

Wichtige Aromastoffe in Obstdestillaten und deren Einfluss auf die sensorische Bewertung

WALTER BRANDES, MARIO KARNER und REINHARD EDER

Höhere Bundeslehranstalt und Bundesamt für Wein- und Obstbau
A-3400 Klosterneuburg, Wiener Straße 74
E-mail: Walter.Brandes@hblawo.bmlfuw.gv.at

Um den Einfluss verschiedener Inhaltsstoffe auf die sensorische Qualität zu bestimmen, wurden von jeweils 30 Apfel-, Williamsbirnen-, Zwetschken- und Marillendestillaten mehr als 150 Inhaltsstoffe quantifiziert. Weiters wurden bei allen Proben die sensorischen Parameter Sauberkeit und Fruchtigkeit mit Punkten bewertet. Anschließend wurden mit Hilfe geeigneter statistischer Verfahren die Ergebnisse der vier Destillatgruppen auf Art und Stärke des Zusammenhangs zwischen Inhaltsstoffen und Sensorik untersucht. Ein negativer Einfluss zeigte sich vor allem bei der Gruppe der freien Fettsäuren, die als Hauptverursacher des Nachlaufcharakters gelten. Die teilweise in hohen Konzentrationen vorkommenden Ester der Fettsäuren ab sechs Kohlenstoffatomen waren dagegen sensorisch bedeutungslos. Auch die untereinander hoch korrelierten Acetale zeigten keinen Einfluss auf die Sensorik. Ein eindeutig positiver Zusammenhang zwischen aus der Literatur bekannten Aromasubstanzen bestimmter Obstarten und der organoleptischen Bewertung gelang nur bei den Apfelfestillaten. Bei den übrigen Arten wurden diese Zusammenhänge durch Antagonismen mit anderen Komponenten aufgehoben, oder der Gehalt der entsprechenden Aromasubstanzen hatte offensichtlich keinen linearen Einfluss auf das Kosturteil. Diese Substanzen werden in kleinen Konzentrationen als positiv, in größeren dagegen als negativ empfunden. Solche Zusammenhänge dürften auch ein wichtiger Grund für die generell eher kleinen Korrelationskoeffizienten sein. Bei sensorisch negativ wirksamen Substanzen ist der Einfluss auf das Kosturteil offenbar eindeutiger erkennbar als bei mutmaßlich positiven.

Schlagwörter: Obstdestillate, Qualität, Sensorik, Aromastoffe, GC-MS Analytik

Important aroma substances in fruit distillates and their influence on sensory evaluation. In order to determine the influence of different contents on the sensory quality, more than 150 substances were quantified in 30 samples each of distillates of Bartlett pears, plums and apricots. Additionally with all samples the sensory parameters cleanliness and fruitiness were evaluated by points. Subsequently, with the help of suitable statistic procedures the results of the four groups of distillates were examined with respect to kind and strength of the connexion between contents and sensory characteristics. A negative influence was found particularly with the group of the free fatty acids, which are considered mainly responsible for the tailing character. The esters of the fatty acids with more than five carbon atoms, which were partially present in high concentrations, were of no importance with respect to sensory characteristics. Also the highly correlated acetals did not show any influence on the sensory system. A clearly positive connexion between species specific aroma substances known from literature and the organoleptic evaluation showed up only with apple distillates. With the other species these connexions were neutralized by antagonisms with other components, or the content of the appropriate aroma substances had obviously no linear influence on the sensory evaluation. These substances are rated as positive in small concentrations, in higher concentrations they are rated as negative. Such connexions might be also an important reason for the generally rather small coefficients of correlation. With sensorily negatively effective substances the influence on the sensory evaluation is obviously more clearly recognizable than with presumed positive substances.

Key words: fruit distillates, quality, sensory evaluation, aroma substances, GC-MS

Les substances aromatisantes importantes dans les distillats de fruits et leur influence sur l'évaluation sensorielle. Plus de 150 composants de 30 distillats de pommes et autant de quetsches et d'abricots ont été quantifiés afin de déterminer l'influence des différents composants sur la qualité sensorielle. En outre, les paramètres sensoriels pureté et fruité de tous les échantillons ont été évalués par points. Par la suite, les résultats des quatre groupes de distillats ont été analysés à l'aide de méthodes statistiques appropriées en vue de déterminer la nature et l'importance de la relation entre les composants et l'évaluation sensorielle. Une influence négative a été notamment constatée pour le groupe des acides gras libres, qui sont considérés comme cause principale du caractère des queues de distillation. En revanche, les esters des acides gras présentant plus de six atomes de carbone, dont la concentration est partiellement très élevée, ont été sans importance du point de vue sensoriel. Les acétales, fortement corrélés entre eux, n'ont également exercé aucune influence sur l'évaluation sensorielle. On n'a réussi à établir une relation positive claire entre les substances aromatisantes, connues de la littérature, de certaines variétés de fruits et l'évaluation organoleptique que pour les distillats de pommes. Pour les autres variétés, ces relations ont été annulées par les antagonismes avec d'autres composants, ou encore la teneur en substances aromatisantes correspondantes n'avait, selon toute évidence, aucune influence linéaire sur le jugement sensoriel. Ces substances ont été ressenties comme positives dans des concentrations faibles, mais comme négatives dans des concentrations élevées. De telles relations devraient également être une cause importante des coefficients de corrélation qui sont en général plutôt faibles. Il est évident que l'influence sur le jugement sensoriel des substances à effet négatif est plus clairement détectable que celle des substances probablement positives.

Mots clés : distillats de fruits, qualité, évaluation sensorielle, substances aromatisantes, analyse GC-MS

Die Qualität von Destillaten ist an eine Reihe von Voraussetzungen gebunden. Dazu zählen vor allem Unverfälschtheit, gesundheitliche Unbedenklichkeit und sensorische Entsprechung. Unter gesundheitlich bedenklichen Substanzen sind in diesem Zusammenhang vor allem Ethylcarbamate und die als Precursor geltende Blausäure zu nennen (JUNG und ADAM, 2005). Für die Authentizität wurden unter anderen die Gehalte verschiedener Alkohole (NOSKO, 1974a und 1974b; REINHARD, 1978; POSTEL und ADAM, 1982), Fettsäureester (MISSELHORN, 1992) oder Terpene (BINDLER und LAUGEL, 1985) herangezogen, wobei vor allem dem Methanolgehalt große Bedeutung zukommt (JUNG, 2005). Ein spezieller Fall ist die Überprüfung der geographischen Herkunft, die mittels Isotopenanalytik angestrebt wird (BAUDLER et al., 2004). Spezielle Aromastoffe erlauben zwar eine weitergehende Beurteilung des Produktes (HOLZER, 1985), scheiden aber in vielen Fällen für die Authentizitätsbeurteilung auf Grund ihrer starken Abhängigkeit vom Produktions- und Lagerungsverfahren aus (ADAM et al., 1995). Andererseits sind diese Inhaltsstoffe für den sortentypischen Geruch und Geschmack von besonderer Bedeutung. Obwohl die sensorische Beurteilung von Destillatzwischen- bzw. -endprodukten bis jetzt durch keine Analytik ersetzt werden kann, ist andererseits eine weitergehende Qualitätsbeurteilung nur durch die genaue Kenntnis der Konzentration einer oder mehrerer Inhaltsstoffe möglich. Aus der Sicht des Technologen ist daher der Zusammenhang von sensorischer Beurteilung und der Konzentration verschiedener

Inhaltsstoffe von besonderem Interesse. Korrelationen dieser Art wurden beispielsweise mit Erfolg bei Vor- und Nachlaufkomponenten gefunden (PIEPER und RAU, 1987; GUAN und PIEPER, 1998). Erschwert wird diese Tatsache durch das Auftreten von Synergismen oder Antagonismen, so dass für die quantitative Beschreibung von Sortenaromen häufig mehr als eine Substanz berücksichtigt werden muss und auch Komponenten relevant sein können, die keineswegs sortentypisch sind (BATTAGLIA, 1986). Bei der großen Zahl der in Obstdestillaten identifizierten Verbindungen ist daher ein beträchtlicher Arbeitsaufwand für derartige Untersuchungen nötig. Andererseits kann der Beitrag vieler Komponenten zum sensorischen Gesamteindruck eines Obstbrandes vernachlässigbar gering sein. Eine Entscheidung ist nur durch deskriptive Verkostung und parallel dazu durch die Bestimmung möglichst vieler Destillat-inhaltsstoffe möglich. Auf Grund der sehr großen Zahl an Verbindungen und der weiten Bandbreite ihrer chemisch-physikalischen Eigenschaften im Bezug auf Konzentration, Flüchtigkeit und Polarität ist diese Aufgabe kaum mit einer einzigen Analysenmethode zu erreichen. Erschwerend ist weiterhin die Tatsache, dass einige in Bränden nachgewiesene Aromastoffe kommerziell nicht erhältlich sind. Eine exakte Bestimmung setzt aber in aller Regel die Reinsubstanz und damit ihre gesonderte Synthese voraus.

Die vorliegende Arbeit ist der Versuch, mit Hilfe geeigneter statistischer Verfahren Art und Stärke der Zusammenhänge zwischen sensorischer Qualität und der

Konzentration verschiedener Inhaltsstoffe bei Zwetschen-, Williamsbirnen-, Marillen- und Apfelfestillaten aufzufinden.

Material und Methoden

Als Probenmaterial wurden von den oben genannten Obstarten je 30 Proben Handelsware verkostet und analysiert. Außer bei den Williamsdestillaten war die Rückführung der Proben auf eine bestimmte für die Herstellung verwendete Obstsorte nicht möglich, so dass eine weitere Differenzierung unterblieb.

Sensorische Bewertung

Jede Probe wurde von zwei erfahrenen Kostern nach einem 20 Punkte-Schema mit den Kategorien Geruch-Sauberkeit, Frucht-Typizität, Geschmack-Sauberkeit und Harmonie verkostet, wobei für jede Kategorie eine Punktezahl von 0 bis 5 vergeben wurde. Dieselben Proben wurden von zwei weiteren Kostern auf die Gesamtpunktezahl mit den Bereichen 0 bis 14, 15 bis 17 und 18 bis 20 verkostet. Lag das Ergebnis der ersten Verkostung im Bereich der zweiten, war das Ergebnis komplett. Anderenfalls wurden die Proben nochmals von drei Kostern nach dem 20 Punkte-Schema bewertet und dieses Ergebnis übernommen. Zusätzlich zur Punkteverkostung wurde jede Probe auch verbal charakterisiert.

GC-Analytik I

Probenvorbereitung. 10 ml Destillat werden in einem 10 ml-Messkolben mit 100 µl internem Standard versetzt und der Kolben durch Umschütteln gemischt. Die Lösung wird anschließend direkt für die GC-Analyse verwendet. Für die Kalibration werden entsprechende Lösungen der Reinsubstanzen in 40%igem Ethanol wie die Proben vorbereitet und analysiert. Interner Standard: 17700 mg/l Tetrahydrofuran in ca. 40% igem Ethanol

Reagenzien

Ethanol p.A. (Merck Nr. 1.00983.2511)
Tetrahydrofuran LiChrosolv (Merck Nr. 108101)
Acetaldehyd p.A. (Fluka Nr. 00070)
Ameisensäure-ethylester p.A. (Fluka Nr. 88554)
Essigsäure-methylester p.A. (Fluka Nr. 45998)
Acrolein purum (Fluka Nr. 01680)
Essigsäure-ethylester p.A. (Fluka Nr. 45460)
Methanol p.A. (Fluka Nr. 32213)
Diacetyl puriss. (Fluka Nr. 31530)
2-Butanol p.A. (Fluka Nr. 19440)

GC-Parameter

Gerät: 5890 II mit Probengeber 7673 und FID (Fa. Hewlett-Packard)
Säule: DB-WAX, Länge 60 m, ID 0,32 mm, Filmdicke 0,25 µm (Fa. Agilent)
Trägergas: Helium 5.6, Kopfdruck 12 psi, constant pressure
Injektionsvolumen: 1 µl
Splitverhältnis: 1:10
Injektortemperatur: 245 °C
Detektortemperatur: 250 °C
Temperaturprogramm:
1. Injektionstemperatur: 40 °C, Haltezeit: 16 Minuten
2. Aufheizen auf 250 °C mit 30 °C/min, Haltezeit 7 Minuten
Gesamtlaufzeit: 30,0 Minuten
Die Bestimmungsgrenze für die einzelnen Substanzen lag bei ca. 0,3mg/l.

GC-Analytik II

Probenvorbereitung. 10 ml Destillat werden in einem 10 ml Messkolben mit 100 µl internem Standard versetzt und der Kolben durch Umschütteln gemischt. Die Lösung wird anschließend direkt für die GC-Analyse verwendet. Für die Kalibration werden entsprechende Lösungen der Reinsubstanzen in 50%igem Ethanol wie die Proben vorbereitet und analysiert. Interner Standard: 9180 mg/l 2-Ethylbuttersäure in 50% Ameisensäure

Reagenzien

Ethanol p.A. (Merck Nr. 1.00983.2511)
Ameisensäure p.A. (Fluka Nr. 33015)
2-Ethylbuttersäure purum (Fluka Nr. 03190)
1-Propanol p.A. (Fluka Nr. 82090)
1-Butanol p.A. (Fluka Nr. 19420)
2-Methyl-1-propanol p.A. (Fluka Nr. 58450)
3-Methyl-1-butanol p.A. Isomerengemisch (Fluka Nr. 59100)
1-Hexanol puriss. (Fluka Nr. 52830)
Essigsäure p.A. (Merck Nr.100063)
Propionsäure p.S. (Merck Nr. 800605)
Isobuttersäure p.S. (Merck Nr. 800472)
Buttersäure p.S. (Merck Nr. 800457)
Isovaleriansäure p.S. (Merck Nr. 800820)
Valeriansäure p.S. (Merck Nr. 800821)
Octansäure p.S. (Merck Nr. 800192)
Hexansäure p.S. (Merck Nr. 800198)
Decansäure p.S. (Merck Nr. 802169)
Laurinsäure p.S. (Merck Nr. 805333)
Furfural p.A. (Merck Nr. 104013)

Benzylalkohol p.A. (Merck Nr. 109626)
 2-Phenylethanol p.S. (Merck Nr. 807006)
 Capronsäure-ethylester purum (Fluka Nr. 21550)
 Caprylsäure-ethylester purum (Fluka Nr. 21670)
 Caprinsäure-ethylester purum (Fluka Nr. 21430)
 Myristinsäure-ethylester puriss. (Fluka Nr. 70090)
 Palmitinsäure-ethylester purum (Fluka Nr. 76132)
 Linolsäure-ethylester puriss. (Fluka Nr. 62250)
 Linolensäure-ethylester purum (Fluka Nr. 62180)
 Milchsäure-ethylester p.A. (Fluka Nr. 73364)
 Essigsäure-butylester p.A. (Fluka Nr. 45860)
 trans-2-cis-4-Decadiensäure-methylester (Eigensynthese)
 trans-2-cis-4-Decadiensäure-ethylester (Aldrich Nr. W31, 480-3)
 trans-2-trans-4-Decadiensäure-methylester (Eigensynthese)
 trans-2-trans-4-Decadiensäure-ethylester (Eigensynthese)

GC-Parameter.

Gerät: 5890 Serie II mit Probengeber 6890 und FID (alles Fa. Hewlett-Packard)
 Säule: DB-FFAP, Länge 30 m, ID 0,32 mm, Filmdicke 0,5 µm (Agilent)
 Trägergas: Helium 5.6, Kopfdruck 12 psi, constant flow
 Injektionsvolumen: 1 µl,
 Splitverhältnis: 1:10
 Injektortemperatur: 260 °C
 Detektortemperatur: 300 °C
 Temperaturprogramm:
 1. Injektionstemperatur: 60 °C, Haltezeit: 2,5 Minuten
 2. Aufheizen auf 100 °C mit 3 °C/min, Haltezeit 0 Minuten
 3. Aufheizen auf 250 °C mit 12 °C/min, Haltezeit 5 Minuten
 Gesamtlaufzeit: 33,33 Minuten
 Die Bestimmungsgrenze für die einzelnen Substanzen lag bei ca. 0,3 mg/l.

GC-MS- Analytik

Probenvorbereitung. 25 ml Destillat werden in einem 100 ml-Messkolben mit 10% iger Natriumchloridlösung bis zur Marke aufgefüllt. Nach Zugabe von 0,5 ml internem Standard durch Umschütteln gemischt. Die Lösung wird anschließend in einem Schütteltrichter dreimal mit je 10 ml Dichlormethan extrahiert. Die vereinigten Extrakte werden mit Natriumsulfat getrocknet und danach am Rotationsverdampfer auf etwa 0,5 ml eingedampft. Die Lösung wird anschließend direkt für die GC-MS-Analyse verwendet. Für die Kali-

bration werden entsprechende Lösungen der Reinsubstanzen in 50% igem Ethanol wie die Proben vorbereitet und analysiert.

Interner Standard: 100 mg/l 5-Nonanol in 40% Ethanol

Reagenzien

3-Methyl-butylaldehyd p.S. (Merck Nr. 820721)
 Valeraldehyd purum (Fluka Nr. 94512)
 Hexanal p.S. (Merck Nr. 802672)
 trans-2-Hexenal p.S. (Merck Nr. 818961)
 Önanthaldehyd p.S. (Merck Nr. 806918)
 Octanal p.S. (Merck Nr. 806901)
 Pelargonaldehyd p.S. (Merck Nr. 807166)
 Decanal purum (Fluka Nr. 21400)
 5-Methyl-2-furaldehyd purum (Fluka Nr. 66911)
 Benzaldehyd p.A. (Fluka Nr. 12010)
 Propionsäure-ethylester puriss. (Fluka Nr. 81920)
 Essigsäure-propylester purum (Fluka Nr. 46050)
 Essigsäure-isobutylester puriss. (Fluka Nr. 45920)
 Essigsäure-isopentylester puriss. (Fluka Nr. 27231)
 Essigsäure-2-methyl-butylester (Eigensynthese)
 Essigsäure-pentylester puriss. p.A. (Fluka Nr. 46022)
 Essigsäure-hexylester puriss. (Fluka Nr. 45900)
 Essigsäure-trans-2-hexenylester (Eigensynthese)
 Essigsäure-benzylester purum (Fluka Nr. 45850)
 Essigsäure-2-phenylethylester purum (Fluka Nr. 46030)
 Buttersäure-methylester purum (Fluka Nr. 19360)
 Buttersäure-ethylester purum (Fluka Nr. 19230)
 Methyl-isobutyrat p.S. (Merck Nr. 820710)
 Ethyl-isobutyrat p.S. (Merck Nr. 800501)
 2-Methyl-buttersäure-ethylester techn. (Fluka Nr. 66135)
 3-Methyl-buttersäure-ethylester (Eigensynthese)
 3-Methyl-buttersäuremethylester (Eigensynthese)
 cis-3-hexen-1-ol purum (Fluka Nr. 53056)
 5-Hexen-1-ol techn. (Fluka Nr. 53050)
 trans-2-hexen-1-ol purum (Fluka Nr. 53057)
 Capronsäure-methylester puriss. (Fluka Nr. 21600)
 α-Pinen purum (Fluka Nr. 80604)
 β-Pinen purum (Fluka Nr. 80608)
 3-Methylbuttersäure-propylester (Eigensynthese)
 1-Pentanol p.A (Fluka Nr. 76929)
 1-Heptanol p.S (Merck Nr. 820624)
 1-Octanol p.S. (Merck Nr. 820931)
 1-Nonanol p.S (Merck Nr. 806866)
 1-Decanol p.S. (Merck Nr. 803463)
 Myrcen techn. (Fluka Nr. 70049)
 Limonen purum (Fluka Nr. 89188)
 γ-Terpinen purum (Fluka Nr. 86478)
 Linalool purum (Fluka Nr. 62140)
 Linalooloxid purum (Fluka Nr. 62141)

γ -Hexalactone (Sigma Aldrich Nr. W25560-2)
 γ -Heptalactone (Sigma Aldrich Nr. W25390-1)
 γ -Octalactone (Sigma Aldrich Nr. W27960-9)
 γ -Nonalactone (Sigma Aldrich Nr. W27810-6)
 γ -Decalactone (Sigma Aldrich Nr. W23600-4)
 γ -Undecalactone (Sigma Aldrich Nr. W30910-9)
 γ -Dodecalactone (Sigma Aldrich Nr. W24000-1)
 δ -Decalactone (Sigma Aldrich Nr. W23610-1)
 δ -Undecalactone (Sigma Aldrich Nr. W32940-1)
 δ -Dodecalactone (Sigma Aldrich Nr. W24010-9)
 Caprylsäure-methylester puriss. (Fluka Nr. 21720)
 Benzoesäure-ethylester purum (Fluka Nr. 12360)
 Bernsteinsäure-diethylester purum (Fluka Nr. 14100)
 α -Terpinol purum (Fluka Nr. 83073)
 Nerol techn. (Fluka Nr. 72170)
 cis-Nerolidol purum (Fluka Nr. 72180)
 β -Citronellol techn. (Fluka Nr. 27480)
 Geraniol purum (Fluka Nr. 48799)
 Phenyllessigsäure-ethylester puriss. (Fluka Nr. 78500)
 Hexansäure-isoamylester (Eigensynthese)
 Octansäure-isoamylester (Eigensynthese)
 Decansäure-isoamylester (Eigensynthese)
 Salicylsäure-ethylester purum (Fluka Nr. 84220)
 Octansäure-propylester (Eigensynthese)
 Octansäure-isobutylester (Eigensynthese)
 Pelargonsäure-ethylester techn. (Fluka Nr. 76350)
 Caprinsäure-methylester purum (Fluka Nr. 21480)
 Laurinsäure-methylester purum (Fluka Nr. 61700)
 Eugenol purum (Fluka Nr. 46100)
 cis-4-Decensäure-ethylester 96% (Aldrich Nr. 34,987-9)
 trans-2-Decensäure-ethylester 95% (Aldrich Nr. W36,411-8)
 β -Damascone techn. (Fluka Nr. 30395)
 α -Jonon techn. (Fluka Nr. 58170)
 β -Jonon purum (Fluka Nr. 58180)
 Zimtsäure-ethylester purum (Fluka Nr. 96350)
 Myristinsäure-methylester puriss. (Fluka Nr. 70130)
 Palmitinsäure-methylester purum (Fluka Nr. 76161)
 Acetaldehyd-diethylacetal purum (Fluka Nr. 00109)
 3-Ethoxy-propionaldehyd-diethylacetal 95% (Aldrich Nr. E750-9)
 Propionaldehyd-diethylacetal 98% (Eigensynthese)
 2-Methylpropanal-diethylacetal 98% (Eigensynthese)
 Butanal-diethylacetal 98% (Eigensynthese)
 3-Methylbutanal-diethylacetal 98% (Eigensynthese)
 Pentanal-diethylacetal 98% (Eigensynthese)
 Hexanal-diethylacetal 98% (Eigensynthese)
 Heptanal-diethylacetal 98% (Eigensynthese)
 Octanal-diethylacetal 98% (Eigensynthese)
 Nonanal-diethylacetal 98% (Eigensynthese)

Decanal-diethylacetal 98% (Eigensynthese)
 Benzaldehyd-diethylacetal 98% (Eigensynthese)

GC-Parameter.

