрастания различается.

Цель:

Определить, зависит ли содержание кофеина от места произрастания кофе.

Задача:

1. Рассмотреть химический состав кофе.
2. Ознакомиться с разными сортами кофе, местами выращивания кофе и разницей условий между ними.
3. Изучить методы анализа кофеина.
4. Выделить кофеин из зерен кофе одного сорта, но с разных мест произрастания и сравнить его количество.
5. Выявить наличие корреляции между количеством кофеина и условиями его произрастания, и его элементным составом.

Для выполнения данных задач потребовалось использовать некоторые источники информации:

Статья «Душа кофе» («Химия и Жизнь», 1975, №11), автор которой Вольпер И. Данная статья очень информативна для диплома, т.к. в ней подробно рассказывается про основные вещества, входящие в состав кофе. В ней содержится достаточно много информации про кофеин, тригонеллин и кафеоль.

Статья «Химический состав кофе», автор которой Пучеров Н.Н. В данной статье есть много информации про кофеин, тригонеллин, кафеоль, хлорогеновую кислоту и танинов, чем очень информативна для написания диплома.

Методика экстракции была взята из статьи «Выделение кофеина из чая» («Химия и химики», 2016, №5). В ней подробно описан каждый шаг эксперимента, чем данная статья оказалась очень полезной для практической части исследовательской работы.

Принцип хроматографического анализа был изучен на основании статьи В.В. Сафонова «Хроматография в современной химии» («Химия», 1999, №32). Данная статья была информативной для дипломного исследования, поскольку в ней доступным языком объяснен принцип работы хроматографического анализа и представлены основные виды хроматографии.

**Глава I.**

* 1. **Вещества, входящие в состав кофе.**

Кофе – очень сложный природный продукт, состоящий из огромного набора различных веществ. Его химический состав так же изменяется по мере обжарки зерен, поскольку при этом процессе органические вещества испытывают химические превращения. К сожалению, роль многих компонентов, входящих в бодрящий напиток, до сих пор не изучена. Стоит отметить, что в разных сортах кофе соотношение компонентов может немного различаться. В данном параграфе будут перечислены лишь основные вещества, входящие в состав кофе, а так же, за что они отвечают. Нижеперечисленные вещества будут представлены в виде таблицы (стр. 8-9, таблица 1), где будут кратко изложены роли веществ и представлены их брутто-формулы.

**Кофеин.** Он был открыт в 1819 году немецким химиком Фердинандом Рунге[[1]](#footnote-1). Своё название кофеин получил от «кофе», поскольку впервые был открыт именно в нём. В 1827 году был выделен из чайных листьев новый алкалоид, получивший название «теин», однако в 1838 году Иобст и Мульдер доказали тождественность теина и кофеина. В 1828 году Пеллетье и Каванту[[2]](#footnote-2) впервые выделили кофеин из кофейного экстракта. Как и большинство алкалоидов, чистый кофеин представляет из себя бесцветные кристаллы, имеющие горький вкус. К концу XIX века Германом Эмилем Фишером[[3]](#footnote-3) была расшифрована структурная формула кофеина, и он же первый искусственно его синтезировал [10].

Кофеин экстрагируют из кислых и щелочных растворов органическими растворителями, в частности, хлороформом, поскольку в нём он легко растворяется [11].

В кофе содержится от 0,6 до 2,4% кофеина [5]. Также он содержится и в других растениях, в том числе, как было сказано выше, в листьях чая. При этом, несмотря на то, что при одинаковой массе чай будет обладать вдвое большим количеством кофеина, чем кофе, в чашке чая будет вдвое меньше кофеина, чем в чашке кофе. Это связано с тем, что для приготовления чая берут небольшое количество чайного листа по сравнению с количеством кофе. Именно поэтому мы пьём именно кофе, чтобы взбодриться, а не чай.

На сегодняшний день кофеин – весьма распространенное лекарственное средство от головной боли, мигрени и сонливости. Это связано с тем, что он стимулирует процессы возбуждения центральной нервной системы. Также под воздействием кофеина ускоряется сердечная деятельность и поднимается кровяное давление [10]. Из-за высвобождения дофамина примерно на 30 минут улучшается настроение после попадания кофеина в организм. Однако спустя 3-6 часов эффект спадает, появляется усталость, вялость и снижается трудоспособность.