Gerät: 6890N Serie II mit CombiPal Probengeber (CTC Analytics)

Säule: DB-5 ms, Länge: 60 m, ID 0,25 mm, Filmdicke 0,25 μ m (Agilent)

Trärgas: Helium 5.6, Kopfdruck 12 psi, constant flow

Injektionsvolumen: 1 μ l,

Splitverhältnis: 1:10

Injektortemperatur: 260 °C

Detektortemperatur: 300 °C

Temperaturprogramm:

4. Injektionstemperatur: 60 °C, Haltezeit: 2,5 Minuten

5. Aufheizen auf 100 °C mit 3 °C/min, Haltezeit 0 Minuten

6. Aufheizen auf 250 °C mit 12 °C/min, Haltezeit 5 Minuten

MS-Parameter

Gerät: Massenselektiver Detektor 5975 (Fa. Hewlett-Packard)

Kopplung: Direct Interface

Electron multiplier Spannung: 1400 V

Mode: Single Ion monitoring

Die Bestimmungsgrenze für die einzelnen Substanzen lag bei ca. 0,01 mg/l (Tab. 1).

Synthese der Ester

Zu einer Menge von 0,25 bis 0,5 Mol Säurechlorid wurde unter ständigem Rühren die äquimolare Menge Alkohol tropfenweise zugegeben. Nach Beendigung der Gasentwicklung wurde das Gemisch zur Vervollständigung der Reaktion 15 Minuten am siedenden Wasserbad unter Rückfluss erhitzt. Nach Abkühlung und Überführung in einen Schütteltrichter wurden zuerst durch zweimaliges Waschen mit je 20 ml 5%iger Kaliumhydrogencarbonatlösung Säurereste entfernt. Danach wurde mit deionisiertem Wasser bis zur neutralen Reaktion gewaschen. Die organische Phase wurde anschließend mit Natriumsulfat getrocknet und je nach Siedepunkt unter Normaldruck oder unter Vakuum destilliert, wobei ca. ein Drittel der Gesamtmenge als Vorlauf abgetrennt wurde und das zweite Drittel als Reinstoff abgenommen wurde. Die Reinheitsüberprüfung erfolgte gaschromatographisch.

Synthese der Diethylacetale

0,5 bis 1 Mol Aldehyd wurde mit der äquimolaren Menge ortho-Ameisensäure-Triethylester und der doppelten Menge Ethylalkohol gemischt. Nach Zugabe

Tab. 1: Massenfragmente (m/z)

Substanzen	Target Ion	Qualifizier Ion	Substanzen	Target Ion	Qualifizier Ion
3-Methylbutyraldehyd	58	57	γ -Nonalactone	85	100
Valeraldehyd	44	58	γ -Decalactone	85	128
Hexanal	44	56	γ -Undecalactone	85	128
trans-2-Hexenal	98	97	γ -Dodecalactone	85	128
Önanthaldehyd	81	96	δ -Decalactone	99	71
Octanal	84	110	δ -Undecalactone	99	71
Pelargonaldehyd	57	70	δ -Dodecalactone	99	71
Decanal	112	82	Caprylsäure-methylester	74	87
5-Methyl-2-furaldehyd	109	110	Benzoesäure-ethylester	122	150
Benzaldehyd	105	106	Bernsteinsäure-diethylester	129	101
Propionsäure-ethylester	102	75	α -Terpinol	136	121
Essigsäure-propylester	43	61	Nerol	69	84
Essigsäure-isobutylester	43	56	cis-Nerolidol	69	93
Essigsäure-isopentylester	43	70	β -Citronellol	69	81
Essigsäure-2-methyl-butylester	43	70	Geraniol	123	111
Essigsäure-pentylester	43	70	Phenyllessigsäure-ethylester	91	164
Essigsäure-hexylester	43	56	Hexansäure-isoamylester	70	71
Essigsäure-trans-2-hexenylester	43	67	Octansäure-isoamylester	145	70
Essigsäure-benzylester	108	150	Decansäure-isoamylester	70	155
Essigsäure-2-phenyl-ethylester	104	91	Salicylsäure-ethylester	120	166
Buttersäure-methylester	74	43	Octansäure-propylester	145	127
Buttersäure-ethylester	88	101	Octansäure-isobutylester	145	127
Methyl-isobutytrat	87	59	Pelargonsäure-ethylester	88	101
Ethyl-isobutytrat	43	71	Caprinsäure-methylester	74	87
2-Methyl-buttersäure-ethylester	102	85	Laurinsäure-methylester	74	87
3-Methyl-buttersäure-ethylester	88	115	Eugenol	164	57
3-Methyl-buttersäure-methylester	74	85	cis-4-Decensäure-ethylester	152	110
cis-3-Hexen-1-ol	67	82	trans-2-Decensäure-ethylester	153	152
5-Hexen-1-ol	67	54	β -Damascone	177	192
trans-2-hexen-1-ol	57	82	α -Jonon	121	136
Capronsäure-methylester	74	87	β -Jonon	177	178
α -Pinen	93	121	Zimtsäure-ethylester	131	103
β -Pinen	93	136	Myristinsäure-methylester	74	87
3-Methyl-buttersäure-propylester	85	57	Palmitinsäure-methylester	74	87
1-Pentanol	70	42	Acetaldehyd-diethylacetal	103	47
1-Heptanol	70	56	3-Ethoxy-propionaldehyd-diethylacetal	103	47
1-Octanol	84	97	Propionaldehyd-diethylacetal	87	103
1-Nonanol	97	70	2-Methylpropanal-diethylacetal	103	101
1-Decanol	97	112	Butanal-diethylacetal	103	101
Myrcen	93	69	3-Methyl-butanal-diethylacetal	47	75
Limonen	68	93	Pentanal-diethylacetal	103	115
γ -Terpinen	93	136	Hexanal-diethylacetal	103	129
Linalool	71	93	Heptanal-diethylacetal	143	75
cis-Linalooloxid	59	94	Octanal-diethylacetal	103	157
trans-Linalooloxid	59	94	Nonanal-diethylacetal	103	171
γ -Hexalactone	85	70	Decanal-diethylacetal	185	75
γ -Heptalactone	85	110	Benzaldehyd-diethylacetal	135	107
γ -Octalactone	85	100	-	-	-

von 0,05 ml 37%iger Salzsäure wurde zur Vervollständigung der Reaktion über Nacht stehen gelassen. Die Mischung wurde am nächsten Tag durch zweimaliges Waschen mit je 20 ml 5%iger Kaliumhydrogencarbonatlösung säurefrei gewaschen und danach mit Natriumsulfat getrocknet. Die Abtrennung des Acetals erfolgte durch Rektifikation bzw. bei hochsiedenden Sub-

stanzen durch Vakuumdestillation. Die Reinheitsüberprüfung erfolgte gaschromatographisch.

Synthese der Decadiensäureester

Die Synthese und Gehaltsbestimmung der entsprechenden Methyl- und Ethylester erfolgte wie bei BRANDES et al. (2003).

Auswertung der Kost- und Analysenergebnisse

Die Auswertung der Ergebnisse erfolgte mit dem Softwarepaket SPSS 12.0 für Windows. Zur Bewältigung der Datenmenge wurden die zu einer Obstsorte gehörenden Konzentrationen der einzelnen Inhaltsstoffe in einem ersten Schritt einer Hauptkomponentenanalyse unterzogen und daraus durch orthogonale Rotation ein Satz unkorrelierter Faktoren gewonnen. Mit den Faktoren, deren Eigenwerte größer als 1 waren, wurden anschließend die zu den einzelnen Bränden gehörenden Faktorwerte berechnet und diese einer bivariaten Korrelation mit den Ergebnissen der sensorischen Bewertung unterzogen. Für die Interpretation allfälliger Zusammenhänge wurde die Ladung der Komponenten auf die einzelnen Faktoren herangezogen. Auf eine Wiedergabe sowohl der Analyseergebnisse wurde auf Grund des großen Umfangs hier verzichtet.

Ergebnisse und Diskussion

Fettsäureanalytik

Während die Analytik aller anderen Substanzen relativ unproblematisch war, gestaltete sich die Bestimmung der freien Fettsäuren als vergleichsweise schwierig. Hauptproblem war hierbei die Adsorption der Analyten an aktiven Stellen im Injektionsbereich, die zu massiven Verschleppungen und damit verbundenen unbefriedigenden Wiederfindungsraten führte. Dieses Problem ist auch durch die Verwendung von deaktivierten Linern nicht auf Dauer lösbar, da sich bereits nach wenigen Injektionen aktive Stellen bilden. Ansätze zur Lösung dieser Schwierigkeit versuchten entweder die Verweilzeit der Probe im Injektor zu minimieren (GUAN und PIEPER, 1998) oder die aktiven Stellen mit einer stark polaren Substanz zu coaten (UNTERWEGER und BANDION, 2003). Die zweite Möglichkeit wurde auch von uns mit Erfolg angewandt, wobei die Ameisensäure auf Grund ihrer Unschädlichkeit für die Trennsäule Mineralsäuren vorgezogen wurde.

Apfeldestillate

Die Hauptkomponentenanalyse führte zu einem System von 20 Faktoren (Tab. 2), die gemeinsam mehr als 95% der Gesamtvarianz des Datenmaterials erklärten. Das Ergebnis kann daher als sehr erklärungsreich beurteilt werden. Die zugehörige Korrelationsmatrix zeigt, dass fast alle Kategorien der sensorischen Bewertung miteinander signifikant positiv korrelieren. Eine Tren-

nung des Fruchtcharakters von der Sauberkeit ist daher entweder sensorisch oder technologisch nur sehr beschränkt möglich.

Deutlich negativ mit allen vier Kategorien der Sensorik korreliert der Faktor 1. Relativ hohe Ladungen auf diesen Faktor haben eine Reihe von Nachlaufkomponenten wie Benzylalkohol, Ethyllactat oder 2-Phenylethanol, vor allem aber Essigsäure, Propansäure, Butansäure, Isobutansäure, Hexansäure und die beiden isomeren Methylbutansäuren. Die negative sensorische Wirkung dieser Säuren ist alleine auf Grund des ausgesprochen unangenehmen Geruchs der meisten dieser Verbindungen nachvollziehbar und auch durch Untersuchungen belegt (GUAN und PIEPER, 1998; FREITAG, 2006).

Praktisch keine Korrelation mit der Sensorik hat Faktor 2. Die Komponentenmatrix zeigt vor allem hohe Ladungen bei den Estern der höheren Fettsäuren sowie im geringeren Ausmaß bei Benzaldehyd und Isopentanol. Der Beitrag dieser Verbindungen zum Geschmack der Destillate ist bei den hier untersuchten Proben eher gering.

Ähnliches gilt für Faktor 3, bei dem vor allem eine Reihe von Essigsäureestern mit höheren Alkoholen, Ethylester höherer Fettsäuren, aber auch höhere Alkohole wie Butanol-1, Pentanol-1 und Hexanol-1 hohe Ladungen besitzen. Der negative Einfluss von Hexanol-1 (PIEPER und RAU, 1987) spielt bei den hier untersuchten Destillaten und Konzentrationen offenbar keine Rolle.

Schwach positiv ist der Zusammenhang des Fruchtcharakters mit dem Faktor 4. In der Komponentenmatrix finden sich neben Acetaldehyd fast ausschließlich die Diethylacetale aller hier untersuchten Aldehyde außer Nonanal.

Faktor 5 hat praktisch keine Korrelation mit jeder der vier Sensorikkategorien, obwohl hier fast alle Aldehyde mit hohen Ladungen vertreten sind und einige dieser Substanzen als Apfelaromen gelten (SCHOLTEN, 2002).

Faktor 6 kann auf Grund der darin maßgeblich vertretenen Komponenten, wie Essigsäuremethyl- und Essigsäureethylester sowie weitere Ethylester kurzkettiger Fettsäuren, grob als Vorlaufkategorie bezeichnet werden. Trotzdem gibt es keine Korrelation mit der sensorischen Bewertung. Unter Berücksichtigung der Tatsache, dass diese Verbindungen in geringerer Konzentration durchaus positive Wirkung entfalten, in größerer Menge den Destillatcharakter jedoch negativ beeinflussen, ist dieses Ergebnis verständlich. Zusätzlich findet sich im Faktor 6 auch die mutmaßlich positiv wirksame

Tab. 2: Rotierte Komponentenmatrix Apfel

Substanzen	Komponente																			
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20
2-Phenylethanol	0.533	0.211	-0.134	-0.071	-0.142	-0.025	-0.021	0.438	-0.135	-0.070	-0.083	-0.152	-0.084	0.511	0.028	0.043	-0.011	-0.158	-0.006	-0.200
5-Methylfurfural	0.883	-0.058	-0.031	0.084	0.148	-0.092	-0.064	0.129	0.050	-0.071	0.095	0.007	-0.035	-0.245	-0.069	-0.072	-0.016	0.183	-0.011	-0.019
α-Terpineol	0.297	-0.226	-0.019	0.113	0.103	-0.002	0.457	-0.078	-0.081	-0.005	0.277	0.055	-0.044	0.202	0.029	0.074	-0.155	0.473	0.111	0.307
β-Citronellol	0.043	-0.164	-0.032	-0.010	-0.039	0.006	0.967	0.047	0.006	0.031	-0.006	0.021	-0.004	-0.039	-0.022	-0.022	0.068	-0.053	-0.007	0.058
Benzaldehyd-diethylacetal	-0.059	0.711	0.383	0.097	0.023	-0.120	0.083	-0.077	-0.077	-0.309	-0.024	-0.368	0.176	0.044	0.113	0.012	0.004	0.037	-0.047	-0.016
Benzaldehyd	0.136	0.663	0.367	0.160	0.171	-0.102	0.168	0.043	-0.089	-0.308	0.000	-0.308	0.177	0.066	0.169	-0.100	-0.100	0.016	-0.015	-0.039
Benzoesäure-ethyl-ester	0.701	0.176	-0.034	0.011	0.064	0.158	-0.018	-0.100	-0.036	0.421	-0.068	-0.108	0.100	0.142	-0.094	0.173	0.156	0.318	0.057	0.143
Benzylalkohol	0.949	0.013	-0.034	-0.011	0.059	0.035	0.016	-0.042	0.075	-0.027	-0.056	0.033	-0.086	-0.094	-0.190	0.030	-0.055	-0.078	-0.045	-0.051
Decanal	0.475	0.327	-0.039	-0.311	0.547	0.243	-0.141	-0.038	0.134	0.004	0.093	0.089	0.150	-0.014	0.000	-0.090	-0.066	-0.134	0.051	-0.097
Decansäure-methyl-ester	-0.079	0.634	-0.036	-0.053	0.099	0.267	-0.159	0.164	0.129	0.259	0.008	0.499	0.257	-0.092	0.017	0.099	-0.086	-0.074	-0.023	-0.093
Decansäure-ethyl-ester	-0.129	0.766	0.366	0.012	-0.050	-0.046	-0.112	0.182	0.161	0.048	-0.114	0.137	-0.345	0.042	-0.071	0.039	-0.047	-0.063	-0.004	-0.121
cis-4-Decensäure-ethyl-ester	-0.068	-0.013	0.063	-0.131	0.063	0.024	-0.101	-0.112	-0.011	-0.032	0.867	0.082	0.065	-0.197	0.144	0.271	-0.032	-0.056	0.049	-0.042
Decensäure-isoamyl-ester	-0.056	0.757	-0.127	-0.056	-0.123	-0.132	-0.046	0.079	-0.011	-0.094	-0.059	0.129	-0.545	-0.042	-0.120	-0.067	-0.027	-0.048	0.051	0.050
Decanol-1	0.137	0.544	0.129	-0.024	0.299	-0.097	0.090	0.186	-0.159	0.487	-0.007	0.210	0.129	0.256	0.081	-0.012	0.241	0.044	-0.123	0.087
Decansäure	0.303	0.276	-0.014	0.067	-0.080	-0.132	0.023	0.870	-0.044	-0.014	-0.051	-0.005	-0.005	0.098	-0.009	0.053	0.004	0.013	-0.029	0.094
Dodecansäure-methyl-ester	0.006	0.727	-0.105	-0.004	0.031	-0.036	-0.067	0.210	0.060	0.104	0.089	0.574	0.173	-0.031	-0.099	0.015	-0.049	-0.042	0.012	0.024
Dodecansäure-ethyl-ester	-0.092	0.803	-0.102	-0.050	-0.099	-0.152	-0.050	0.077	0.104	-0.051	0.042	0.163	-0.427	-0.128	-0.119	-0.014	-0.005	0.012	0.124	0.047
Dodecansäure	0.242	0.276	0.006	0.050	-0.067	-0.194	0.040	0.836	-0.054	-0.007	0.007	-0.032	-0.103	0.098	0.012	0.127	-0.059	0.087	-0.065	0.026
Tetradecansäure-methyl-ester	0.046	0.890	-0.048	0.043	-0.060	-0.057	0.050	0.024	-0.053	-0.049	0.119	0.333	0.266	0.053	-0.005	0.024	0.002	0.037	0.000	-0.002
Tetradecansäure-ethyl-ester	-0.035	0.828	-0.095	-0.064	-0.166	-0.138	0.133	-0.090	-0.090	-0.064	-0.026	-0.044	-0.228	0.195	-0.096	0.076	0.086	0.265	0.151	0.014
Hexadecansäure-methyl-ester	0.114	0.889	-0.003	-0.027	-0.046	-0.018	0.059	-0.186	-0.113	0.027	0.029	0.224	0.197	-0.057	0.002	0.005	0.020	-0.104	0.028	-0.034
Hexadecansäure-ethyl-ester	0.080	0.907	0.010	-0.025	0.002	-0.062	0.069	-0.133	-0.029	-0.098	0.020	-0.272	0.072	-0.040	0.079	0.094	0.076	-0.075	0.002	-0.061
Linolensäure-ethyl-ester	0.139	0.866	-0.074	-0.030	-0.161	-0.068	0.044	-0.101	-0.072	0.128	-0.117	0.051	-0.107	0.072	-0.144	-0.007	0.048	0.152	0.162	0.084
Linolensäure	0.215	0.875	-0.025	-0.073	-0.080	-0.009	0.029	-0.089	-0.046	0.126	-0.033	-0.135	0.202	0.056	-0.053	0.034	0.120	-0.112	0.143	0.009
Ameisensäure-ethyl-ester	0.037	0.250	0.018	-0.014	-0.049	0.054	-0.023	-0.062	-0.050	0.887	-0.082	-0.027	0.104	-0.063	0.029	-0.097	-0.123	-0.053	0.114	-0.011
Methanol	0.104	0.133	0.009	0.069	0.163	0.402	-0.146	0.183	0.059	0.185	0.339	0.341	0.508	-0.121	-0.090	-0.121	0.123	-0.011	0.263	0.007
Acetaldehyd-diethylacetal	-0.162	-0.097	0.262	0.914	-0.039	0.121	0.020	-0.058	0.032	-0.035	0.018	0.042	-0.030	0.032	-0.102	-0.008	-0.031	-0.013	-0.005	-0.013
Acetaldehyd	-0.186	-0.218	0.015	0.655	0.219	0.256	0.309	-0.080	-0.132	-0.007	0.095	0.006	-0.131	0.161	-0.048	-0.048	-0.294	0.014	0.122	0.159
Essigsäure-benzyl-ester	0.781	-0.051	0.068	0.067	0.180	0.046	0.070	-0.119	0.075	0.018	0.502	-0.043	-0.079	-0.052	-0.076	-0.152	-0.115	0.015	-0.070	-0.049
Essigsäure-methyl-ester	0.138	-0.136	-0.050	0.476	-0.013	0.726	0.012	-0.139	0.050	-0.038	0.076	0.237	0.135	0.028	-0.050	-0.024	0.140	-0.087	0.083	0.030
Essigsäure-ethyl-ester	0.108	-0.228	-0.004	0.253	0.017	0.828	0.267	-0.204	0.027	-0.153	0.212	-0.033	0.021	-0.035	0.039	0.095	-0.105	0.061	-0.027	0.041
Essigsäure-propyl-ester	0.039	-0.225	0.018	0.079	0.099	0.173	0.282	-0.178	0.821	-0.118	0.078	0.053	-0.036	-0.101	-0.024	-0.082	-0.066	0.094	-0.015	-0.080
Essigsäure-pentyl-ester	-0.213	-0.118	0.542	0.117	-0.011	-0.188	-0.005	-0.136	0.712	0.069	0.002	-0.009	-0.109	0.080	-0.005	-0.155	-0.092	0.018	-0.004	-0.047
Essigsäure-hexyl-ester	-0.196	-0.112	0.741	0.140	0.001	-0.185	-0.036	-0.136	0.445	-0.090	0.058	0.015	-0.096	0.066	-0.112	-0.233	-0.091	0.024	0.009	-0.058
Essigsäure-trans-2-hexenyl-ester	-0.082	-0.078	-0.016	-0.041	0.081	-0.035	0.399	-0.034	0.029	0.008	0.874	-0.040	-0.036	-0.035	-0.072	-0.152	-0.065	0.028	0.028	-0.038
Essigsäure-2-methylbutyl-ester	0.086	0.112	0.922	0.111	-0.047	-0.038	-0.003	-0.102	0.061	0.061	-0.080	-0.066	-0.044	-0.097	0.091	-0.145	-0.053	0.027	-0.112	-0.037
Essigsäure-2-methylpropyl-ester	-0.285	-0.071	0.129	0.245	0.028	0.177	-0.088	-0.313	0.547	-0.063	-0.175	0.099	-0.284	-0.185	-0.038	-0.189	-0.068	-0.057	-0.302	-0.026
Essigsäure-3-methylbutyl-ester	-0.126	-0.119	0.268	0.056	-0.120	-0.171	-0.146	-0.049	0.481	-0.099	0.151	0.065	-0.574	-0.096	0.294	-0.157	0.024	0.138	-0.080	-0.046
Essigsäure-2-phenylethyl-ester	-0.085	0.095	-0.062	-0.130	-0.228	-0.069	-0.069	-0.077	-0.054	-0.029	-0.010	-0.128	-0.898	0.024	-0.096	-0.080	-0.036	-0.047	0.109	0.017
Essigsäure	0.719	-0.244	-0.088	0.068	-0.046	0.322	-0.026	0.123	0.000	-0.095	-0.047	-0.067	0.109	0.325	-0.006	0.134	-0.058	-0.187	-0.031	-0.172
Propansäure	-0.035	-0.110	0.216	0.886	-0.118	-0.011	0.038	-0.072	0.088	-0.101	-0.075	0.052	0.018	0.248	0.077	-0.022	0.078	-0.013	-0.053	-0.020
Propansäure-diethylacetal	-0.055	-0.207	0.021	0.051	-0.069	0.864	0.036	0.163	0.014	-0.187	-0.029	-0.080	-0.074	0.127	-0.101	-0.105	0.096	0.164	0.106	0.058
Propansäure-ethyl-ester	0.002	-0.155	-0.138	-0.071	-0.344	-0.234	-0.043	-0.122	-0.014	0.002	-0.037	-0.094	0.062	0.150	0.006	-0.034	-0.023	0.037	-0.706	-0.030
3-Ethoxypropanal-diethylacetal	0.904	-0.029	0.030	-0.062	-0.016	0.038	-0.004	0.229	0.012	0.121	-0.041	0.037	-0.036	-0.079	0.203	-0.018	0.017	0.096	-0.029	-0.051
Milchsäure-ethyl-ester	-0.103	0.022	0.069	-0.086	0.502	-0.058	0.030	-0.126	0.553	0.096	-0.027	0.128	0.034	0.026	-0.102	0.076	0.536	0.125	-0.107	0.021
Propanol-1	0.517	-0.256	0.062	0.092	-0.120	-0.030	0.267	-0.035	-0.091	-0.167	0.334	0.142	0.139	0.363	-0.048	-0.198	0.176	0.006	0.118	0.320
Butansäure	-0.005	-0.166	0.842	0.396	-0.153	-0.024	0.040	0.057	-0.018	-0.053	-0.070	0.009	0.062	0.015	-0.053	-0.038	0.023	-0.047	0.000	-0.001
Butanal-diethylacetal	-0.084	-0.098	0.920	0.249	-0.083	0.038	-0.043	-0.072	-0.035	-0.066	-0.047	0.037	0.025	0.015	-0.157	-0.101	-0.057	0.134	-0.022	-0.072
Butansäure-methyl-ester	-0.040	-0.191	0.819	0.373	-0.083	0.204	-0.074	-0.137	0.064	-0.067	-0.093	0.038	-0.009	-0.021	-0.067	0.134	-0.066	-0.038	-0.048	0.008
Butansäure-ethyl-ester	0.781	-0.146	-0.020	-0.060	-0.137	-0.054	0.068	0.204	-0.110	-0.052	-0.044	0.047	0.008	0.062	0.399	0.032	0.174	0.147	0.120	-0.098
Bernsteinsäure-diethyl-ester	0.076	-0.183	0.818	-0.062	-0.072	-0.088	-0.100	0.197	-0.007	-0.043	0.261	-0.028	-0.034	0.103	0.263	-0.081	0.060	0.010	0.210	-0.020
Butanol-2	0.215	-0.141	-0.034	-0.211	-0.088	0.459	-0.077	0.007	-0.039	0.073	0.005	-0.026	0.028	0.029	0.049	-0.006	0.024	0.790	-0.070	-0.007
Butansäure	0.815	0.196	0.129	-0.016	-0.113	-0.076	0.302	0.027	0.047	-0.178	-0.052	-0.092	0.031	-0.060	0.068	0.035	0.038	-0.176	0.093	-0.037
Pentansäure-diethylacetal	0.160	0.252	0.216	0.846	-0.077	0.161	-0.030	0.134	0.009	0.045	-0.124	-0.060	0.128	0.026	0.058	0.035	-0.033	0.046	0.065	0.049
Pentanal	0.165	0.057	-0.130	0.004	0.767	0.331	-0.027	-0.120	-0.126	0.009	-0.102	-0.022	0.170	-0.015	-0.079	-0.153	-0.092	0.185	0.169	-0.172
Pentanol-1	0.182	0.032	0.802	-0.063	0.085	-0.0														

Fortsetzung Tab. 2: Rotierte Komponentenmatrix Apfel

Substanzen	Komponente																			
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20
Hexanal-diethylacetal	-0,046	0,010	0,454	0,664	0,036	-0,032	0,298	0,015	0,445	-0,085	0,020	-0,018	0,072	0,067	0,027	0,090	0,013	-0,088	0,080	-0,095
Hexanal	-0,070	-0,239	0,026	-0,102	0,640	0,032	0,528	-0,082	0,090	-0,097	0,307	0,025	0,067	0,041	-0,014	-0,035	-0,169	0,023	0,187	-0,093
Hexansäure-methyl-ester	-0,141	0,057	0,209	0,401	0,046	0,455	-0,184	-0,093	0,252	0,228	0,252	0,457	0,194	-0,241	0,059	0,123	0,041	-0,137	0,047	-0,075
Hexansäure-ethyl-ester	-0,045	0,034	0,511	0,414	-0,025	0,065	0,023	0,052	0,335	0,403	0,137	-0,116	-0,116	-0,065	0,111	0,219	0,139	0,094	0,045	-0,186
cis-3-Hexenol-1	0,195	0,104	-0,167	0,304	0,289	0,031	0,234	0,284	-0,053	0,003	-0,116	-0,142	-0,071	0,128	-0,078	-0,059	-0,111	0,080	0,010	0,680
5-Hexenol-1	0,058	0,058	-0,036	-0,021	0,142	-0,048	-0,044	0,146	-0,057	-0,050	-0,023	-0,041	0,103	0,016	-0,035	0,880	0,042	0,011	0,024	-0,023
Hexansäure-2-methylbutyl-ester	-0,042	0,384	-0,007	-0,046	0,299	0,240	-0,109	0,127	-0,019	0,164	0,096	0,021	0,139	-0,238	0,571	-0,026	-0,062	-0,042	0,007	-0,005
Hexansäure-3-methylbutyl-ester	-0,033	0,655	0,074	-0,005	0,242	0,234	-0,106	0,248	-0,006	0,150	-0,004	0,049	0,100	-0,227	0,512	0,001	-0,005	-0,030	-0,070	-0,086
Hexanol	0,144	0,184	0,822	0,049	0,159	-0,166	0,002	0,063	-0,152	0,060	0,215	-0,128	0,052	-0,065	0,093	0,099	0,195	0,021	0,151	0,005
Hexansäure	0,580	-0,006	0,005	-0,013	-0,139	-0,093	0,019	0,698	-0,028	-0,002	-0,049	0,066	0,081	-0,118	0,084	0,065	0,128	-0,104	0,114	-0,008
Heptanal-diethylacetal	0,094	0,204	0,128	0,719	-0,027	-0,008	-0,117	0,033	0,560	0,123	-0,094	-0,101	0,084	-0,033	0,039	-0,029	0,007	-0,047	0,021	0,054
Heptanal	0,202	-0,147	0,038	-0,085	0,852	0,017	0,099	-0,195	0,121	-0,008	0,224	-0,109	0,098	0,126	0,095	0,129	-0,069	-0,026	0,105	0,056
Heptanol-1	0,468	0,339	0,275	-0,012	0,256	0,029	0,127	-0,054	0,163	0,442	0,118	-0,120	0,102	0,286	0,029	0,294	0,211	0,073	0,079	-0,051
Octanal	-0,072	0,080	-0,052	-0,007	0,886	-0,090	0,015	0,005	-0,064	0,016	0,279	-0,093	0,076	0,048	0,127	0,009	0,128	-0,050	0,022	0,194
Octansäure-methyl-ester	-0,170	0,365	0,073	0,111	0,064	0,606	-0,198	0,042	0,081	0,418	-0,007	0,304	0,244	-0,138	0,066	0,096	-0,039	-0,077	-0,013	-0,152
Octansäure-ethyl-ester	-0,138	0,216	0,900	0,201	-0,018	0,113	-0,084	-0,012	0,039	0,093	-0,109	0,005	-0,019	0,037	-0,053	-0,046	-0,010	-0,028	-0,074	-0,109
Octansäure-propyl-ester	-0,216	0,139	0,688	0,088	0,226	0,148	-0,059	-0,155	0,324	0,085	-0,078	0,354	0,126	-0,034	-0,126	0,020	-0,087	0,072	-0,216	-0,038
Octansäure-2-methylbutyl-ester	-0,026	0,900	-0,105	-0,026	0,092	-0,024	-0,085	0,269	0,084	0,079	-0,033	0,131	-0,083	-0,077	0,069	-0,028	-0,139	-0,043	-0,056	0,012
Octansäure-2-methylpropyl-ester	0,014	0,813	0,048	0,080	0,149	0,068	-0,095	0,198	0,037	0,294	-0,074	0,197	0,081	-0,106	0,040	-0,176	-0,085	-0,043	-0,161	0,057
Octansäure-3-methylbutyl-ester	-0,040	0,878	-0,105	0,001	0,015	0,039	0,045	0,004	0,048	0,011	-0,073	0,079	-0,177	-0,077	0,028	-0,026	-0,125	-0,025	-0,066	0,040
Octanol-1	0,483	0,311	0,427	0,067	0,007	0,023	0,014	0,093	-0,135	0,213	0,335	-0,063	0,119	0,228	0,219	0,342	-0,139	0,026	0,118	0,031
Octansäure	0,344	0,189	0,006	0,034	-0,131	-0,096	-0,027	0,876	-0,042	-0,002	-0,054	0,033	0,030	-0,034	-0,005	0,022	-0,053	-0,072	-0,003	0,095
Nonanal	0,260	0,221	-0,023	0,266	0,106	-0,045	-0,041	0,068	0,786	0,141	-0,095	-0,016	0,084	-0,004	0,031	0,285	-0,029	-0,123	0,081	0,022
Nonansäure-ethyl-ester	0,257	-0,062	-0,003	-0,076	0,794	0,014	-0,011	-0,079	0,230	0,161	-0,119	-0,064	-0,018	0,041	-0,077	0,251	0,237	-0,101	-0,038	0,102
Nonanol-1	0,749	0,165	0,027	-0,051	0,329	0,218	-0,048	-0,094	0,097	0,286	-0,031	0,028	-0,011	-0,030	-0,165	0,214	0,009	-0,110	-0,038	-0,189
Nonansäure-ethyl-ester	0,546	0,151	0,113	0,003	0,398	0,045	0,008	-0,025	0,505	0,042	0,121	0,009	0,016	-0,030	-0,223	0,306	0,205	-0,023	-0,026	-0,106
cis-Linalooloxid	0,596	0,163	-0,029	-0,022	-0,064	-0,174	0,216	0,131	-0,249	-0,135	0,065	0,248	-0,041	0,289	0,418	-0,047	0,005	0,125	0,118	0,031
Diacetyl	0,401	-0,054	-0,099	-0,038	-0,011	0,022	-0,123	-0,004	0,566	-0,100	-0,025	-0,150	-0,024	-0,024	-0,225	-0,261	0,254	-0,186	0,145	0,283
Eugenol	0,725	-0,145	0,051	-0,083	0,011	-0,028	0,008	0,209	-0,044	-0,085	0,022	0,119	-0,102	-0,135	0,497	-0,035	0,071	0,115	0,002	-0,087
Farnesol-1	0,188	-0,082	-0,087	-0,128	0,440	-0,216	0,044	0,288	-0,135	0,108	-0,024	0,109	0,075	0,041	0,103	0,099	0,644	-0,082	0,131	-0,090
Farnesol-2	0,098	0,280	-0,060	-0,066	-0,084	-0,014	-0,014	-0,052	-0,104	-0,071	0,064	0,891	0,025	0,173	-0,049	-0,072	0,052	0,005	0,031	-0,070
Farnesol-3	0,320	0,056	-0,084	-0,124	0,006	-0,177	0,005	0,632	-0,217	-0,006	-0,059	0,060	0,191	0,247	0,258	0,008	0,028	0,003	0,333	-0,258
Furfural	0,513	0,053	-0,220	0,026	0,160	-0,006	-0,132	0,507	-0,139	0,065	0,166	0,074	0,256	-0,033	0,016	-0,206	0,037	0,175	0,216	0,066
Geraniol	0,020	-0,093	-0,038	0,002	-0,057	0,022	0,979	0,037	0,031	-0,001	0,321	-0,119	-0,110	-0,110	0,029	0,009	0,004	-0,005	0,093	0,011
2-Methylbutansäure-ethyl-ester	0,387	-0,140	-0,014	0,047	0,230	0,592	0,009	-0,146	-0,071	0,083	-0,015	0,066	-0,045	-0,041	-0,023	-0,047	0,027	-0,096	0,093	0,148
2-Methylpropanal-diethylacetal	-0,060	0,042	0,042	0,965	-0,027	0,112	-0,113	0,083	-0,015	0,066	-0,045	-0,045	-0,003	-0,041	-0,023	-0,047	0,026	-0,014	-0,027	0,018
2-Methylpropanal-diethylacetal	-0,116	-0,248	0,391	0,427	0,060	0,372	-0,086	-0,104	0,293	-0,102	-0,012	0,074	0,079	0,032	0,137	0,115	-0,367	-0,094	0,037	0,129
2-Methylpropanal-diethylacetal	0,018	-0,129	0,099	0,410	0,135	0,221	-0,076	0,108	-0,148	-0,018	-0,048	0,105	-0,037	0,766	-0,028	0,006	-0,132	0,002	0,017	0,009
2-Methylpropanal-1	-0,021	0,402	0,017	0,202	0,337	0,004	-0,175	0,032	-0,001	0,619	-0,008	-0,153	-0,128	-0,006	0,003	-0,119	0,303	0,036	-0,295	-0,007
2-Methylpropanal	0,683	0,023	-0,086	-0,028	-0,202	-0,105	-0,086	0,346	-0,061	0,142	-0,069	-0,043	0,087	-0,039	0,346	-0,200	0,050	-0,093	-0,156	-0,025
3-Methylbutansäure	-0,003	-0,051	0,350	0,906	-0,071	0,103	-0,097	0,026	0,018	0,056	-0,031	-0,018	0,006	-0,028	-0,055	0,002	-0,027	-0,060	0,025	0,025
3-Methylbutanal	0,250	-0,103	-0,041	0,390	0,268	0,607	-0,039	0,026	-0,066	0,199	0,166	-0,013	0,036	-0,055	0,034	-0,165	0,130	0,197	-0,010	0,022
3-Methylbutansäure-ethyl-ester	0,249	-0,079	-0,074	0,117	0,046	0,809	-0,084	-0,092	-0,081	0,203	-0,158	-0,120	0,034	0,034	0,086	-0,073	-0,121	0,085	-0,017	-0,093
3-Methylbutanol-1	-0,010	0,607	0,109	0,056	0,057	-0,052	-0,110	0,134	-0,065	0,465	0,098	-0,258	-0,073	0,043	0,156	0,004	0,246	0,043	-0,192	0,013
3-Methylbutansäure	0,894	-0,014	-0,052	-0,058	-0,062	0,105	0,003	0,079	0,037	-0,021	-0,031	-0,099	0,095	0,048	-0,164	-0,086	0,142	-0,148	0,032	0,163
Linalool	-0,018	0,244	-0,037	0,010	-0,097	-0,052	-0,036	0,033	0,072	-0,117	-0,019	0,885	0,010	-0,050	0,131	-0,011	0,026	0,017	0,027	0,024
Phenylacetaldehyd	0,047	-0,075	0,060	0,065	0,242	-0,128	0,558	-0,169	0,126	0,008	0,594	0,114	-0,039	0,223	0,003	0,063	-0,042	0,257	0,016	0,180
Phenylacetaldehyd	0,585	0,312	-0,051	0,000	0,015	0,111	-0,020	0,318	-0,027	0,457	-0,081	-0,093	0,162	0,187	-0,187	0,130	0,031	0,169	0,075	0,232
Salicylsäure-ethyl-ester	0,901	0,095	-0,015	0,033	0,176	0,039	0,030	-0,147	0,082	-0,039	-0,044	-0,079	-0,041	-0,039	-0,069	0,101	-0,146	0,122	-0,114	0,061
trans-2-Decensäure-ethyl-ester	0,088	0,017	-0,056	-0,123	0,183	-0,049	-0,078	0,081	0,035	-0,040	0,852	0,021	-0,014	0,369	-0,019	-0,126	0,092	-0,012	-0,061	-0,029
trans-2-Hexenal	-0,111	0,098	-0,073	0,004	0,081	0,015	0,964	0,003	0,001	-0,046	-0,044	-0,031	0,068	-0,030	-0,003	-0,019	0,064	-0,059	0,014	0,000
trans-2-Hexenal	0,318	0,191	-0,052	0,021	0,057	0,006	0,879	-0,038	0,042	-0,066	0,129	-0,131	0,049	-0,037	-0,029	0,014	-0,069	0,035	-0,029	-0,032
trans-Linalooloxid	0,858	-0,018	-0,033	-0,021	0,057	0,056	0,216	-0,004	-0,086	-0,144	0,026	0,220	0,051	0,185	0,147	-0,031	-0,096	0,079	-0,028	0,009
Zimtsäure-ethyl-ester	0,901	0,082	0,002	-0,018	0,023	0,089	0,030	0,056	0,062	0,086	-0,068	-0,021	0,081	-0,022	-0,277	-0,044	0,051	-0,076	0,023	0,217
trans-2-cis-4-Decensäure-ethyl-ester	-0,029	-0,123	-0,119	-0,153	0,196	-0,021	-0,121	0,243	0,086	0,075	0,291	0,004	0,017	0,762	-0,135	0,034	0,163	0,142	-0,222	0,137
Essigsäure-butyl-ester	-0,062	0,510	0,126	0,001	0,021	-0,169	-0,161	0,044												

Aromakomponente 2-Methylbutansäureethylester (SCHOLTEN, 2002) mit relativ hoher Ladung, und die Kompensation der Wirkung allfälliger Vorlaufkomponenten durch diese Verbindung ist durchaus denkbar. Signifikant positiv mit Geschmack-Sauberkeit korreliert Faktorwert 7. In der Komponentenmatrix scheinen dafür die Verbindungen β -Citronellol, Hexanal, Geraniol, trans-2-Hexenol und trans-2-Hexenal mit hoher Ladung auf. Obwohl vor allem die beiden Aldehyde, aber auch trans-2-Hexenol als charakteristische Aromakomponenten des Apfels gelten (PRELL et al., 2001), wurden sie hier offenbar als Sauberkeitsparameter wahrgenommen.