**Тригонеллин.** В растениях он образуется за счёт метиллирования никотиновой кислоты. Тригонеллин хорошо растворим в воде, но термически неустойчив. При обжарке он разрушается, образуя никотиновую кислоту. Это вещество представляет собой один из витаминов B-группы, а точнее, витамин B3 [16]. Этот витамин необходим для синтеза белков и жиров, а также для освобождения энергии из всех пищевых веществ, участвует в образовании ферментов. Также витамин B предупреждает множество заболеваний, в том числе и пеллагру. Поэтому в странах Южной Америки, где кофе – традиционный напиток, пеллагра практически не встречается [17].

**Хлорогеновая кислота.** Она представляет из себя сочетанием эфиров хинной кислоты с молекулами кофейной кислоты. В третьем выпуске 1966 года журнала «Химия и жизнь» Р. Смит предположил, что именно продукты распада хлорогеновой кислоты придают кофе характерный вкус и аромат [5].

Хлорогеновая кислота содержится в довольно маленьких количествах в составе кофе, также она проявляет похожие свойства, как у кофеина, но по меньшей мощности воздействия. Она активизирует процесс сжигания жиров и регулирует обменные процессы, снижает поглощение углеводов и снижает риск развития диабета, стимулирует обмен азота и помогает строить молекулу белка.

При обжаривании содержание хлорогеновой кислоты снижается. Это связано с её разложением на хинную и кофейную кислоты, а так же с её взаимодействием с аминокислотами и белками с образованием темноокрашенных продуктов. Поэтому можно смело предположить, что она придаёт обжаренному кофе его характерный цвет.

**Кафеоль.** Его открыл немецкий химик Эрдманн ещё в самом начале XX века, дистиллируя с перегретым паром жареный кофе, выделив при этом остро пахнущее масло. Когда кофе терял кафеоль, он заодно терял свой вкус и аромат. Поэтому можно смело считать, что именно это вещество придаёт кофе своё очарование. Однако кафеоль является не самостоятельным соединением, а смесью. Сам Эрдманн опознал более десяти соединений, среди которых уксусная кислота, метиловый спирт и другие. В 1960 году продолжили работу американские исследователи Златкис и Сайветц, которые выделили две группы носителей ароматов. Первая группа была сконцентрирована из газов, образованных при обжаривании кофе. Вторую получили из дистиллята при перегонке жареных зерен в вакууме. После этого компонентов, отвечающих за аромат кофе, перевалило уже за сотни. А в 1967 году американские ученые Готши и Уинтер, применяя современные методы исследования, обнаружили более 220 компонентов, отвечающих за аромат кофе.

Кафеоль образуется лишь при обжарке кофейных зерен в результате многих пирохимических реакций. В кофе его содержание может быть до 1,5% [5].

**Танин.** Основной его функцией является связывание веществ, в частности, белков и полисахаридов. Именно поэтому разрушение танина может повлечь за собой и распад многих ценных соединений. В сырых зернах танин может составлять около 7,7%. Однако во время обжарки он распадается, в результате чего образуются темноокрашенные пигменты, и в готовом напитке остаётся уже не более 1%. Как раз благодаря распаду танина кофе также приобретает свой вкус и цвет. Однако танин может полностью разложиться при чрезмерном нагревании, из-за чего кофе может потерять свой вкус [18].

**Сахароза.** Кофе состоит примерно на 50% из углеводов, среди которых главными являются сахароза, целлюлоза и пектиновые вещества [16]. Сахароза является основным компонентов углеводного комплекса кофе. В арабике содержание сахарозы варьируется 6-9%, в робусте 3-7%. При обжаривании кофейных зерен сахароза легко разлагается. Благодаря сахарозе при обжарке кофейного зерна образуются органические кислоты, из-за чего зерно набирает кислотность. Кислотность является определяющим фактором в оценке качества зерна. Так, арабика считается самым качественным сортом, поскольку в ней находится высокое содержание сахарозы в зеленом зерне, которая при обжарке образует большое количество органических кислот. Также считается, что под высокой температурой сахар подвергается карамелизации, в результате чего напиток приобретает характерный коричневый цвет [15].