Negativ korreliert mit dem Parameter Geschmack-Sauberkeit ist der Faktorwert 8 mit deutlichen Ladungen der freien Fettsäuren ab sechs Kohlenstoffatomen. Alle oben genannten Verbindungen sind als mutmaßliche Verursacher des Nachlauftons bekannt (GUAN und PIEPER, 1998).

Keine Korrelation mit der Sensorik hat der Faktorwert 9. Bei der korrespondierenden Komponentenmatrix ist lediglich das mit höherer Ladung aufscheinende Diacetyl interessant. Diacetyl ist ein typisches Produkt des Stoffwechsels von Milchsäurebakterien und gilt damit als ein Indikator für unsaubere Vergärungen. Offenbar waren auch hier ähnlich wie bei Hexanol-1 die gemessenen Konzentrationen zu gering, um eine Unsauberkeit der Destillate zu bewirken.

Signifikant negativ mit Geruch-Sauberkeit ist die Korrelation mit dem Faktorwert 10. Eine hohe Ladung hat hier vor allem der Ameisensäureethylester neben den typischen Gärungsalkoholen Isobutanol und isomeren Isopentanol. Ameisensäure ist zwar ein charakteristisches Gärungsprodukt von Enterobakterien, ein allgemeiner Rückschluss auf eine unsaubere Maische ist in diesem Fall jedoch nicht möglich, da der Ameisensäureethylester lediglich bei einer Probe nachgewiesen werden konnte.

Signifikant negativ auf die Kategorie Frucht-Charakter ist der Einfluss von Faktorwert 11, wobei aber keine der dafür in Frage kommenden Substanzen diesen Zusammenhang schlüssig erklärt. Die beiden Decensäureethylester sind zwar in größerer Konzentration typische Inhaltsstoffe von Williamsbirnen-Bränden (POSTEL und ADAM, 1982), die gefundenen Mengen scheinen jedoch für eine Beeinflussung der Sensorik in Richtung Untypizität relativ gering, und Essigsäure-2-hexenylester wurde ohnehin nur bei einer Probe nachgewiesen. Weitere Zusammenhänge existieren noch bei Faktorwert 14 und Geruch-Sauberkeit sowie in schwächerem

Ausmaß bei Faktorwert 16 und Geschmack-Sauberkeit sowie Faktorwert 18 und Geruch-Sauberkeit und Frucht-Charakter. Bei Wert 14 kommt als einziger möglicher Verursacher 2-Phenylethanol in Frage, dessen negativer Einfluss bei höheren Konzentrationen beschrieben wird (SCHOLTEN, 2002). Bei Faktorwert 16 scheint nur 5-Hexenol-1 als mögliche negativ beeinflussende Komponente auf, während bei Faktor 18 kein Inhaltsstoff gefunden werden konnte.

Allgemein lässt sich bei den hier untersuchten Apfelbränden noch bemerken, dass von der Literatur her bekannte Unsauberkeitsparameter, wie Butanol-2 (ADAM et al., 1995) oder 1,1,3-Triethoxypropan (POSTEL und ADAM, 1982), nicht bestätigt werden konnten. Interessant ist auch, dass kein einziger Faktor gefunden wurde, auf dem Methanol eine hohe Ladung besitzt. Es existiert somit praktisch keine hier untersuchte Komponente, die mit diesem sensorisch bedeutungslosen Alkohol eine höhere Korrelation aufweist. Dieses schon von MISSELHORN (1992) bei einem wesentlich geringeren Datensatz gefundene Charakteristikum konnte von uns hier bestätigt werden. Alle hier gefundenen Zusammenhänge sind auf Grund der eingeschränkten Probenzahl allerdings nicht ohne Vorbehalte zu verallgemeinern.

Williamsbirnendestillate

Wie bei den Apfeldestillaten führte auch hier die Hauptkomponentenanalyse zu 20 Faktoren (Tab.3) mit einer Gesamtvarianzerklärung von mehr als 95%. Bezüglich der Zusammenhänge zwischen den sensorischen Kategorien gilt sinngemäß das bei den Apfelbränden Gesagte.

Signifikant negativ mit allen sensorischen Bewertungen korreliert Faktorwert 2. Wie bei den Apfeldestillaten finden sich bei den möglichen Verursachern Nachlaufkomponenten, wie Benzylalkohol, Milchsäure-ethylester oder 2-Phenylethanol, vor allem aber Essigsäure und Propansäure. Faktor 3 zeigt einen negativen Einfluss auf Geruch-Sauberkeit, aber einen positiven auf Frucht-Charakter. In Übereinstimmung damit enthält der Faktor einerseits als typische Vorlaufkomponenten nahezu alle Methyl- und Ethylester der Karbonsäuren mit bis zu vier Kohlenstoffatomen, aber auch die als sensorisch positiv wirksam bekannten Methyl- und Ethylester der trans-2-trans-4-Decadiensäure.

Ein schwach positiver Zusammenhang mit der Punktzahl Frucht-Charakter besteht bei Faktorwert 4. Hohe Ladungen besitzen hier vor allem die Acetale bis zum Pentanal, aber auch Benzaldehyd und Benzoesäureethylester.

Tab. 3: Rotierte Komponentenmatrix Williamsbirne

Substanzen	Komponente																			
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20
2-Phenylethanol	0,148	0,567	0,073	-0,058	0,723	0,011	-0,074	-0,059	-0,061	-0,171	0,019	-0,089	-0,039	-0,008	-0,168	0,005	-0,077	-0,077	-0,089	-0,089
5-Methylfurfural	-0,078	0,420	0,057	0,436	0,520	0,045	0,060	-0,028	-0,078	-0,156	-0,197	0,162	0,034	0,308	-0,041	0,020	0,079	0,079	0,315	0,006
α -Terpinol	-0,011	0,966	-0,049	0,040	0,011	-0,009	-0,047	0,011	0,056	-0,048	-0,058	0,039	-0,024	-0,027	-0,085	0,020	-0,058	-0,058	-0,052	-0,052
β -Citronellol	0,014	0,116	-0,091	0,626	0,212	-0,045	0,301	0,259	-0,020	0,306	0,209	0,057	0,125	0,096	0,171	0,107	-0,178	-0,008	-0,008	-0,006
Benzaldehyd	0,416	0,188	0,010	0,668	-0,009	-0,188	0,052	-0,013	-0,040	-0,016	0,060	0,133	-0,134	0,007	-0,101	-0,040	-0,066	0,116	0,351	0,351
Benzoesäure-ethylester	0,034	0,219	-0,139	0,614	-0,221	-0,159	0,096	0,269	0,058	0,294	0,085	-0,105	0,184	-0,341	-0,237	0,045	0,087	0,022	0,034	0,034
Benzylalkohol	0,014	0,520	0,375	-0,170	-0,183	0,194	0,046	0,205	0,012	0,114	-0,114	-0,080	-0,394	-0,150	-0,181	0,223	0,176	-0,074	0,037	0,037
Decansäure-ethylester	0,717	-0,089	0,367	0,068	0,141	0,368	-0,068	0,013	-0,049	0,100	0,196	-0,139	0,061	-0,060	-0,055	-0,053	0,174	-0,201	0,068	0,068
Decansäure-ethylester	0,839	-0,085	0,007	-0,074	0,331	0,143	-0,001	0,177	0,107	-0,027	0,152	-0,118	0,009	0,045	0,022	-0,017	-0,139	-0,016	-0,149	-0,005
cis-4-Decensäure-ethylester	-0,005	-0,231	0,277	0,383	0,029	0,413	-0,072	0,532	-0,046	-0,151	0,079	0,047	0,203	0,175	0,196	-0,140	0,095	0,079	-0,039	0,188
Decansäure-isoamylester	0,929	0,105	-0,008	0,050	-0,048	0,001	-0,003	-0,017	0,273	-0,042	-0,019	0,061	-0,056	0,002	0,019	0,071	-0,002	-0,049	0,101	-0,015
Decanol-1	0,137	-0,003	0,006	0,030	0,095	0,199	-0,017	0,191	0,160	0,168	0,098	-0,146	-0,352	0,110	-0,327	0,133	-0,244	-0,042	-0,042	0,066
Decansäure	0,074	-0,010	-0,032	0,166	0,940	0,038	-0,013	0,114	-0,078	-0,042	0,119	0,080	0,000	0,045	0,065	0,033	-0,077	-0,016	-0,058	0,038
Dodecansäure-methylester	0,923	0,089	0,123	0,129	0,118	0,050	0,025	-0,011	-0,024	-0,088	0,063	-0,019	0,064	0,077	-0,032	0,208	0,021	-0,031	-0,066	0,012
Dodecansäure-ethylester	0,957	0,033	-0,037	0,039	0,017	0,022	0,049	-0,024	0,205	-0,074	0,015	0,032	0,081	0,014	0,034	0,057	0,010	-0,029	-0,031	0,011
Dodecansäure	0,034	-0,124	0,003	0,258	0,880	0,038	-0,016	0,081	-0,044	-0,097	0,023	0,068	0,128	0,106	-0,082	-0,168	-0,161	-0,004	0,027	-0,092
Tetradecansäure-methylester	0,849	0,027	0,099	0,230	0,068	0,212	0,112	0,025	0,203	-0,044	-0,073	0,038	0,082	0,106	0,034	0,168	-0,161	-0,004	0,027	-0,092
Tetradecansäure-ethylester	0,727	-0,019	-0,061	0,024	0,021	0,190	0,044	0,046	0,605	0,013	0,008	0,057	-0,041	0,137	0,013	-0,004	0,085	-0,009	-0,005	0,015
Hexadecansäure-methylester	0,391	0,038	-0,029	0,007	-0,111	0,353	-0,032	0,027	0,785	-0,052	-0,031	0,012	0,071	0,172	0,072	0,125	0,102	0,029	0,085	-0,057
Hexadecansäure-ethylester	0,328	0,033	0,030	-0,038	-0,164	0,294	-0,032	-0,019	0,803	0,007	0,034	-0,092	0,180	0,020	0,009	0,122	0,130	0,173	-0,075	-0,075
Linolensäure-ethylester	0,148	0,311	0,043	0,284	-0,018	-0,173	-0,136	-0,121	0,445	-0,111	-0,058	-0,071	-0,107	0,605	-0,165	-0,072	0,122	0,121	-0,089	0,048
Linolensäure	0,390	0,126	-0,089	0,229	0,097	-0,011	-0,043	0,065	0,431	-0,012	-0,035	-0,075	0,139	0,671	0,013	0,084	-0,064	0,050	0,077	-0,142
Ameisensäure-ethylester	0,126	0,026	-0,052	0,195	-0,029	0,047	-0,063	-0,273	-0,126	-0,123	-0,074	-0,042	0,082	-0,004	-0,027	0,819	0,146	0,046	0,004	-0,040
Methanol	0,024	-0,025	0,090	0,488	0,031	0,491	0,191	-0,224	-0,111	-0,323	0,106	0,144	-0,123	0,113	-0,052	0,125	-0,012	0,324	0,111	0,010
Acetaldehyd-diethylester	0,019	0,447	-0,063	0,505	0,073	0,118	-0,193	-0,113	-0,049	0,222	0,009	0,298	-0,097	0,026	0,393	0,128	-0,218	0,010	-0,217	-0,290
Acetaldehyd	0,081	0,652	0,040	0,236	0,039	0,005	-0,114	-0,086	-0,142	-0,004	0,031	-0,004	0,047	0,283	0,346	0,276	-0,177	0,178	-0,063	-0,233
Essigsäure-methylester	0,171	0,029	0,860	0,177	0,141	0,087	0,057	0,217	-0,076	-0,083	0,094	-0,048	-0,109	0,070	-0,060	0,009	-0,016	0,003	0,128	-0,151
Essigsäure-ethylester	0,036	0,187	0,606	0,406	-0,131	-0,124	0,377	0,122	-0,054	-0,116	0,020	0,056	0,022	0,302	0,158	0,027	-0,031	0,101	0,029	-0,175
Essigsäure-propylester	0,059	-0,100	0,925	-0,144	-0,061	0,080	0,257	-0,023	0,074	0,027	-0,023	0,023	-0,080	-0,058	-0,015	0,066	-0,072	-0,028	-0,041	0,046
Essigsäure-pentylester	0,227	-0,205	0,145	-0,029	0,009	0,911	-0,022	-0,039	0,132	-0,015	-0,008	0,073	-0,031	-0,019	-0,017	0,032	-0,076	-0,006	-0,021	-0,001
Essigsäure-hexylester	0,204	-0,195	0,061	-0,063	0,043	0,913	0,014	0,016	0,118	0,031	-0,085	0,059	-0,012	-0,021	-0,021	0,032	-0,096	0,107	0,002	0,011
Essigsäure-trans-2-hexenylester	0,104	-0,180	-0,121	-0,025	-0,143	0,208	0,025	-0,185	0,429	-0,157	-0,017	-0,100	0,013	-0,032	0,101	0,125	-0,129	0,722	-0,051	-0,137
Essigsäure-2-methylbutylester	0,332	-0,124	0,223	0,172	-0,041	0,602	-0,027	-0,367	0,408	0,241	0,019	-0,086	0,063	-0,038	-0,039	-0,032	0,073	-0,032	-0,036	-0,030
Essigsäure-2-methylpropylester	0,333	-0,056	0,412	0,230	-0,141	0,429	0,001	-0,337	0,408	0,176	0,004	-0,024	0,086	0,030	0,014	-0,052	0,164	-0,126	-0,089	-0,043
Essigsäure-3-methylbutylester	0,278	-0,154	0,433	0,202	0,116	0,454	0,056	-0,294	0,405	0,231	0,004	-0,236	-0,113	-0,129	-0,030	-0,002	0,048	-0,038	0,180	-0,026
Essigsäure-2-phenylethylester	0,156	0,012	0,063	0,079	0,772	0,233	0,194	-0,015	0,030	0,071	-0,183	-0,274	-0,144	-0,249	-0,042	-0,058	-0,046	-0,080	-0,050	0,007
Essigsäure	0,018	0,555	0,173	0,418	0,047	-0,092	0,046	-0,044	-0,095	0,023	0,226	0,221	0,229	0,454	0,158	0,130	0,077	-0,091	-0,069	-0,117
Propanal-diethylester	-0,060	-0,009	0,020	0,768	0,072	-0,118	0,072	0,262	-0,053	0,140	0,098	-0,068	0,230	-0,194	-0,173	0,183	0,107	-0,160	-0,206	-0,103
Propanal-ethylester	0,275	-0,099	0,925	0,007	-0,037	-0,023	-0,082	0,120	0,084	0,016	-0,051	-0,058	0,005	0,003	-0,070	-0,076	0,056	0,004	-0,049	0,006
3-Ethoxypropanal-diethylester	-0,083	0,150	0,018	0,174	-0,039	-0,043	0,931	-0,110	-0,069	-0,053	-0,057	-0,040	0,071	0,025	0,071	0,025	0,109	-0,089	-0,051	0,016
Milchsäure-ethylester	0,061	0,702	-0,138	-0,045	0,070	-0,211	0,003	-0,129	0,002	0,056	0,057	-0,033	-0,055	0,093	0,223	0,351	0,323	-0,146	-0,094	-0,044
Propanol-1	-0,137	0,046	0,055	0,051	-0,050	-0,034	0,948	-0,094	-0,017	-0,005	-0,044	-0,045	-0,159	-0,043	0,022	-0,034	-0,044	-0,052	0,033	0,062
Propanol-2	0,025	0,687	0,161	0,219	0,369	-0,161	0,060	0,286	-0,155	-0,047	0,233	0,116	0,207	0,086	-0,037	-0,110	0,126	0,005	0,027	0,032
Butanal-diethylester	0,034	-0,045	0,100	0,800	0,324	0,347	0,022	0,039	0,006	-0,057	-0,137	0,183	0,010	-0,163	0,064	-0,091	-0,044	-0,081	0,004	-0,049
Butansäure-methylester	0,085	-0,111	0,884	0,092	0,163	0,256	-0,068	0,228	0,034	-0,081	-0,011	0,027	0,005	-0,107	-0,076	0,056	0,039	0,014	0,016	0,016
Butansäure-ethylester	0,328	-0,129	0,786	0,182	0,037	0,297	-0,044	0,091	0,064	-0,073	0,062	0,071	0,149	-0,040	0,144	-0,098	0,042	-0,147	-0,043	0,024
Bernsteinsäure-diethylester	0,116	0,089	-0,107	-0,155	-0,055	-0,283	0,220	-0,062	-0,138	0,067	-0,082	-0,025	0,163	0,067	-0,194	0,264	0,770	-0,048	-0,008	0,032
Butanol-1	-0,173	-0,024	0,100	0,323	0,118	0,204	0,716	0,343	-0,118	-0,104	0,064	-0,047	-0,036	0,026	-0,124	0,060	0,144	0,060	0,238	0,041
Butanol-2	-0,071	0,102	0,023	-0,007	-0,076	-0,068	0,930	-0,019	-0,023	0,009	-0,078	0,024	0,121	-0,052	-0,023	-0,047	-0,195	-0,101	-0,105	-0,047
Butansäure	0,189	0,242	0,249	0,353	0,543	-0,097	-0,166	-0,079	-0,230	-0,110	0,171	0,169	0,253	0,241	-0,043	-0,098	0,201	-0,082	-0,049	0,012
Pentanal-diethylester	0,237	0,001	0,165	0,680	0,105	0,175	0,001	0,072	0,292	0,119	0,042	0,352	0,105	0,106	0,018	0,198	-0,024	-0,162	0,148	0,148
Pentanal	0,271	-0,061	0,368	0,358	-0,037	0,309	0,013	-0,002	0,083	-0,072	0,014	0,270	0,385	0,439	0,126	0,198	-0,026	-0,065	0,065	0,202
Pentanol-1	-0,568	0,134	0,047	0,294	-0,159	-0,048	0,494	0,234	-0,010	0,161	0,093	0,053	0,217	0,082	-0,062	-0,052	-0,002	-0,118	0,298	0,028
Hexanal-diethylester	-0,123	-0,047	0,050	0,182	0,097	0,072	-0,077	0,031	0,011	0,066	-0,011	0,933	-0,022	-0,084	-0,029	-0,014	-0,052	0,024	-0,058	0,016