**Минеральные вещества.** В сырых кофейных зернах минеральных веществ содержится примерно 3-5%. При этом, преобладает калий, в 10 раз меньше магний и кальций, ещё меньше натрий, железо и марганец. Поскольку при обжарке кофейные зерна теряют воду, то процентное содержание минеральных веществ увеличивается до 5-7%. Считается, что содержание цинка, марганца и рубидия в сырых зернах означают лучшее качество готового кофе. Калий отвечает за сокращение мышц, регулирует сердечно-сосудистую и другие системы. Магний участвует в образовании энергии из глюкозы, улучшает работу нервной и мышечной систем. Кальций является важнейшим составляющим костей. Натрий транспортирует аминокислоты и другие элементы в клетки. Железо переносит кислород в организме, является необходимой составляющей крови человека. Марганец предотвращает отложение жиров в организме и помогает росту. Цинк применяет участие в сокращении мышц и образования белка, активирует некоторые гормоны, способствует распаду жиров [14].

Таблица 1. Вещества, входящие в состав кофе.

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| **Вещество** | **Брутто-формула** | **За что отвечает** |
| **Кофеин** | C₈H₁₀N₄O₂. | Стимулирует процессы возбуждения центральной нервной системы. Также под воздействием кофеина ускоряется сердечная деятельность и поднимается кровяное давление. |
| **Тригонеллин** | C7H7NO2 | Образует витамин B3 |
| **Хлорогеновая кислота** | C16H18O9 | Активизирует процесс сжигания жиров и регулирует обменные процессы, снижает поглощение углеводов и снижает риск развития диабета, стимулирует обмен азота и помогает строить молекулу белка. Предположительно её разложение дарит кофе его вкус, цвет и аромат. |
| **Кафеоль** | более 220 компонентов | Придаёт кофе его уникальный вкус и аромат. |
| **Танин** | C76H52O46 | Является связывание веществ, в частности, белков и полисахаридов; придаёт кофе его вкус и цвет. |
| **Сахароза** | C₁₂H₂₂O₁₁ | При обжарке благодаря сахарозе образуются органические кислоты, из-за чего зерно набирает кислотность. |
| **Минеральные вещества** |  | ***Калий*** отвечает за сокращение мышц, регулирует сердечнососудистую и другие системы. ***Магний*** участвует в образовании энергии из глюкозы, улучшает работу нервной и мышечной систем. ***Кальций*** является важнейшим составляющим костей. ***Натрий*** транспортирует аминокислоты и другие элементы в клетки. ***Железо*** переносит кислород в организме, является необходимой составляющей крови человека. ***Марганец*** предотвращает отложение жиров в организме и помогает росту. ***Цинк*** применяет участие в сокращении мышц и образования белка, активирует некоторые гормоны, способствует распаду жиров. |

* 1. **Сорта и места произрастания кофе.**

К кофе относится чуть более девяносто разновидностей растений. Со временем люди выделили два наиболее удобных в выращивании и имеющие лучшие вкусовые и ароматические качества сорта – Арабика и Робуста. На сегодняшний день Арабика заняла более 70% от всего потребляемого кофе на рынке, Робуста же заняла 30%. Так же есть менее популярные сорта, такие как «Либерика» из западной Африки, «Эксцельзы», «Мокко», «Бурбон», «Тиника» и другие, произрастающие в Конго, Вьетнаме, Венесуэле, Филиппинах и Кении. Эти сорта требовательны к почвам, неустойчивы к вредителям, не удобны в обработке, а так же не обладают тем ароматом, ради которого и производят кофе в промышленных масштабах.

Арабику и Робусту легко различить как по вкусовым качествам, так и по внешнему виду. Так Арабика имеет вытянутую форму и выглядит как немного увеличенное зерно пшеницы с полосой в виде латинской буквы «S», что является фирменным знаком этого сорта. Арабика содержит больше ароматических масел, но в почти два раза меньше кофеина, чем зерна робусты. Арабика очень солнцелюбива и произрастает от 900 м до 2000м над уровнем моря, чем и обусловливается насыщенный цвет зерна.