Fortsetzung Tab. 3: Rotierte Komponentenmatrix Williamsbirne

Substanzen	Komponente																			
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20
Hexanal	-0,113	-0,065	0,048	0,034	-0,038	0,200	-0,055	0,010	-0,051	-0,030	-0,034	0,803	0,356	0,125	0,248	-0,087	0,025	-0,159	0,085	0,006
Hexansäure-methylester	0,428	-0,190	0,550	0,177	0,225	0,387	0,005	-0,218	-0,056	-0,120	-0,034	-0,132	0,136	-0,026	0,041	-0,040	-0,108	-0,111	-0,124	
Hexansäure-ethylester	0,478	-0,212	-0,037	0,180	0,421	0,252	0,120	-0,138	0,265	-0,079	0,281	-0,218	-0,059	0,013	-0,118	-0,217	0,137	0,060	-0,296	
cis-3-Hexenol-1	0,226	0,323	-0,136	0,120	-0,023	-0,067	0,028	-0,137	0,257	0,149	0,227	0,073	0,055	-0,026	-0,084	0,039	-0,164	0,070	-0,131	0,303
5-Hexenol-1	0,381	0,712	-0,126	-0,160	0,126	-0,101	-0,139	-0,089	-0,116	-0,102	-0,162	-0,037	0,141	0,013	0,079	-0,110	-0,226	-0,057	0,163	-0,135
Hexansäure-2-methylbutylester	0,729	0,119	0,153	0,283	-0,039	0,173	-0,111	-0,165	-0,020	0,287	-0,163	-0,096	0,159	0,052	0,084	-0,120	0,104	0,255	0,026	0,072
Hexansäure-3-methylbutylester	0,853	-0,065	0,387	-0,118	0,060	-0,018	-0,074	-0,099	0,075	0,136	-0,014	-0,112	-0,050	-0,059	0,016	-0,092	0,069	0,021	-0,019	-0,075
Hexanol	-0,008	0,018	0,194	0,303	0,208	0,066	0,730	0,252	-0,094	0,094	0,262	0,019	-0,087	0,019	-0,057	0,008	-0,066	-0,016	0,154	
Hexansäure	-0,211	-0,205	0,130	0,303	0,297	0,078	0,135	0,580	-0,069	-0,078	0,036	-0,114	-0,222	-0,249	-0,233	-0,233	0,042	-0,047	0,250	0,028
Heptanal	-0,012	-0,043	0,036	0,056	-0,121	-0,020	0,006	0,174	0,154	0,096	0,065	0,157	0,895	0,193	0,134	0,074	0,091	-0,030	0,017	-0,006
Heptanol-1	-0,182	0,168	0,331	-0,058	0,080	-0,124	0,258	0,419	-0,221	0,500	0,027	0,185	0,201	-0,137	0,040	-0,146	-0,040	-0,011	0,181	0,010
Octanal	0,316	-0,011	0,093	0,208	-0,057	0,196	-0,325	-0,510	0,201	0,005	0,042	0,199	0,223	0,163	0,342	0,110	-0,100	-0,012	0,178	0,223
Octansäure-methylester	0,507	-0,183	0,489	0,183	0,095	0,418	-0,064	-0,184	-0,018	0,092	0,270	-0,146	0,173	0,077	0,007	-0,115	0,005	0,222	-0,045	0,012
Octansäure-ethylester	0,711	-0,190	0,161	0,005	0,305	0,302	0,012	-0,079	0,146	0,014	0,287	-0,153	0,094	0,055	0,010	-0,133	0,100	-0,086	-0,124	
Octansäure-propylester	0,127	0,036	-0,019	-0,065	0,004	0,092	0,739	0,082	0,131	0,290	-0,063	-0,141	0,301	-0,045	0,020	-0,072	0,349	0,137	-0,196	-0,016
Octansäure-2-methylbutylester	0,950	0,091	0,047	0,002	-0,017	0,065	-0,096	-0,133	0,036	-0,051	-0,061	0,036	0,009	-0,037	-0,091	0,060	0,060	-0,091	0,030	0,112
Octansäure-2-methylpropylester	0,871	-0,036	0,141	-0,046	-0,099	0,103	-0,152	-0,243	0,035	0,166	-0,013	0,020	-0,013	0,077	-0,134	-0,097	0,110	-0,034	-0,109	0,058
Octansäure-3-methylbutylester	0,982	0,079	0,072	-0,027	0,003	-0,054	-0,078	-0,027	-0,035	-0,024	-0,022	0,098	-0,027	-0,012	-0,047	-0,032	0,033	-0,040	0,028	0,009
Octanol-1	-0,054	0,110	-0,032	0,155	0,025	-0,125	0,356	0,170	-0,092	0,650	-0,015	0,098	0,307	0,028	-0,042	0,010	0,439	-0,061	0,188	-0,025
Octansäure	0,279	0,081	0,005	0,196	0,866	-0,029	-0,033	0,046	-0,194	-0,055	0,163	-0,030	-0,001	-0,016	0,097	0,165	0,074	-0,055	-0,028	0,029
Nonanal	0,213	-0,117	-0,095	0,056	-0,112	-0,116	-0,069	-0,237	0,847	0,030	0,006	-0,022	0,109	-0,111	-0,110	-0,064	-0,177	0,013	-0,074	0,012
Nonanol	0,272	0,047	0,028	0,089	-0,194	0,069	-0,132	-0,252	0,759	0,179	-0,063	-0,020	0,213	-0,005	-0,112	-0,025	-0,272	-0,029	-0,082	0,155
Nonansäure-ethylester	0,322	0,197	0,227	-0,156	-0,265	-0,078	-0,018	0,190	0,492	0,238	-0,019	-0,040	0,393	-0,063	0,018	-0,183	0,187	0,088	-0,229	0,002
Nonanol-1	0,098	0,078	0,006	-0,009	-0,228	-0,085	-0,069	-0,062	0,135	0,871	-0,097	0,103	0,090	-0,150	-0,136	-0,109	-0,042	0,055	-0,088	-0,009
cis-Linalooloxid	-0,002	0,808	-0,127	0,126	0,135	-0,142	0,271	-0,148	-0,083	0,145	0,043	-0,026	-0,172	0,033	0,002	0,132	0,164	-0,072	0,051	0,220
Diacetyl	0,066	-0,101	0,816	-0,014	-0,014	0,058	0,113	-0,148	-0,038	0,124	-0,057	0,276	-0,178	-0,039	0,041	0,231	0,023	0,244	0,086	0,018
Eugenol	0,021	0,951	-0,021	0,014	-0,006	-0,034	0,163	-0,116	0,036	-0,018	-0,003	-0,040	-0,001	0,034	0,028	0,056	-0,033	0,041	-0,027	-0,075
Farnesol-3	0,010	0,021	-0,069	0,229	0,733	-0,005	0,022	0,394	-0,050	0,006	0,056	0,130	-0,206	-0,079	0,065	0,147	0,153	0,050	0,157	0,113
Furfural	-0,049	0,137	0,076	0,748	0,317	0,007	0,051	-0,032	-0,034	-0,229	-0,013	-0,087	0,079	0,244	-0,144	0,071	0,140	-0,008	0,312	0,030
2-Methylbutansäure-ethylester	0,157	0,196	0,761	-0,003	-0,260	0,042	0,041	-0,101	0,018	0,155	-0,035	0,013	0,169	0,131	0,254	-0,054	0,040	-0,183	-0,027	0,161
2-Methylpropanal-diethylacetal	0,256	-0,001	0,021	0,737	0,441	0,128	-0,052	0,096	0,093	-0,005	-0,079	-0,132	0,209	0,556	0,183	0,094	0,057	0,129	0,120	-0,079
2-Methylpropanäure-methylester	-0,013	0,067	0,130	0,157	0,083	-0,094	-0,049	-0,032	-0,056	-0,154	-0,010	0,109	-0,078	0,094	0,868	-0,031	-0,141	0,046	0,073	0,043
2-Methylpropanäure-ethylester	-0,104	0,600	-0,142	-0,139	-0,132	0,144	-0,088	-0,069	-0,036	0,079	-0,082	-0,123	-0,069	0,104	-0,024	-0,145	0,116	0,582	0,042	0,245
2-Methylpropanol-1	0,488	-0,206	0,253	-0,125	-0,013	0,003	-0,067	-0,152	0,184	0,325	0,011	0,041	-0,101	0,101	-0,550	-0,027	-0,085	0,016	0,251	0,049
2-Methylpropanäure	0,126	0,349	0,111	0,143	0,626	-0,226	-0,204	-0,183	-0,155	0,154	0,057	0,332	-0,175	0,140	-0,135	0,080	0,218	0,011	0,011	0,081
3-Methylbutanal-diethylacetal	-0,011	0,118	0,034	0,888	0,226	0,007	0,157	0,109	0,036	0,009	-0,073	-0,080	0,090	0,216	0,065	0,050	0,037	0,136	-0,005	-0,037
3-Methylbutanal	0,015	0,101	0,287	0,603	0,128	-0,052	0,096	0,093	-0,005	-0,095	-0,079	-0,132	0,209	0,556	0,183	0,094	0,057	0,129	0,120	-0,079
3-Methylbutansäure-ethylester	0,273	0,039	0,168	0,272	-0,235	-0,015	0,075	-0,031	-0,088	-0,092	-0,209	0,120	0,222	0,566	0,168	0,217	0,040	-0,223	-0,071	0,240
3-Methylbutanol-1	0,569	-0,093	0,218	-0,250	0,375	-0,068	-0,019	0,110	0,029	0,039	-0,005	-0,032	-0,153	0,008	-0,488	-0,083	-0,202	0,022	0,236	0,053
3-Methylbutansäure	0,008	0,390	0,296	0,048	0,511	-0,207	-0,070	-0,117	-0,083	0,189	0,024	0,506	-0,115	-0,066	0,027	0,130	0,240	0,013	0,035	-0,096
Limonen	0,786	0,024	-0,092	0,020	-0,056	-0,222	0,002	0,049	-0,324	0,039	0,072	0,045	-0,219	-0,157	0,065	0,035	-0,033	0,081	0,230	-0,104
Linalool	-0,046	0,941	-0,042	0,073	-0,037	-0,024	-0,088	-0,003	0,104	-0,014	0,103	-0,037	0,072	-0,066	-0,074	-0,170	-0,089	-0,056	0,067	-0,017
Phenyläthylsäure-ethylester	-0,222	0,722	-0,034	-0,140	-0,103	-0,182	0,341	-0,010	-0,075	0,187	0,358	0,095	0,042	-0,055	-0,025	0,064	0,139	-0,131	0,056	-0,039
Salicylsäure-ethylester	0,030	0,677	-0,027	0,283	-0,163	-0,029	-0,001	-0,008	0,460	-0,177	-0,110	0,019	0,044	-0,096	-0,089	-0,225	-0,196	0,094	-0,141	0,148
trans-2-decensäure-ethylester	-0,198	-0,150	0,467	0,037	-0,017	-0,272	-0,029	0,064	-0,083	0,046	-0,137	0,072	0,270	0,031	0,163	-0,060	0,126	-0,056	-0,088	-0,147
trans-2-Hexenal	0,341	0,036	0,017	0,015	0,053	0,017	-0,024	-0,014	-0,109	-0,078	0,883	-0,037	-0,083	-0,044	0,086	-0,084	0,039	0,014	0,027	-0,110
trans-2-Hexanol	-0,127	0,044	0,037	-0,153	0,063	0,037	-0,023	-0,034	-0,072	-0,054	0,940	-0,019	0,073	-0,023	-0,051	-0,007	-0,009	-0,068	0,033	-0,019
trans-Linalooloxid	-0,057	0,902	-0,091	0,054	0,072	-0,088	0,187	-0,183	-0,051	0,130	0,051	0,024	-0,130	0,035	-0,014	0,035	0,133	0,001	0,058	0,073
Zimtsäure-ethylester	0,199	0,597	-0,200	0,084	0,101	-0,184	0,038	-0,093	0,108	0,087	-0,024	0,036	-0,078	0,046	0,101	0,521	0,107	-0,031	0,001	0,370
trans-2-cis-4-decadiensäure-methylester	-0,227	-0,253	0,206	0,049	0,110	0,022	0,099	0,854	-0,101	0,040	-0,048	-0,049	-0,001	-0,044	-0,099	-0,144	0,013	-0,024	0,055	0,043
trans-2-cis-4-decadiensäure-ethylester	-0,191	-0,247	0,102	0,082	0,078	-0,114	-0,032	0,855	-0,106	-0,001	-0,049	0,032	0,119	0,084	0,132	-0,052	-0,048	-0,076	-0,011	-0,021
trans-2-trans-4-decadiensäure-methylester	0,007	-0,007	0,682	-0,113	0,243	-0,041	-0,058	0,525	-0,124	-0,016	-0,070	-0,055	0,126	0,124	-0,198	0,063	-0,180	-0,056	-0,181	0,034
trans-2-trans-4-decadiensäure-ethylester	0,024	-0,042	0,618	-0,020	0,107	-0,129	-0,102	0,587	-0,148	-0,030	-0,007	0,075	0,165	0,208	-0,193	0,099	-0,138	-0,058	-0,137	-0,018
Essigsäure-butylester	0,302	-0,181	0,222	0,052	0,052	0,871	-0,029	-0,024	0,031	-0,149	0,052	0,103	-0,029	-0,039	-0,063	0,039	-0,044	-0,016	0,024	-0,025

Interessant ist das Fehlen eines negativen Zusammenhangs zwischen den Sauberheitskategorien und Faktor 5. Dieser Faktor enthält viele freie Fettsäuren neben einer Reihe von weiteren Nachlaufkomponenten. Obwohl die Konzentrationen dieser Säuren durchaus mit denen der Apfeldestillate vergleichbar sind, ist ihre sensorische Wirkung offenbar hier unterschiedlich. Mögliche Erklärung hierfür ist die fehlende hohe Ladung der Essigsäure auf diesen Faktor. Essigsäure ist durch ihre mengenmäßige Dominanz maßgeblich am pH-Wert der Destillate beteiligt, und die sensorischen Schwellenwerte der freien Fettsäuren sind stark vom pH-Wert im Medium abhängig (GUAN und PIEPER, 1998).

Faktor 6 mit hohen Ladungen der Essigsäureester von Pentanol, Hexanol, Isobutanol und Butanol-1 hat eine positive Korrelation mit Frucht-Charakter.

Negativ mit dem Faktorwert 7 ist der Zusammenhang der sensorischen Kategorie Geschmack-Sauberkeit. Wichtige Leitsubstanzen sind hier die bekannten Unsauberheitsparameter 1,1,3-Triethoxypropan, Butanol-2 und Hexanol-1.

Auffällig ist der fehlende Zusammenhang zwischen dem fast alle charakteristischen Aromasubstanzen wie die isomeren Decadiensäure- und Decensäureester enthaltenden Faktorwert 8 und der sensorischen Bewertung. Möglicherweise liegt hier ein nicht linearer Zusammenhang vor, denn die Brände mit den höchsten Decadiensäureestern wurden in den meisten Fällen zwar als typisch, aber auch leicht grasig, dumpf und pappig beschrieben.

Faktorwert 10 weist eine signifikant negative Korrelation mit dem Frucht-Charakter auf. Als dafür verantwortliche Substanzen scheinen in der Komponentenmatrix nur die Alkohole mit sieben bis zehn Kohlenstoffatomen auf. Bei den übrigen Faktoren konnten keine sachlogisch relevanten Zusammenhänge gefunden werden. Erwähnenswert ist jedoch wie bei den Apfeldestillaten, dass der Faktor mit den höchsten Ladungen fast aller Ester der höheren Fettsäure (hier Faktor 1) keinerlei Korrelation mit der sensorischen Bewertung aufweist. Obwohl in relativ hohen Konzentrationen vorliegend, sind diese Verbindungen für den Destillatcharakter offenbar bedeutungslos.

Marillendestillate

Auch die Hauptkomponentenanalyse der Marillendaten führte zu 20 Faktoren (Tab. 4) mit ähnlich hohem Erklärungswert wie bei Apfel- und Birnenbränden. Ebenso korrelierten die Kategorien der sensorischen Beurteilung stark miteinander.

Faktorwert 1 besitzt eine relativ hohe negative Korrelation mit allen sensorischen Beurteilungen. Dominante Verbindungen dieses Faktors sind vor allem typische Vorlaufkomponenten, wie die Essigester der kurzkettigen Alkohole, wie Methyl- und Ethylacetat.

Faktorwert 2 zeigt einen ambivalenten Charakter, nämlich positive Korrelation mit Frucht-Charakter und Geschmack-Sauberkeit, jedoch negative mit Geruch-Sauberkeit. In Übereinstimmung damit finden sich hier einerseits die positiv wirksamen Terpene β -Citronellol und die beiden isomeren Linalooloxide, aber auch Essigsäure als möglicher negativer Einflussfaktor. Auffallend hohe Ladungen auf diesen Faktor weist auch die homologe Reihe der Alkohole ab Butanol-1 auf. Zweifellos einer der interessantesten Faktoren ist Faktor 3 mit nahezu allen für die Marille dominierenden Aromastoffe, wie γ -Hexa-, γ -Deca- und γ -Dodecalacton sowie den Terpenen α -Terpineol, β -Citronellol, Geraniol, Linalool, trans-Linalooloxid und Nerol. Trotzdem weist dieser Faktor keinen nennenswerten Zusammenhang mit einer der sensorischen Kategorien auf. Erklärbar wird dieses Phänomen dadurch, dass auf diesen Faktor auch nahezu alle freien Fettsäuren eine hohe Ladung besitzen. Möglicherweise kompensieren diese negativ wirksamen Komponenten den positiven Einfluss der oben genannten Aromastoffe. Auf die Praxis übertragen würde das bedeuten, dass gerade bei der Marille die dominierenden Aromastoffe gemeinsam mit diesen typischen Nachlaufkomponenten überdestillieren und eine saubere Maische hier besondere Bedeutung besitzt, da entsprechend großzügige Nachlaufabtrennung auch zu aromaschwachen Produkten führt.

Faktor 4 mit vielen höheren Fettsäureestern weist lediglich mit der Punktezahl Geruch-Sauberkeit eine schwache negative Korrelation auf.

Eine breit gefächerte Zusammensetzung weist der Faktor 5 mit schwach positivem Zusammenhang mit Geruch-Sauberkeit und Frucht-Charakter auf. Diesen Faktor prägen verschiedene höhere und niedere Fettsäureester, einige Aldehyde und Acetale sowie in geringem Ausmaß Myrcen und Linalool.

Negativ ist der Zusammenhang von Faktorwert 7 mit der Kategorie Geschmack-Sauberkeit. Als mögliche Ursachen dafür scheinen vor allem die Essigsäure und die sensorisch als unreif und grasig empfundenen Alkohole trans-2-Hexenol und cis-3-Hexenol mit höheren Ladungen auf.

Schwach positiv ist die Korrelation zwischen Faktor 9 und Frucht-Charakter. Hohe Ladungen besitzt hier ne-

Tab. 4: Rotierte Komponentenmatrix Marille

Substanzen	Komponente																			
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20
2-Phenylethanol	-0,220	-0,162	0,330	-0,172	-0,059	0,131	-0,062	0,626	0,203	-0,047	-0,047	0,289	-0,068	0,324	0,183	-0,008	0,244	-0,043	-0,002	0,154
5-Methylfurfural	-0,108	0,094	0,258	0,108	0,010	-0,018	0,518	0,716	0,093	-0,036	-0,047	-0,037	0,193	-0,079	-0,040	0,006	-0,052	0,035	-0,091	-0,172
α -Terpineol	-0,146	0,185	0,776	0,082	0,015	0,363	0,285	0,125	-0,045	0,036	-0,034	-0,094	-0,042	-0,103	-0,086	0,106	0,058	0,101	-0,085	-0,119
β -Citronellol	-0,165	0,527	0,673	-0,004	0,003	0,171	-0,110	0,044	-0,032	-0,191	-0,013	0,029	-0,075	-0,210	-0,035	0,026	-0,176	0,181	-0,133	-0,065
β -Ionon	-0,288	-0,016	0,159	0,118	-0,025	0,208	-0,037	0,002	0,058	-0,122	-0,026	-0,059	0,037	0,049	0,822	0,092	-0,078	0,109	0,099	-0,141
Benzaldehyd-diethylacetal	-0,045	-0,068	-0,168	-0,008	0,029	0,032	0,021	-0,008	0,074	-0,058	-0,050	0,065	0,922	-0,007	0,020	-0,005	-0,095	-0,024	0,013	-0,033
Benzaldehyd	0,126	-0,005	-0,173	0,038	-0,085	-0,041	0,038	-0,007	-0,047	-0,012	-0,022	0,094	0,937	-0,058	-0,033	-0,106	0,016	0,014	-0,023	0,027
Benzolensäure-ethyl-ester	0,938	-0,053	-0,069	-0,060	-0,057	-0,046	-0,069	-0,014	-0,067	-0,255	-0,045	-0,039	0,041	0,032	0,039	-0,067	-0,007	-0,024	-0,042	-0,023
Benzylalkohol	0,908	0,057	-0,036	-0,072	0,075	-0,066	0,069	-0,019	-0,053	-0,309	-0,035	-0,066	0,129	0,046	0,001	-0,012	-0,004	-0,007	-0,122	0,007
Decansäure-methyl-ester	-0,007	0,124	0,077	0,787	0,456	0,137	-0,016	-0,060	-0,077	-0,028	0,019	-0,196	-0,002	-0,056	-0,113	-0,137	0,045	-0,169	0,015	0,040
Decansäure-ethyl-ester	-0,067	-0,015	0,021	0,865	0,345	0,058	-0,116	-0,027	-0,003	0,011	0,159	-0,166	0,006	0,011	-0,154	0,020	0,073	-0,103	0,012	0,028
cis-4-Decensäure-ethyl-ester	-0,047	-0,067	-0,020	-0,024	0,225	-0,095	0,166	0,195	0,883	-0,058	-0,061	-0,117	-0,056	0,005	-0,038	0,161	-0,025	-0,056	0,074	-0,005
Decansäure-isoamyl-ester	-0,057	-0,170	-0,102	0,859	0,045	0,104	-0,059	0,244	0,124	-0,022	-0,063	0,198	-0,038	0,079	0,014	0,133	0,120	0,036	0,036	-0,033
Decanol-1	-0,252	0,220	0,195	0,390	-0,013	0,562	-0,046	0,302	0,166	-0,242	-0,151	0,037	0,008	0,098	0,146	0,031	-0,131	-0,115	0,160	-0,259
Decansäure	-0,302	-0,004	0,409	0,454	-0,119	-0,074	0,336	-0,033	0,177	-0,074	-0,012	-0,039	-0,119	0,556	0,035	0,053	0,045	-0,043	-0,062	-0,062
Dodecansäure-methyl-ester	-0,074	0,110	0,113	0,923	0,228	0,003	0,009	-0,003	-0,062	-0,054	-0,041	0,006	-0,025	0,003	-0,025	-0,106	-0,074	-0,156	-0,015	0,034
Dodecansäure-ethyl-ester	-0,161	-0,064	0,045	0,915	0,170	-0,056	-0,073	0,000	-0,053	-0,018	-0,008	0,086	-0,024	0,006	-0,048	0,046	-0,027	-0,020	-0,031	0,002
Dodecansäure	-0,312	0,004	0,506	0,167	0,074	-0,282	0,313	-0,071	0,223	-0,047	-0,008	0,086	-0,001	0,525	-0,037	0,147	-0,078	-0,116	-0,001	-0,140
Tetradecansäure-methyl-ester	-0,103	-0,082	0,026	0,913	-0,001	-0,042	0,146	0,107	0,126	0,034	-0,067	0,120	0,054	0,001	0,165	0,017	0,004	0,119	-0,100	0,079
Tetradecansäure-ethyl-ester	-0,179	-0,306	-0,018	0,634	-0,045	-0,140	-0,033	-0,019	-0,234	-0,022	-0,166	0,269	0,187	-0,095	0,023	-0,046	0,082	0,181	0,036	-0,116
Hexadecansäure-methyl-ester	-0,093	-0,028	-0,071	0,634	0,134	0,037	0,017	0,314	-0,079	-0,026	-0,027	0,568	0,211	-0,121	0,118	0,067	-0,112	-0,016	-0,019	-0,105
Hexadecansäure-ethyl-ester	-0,099	-0,094	-0,162	0,381	0,022	0,002	-0,016	0,151	-0,087	-0,038	-0,035	0,684	0,283	-0,337	-0,145	-0,053	-0,054	-0,065	0,188	-0,045
Linolensäure-ethyl-ester	-0,230	-0,093	0,357	0,012	-0,007	-0,036	0,012	0,023	-0,198	0,010	-0,171	0,797	0,091	0,091	-0,067	-0,019	0,058	0,046	-0,180	0,060
Linolensäure	-0,151	-0,142	0,164	0,093	-0,001	-0,092	-0,122	0,213	-0,213	-0,161	-0,161	0,817	-0,010	0,133	0,043	0,003	0,180	-0,013	0,071	0,011
Armeisensäure-ethyl-ester	0,465	0,035	-0,094	-0,013	0,036	-0,046	-0,109	-0,069	-0,076	0,813	-0,049	-0,038	-0,075	-0,061	-0,081	-0,011	0,028	-0,060	-0,099	-0,015
Methanol	-0,055	0,357	0,089	0,246	0,160	0,036	0,525	0,159	-0,088	0,008	-0,257	0,039	0,108	-0,179	0,003	-0,447	-0,091	-0,150	0,194	-0,146
Acetaldehyd-diethylacetal	-0,104	-0,011	-0,039	0,230	0,520	0,312	0,109	-0,133	0,396	0,046	0,152	0,236	-0,197	0,273	0,099	0,141	-0,318	-0,029	-0,133	0,061
Acetaldehyd	0,494	0,063	0,010	0,086	0,524	-0,004	0,440	-0,061	0,321	-0,083	-0,063	0,181	-0,144	0,078	0,164	-0,021	-0,108	-0,082	-0,117	0,131
Essigsäure-benzyl-ester	0,924	-0,065	-0,063	-0,046	-0,185	-0,046	-0,056	0,000	-0,053	-0,256	-0,034	-0,043	0,035	0,015	0,032	-0,081	-0,011	-0,024	0,037	-0,006
Essigsäure-methyl-ester	0,897	0,293	-0,019	-0,100	-0,007	-0,051	0,172	0,088	-0,030	0,208	0,030	0,010	-0,026	0,065	-0,006	0,004	-0,016	-0,017	0,031	-0,017
Essigsäure-2-methylbutyl-ester	0,923	0,241	-0,098	-0,154	-0,032	-0,065	0,068	0,054	-0,055	0,115	0,126	-0,014	-0,034	0,013	-0,041	0,036	-0,055	0,020	0,056	-0,007
Essigsäure-propyl-ester	0,963	0,091	-0,134	-0,104	-0,042	-0,071	-0,077	-0,020	-0,072	0,066	-0,010	-0,017	-0,023	-0,042	-0,025	0,036	-0,027	-0,040	0,047	-0,038
Essigsäure-pentyl-ester	0,881	0,147	-0,128	-0,064	0,038	-0,092	-0,033	-0,043	0,011	0,312	0,007	-0,058	-0,057	-0,002	-0,047	0,028	0,100	-0,137	0,089	-0,076
Essigsäure-hexyl-ester	0,769	0,122	-0,151	0,090	0,286	-0,004	-0,166	-0,123	-0,005	0,413	-0,048	-0,037	-0,059	0,128	-0,007	0,111	0,037	0,011	0,000	-0,118
Essigsäure-trans-2-hexyl-ester	-0,039	0,101	0,510	-0,015	-0,021	-0,097	-0,124	-0,057	-0,123	-0,033	-0,033	0,635	-0,027	-0,068	0,034	0,019	-0,209	0,188	0,373	0,013
Essigsäure-2-methylbutyl-ester	0,883	0,055	-0,043	-0,012	0,308	0,027	-0,037	0,065	-0,098	0,095	0,058	0,000	0,024	0,072	0,038	-0,098	-0,115	0,078	0,058	-0,073
Essigsäure-3-methylpropyl-ester	0,887	-0,006	-0,110	0,038	0,045	0,146	-0,121	0,023	0,121	0,093	0,069	0,023	-0,044	-0,134	-0,125	-0,106	0,077	0,144	0,041	0,089
Essigsäure-2-methylbutyl-ester	0,818	-0,237	-0,116	0,088	0,265	0,068	-0,122	-0,026	0,266	0,002	-0,011	-0,002	-0,043	-0,036	-0,123	-0,112	-0,045	0,093	-0,159	0,063
Essigsäure-2-phenyl-ethyl-ester	-0,007	-0,217	0,173	0,043	-0,090	0,064	-0,096	0,004	0,868	0,065	0,024	-0,102	-0,060	0,131	-0,093	-0,135	0,034	0,047	-0,014	-0,045
Essigsäure	0,139	0,583	0,175	-0,239	-0,105	-0,072	0,656	0,003	0,031	-0,053	-0,003	-0,018	-0,079	-0,021	-0,074	0,140	0,040	0,153	-0,134	-0,060
Propanal-diethylacetal	-0,005	0,031	-0,138	0,059	0,418	0,004	0,154	-0,029	0,060	0,128	0,058	-0,036	-0,101	0,020	-0,044	0,766	-0,001	-0,049	-0,030	0,035
Propansäure-ethyl-ester	0,883	0,055	-0,043	-0,012	0,308	0,027	-0,037	0,065	-0,098	0,095	0,058	0,000	0,024	0,072	0,038	-0,081	0,062	-0,023	0,023	0,035
3-Ethoxypropanal-diethylacetal	0,290	0,331	-0,036	-0,110	0,054	-0,094	0,497	-0,004	-0,006	0,668	-0,046	-0,078	-0,044	0,128	-0,044	0,146	0,055	-0,032	0,140	0,006
Milchsäure-ethyl-ester	-0,026	0,679	0,139	-0,270	-0,245	0,090	-0,105	0,128	-0,046	-0,192	0,164	-0,111	0,046	-0,152	0,029	0,252	0,030	0,063	-0,362	-0,090
Propanol-1	0,740	0,186	0,083	0,009	0,080	-0,115	-0,114	-0,167	-0,149	0,032	-0,081	0,036	-0,020	-0,251	-0,078	0,426	-0,044	-0,041	0,058	-0,195
Propansäure	-0,052	0,181	0,720	-0,011	0,464	-0,002	0,064	-0,129	-0,093	0,197	-0,137	0,098	-0,043	-0,129	-0,179	-0,106	0,004	0,078	-0,073	-0,196
Butanal-diethylacetal	0,432	0,313	-0,150	0,299	0,206	0,211	0,105	0,151	-0,083	0,260	0,192	0,059	-0,035	0,236	0,192	0,327	-0,148	0,191	0,141	0,085
Butansäure-ethyl-ester	-0,065	-0,246	0,095	-0,051	-0,027	-0,023	-0,065	-0,048	-0,032	0,017	0,039	0,109	-0,063	0,055	0,047	0,034	0,848	-0,023	-0,028	-0,021
Butansäure-methyl-ester	0,456	0,073	-0,111	-0,010	0,647	0,397	-0,082	0,072	0,054	-0,008	0,275	0,075	-0,039	-0,008	-0,094	-0,018	-0,044	0,263	-0,029	0,093
Bernsteinsäure-diethyl-ester	-0,051	0,244	-0,153	-0,136	-0,056	-0,028	-0,066	0,094	-0,119	-0,102	0,835	-0,244	0,034	0,016	-0,007	0,112	0,001	-0,155	-0,144	0,035
Butanol-1	0,212	0,882	0,185	-0,135	0,111	0,068	-0,081	-0,101	-0,060	0,186	0,007	-0,081	0,086	-0,078	-0,024	-0,049	-0,057	-0,104	0,084	0,004
Butanol-2	0,929	0,065	-0,057	-0,096	-0,165	0,024	0,232	-0,019	-0,047	-0,068	-0,052	-0,059	-0,066	0,076	0,005	-0,023	0,016	-0,034	0,019	0,004
Butensäure	-0,151	0,362	-0,141	-0,087	0,189	0,048	0,340	0,012	0,020	-0,040	-0,055	0,038	0,265	0,105	0,037	0,054	0,340	-0,161	0,037	0,037
Pentanal-diethylacetal	0,049	0,031	-0,002	0,354	0,650	0,294	0,136	0,427	-0,094	0,213	0,074	0,051	-0,117	0,036	0,016	0,148	-0,068	-0,040	0,026	-0,132
Pentanol-1	0,683	0,002	-0,093	0,140	0,568	-0,042	0,093	0,226	-0,077	0,103	-0,197	-0,136	-0,016	-0,007	-0,001	0,005	0,048	-0,086	0,065	-0,127
Pentansäure	0,427	0,835	-0,003	-0,04																

Fortsetzung Tab. 4: Rotierte Komponentenmatrix Marille

Substanzen	Komponente																			
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20
Hexanal	0,314	-0,056	-0,234	0,133	0,375	-0,167	0,204	0,304	-0,045	0,284	-0,218	-0,015	-0,098	-0,092	0,089	0,361	0,322	-0,102	0,298	0,055
Hexansäure-methylester	0,486	0,016	-0,111	0,185	0,729	0,048	0,075	-0,096	0,027	0,197	0,043	0,110	-0,045	0,101	-0,107	-0,086	-0,052	0,060	-0,181	0,077
Hexansäure-ethylester	0,084	0,183	-0,149	0,139	0,652	0,244	-0,051	0,166	0,445	0,207	0,045	0,000	0,112	0,053	0,015	0,140	-0,085	0,116	-0,116	0,026
cis-3-Hexenol-1	0,236	0,551	0,064	0,192	0,051	0,296	0,527	-0,115	-0,103	0,152	0,009	-0,011	-0,099	0,254	-0,103	0,038	-0,084	0,075	-0,128	0,229
Hexansäure-2-methylbutylester	0,159	-0,044	-0,188	0,015	0,270	0,041	-0,111	0,099	0,011	0,131	0,707	0,007	-0,248	0,108	-0,121	-0,081	0,375	0,103	-0,049	-0,174
Hexansäure-3-methylbutylester	0,520	0,000	0,042	-0,079	0,191	0,165	0,248	0,058	0,208	0,237	0,026	0,097	-0,111	0,381	-0,142	-0,099	0,434	0,035	0,078	0,088
Hexanol	0,257	0,882	0,067	0,093	0,086	-0,016	0,048	-0,074	-0,091	0,262	0,058	0,033	-0,056	0,147	0,034	-0,037	-0,095	-0,001	0,015	0,015
Hexansäure	-0,053	0,090	0,969	0,087	0,007	0,021	0,036	-0,007	-0,021	-0,021	-0,027	0,004	0,032	0,031	-0,046	-0,009	-0,033	-0,035	0,031	-0,015
Heptanal	-0,061	0,178	0,085	0,081	0,616	-0,133	0,008	0,065	0,007	-0,258	-0,103	0,089	-0,042	0,039	0,145	0,352	-0,123	-0,095	0,129	0,444
Heptanol-1	0,289	0,849	0,284	0,120	0,178	0,092	0,013	-0,001	-0,073	-0,024	-0,112	0,013	-0,065	0,031	0,000	0,005	-0,017	-0,093	0,051	0,034
Octanal	0,160	0,006	0,129	0,228	0,756	0,474	0,009	0,089	0,094	0,005	0,004	-0,059	0,069	-0,019	0,029	-0,035	0,050	-0,067	0,045	-0,098
Octansäure-methylester	0,288	0,171	-0,093	0,493	0,738	0,125	0,075	-0,005	-0,075	0,015	0,008	-0,155	-0,027	-0,016	0,029	-0,086	0,053	-0,082	-0,001	0,012
Octansäure-ethylester	-0,073	0,245	-0,160	0,409	0,694	0,123	-0,145	0,021	0,058	0,153	0,244	-0,110	0,037	0,080	-0,010	-0,086	0,116	-0,124	0,096	-0,051
Octansäure-propylester	0,537	0,114	0,016	0,338	0,591	-0,061	-0,193	-0,134	0,069	0,001	0,242	0,115	0,000	-0,113	-0,032	0,247	-0,063	-0,068	0,093	-0,083
Octansäure-2-methylbutylester	-0,012	-0,077	-0,016	0,397	0,165	0,096	-0,009	0,835	0,069	-0,001	0,242	0,115	0,000	-0,113	-0,032	0,247	-0,063	-0,068	0,093	-0,083
Octansäure-3-methylbutylester	0,022	-0,090	0,050	0,674	0,216	0,500	-0,141	0,144	0,276	0,071	0,041	-0,134	0,025	-0,024	-0,098	-0,046	0,164	0,100	0,085	0,112
Nonanal	0,038	-0,116	-0,089	0,738	0,218	0,190	-0,111	0,322	0,392	-0,024	-0,151	-0,053	0,008	0,060	-0,113	-0,019	-0,052	-0,008	0,082	-0,011
Nonanol-1	0,029	0,905	0,223	0,071	0,052	0,181	-0,080	-0,016	-0,077	-0,104	0,003	0,026	-0,073	0,056	0,038	-0,060	-0,085	-0,181	-0,011	0,016
Octansäure	-0,246	-0,039	0,440	0,441	-0,118	0,112	0,349	0,032	0,296	0,031	0,031	-0,169	-0,157	0,462	-0,010	-0,006	0,040	-0,059	-0,095	0,017
Nonanal-diethylester	-0,114	-0,018	-0,012	0,458	0,668	0,135	-0,066	0,467	0,109	-0,107	0,046	0,024	-0,046	0,044	-0,049	0,006	0,076	0,056	0,097	0,094
Nonanol	-0,027	-0,070	-0,005	0,206	0,856	-0,044	-0,021	0,234	0,071	-0,166	-0,210	-0,157	0,037	-0,003	-0,011	-0,019	0,065	0,001	0,148	-0,062
Nonansäure-ethylester	0,209	0,084	0,002	0,402	0,371	0,134	-0,014	0,738	-0,051	0,089	0,072	0,091	-0,014	-0,074	-0,072	0,047	-0,037	0,007	0,127	0,088
Nonanol-1	0,027	0,770	0,368	0,105	0,268	-0,020	0,338	-0,014	0,054	-0,141	-0,099	0,029	-0,034	0,012	0,063	0,019	-0,072	0,109	0,037	0,001
cis-Linalooloxid	-0,010	0,766	0,331	-0,101	0,045	0,049	0,234	0,072	0,040	-0,002	0,022	-0,098	0,043	-0,104	-0,034	-0,111	-0,022	0,403	0,022	-0,105
Diacetyl	0,551	0,522	-0,103	-0,292	0,018	0,119	0,176	-0,087	-0,073	0,236	0,178	0,025	0,210	-0,022	-0,015	-0,034	0,022	-0,160	0,106	-0,041
Enugenol	-0,126	0,698	0,320	-0,066	-0,138	0,062	0,274	0,057	-0,018	-0,222	0,206	0,021	-0,129	0,065	-0,004	-0,003	0,053	-0,128	-0,305	-0,097
Farnesol-3	-0,223	-0,043	0,511	0,127	-0,070	0,025	-0,277	0,367	0,316	-0,130	0,034	0,003	0,030	0,317	-0,039	0,311	-0,337	0,020	0,031	0,061
Furfural	-0,223	0,094	0,283	0,053	0,041	-0,022	0,706	-0,076	-0,150	-0,076	-0,150	-0,106	-0,360	-0,037	-0,008	-0,017	-0,080	-0,023	-0,023	-0,168
γ-Decalacton	-0,179	0,133	0,838	0,045	-0,164	0,092	-0,144	0,087	0,167	-0,018	0,096	0,007	-0,030	0,019	0,169	-0,028	0,207	-0,183	0,094	0,053
γ-Undecalacton	-0,033	0,097	0,127	-0,101	-0,046	0,946	-0,019	-0,048	-0,102	-0,029	-0,010	-0,080	0,069	0,020	0,001	0,055	-0,077	-0,061	0,097	-0,055
γ-Dodecalacton	-0,232	0,213	0,701	0,094	-0,171	0,119	-0,001	0,146	0,270	-0,040	0,103	0,047	-0,088	0,123	0,230	-0,063	0,242	-0,175	0,048	0,185
γ-Hexalacton	-0,141	0,124	0,854	-0,159	-0,083	-0,012	0,212	0,114	-0,045	-0,038	-0,142	0,069	-0,028	0,078	0,149	0,028	0,077	-0,063	-0,030	0,166
Geraniol	-0,130	0,080	0,963	0,102	0,021	0,007	0,037	-0,012	-0,007	-0,015	0,022	0,007	-0,027	0,062	-0,049	-0,006	-0,058	-0,058	0,049	0,021
γ-Terpinen	-0,024	-0,073	0,154	0,274	0,243	0,784	0,158	-0,089	-0,160	0,037	-0,095	-0,014	-0,144	-0,209	-0,170	-0,121	-0,094	-0,073	-0,139	0,063
2-Methyl-propansäure-ethylester	0,121	0,370	-0,072	-0,258	0,278	0,313	-0,027	-0,120	-0,107	0,048	0,482	0,220	-0,164	-0,212	-0,131	0,068	-0,094	0,246	0,307	0,085
2-Methyl-propansäure-diethylester	-0,104	-0,130	0,163	0,188	0,223	0,823	0,020	0,114	0,085	0,079	0,288	0,036	-0,038	-0,020	-0,064	0,034	-0,116	-0,089	-0,051	0,004
2-Methyl-propansäure-methylester	0,200	0,078	0,063	-0,057	0,932	-0,071	-0,015	-0,015	0,082	-0,100	0,039	0,133	0,044	0,029	0,050	0,086	0,008	0,068	-0,062	0,001
2-Methyl-propansäure-ethylester	-0,170	-0,101	-0,110	-0,321	-0,111	-0,055	-0,042	-0,013	0,056	-0,002	-0,066	0,003	-0,078	-0,107	0,739	-0,112	0,127	-0,117	-0,098	0,162
2-Methyl-butansäure	-0,064	-0,067	-0,008	-0,128	0,004	0,771	-0,192	0,193	0,217	0,052	-0,128	0,095	0,112	0,016	0,284	-0,048	0,318	0,170	0,020	0,052
3-Methyl-butansäure	-0,223	0,209	0,629	-0,216	-0,161	0,388	-0,061	0,065	0,025	-0,034	0,003	0,113	-0,088	0,103	0,199	-0,036	0,237	0,262	0,055	0,190
3-Methyl-butanol-diethylester	-0,051	0,223	-0,030	0,054	0,283	0,560	0,308	0,126	0,135	0,275	0,453	0,036	0,103	0,012	-0,031	0,052	-0,185	0,000	0,034	0,229
3-Methyl-butanol	0,819	0,135	-0,145	-0,085	0,154	-0,013	0,357	0,037	0,126	0,016	-0,050	0,006	0,242	-0,011	0,030	-0,074	-0,048	-0,039	0,059	0,105
3-Methyl-butansäure-ethylester	0,077	0,160	0,000	-0,109	-0,085	0,154	-0,013	0,357	0,037	0,126	0,016	-0,050	0,006	0,242	-0,011	0,030	-0,074	-0,048	-0,039	0,059
3-Methyl-butanol-1	-0,083	-0,171	-0,059	0,040	0,165	0,944	0,020	-0,021	-0,079	-0,057	0,015	-0,062	-0,001	-0,024	0,001	0,024	0,027	-0,004	-0,028	0,001
3-Methyl-butansäure	-0,118	0,489	0,610	-0,202	-0,128	-0,024	-0,016	-0,015	0,018	-0,092	0,056	0,067	-0,065	-0,338	0,082	0,084	-0,046	0,422	0,028	0,075
Limonen	-0,020	0,107	-0,019	0,053	-0,017	0,974	0,029	-0,082	-0,046	-0,011	-0,022	-0,013	-0,034	0,032	0,002	-0,046	0,422	0,028	-0,007	-0,071
Linalool	-0,052	0,159	0,703	-0,012	0,450	-0,020	0,032	-0,103	-0,122	0,182	-0,129	0,116	-0,097	-0,187	-0,218	-0,159	-0,023	0,135	-0,018	0,157
Myrcen	0,063	-0,110	0,345	0,305	0,486	0,439	0,159	-0,103	-0,073	0,182	-0,116	0,005	-0,056	-0,306	-0,196	-0,138	-0,065	-0,212	0,012	0,052
Nerol	-0,144	0,233	0,943	0,033	0,019	-0,032	0,002	-0,031	-0,030	-0,060	0,007	0,058	-0,032	0,019	-0,060	0,006	-0,066	-0,039	-0,018	-0,033
Phenylsäure-ethylester	0,574	0,453	0,094	-0,201	-0,142	0,255	0,483	0,085	0,013	-0,004	0,076	-0,059	0,006	0,149	-0,060	0,072	-0,002	0,072	0,034	0,065
Salicylsäure-ethylester	0,319	0,533	-0,092	0,165	0,231	0,284	0,079	-0,003	-0,111	0,552	0,133	-0,040	0,048	0,021	-0,098	0,048	0,127	-0,028	0,043	0,127
trans-2-Decensäure-ethylester	0,032	0,543	-0,061	0,066	-0,067	-0,202	0,000	0,228	0,094	0,367	-0,085	-0,052	-0,393	0,055	-0,211	0,107	0,259	0,208	0,018	0,228
trans-2-Hexenal	-0,012	0,343	0,157	0,544	-0,124	-0,186	-0,349	-0,237	-0,040	-0,008	0,202	-0,100	-0,085	0,211	0,300	0,163	0,033	0,024	-0,239	-0,108
trans-2-Hexenol	0,142	0,299	0,085	-0,140	0,006	-0,003	0,887	-0,053	0,051	0,084	-0,015	-0,023	-0,022	0,164	-0,048	0,079	0,013	0,010	0,062	0,114
trans-Linalooloxid	-0,042	0,752	0,302	-0,127	0,068	-0,074	0,138	-0,014	0,037	-0,069	0,120	-0,063	0,017	-0,100	-0,034	-0,109	-0,045	0,474	0,068	-0,002
Zimtsäure-ethylester	-0,173	0,202	0,090	0,389	0,059	0,597	-0,067	0,298	0,136	-0,171	0,022									