Робуста произрастает в более теплых местах, но ниже по отношению к уровню моря (начиная с 200 м над уровнем моря) и с более бледным диапазоном расцветки: от светло-коричневого до серо-зеленого. Робуста имеет округлую форму. Из-за быстрого созревания и высокой устойчивости к вредителям этот сорт имеет низкую себестоимость. Робусту чаще используют для приготовления эспрессо, поскольку она содержит большее количество кофеина и образует более активную пенку, чем в кофе из зерен Арабики [1].

Вкус и аромат кофе во многом зависит от места его произрастания. Особое значение занимает климат и высота плантации над уровнем моря. Лучшими зернами арабики считаются с плантаций на высоте 1300-2000 м, где годовой уровень осадков 1500-2500 мм и четко разграниченные сухой и влажный периоды года, средняя годовая температура 25-30 градусов, и, конечно, наличие плодородной почвы, часто вулканического происхождения. Поэтому арабику выращивают в странах Америки, Африки и Юго-Восточной Азии, которые расположены в Экваториальном поясе. Условия экваториального климата обеспечивают обилие осадков и стабильную годовую температуру, идеально подходя для выращивания кофе.

Ниже перечислены некоторые страны, выращивающие кофе, и особенности их климата.

Бразилия занимает первое место в мире по производству кофе. Однако, качество бразильского кофе считается средним. Арабику выращивают на низких плоскогорьях (на высоте 800-1350 м над уровнем моря), из-за чего зерна не отличаются высоким вкусовым показателем [3].

Все плантации Колумбии располагаются на высоте 1000-1800 м над уровнем моря и хорошо прогреваются солнцем, в этом районе характерна высокая влажность из-за частых дождей. Колумбийский кофе имеет хорошую репутацию на рынке, ведь благодаря подходящим климатическим условиям, произрастающая там арабика имеет хорошее качество [7].

Куба расположена в тропическом поясе. На её климат так же влияют океанические ветры. Кофе выращиваются преимущественно в горах (на высоте 1000-1200 м над уровнем моря), где достаточно солнечного тепла и количества осадков. Кубинский кофе считается очень крепким. Однако, в количественном соотношении Куба не может конкурировать со странами, производящими кофе в промышленном масштабе, но на качество кофе это не влияет [13].

Кофе в Коста-Рике выращивается на горных плантациях на высоте от 900 м до 1700 м над уровнем моря. Перепады температуры между днём и ночью увеличивают количество кофеина в кофе, из-за чего он считается крепким видом [8].

Эфиопия считается родиной кофе. И до сих пор здесь производят кофе. Удивительно, но большая часть собранного кофе являются зернами дикорастущей арабики. Эфиопия является самой высокогорной страной Африки, она расположена в субэкваториальном и экваториальном климатических поясах. Несмотря на засушливый климат на равнинах, в горах условия отлично подходят для выращивания кофе благодаря обилию солнца, комфортных температурах и влажности [9].

* 1. **Выделение кофеина.**
     1. **Экстракция.**

Для разделения веществ в химии используют разные методы, один из которых экстракция. Для этого используют избирательные экстрагенты, то есть растворители.

Процесс экстракции проходит в три этапа. Первый этап – это смешивание исходной смеси с растворителем. Тогда происходит разделение смеси на два слоя – слой растворившегося вещества в экстрагенте и слой не растворившегося вещества. Второй этап – механическое разделение растворившегося в экстрагенте вещества (экстракта) от не растворившегося (рафината). Третий этап включает в себя выделение экстрагированного вещества из растворителя с помощью выпаривания, кристаллизации и др. Вместе с этим получают обратно растворитель, который можно использовать повторно.

Достоинствами экстракции являются простота проведения и отсутствие потребности в сложной аппаратуре. Её можно проводить при низких рабочих температурах и с веществами, близкими по температуре кипения. Однако, минусом экстракции является сложность полного выделение растворителя из экстрагируемого вещества.

Метод экстракции активно используется в аналитической химии. Ведь он позволяет выделить вещества из смеси для количественного анализа и определить содержание примесей в исследуемых веществах [19].

* + 1. **Хроматография.**

М.С. Цвет[[4]](#footnote-4) в 1903 году предложил хроматографию, как метод анализа пигментов, однако позже этот метод стал универсальным для качественного и количественного анализа в химии и биологии, а так же методом получения многих веществ. Он основан на разнице поглощаемости веществ. Широко применяются несколько видов хроматографии:

Бумажная хроматография проводится на специальных полосках бумаги. Исследуемый раствор наносят на некоторое расстояния от края бумаги, после чего его помещают в растворитель, который будет перемещаться по бумаге. Происходит разделение раствора: чем хуже поглощается вещество, тем дальше от начала оно будет находиться. После полоску высушивают и опрыскивают раствором реагента, вызывающего характерное окрашивание с определенными веществами.

Колоночная хроматография осуществляется пропусканием исследуемого раствора через заполненную сорбентом стеклянную трубку. За счёт разной поглощаемости происходит разделение раствора. Чем легче растворяется вещество, тем выше в колонке оно остаётся. После пропускают через трубку реагент, который образует окрашенные соединения с исследуемыми веществами.

Хроматография в тонком слое сорбента похожа на хроматографию на бумаге, и отличается лишь тем, что вместо бумаги используют стеклянную пластинку, на которую наносят порошкообразный сорбент.

Гель-фильтрационная хроматография применяется чаще всего для анализа молекулярных масс разделяемых веществ. В качестве неподвижной фазы используется гель с определенной пористостью, в результате чего одни молекулы разделяемого вещества способны проникать между молекулами геля, а другие нет [4].

Сейчас всё чаще используют автоматические анализаторы. Они проводят хроматографический анализ с помощью специальных устройств и записывают полученные результаты автоматически.

**Глава II.**

**Гипотеза:**

Количество кофеина в кофе с разных мест произрастания различается.

**Цель:**

Определить, зависит ли содержание кофеина от места произрастания кофе.

**Для проверки гипотезы планировалось использовать следующие методы:**

1. Экстракция
2. Высокоэффективная жидкостная хроматография

**2.1. Экстракция.**

Методика экстракции кофеина описана в Приложении (стр. 18, Приложение А).

Перед тем, как выделять кофеин из кофе, мы решили опробовать методику на пробе. В качестве пробы мы взяли чай молочный улун.

Мы довели до кипения 200 мл воды и насыпали туда щепотку мела (CaCO3). В кипящую воду добавили 20 грамм пробы и кипятили на протяжении 10 минут. Затем настой в горячем виде отфильтровали через тряпку, отжали. Заварку экстрагировали ещё два раза. Полученный экстракт объединили.

Далее развели чайную ложку гашеной извести (Ca(OH)2) в воде и добавили эту взвесь в горячий экстракт до щелочной реакции. Образовался хлопьевидный осадок. Для улучшения отделения осадка добавили 30% раствор поваренной соли (NaCl). После раствор отфильтровали.

Из-за невозможности применить хлороформ, мы попытались заменить его дихлорэтаном, однако, кофеин выделить таким образом не получилось. По этим причинам эксперимент не удался.

**2.2. Хроматография.**

Сотрудница НИЦ Курчатовского института ИРЕА провела хроматографию для данного дипломного исследования.

В качестве проб использовались кофе сорта Арабика из четырех стран с разными климатическими условиями и рельефом (Куба, Колумбия, Коста-Рика и Бразилия).

Результаты представлены ниже (стр. 14, таблица 2).

Таблица 2. Элементный состав и кофеин в кофе с различных мест произрастания. Данные получены при помощи хроматографии.

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
|  | Страна произрастания кофе | | | |
| Процент содержания в 5 граммах продукта, % | Колумбия | Бразилия | Куба | Коста-Рика |
| Al | 0,00017 | 0,00065 | 0,00047 | 0,00012 |
| B | 0,00083 | 0,00100 | 0,00073 | 0,00124 |
| Ba | 0,00065 | 0,00025 | 0,00075 | 0,00052 |
| Ca | 0,10529 | 0,10837 | 0,12875 | 0,10786 |
| Cu | 0,00118 | 0,00119 | 0,00127 | 0,00114 |
| Fe | 0,00266 | 0,00308 | 0,00314 | 0,00268 |
| K | 1,60 | 1,68 | 1,73 | 1,60 |
| Mg | 0,204 | 0,204 | 0,212 | 0,207 |
| Mn | 0,00461 | 0,00296 | 0,00174 | 0,00307 |
| Na | 0,0006 | 0,0006 | 0,0007 | 0,0007 |
| P | 0,1655 | 0,1434 | 0,1644 | 0,1471 |
| S | 0,1399 | 0,1424 | 0,1470 | 0,1398 |
| Si | 0,00229 | 0,00093 | 0,00176 | 0,00132 |
| Sr | 0,00081 | 0,00035 | 0,00074 | 0,00071 |
| Кофеин | 5,54000 | 4,92000 | 5,78000 | 4,96000 |

Для наглядности в приложении приведены диаграммы элементного состава кофе из всех четырех стран (стр. 18-20, Приложение Б).