ben cis-4-Decensäureethylester vor allem die aromatische Substanz Essigsäure-2-phenylethylester. Bezüglich der übrigen Faktoren ist noch erwähnenswert, dass der in der Literatur (SCHOLTEN, 2002) als wichtiger Aromastoff beschriebene Benzaldehyd lediglich auf Faktorwert 13 eine hohe Ladung besitzt. Dieser Faktor hat zwar eine positive Korrelation, allerdings mit der Punktezahl Geschmack-Sauberkeit.

Zwetschkendestillate

Die statistische Datenanalyse ergab im Bezug auf die anderen Destillate sehr ähnliche Resultate mit dem einzigen Unterschied, dass hier nur 19 Faktoren extrahiert wurden (Tab. 5). Bezüglich der Korrelation der sensorischen Kategorien gilt das bereits bei den übrigen Destillaten Erwähnte.

Faktor 1 zeigt positive Zusammenhänge mit fast allen Punktezahlen der Kostbewertung. In der Komponentenmatrix scheint eine große Zahl von Fettsäureestern mit hohen Ladungen auf diesen Faktor auf. Auf Grund ihres eher fruchtigen Charakters sind die niederkettigen Ester wahrscheinliche Verursacher eines positiven Einflusses.

Faktor 2 besitzt teilweise sogar signifikant negativen Einfluss auf die Sensorik. Hier finden sich die schon von den anderen Destillaten als negativ bekannten freien Fettsäuren sowie der Unsauberkeitsindikator Butanol-2 mit hoher Ladung.

Faktor 3 hat lediglich auf die Kategorie Geschmack-Sauberkeit einen schwachen positiven Einfluss. Ester der höheren Fettsäuren scheinen in der Komponentenmatrix als einzige mögliche Verursacher auf.

Schwach negativ auf den Geschmack ist der Einfluss von Faktor 4 mit einer Reihe von Nachlaufkomponenten, wie 2-Phenylethanol oder Benzylalkohol, denen in höheren Konzentrationen eine negative Beeinflussung des Brandes nachgesagt wird (SCHOLTEN, 2002).

Obwohl in Faktor 5 vor allem eine Reihe von Vorlaufkomponenten mit hohen Ladungen vertreten und die Konzentrationen dieser Substanzen durchaus mit denen der übrigen Destillate vergleichbar sind, fehlt hier jeder Zusammenhang mit der Sensorik. Entweder werden diese Verbindungen bei Zwetschkendestillaten erst in höheren Konzentrationen als unangenehm empfunden, oder deren negativer Einfluss wird durch die Anwesenheit anderer Substanzen kompensiert. Als solche kommen eine Reihe von Aldehyden, vor allem das als typische Zwetschkenkomponente beschriebene Nonanal, in Frage (ADAM et al., 1995). Dieser Fall würde bedeuten, dass der Sauberkeit der Maische bei der Zwetschke

besondere Bedeutung zukommt, da mit großzügiger Vorlaufabtrennung auch die Intensität des erwünschten Aromas leidet.

Beim Benzaldehyd mit hoher Ladung auf Faktor 8 fehlt jede Korrelation mit der Sensorik. Hier liegt offenbar deutlich ein nichtlinearer Zusammenhang vor, da die Brände mit den höchsten Gehalten dieser Verbindung als sensorisch eher unangenehm empfunden wurden, obwohl dieser Aldehyd andererseits als dominierender Aromastoff beschrieben wird (SCHOLTEN, 2002).

Faktor 9 hat signifikant negative Korrelationen mit den sensorischen Kategorien. Eine eindeutige Zuordnung, welche Komponenten dafür verantwortlich zeichnen, ist nicht möglich, weil unter den Verbindungen mit höherer Ladung vor allem eine Reihe von Alkoholen aufscheinen.

Ebensowenig ist der schwächer ausgeprägte negative Einfluss von Faktor 10 mit lediglich hohen Ladungen von Linol- und Linolensäure-ethylester auf die Sensorik erklärbar. Auch für die übrigen eher schwach ausgeprägten Zusammenhänge konnten mit der vorliegenden Komponentenmatrix keine befriedigenden Erklärungen gefunden werden. Bemerkenswert ist auch die Tatsache, dass der mutmaßlich positive Aromastoff Nonansäureethylester (Scholten, 2002) auf keine Hauptkomponente eine hohe Ladung besitzt und damit auch ein möglicher Einfluss auf die Sensorik nicht sichtbar wird.

Zusammenfassung

Trotz teilweise deutlicher Unterschiede in der Bedeutung der einzelnen Aromastoffe für die sensorische Bewertung der einzelnen Destillate lässt sich eine Reihe von Gemeinsamkeiten aller hier untersuchten Destillate hervorheben.

1. Eine unabhängige sensorische Beurteilung der Parameter Sauberkeit beziehungsweise Charakter der Frucht war offenbar nur in sehr beschränktem Ausmaß möglich. Fehlerhafte Produkte wurden offenbar auch als aromaschwach empfunden.
2. Die Korrelationskoeffizienten negativer Zusammenhänge waren in den meisten Fällen deutlich höher als solche positive Zusammenhänge. Entweder folgt das Erkennen und Bewerten von Fehlern einfacheren Zusammenhängen als das analoge Beurteilen von positiven sensorischen Eigenschaften, oder die Zahl der als positiv empfundenen Aromakomponenten ist wesentlich größer als jene der hier untersuchten.
3. Die Korrelationskoeffizienten waren ganz allgemein eher niedrig, so dass die Zusammenhänge in vielen Fäl-

Tab. 5: Rotierte Komponentenmatrix Zwetschke

Substanzen	Komponente																		
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19
2-Phenylethanol	-0,073	0,261	-0,085	0,833	-0,093	-0,096	0,029	-0,109	-0,122	0,162	0,356	-0,028	0,030	0,014	-0,095	-0,016	0,014	-0,082	0,014
5-Methylfurfural	-0,236	0,833	-0,204	0,274	0,079	0,045	-0,049	0,035	0,080	-0,189	0,010	0,051	0,018	0,204	-0,021	-0,046	0,002	0,037	-0,008
α-Terpineol	-0,055	0,424	-0,057	0,792	0,009	-0,080	0,237	0,012	0,167	-0,009	0,199	-0,021	-0,077	0,078	0,121	-0,016	-0,090	-0,022	0,103
β-Citronellol	-0,344	0,181	-0,348	0,134	-0,007	-0,157	-0,029	0,014	0,721	0,078	-0,155	0,042	-0,143	-0,089	0,115	-0,090	0,103	0,164	-0,038
Benzaldehyd-diethylacetal	-0,087	-0,084	0,034	0,034	-0,070	0,002	-0,116	0,930	0,150	-0,036	-0,025	0,151	-0,018	-0,119	0,063	-0,006	-0,110	-0,033	0,013
Benzaldehyd	-0,161	-0,073	-0,200	-0,019	0,073	0,052	-0,102	0,761	0,103	-0,036	-0,024	0,033	0,070	0,170	0,062	-0,179	0,346	0,102	0,149
Benzoesäure-ethyl-ester	-0,411	-0,024	0,031	0,478	-0,041	0,208	-0,134	0,338	0,304	0,032	-0,024	-0,269	0,048	0,133	-0,243	0,004	0,291	-0,150	0,012
Benzylalkohol	-0,169	0,390	-0,136	0,860	-0,067	-0,096	-0,016	-0,048	0,053	0,133	0,030	-0,036	0,010	0,063	0,101	-0,021	0,109	-0,018	-0,001
Decanal	0,097	-0,134	0,444	-0,128	0,539	0,008	-0,125	0,105	0,268	-0,127	-0,113	-0,211	0,005	0,012	-0,051	-0,242	-0,231	0,245	0,295
Decansäure-methyl-ester	0,407	-0,197	0,550	-0,130	-0,050	0,249	0,044	0,558	-0,166	-0,135	0,004	0,029	0,034	-0,008	0,096	0,062	-0,030	-0,025	-0,093
Decansäure-ethyl-ester	0,690	-0,215	0,561	-0,130	0,029	0,004	0,068	0,017	-0,085	-0,213	-0,012	0,119	0,063	-0,008	0,102	0,020	-0,035	0,078	-0,118
cis-4-decensäure-ethyl-ester	-0,009	-0,142	0,202	0,085	0,213	-0,098	0,725	-0,025	-0,022	-0,179	0,044	0,336	-0,074	-0,224	0,138	0,046	0,250	-0,103	0,028
Decansäure-isoamyl-ester	0,446	-0,109	0,818	-0,100	0,091	-0,072	0,173	0,054	-0,041	0,004	0,102	-0,025	-0,066	0,029	0,043	-0,054	-0,023	0,026	0,007
Decamol-1	-0,274	0,213	-0,030	0,109	-0,106	0,572	-0,011	0,241	0,300	0,148	0,096	-0,028	0,138	0,036	0,111	0,131	-0,250	-0,067	0,043
Decansäure	-0,088	0,726	-0,110	0,019	-0,081	-0,040	0,554	0,072	0,033	0,204	0,044	-0,047	0,138	0,136	0,029	-0,060	-0,043	0,169	-0,033
Dodecansäure-methyl-ester	0,326	-0,111	0,809	-0,051	-0,015	0,158	0,140	0,349	-0,076	-0,058	0,004	-0,047	0,090	0,018	-0,021	-0,077	-0,037	0,123	-0,034
Dodecansäure-ethyl-ester	0,406	-0,140	0,821	-0,134	0,074	-0,056	0,098	-0,076	-0,030	-0,027	-0,009	-0,003	0,075	0,023	-0,107	-0,097	-0,077	0,031	-0,081
Dodecansäure	-0,117	0,690	-0,063	0,000	-0,144	-0,126	0,455	-0,022	0,080	0,430	0,068	-0,069	0,077	0,077	0,031	-0,034	-0,093	0,144	-0,088
Tetradecansäure-methyl-ester	0,117	-0,069	0,917	0,017	0,030	-0,004	0,092	0,236	-0,017	0,046	0,126	-0,055	0,142	0,004	0,033	-0,050	0,032	0,109	0,005
Tetradecansäure-ethyl-ester	0,077	-0,159	0,900	-0,046	0,127	-0,082	0,031	-0,089	0,059	0,166	0,125	0,018	0,063	-0,004	-0,014	0,037	-0,016	-0,130	-0,070
Hexadecansäure-methyl-ester	0,095	-0,080	0,876	0,079	0,223	-0,137	-0,012	-0,119	0,062	0,092	-0,073	0,105	-0,002	-0,022	0,072	-0,053	0,034	-0,079	0,201
Hexadecansäure-ethyl-ester	0,051	-0,147	0,716	0,060	0,246	-0,252	0,007	-0,230	0,067	0,295	-0,128	0,153	0,001	-0,085	0,043	0,068	-0,070	-0,333	0,033
Linolensäure-ethyl-ester	-0,202	0,163	0,052	0,044	-0,188	-0,149	-0,110	-0,090	0,189	0,864	-0,074	0,052	-0,023	-0,060	-0,004	0,063	0,052	-0,023	-0,033
Linolensäure	-0,133	0,088	0,342	0,104	0,005	-0,204	-0,069	-0,153	0,126	0,839	0,022	0,084	0,021	-0,059	-0,030	0,125	-0,015	-0,065	0,019
Armeisensäure-ethyl-ester	0,017	0,056	0,157	-0,045	-0,133	0,024	0,389	0,836	-0,002	0,060	-0,006	-0,056	0,032	-0,025	-0,043	0,047	-0,188	0,022	-0,144
Methanol	-0,134	0,072	0,252	0,143	-0,095	0,247	-0,180	0,184	0,180	-0,040	-0,126	-0,056	0,139	0,115	0,773	-0,058	0,028	-0,008	0,070
Acetaldehyd-diethylacetal	0,517	-0,020	-0,116	-0,119	0,087	0,617	-0,163	-0,005	-0,040	-0,105	0,095	-0,186	-0,049	-0,054	-0,273	-0,105	0,194	-0,079	-0,102
Acetaldehyd	0,223	0,230	0,054	-0,135	0,767	-0,168	-0,044	-0,015	-0,012	-0,100	0,124	-0,007	0,065	0,072	0,081	-0,106	0,019	-0,268	-0,033
Essigsäure-benzyl-ester	-0,253	0,435	-0,159	0,586	-0,093	-0,152	-0,117	0,138	0,415	0,096	-0,057	-0,010	0,226	0,037	0,141	-0,035	0,142	0,090	-0,098
Essigsäure-methyl-ester	-0,010	0,495	-0,013	0,110	0,748	-0,025	-0,135	-0,041	0,068	-0,080	0,020	-0,045	-0,040	-0,111	0,030	-0,049	-0,013	-0,164	-0,193
Essigsäure-ethyl-ester	0,004	0,411	-0,068	0,398	0,690	-0,104	-0,007	-0,075	0,161	-0,168	0,144	0,018	-0,066	-0,056	-0,062	-0,037	-0,015	-0,077	-0,142
Essigsäure-propyl-ester	0,064	0,216	-0,035	-0,014	0,547	-0,202	0,143	0,043	0,033	-0,243	-0,181	0,488	-0,016	0,157	-0,069	0,428	-0,042	0,007	-0,024
Essigsäure-pentyl-ester	0,598	0,192	0,158	-0,180	-0,120	0,026	0,562	-0,047	-0,090	-0,081	-0,210	-0,062	0,029	-0,020	0,085	0,272	0,047	-0,022	-0,032
Essigsäure-hexyl-ester	0,572	0,110	-0,031	-0,187	-0,142	0,110	0,689	0,026	-0,121	-0,040	-0,019	-0,130	0,065	0,072	0,081	0,181	0,020	0,131	-0,006
Essigsäure-trans-2-hexenyl-ester	0,850	-0,115	-0,077	-0,070	-0,074	0,293	-0,147	-0,074	0,016	0,036	-0,232	0,014	0,069	-0,063	0,037	-0,133	-0,047	-0,004	0,128
Essigsäure-2-methylbutyl-ester	0,941	-0,044	-0,161	-0,024	-0,078	0,087	0,025	-0,036	-0,026	-0,056	0,084	0,005	0,029	0,045	-0,050	0,193	0,045	-0,011	0,035
Essigsäure-2-methylpropyl-ester	0,962	-0,032	-0,061	0,036	-0,003	0,150	0,052	-0,034	0,033	-0,008	0,072	-0,031	0,012	-0,008	-0,089	-0,018	0,017	0,043	0,045
Essigsäure-3-methylbutyl-ester	0,922	-0,051	-0,141	-0,079	-0,094	0,037	0,024	-0,054	-0,053	-0,064	0,160	0,021	0,020	0,088	-0,014	0,231	0,049	-0,018	0,038
Essigsäure-2-phenylethyl-ester	0,251	0,161	-0,054	0,081	-0,117	-0,135	-0,051	-0,073	-0,007	0,055	-0,100	-0,100	0,272	0,038	-0,019	-0,058	-0,022	0,010	-0,010
Essigsäure	-0,125	0,861	-0,163	0,213	0,051	-0,115	-0,171	-0,040	0,286	0,040	-0,128	0,027	0,047	-0,055	0,080	-0,028	0,060	-0,021	-0,008
Propanal-diethylacetal	0,177	-0,063	-0,039	-0,028	0,022	0,939	-0,010	0,012	0,010	-0,015	-0,035	0,000	-0,007	0,135	-0,033	0,015	-0,137	-0,014	-0,021
Propansäure-ethyl-ester	-0,143	0,041	0,250	0,041	0,742	-0,006	0,124	-0,033	-0,021	-0,069	-0,091	0,328	0,068	0,088	-0,206	0,024	-0,038	0,167	0,020
3-Ethoxypropanal-diethylacetal	-0,199	0,172	-0,198	0,252	-0,089	0,304	0,052	0,003	0,401	-0,398	-0,048	0,145	-0,001	-0,136	0,318	-0,068	-0,006	0,121	-0,137
Milchsäure-ethyl-ester	-0,274	0,414	-0,090	0,656	-0,125	-0,114	0,028	0,147	0,247	0,044	-0,048	-0,071	0,370	-0,001	0,103	-0,003	0,052	0,087	-0,096
Propanol-1	-0,299	-0,094	0,080	-0,181	-0,099	-0,146	0,073	-0,050	0,025	0,236	-0,121	0,799	-0,010	-0,036	0,022	0,237	0,030	0,027	-0,065
Propansäure	-0,026	0,859	0,051	0,091	0,039	-0,204	-0,117	-0,118	0,294	0,016	0,057	0,078	-0,013	0,062	-0,121	-0,015	0,060	-0,084	0,213
Butanol-diethylacetal	0,255	-0,086	-0,034	-0,075	0,029	0,943	0,006	-0,070	0,008	-0,019	-0,042	-0,071	0,041	0,074	0,019	0,007	-0,005	0,033	-0,018
Butansäure-methyl-ester	0,648	0,117	0,145	-0,090	0,090	0,582	0,076	-0,105	0,059	0,016	-0,012	-0,059	-0,093	0,116	0,014	0,220	-0,041	0,051	0,004
Butansäure-ethyl-ester	0,759	0,025	0,083	-0,123	0,362	0,125	0,070	0,009	-0,026	0,023	-0,082	-0,011	-0,021	-0,049	-0,019	-0,037	0,035	-0,054	-0,014
Bernsteinsäure-methyl-ester	-0,289	0,222	-0,246	0,212	0,051	0,062	-0,047	0,177	0,219	0,301	-0,011	-0,025	-0,026	-0,068	-0,001	-0,063	0,720	0,050	-0,034
Butanol-1	-0,163	0,227	0,217	-0,090	0,114	-0,198	0,056	-0,236	0,727	0,069	-0,117	0,169	0,059	-0,090	0,090	-0,063	-0,128	-0,293	-0,017
Butanol-2	-0,050	0,932	-0,010	0,040	0,079	0,002	-0,177	-0,043	-0,034	-0,196	-0,090	0,005	0,025	0,025	-0,049	0,019	0,057	-0,006	0,001
Butansäure	-0,167	0,015	-0,336	0,040	-0,219	0,036	0,099	0,200	0,059	0,594	0,185	-0,062	0,046	0,189	-0,346	-0,175	0,105	0,174	0,008
Pentanal-diethylacetal	0,371	-0,103	-0,074	-0,116	-0,048	0,885	-0,008	-0,028	-0,036	-0,044	-0,105	-0,056	0,025	-0,062	0,065	-0,026	0,013	0,055	-0,031
Pentanol-1	0,174	-0,105	0,298	-0,196	0,009	-0,122	0,198	-0,080	0,051	-0,020	-0,070	-0,018	0,060	0,110	0,114	0,063	-0,061	0,198	0,140
Pentansäure	0,075	0,081	-0,436	-0,140	0,041	-0,119	0,059	0,175	0,767	0,033	-0,159	-0,136	0,134	-0,007	0,119	-0,069	0,006	-0,068	0,045
Hexanal-diethylacetal	0,434	-0,138	-0,064	-0,091	0,166	0,779	-0,056	-0,004	-0,013	0,008	-0,003	0,095	-0,059	-0,053	-0,022	-0,100	0,044	0,277	0,171
Hexanal	0,231	-0,117	0,467	-0,099	0,607	-0,131	0,031	-0,189	0,034	-0,043	-0,089	-0,013	0,176	0,190	0,056	0,065	0,054	0,090	-0,060