Чтобы определить, зависит ли количество кофеина от места произрастания, был подсчитан коэффициент линейной корреляции, где в качестве данных использовались значения количества кофеина в кофе из четырех стран (стр. 14, таблица 2) и условия: высота произрастания, среднее количество осадков в год и средняя температура воздуха. Полученный результат представлен в виде таблицы ниже (стр. 15, таблица 3).

Таблица 3. Коэффициент линейной корреляции между количеством кофеина и условиями.

|  |  |
| --- | --- |
| Условие | Коэффициент линейной корреляции |
| Высота плантации | 0.229 |
| Среднее количество осадков в год | -0.117 |
| Средняя температура воздуха | 0.316 |

Для оценки тесноты связи использовалась таблица, приведенная в приложении (стр. 20, Приложение В).

Как мы можем наблюдать, все значения коэффициента линейной корреляции расположены в интервалах [0; 0,3] и [-0,3; 0], что означает, связь между количеством кофеина и условиями его произрастания слабая.

Не мало важную роль в развитии растений играет почва. Из неё дерево берёт все необходимые минеральные вещества. Можно предположить, что количество кофеина зависит так же от количества какого-то микроэлемента. Чтобы проверить это, найдём коэффициент линейной корреляции между количество кофеина и количеством некоторых химических элементов, входящих в состав образцов кофе. Полученный результат представлен в виде таблицы (стр. 15, таблица 4).

Таблица 4. Коэффициент линейной корреляции между содержанием кофеина и элементным составом кофе

|  |  |
| --- | --- |
| Элемент | Коэффициент линейной корреляции |
| B | -0.881 |
| Ba | 0.88 |
| Mn | -0.151 |
| Si | 0.79 |
| Ca | 0.661 |
| P | 0.959 |
| S | 0.576 |
| Fe | 0.195 |
| K | 0.749 |

Как видно, коэффициент линейной корреляции между количеством кофеина и количеством фосфора, бария, кремния и калия больше 0,7, что значит, связь между содержанием кофеина и наличием данных микроэлементов сильная, и они оказывают наибольшее влияние на содержание кофеина в зернах кофе.

Также из таблицы видно, что коэффициент линейной корреляции между количеством кофеина и количеством кальция, серы и железа находится в интервале [0; 6], что значит, влияние данных микроэлементов на количество кофеина возможно, но связь слабая, и оно не оказывает большого влияния на содержание кофеина в зернах кофе.

Ко всему прочему можно наблюдать, что коэффициент корреляции Пирсона между количеством кофеина и количеством бора ниже -0,7, из чего следует вывод, что бор отрицательное влияет на количество кофеина, и можно предположить, что чем больше содержится бора в зернах, тем меньше кофеина в них будет.

Обратную корреляцию также можно наблюдать между количеством кофеина и количеством марганца, однако коэффициент корреляции Пирсона находится в интервале [-0,6; 0], из чего следует, что связь слабая, и количество марганца не оказывает большого влияние на содержание кофеина в зернах кофе.

**Вывод:** Количество кофеина в кофе не зависит от высоты плантации, количества осадков и температуры, однако, зависит от почвы, в которой он произрастает. Возможно предположить, что чем больше бария, кремния, фосфора и калия растение получает, тем больше кофеина накапливается в его зернах.

**Заключение**

Целью дипломного исследования было определить, зависит ли количество кофеина от места произрастания кофе.

Для достижения цели в ходе работы над дипломным исследованием были выполнены следующие задачи:

Был рассмотрен химический состав кофе. Кофе – очень сложный природный продукт, состоящий из огромного набора различных веществ, из которых наиболее важными являются тригонеллин, хлорогеновая кислота, кафеоль, танин и сахароза, однако основными предметами данного дипломного исследования были кофеин и минеральные вещества.

Были рассмотрены разные сорта кофе, наиболее популярными из которых являются Арабика и Робуста. География выращивания кофе весьма обширная, его выращивают в странах Америки, Африки и Юго-Восточной Азии, однако наиболее популярными странами являются Колумбия, Бразилия, Куба и Коста-Рика. Эти места произрастания различаются по условиям, таким как климат и высота над уровнем моря, а также почва, и поэтому для эксперимента были выбраны зерна Арабики именно из этих стран.

Для исследования кофеина обычно используются экстракция и хроматография. Экстракция – способ извлечения вещества из раствора с помощью подходящего растворителя, основан на разнице растворимости веществ. Хроматография – метод анализа веществ, основан на разнице поглощаемости веществ.

При использовании метода экстракции из-за невозможности применить хлороформ, мы попытались заменить его дихлорэтаном, однако, кофеин выделить таким образом не получилось. По этим причинам эксперимент не удался.

Поэтому хроматографический анализ был произведен в НИЦ Курчатовском институте ИРЕА.

Полученные данные свидетельствуют о том, что между количеством кофеина и условиями произрастания слабая корреляция.

Коэффициенты линейной корреляции между количеством кофеина и количеством бария, кремния, фосфора и калия наиболее приближены к значению 1, что означает сильную связь. Из этого можно сделать вывод, что количество кофеина в зернах кофе зависит от микроэлементов, содержащихся в почве, в которой он произрастает.

В результате дипломного исследования цель выполнена, и гипотеза частично подтвердилась: содержание кофеина зависит от состава почвы, на которой произрастает кофе.

**Приложение**

**Приложение А. Эксперимент по изучению содержания кофеина в разных сортах чая [6].**

Ход эксперимента.

1. 20 грамм чая размалываем в кофемолке. Доводим до кипения 180 мл. воды, куда насыпаем немного мела (CaCO3). В кипящую воду добавляем измельчённый в кофемолке чай и кипятим его около 10 минут. Затем оставшийся настой в горячем виде фильтруем через марлю, отжимаем. Получается экстракт. Затем производится упарка экстракта.
2. Далее удаляем из чая танины. Разводим 5 грамм гашённой извести(Ca(OH)2) в воде и добавляем эту взвесь в горячий экстракт до получения щелочной реакции. Выпадет крупный осадок, соединение танина и кальция. Для улучшения отделения осадка и уменьшения растворимости кофеина добавляем раствор поваренной соли 30% концентрации (NaCl). Осадок укрупняется, раствор становится более светлым. Производим фильтрование раствора.
3. Разбавляем водой и экстрагируем хлороформом (CHCl3) уже остывший раствор. Получаем расслоение раствора. Хлороформенный слой сливаем через воронку в колбу и отгоняем хлороформ. Внизу в колбе остаётся сырой кофеин. Взвешиваем его. Повторяем ту же процедуру с другим сортом чая. Сравниваем по весу продукты.1

**Приложение Б. Элементный состав кофе.**

**Приложение В. Оценка тесноты связи при помощи значений коэффициента линейной корреляции.**

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| Теснота связи | Величина коэффициента корреляции при наличии | |
| прямой связи (+) | обратной связи (−) |
| Связь отсутствует | https://studfiles.net/html/2706/516/html_2qXvnREqeq.RedH/img-PLv4yp.png | https://studfiles.net/html/2706/516/html_2qXvnREqeq.RedH/img-PLv4yp.png |
| Связь слабая | https://studfiles.net/html/2706/516/html_2qXvnREqeq.RedH/img-24JVAs.png | https://studfiles.net/html/2706/516/html_2qXvnREqeq.RedH/img-i27wk6.png |
| Связь умеренная | https://studfiles.net/html/2706/516/html_2qXvnREqeq.RedH/img-kWrXbe.png | https://studfiles.net/html/2706/516/html_2qXvnREqeq.RedH/img-RAmVMm.png |
| Связь сильная | https://studfiles.net/html/2706/516/html_2qXvnREqeq.RedH/img-mvaUGJ.png | https://studfiles.net/html/2706/516/html_2qXvnREqeq.RedH/img-XnrgL7.png |
| Полная функциональная | https://studfiles.net/html/2706/516/html_2qXvnREqeq.RedH/img-Q83Z6D.png | https://studfiles.net/html/2706/516/html_2qXvnREqeq.RedH/img-dG_qC0.png |

**Приложение Г. Высота, среднее количество осадков в год и средняя температура воздуха на плантациях кофе.**

**Литература**

1. Арабика и робуста - различия // Kofella URL: http://kofella.net/sorta-kofe/arabika-i-robusta-razlichiya.html (дата обращения: 27.12.2017).
2. Бодрячком // lenta.ru URL: https://lenta.ru/articles/2018/03/20/coffegoodbye/ (дата обращения: 29.05.2018).
3. Бразильский кофе // Kofella URL: http://kofella.net/sorta-kofe/brazilskiy-kofe.html (дата обращения: 27.12.2017).
4. В.В.Сафонов Хроматография в современной химии // Химия. - 1999. - №32.
5. Вольпер И. Душа кофе // Химия и Жизнь. 1975. №11.
6. Выделение кофеина из чая // Химия и Химики URL: http://chemistry-chemists.com/N5\_2016/ChemistryAndChemists\_5\_2016-P6-1.html (дата обращения: 22.04.2018).
7. Колумбийский кофе // Kofella URL: http://kofella.net/sorta-kofe/kolumbiyskiy-kofe.html (дата обращения: 27.12.2017).
8. Кофе Коста-Рики // Kofella URL: http://kofella.net/sorta-kofe/kofe-kosta-riki.html (дата обращения: 27.12.2017).
9. Кофе Эфиопии // Kofella URL: http://kofella.net/sorta-kofe/kofe-efiopii.html (дата обращения: 27.12.2017).
10. Кофеин // Formula Info URL: http://formula-info.ru/khimicheskie-formuly/k/formula-kofeina-strukturnaya-khimicheskaya (дата обращения: 27.12.2017).
11. КОФЕИН // XuMuK.ru URL: www.xumuk.ru/toxicchem/80.html (дата обращения: 19.01.2018).
12. Коэффициент корреляции Пирсона: онлайн калькулятор // Задачи оптимизации URL: http://www.uchimatchast.ru/aplication/pirson.php (дата обращения: 22.04.2018).
13. Кубинский кофе // Kofella URL: http://kofella.net/sorta-kofe/kubinskiy-kofe.html (дата обращения: 27.12.2017).
14. Минеральные вещества // Tvoytrening URL: <http://www.tvoytrening.ru/racion-sportsmena/44-mineralnie-veshestva.html> (дата обращения: 18.05.2017).
15. Углеводы // Just coffee factory URL: <https://justcoffee.ru/blog/kofeynyy-mir/coffee-chemistry> (дата обращения: 18.05.2017).
16. Химический состав и пищевая ценность кофе // Kivahan URL: <http://kivahan.ru/himicheskij-sostav-pishhevaya-cennost-kofe/> (дата обращения: 18.05.2017).
17. Химический состав кофе // Энциклопедия кофе URL: <http://www.sweetcoffee.ru/coffee11.shtml> (дата обращения: 18.05.2017).
18. Химия кофе // О кофе URL: http://aboutcoffee.info/химия-кофе/ (дата обращения: 27.12.2017).
19. Экстракция // ХиМиК.ru URL: http://www.xumuk.ru/bse/3230.html (дата обращения: 27.12.2017).

1. Фердинандом Рунге (1794-1867) – немецкий химик-органик. Важнейшие научные работы посвящал изучению органических соединений. Также известен тем, что первый предложил использовать хлор как дезинфицирующее средство [↑](#footnote-ref-1)
2. Пеллетье (1788-1842) и Каванту (1795-1877) – французские химики и фармацевты, внесшие огромный вклад в изучение химии алкалоидов [↑](#footnote-ref-2)
3. Герман Эмиль Фишер (1852-1919) –немецкий химик, лауреат Нобелевской Премии по химии в 1902 году за исследование сахаров и пуринов, синтез глюкозы [↑](#footnote-ref-3)
4. Михаил Семёнович Цвет (14 мая 1872 – 26 июня 1919) – русский ботаник-физиолог и биохимик растений. Исследовал пигменты листьев растений. Создал хроматографический метод. [↑](#footnote-ref-4)