Fortsetzung Tab. 5: Rotierte Komponentenmatrix Zwetschke

Substanzen	Komponente																		
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19
Hexansäure-methylester	0.898	-0.031	-0.068	-0.048	0.179	0.270	-0.068	0.083	-0.007	0.004	-0.129	-0.058	0.033	-0.054	0.099	0.017	-0.060	-0.056	-0.054
Hexansäure-ethylester	0.903	-0.045	-0.022	-0.015	0.156	0.091	-0.195	-0.230	-0.014	-0.018	-0.088	0.086	0.035	-0.050	-0.018	-0.064	-0.064	-0.046	-0.126
cis-3-Hexenol-1	-0.184	0.444	0.073	0.338	-0.191	0.195	0.178	-0.116	-0.188	-0.045	0.025	-0.136	0.535	0.268	0.107	0.000	-0.100	0.084	-0.032
Hexansäure-2-methylbutylester	0.829	-0.029	0.408	0.060	0.166	0.139	0.044	-0.063	-0.043	0.062	0.160	-0.040	-0.114	0.002	-0.091	-0.049	0.011	0.043	0.155
Hexansäure-3-methylbutylester	0.899	-0.110	0.306	-0.014	0.084	0.108	0.040	-0.013	-0.057	0.046	0.118	-0.021	-0.056	-0.049	-0.055	-0.074	0.030	0.005	0.012
Hexanol	-0.133	0.532	0.232	0.494	-0.009	0.311	0.508	-0.184	-0.048	0.039	0.030	-0.160	0.042	0.168	0.101	0.177	0.193	-0.041	0.038
Hexansäure	-0.078	0.946	-0.157	0.137	0.018	-0.038	0.176	0.080	0.037	0.082	0.001	-0.025	-0.003	0.022	-0.038	-0.015	0.007	0.031	0.005
Heptanal-dichylacetal	0.319	-0.181	-0.075	0.118	-0.075	0.798	-0.056	0.086	-0.117	-0.118	-0.085	0.124	-0.029	-0.264	0.127	-0.089	0.137	-0.004	-0.018
Heptanal	0.207	-0.197	0.420	0.178	0.747	-0.132	0.024	-0.009	0.036	0.000	-0.082	-0.045	-0.030	0.051	0.165	0.066	0.166	0.004	-0.018
Heptanol-1	-0.226	0.087	0.148	0.149	-0.005	0.155	-0.057	0.240	0.701	0.415	0.255	0.012	-0.004	0.161	0.031	0.026	0.178	0.065	0.042
Octanal-diethylacetal	0.302	-0.188	-0.111	-0.153	-0.225	0.644	0.098	0.120	-0.168	-0.138	-0.104	0.212	-0.057	-0.403	0.171	-0.156	0.024	0.026	0.083
Octanal	0.133	-0.181	0.086	-0.224	0.503	-0.225	0.236	0.102	-0.121	0.000	-0.137	-0.123	-0.025	-0.021	0.180	0.070	-0.142	0.125	0.600
Octansäure-methylester	0.554	-0.188	0.359	-0.134	0.141	0.213	-0.040	0.495	-0.137	-0.138	-0.077	-0.037	-0.057	-0.044	0.287	0.000	-0.120	-0.098	-0.186
Octansäure-ethylester	0.765	-0.212	0.359	-0.152	0.186	0.041	-0.028	0.014	-0.186	-0.133	-0.068	0.077	-0.034	-0.075	0.121	-0.044	-0.119	-0.101	-0.223
Octansäure-propylester	0.118	-0.261	0.524	-0.197	0.097	0.014	0.153	0.323	-0.077	-0.115	-0.140	0.535	-0.008	-0.027	-0.026	0.212	-0.105	-0.163	-0.077
Octansäure-2-methylbutylester	0.767	-0.162	0.466	-0.101	0.047	0.035	0.118	0.328	-0.096	-0.018	0.097	-0.102	-0.073	0.013	-0.027	-0.092	-0.063	0.012	0.213
Octansäure-2-methylpropylester	0.844	-0.099	0.382	-0.092	-0.071	0.066	-0.002	0.103	0.111	-0.002	0.131	-0.026	-0.070	0.013	-0.105	-0.113	0.024	0.088	0.044
Octansäure-3-methylbutylester	0.786	-0.129	0.471	-0.090	0.017	0.012	0.130	0.015	-0.112	-0.044	0.176	-0.078	-0.078	0.035	-0.028	-0.096	-0.034	0.027	-0.044
Octanol-1	-0.234	0.300	-0.098	0.134	-0.046	0.075	0.227	0.508	0.535	0.235	0.021	-0.058	-0.064	0.236	-0.051	0.086	-0.176	0.077	0.203
Octansäure	-0.051	0.839	-0.139	0.043	-0.012	-0.013	0.466	0.082	0.009	0.086	0.020	-0.050	0.028	0.085	-0.008	-0.047	-0.032	0.115	-0.004
Nonanal-diethylacetal	0.277	-0.179	-0.118	-0.110	-0.253	0.520	-0.038	0.013	-0.101	-0.115	-0.060	0.438	-0.048	-0.495	0.072	-0.135	-0.013	-0.036	-0.034
Nonanal	0.334	-0.255	0.407	-0.172	0.656	-0.139	0.049	-0.058	0.103	-0.008	-0.034	0.127	-0.085	-0.041	-0.007	0.173	-0.070	0.155	0.145
Nonansäure-ethylester	0.079	-0.331	0.378	-0.021	0.290	0.250	-0.092	0.384	-0.076	0.061	0.109	0.317	-0.062	-0.400	-0.112	-0.106	0.131	-0.146	-0.173
Nonanol-1	-0.217	0.023	0.018	0.327	-0.159	0.140	-0.048	0.369	0.595	0.421	0.254	-0.022	-0.058	0.062	-0.130	0.073	0.067	-0.004	0.006
cis-Linalooloxid	-0.189	0.286	-0.072	0.595	-0.011	-0.116	-0.028	0.088	0.377	-0.145	0.088	-0.012	0.519	-0.004	0.190	-0.008	0.012	0.131	-0.024
Diacetyl	0.321	-0.127	0.340	-0.054	0.219	-0.117	0.266	0.014	0.861	0.270	0.149	0.497	0.053	-0.346	-0.127	0.112	-0.321	0.178	0.111
Eugenol	-0.210	0.433	-0.142	0.813	-0.007	-0.023	0.130	-0.024	0.021	0.099	-0.005	0.010	0.181	0.042	-0.021	0.071	0.074	0.014	0.014
Farnesol-3	-0.160	0.522	-0.029	0.468	-0.189	-0.126	0.234	-0.045	-0.029	0.367	0.010	-0.010	0.414	-0.018	0.031	-0.093	0.089	0.068	0.003
Furfural	-0.320	0.479	-0.058	0.202	-0.113	0.222	0.003	-0.050	-0.014	-0.044	0.105	0.032	0.074	0.665	0.066	0.024	0.024	0.069	0.041
γ-Decalacton	-0.062	0.960	-0.071	0.058	0.026	-0.038	-0.165	-0.062	0.009	0.053	0.085	0.021	0.007	-0.034	0.013	0.012	0.050	-0.061	0.023
γ-Decalacton	-0.036	0.535	-0.160	-0.034	-0.103	-0.162	0.026	-0.081	0.069	0.592	0.390	0.027	-0.117	0.147	0.163	-0.130	0.119	0.007	-0.099
2-Methylpropanol-1	-0.214	0.320	-0.246	0.600	0.027	-0.148	0.047	-0.009	0.513	-0.012	-0.024	0.011	0.120	-0.014	0.241	-0.041	0.056	0.211	-0.018
2-Methylbutansäure-ethylester	-0.129	0.217	0.035	0.307	-0.036	0.091	0.084	0.010	0.251	-0.197	-0.078	-0.204	-0.184	-0.189	0.051	-0.065	0.010	-0.187	-0.018
2-Methylpropanal-diethylacetal	0.139	-0.071	0.019	-0.011	-0.036	0.904	-0.008	0.269	0.005	-0.009	0.121	-0.075	-0.001	0.209	0.012	0.011	-0.035	-0.059	0.015
2-Methylpropanansäure-methylester	0.193	-0.122	-0.058	0.011	0.813	0.058	-0.105	0.079	-0.129	0.133	0.208	-0.064	-0.052	-0.145	-0.039	-0.008	0.089	-0.138	-0.104
2-Methylpropanansäure-ethylester	0.032	-0.113	-0.097	-0.100	-0.006	-0.136	0.023	-0.112	-0.095	0.081	0.051	0.184	-0.001	-0.041	-0.023	0.922	-0.046	0.013	0.013
2-Methylpropanol-1	0.641	-0.139	0.447	0.064	-0.030	0.016	-0.034	-0.075	-0.020	0.029	0.485	0.068	-0.192	-0.090	-0.071	0.000	-0.011	0.120	0.045
2-Methylpropanansäure	-0.037	0.714	-0.137	0.475	-0.040	-0.090	0.106	-0.079	-0.029	0.191	0.386	-0.048	-0.046	0.005	-0.072	0.034	0.008	-0.031	-0.025
3-Methylbutanal-diethylacetal	-0.115	-0.109	-0.007	0.014	0.007	0.616	-0.126	0.678	-0.022	-0.060	0.003	-0.124	-0.043	-0.013	-0.017	0.020	0.268	-0.093	-0.036
3-Methylbutanal	-0.193	-0.085	-0.156	0.059	0.408	0.024	-0.119	0.740	0.238	-0.120	0.003	-0.087	-0.003	-0.019	0.080	-0.105	0.033	0.154	0.154
3-Methylbutansäure-ethylester	-0.075	0.069	0.083	0.713	0.508	0.079	0.021	0.231	-0.106	-0.124	0.012	-0.166	-0.121	-0.127	0.080	-0.033	0.202	0.002	-0.082
3-Methylbutanol-1	0.484	-0.017	0.247	0.367	-0.020	-0.081	-0.006	-0.088	-0.067	0.060	0.688	-0.026	-0.152	0.012	-0.093	0.102	-0.037	-0.013	-0.037
3-Methylbutansäure	-0.047	0.914	-0.020	0.160	0.114	-0.077	-0.062	-0.023	-0.077	-0.042	-0.023	0.014	-0.077	-0.045	-0.064	0.013	-0.026	0.067	-0.002
Limonen	0.029	0.769	0.057	-0.138	0.588	0.012	0.562	0.066	-0.105	-0.094	-0.061	-0.098	-0.036	-0.093	-0.009	0.064	-0.056	0.033	-0.021
Linalool	0.153	0.346	0.265	0.140	0.014	-0.250	0.027	0.028	0.481	-0.111	0.082	-0.109	-0.014	0.100	-0.072	0.074	-0.125	0.612	0.008
Myrcen	0.159	0.198	0.648	-0.175	0.230	-0.170	0.155	-0.211	-0.135	-0.177	-0.177	-0.046	-0.129	0.126	0.315	0.170	0.136	-0.028	-0.007
Nerol	-0.115	0.809	-0.089	0.410	-0.022	-0.105	0.057	-0.044	0.185	0.109	-0.069	0.016	0.166	-0.090	0.167	0.007	0.065	0.044	-0.053
Phenyllessigsäure-ethylester	-0.495	0.247	-0.238	0.224	-0.137	0.005	-0.070	0.252	0.335	0.255	-0.095	-0.149	0.478	0.145	-0.335	-0.052	0.202	0.078	-0.082
Säure-ethylester	-0.272	-0.083	0.300	0.319	-0.223	0.051	0.084	0.025	0.102	-0.023	0.023	0.406	0.413	-0.192	-0.063	-0.124	0.073	-0.427	0.000
trans-2-decensäure-ethylester	0.103	-0.052	0.037	0.588	-0.020	-0.156	0.705	-0.093	0.040	-0.178	0.021	0.202	-0.092	-0.037	-0.030	-0.033	-0.088	-0.052	0.008
trans-2-Hexenal	-0.232	0.446	0.151	0.015	0.116	0.216	0.678	0.081	-0.033	0.101	0.132	-0.157	0.206	0.017	-0.050	0.100	0.161	0.126	0.036
trans-2-Hexenol	-0.161	0.248	0.202	0.774	-0.117	0.043	0.047	0.013	0.040	0.038	-0.016	0.870	0.029	0.002	0.029	0.005	0.002	-0.044	0.009
trans-Linalooloxid	-0.164	0.154	-0.075	0.778	-0.004	-0.119	-0.001	0.116	0.356	-0.130	0.030	0.021	0.348	-0.037	0.156	0.007	-0.017	0.074	-0.038
Zimtsäure-ethylester	-0.198	0.239	-0.211	0.116	0.023	-0.025	0.699	0.111	0.321	0.221	0.071	-0.022	0.083	0.106	0.059	-0.037	0.029	0.348	-0.068
trans-2-cis-4-decadiensäure-methylester	0.049	0.071	0.180	0.296	-0.054	-0.029	0.881	-0.012	-0.028	0.013	-0.016	-0.124	0.036	0.013	-0.041	-0.051	-0.062	-0.193	-0.026
trans-2-cis-4-decadiensäure-ethylester	-0.019	-0.030	0.111	0.230	0.036	-0.140	0.868	-0.073	-0.040	-0.100	-0.040	0.155	0.014	0.003	-0.139	0.020	-0.100	-0.210	0.008
trans-2-trans-4-decadiensäure-methylester	0.003	-0.018	-0.012	0.946	-0.043	-0.032	1.013	-0.073	-0.192	-0.002	0.002	-0.019	-0.148	0.033	-0.060	0.009	-0.078	-0.074	0.035
trans-2-trans-4-decadiensäure-ethylester	0.001	0.014	0.062	0.651	0.073	-0.064	0.663	-0.046	-0.123	-0.023	-0.028	0.036	-0.054	0.082	-0.192	-0.085	-0.124	-0.107	0.031

len lediglich als Trend gedeutet werden können. Eine der wichtigsten Ursachen dafür dürfte in nicht linearen Zusammenhängen zu suchen sein, da ganz allgemein die Korrelationsanalyse nur für lineare Zusammenhänge passend ist, und andererseits gerade Sinneswahrnehmungen häufig nicht linearen Gesetzmäßigkeiten folgen. Deutliche Hinweise in diese Richtung lieferte etwa die Analyse der Benzaldehydgehalte der Zwetschkendestillate oder der Decadiensäureestergehalte bei den Williamsbirnendestillaten.

4. Die schon von GUAN und PIEPER (1998) gewonnenen Erkenntnisse über freie Fettsäuren als Hauptverursacher von Nachlaufölen konnte von uns bei dem hier untersuchten Probenmaterial voll bestätigt werden.

5. Die in relativ hohen Konzentrationen vorliegenden Ester der höheren gesättigten Fettsäuren sind für den sensorischen Charakter weitgehend bedeutungslos.

6. Die untereinander meist hoch korrelierten Acetale der hier untersuchten Aldehyde weisen ebenfalls nur eine untergeordnete sensorische Bedeutung auf. Diese von uns schon beim Actetaldehyddiethylacetal beschriebene Eigenart (BRANDES et al., 2005) dürfte demnach auf die meisten dieser Verbindungen zutreffen.

7. Interessant ist auch die Tatsache, dass bei fast allen Destillaten der Faktor mit relativ hohen Ladungen von Heptanol-1, Octanol-1, Nonanol-1 und Decanol-1 einen negativen Zusammenhang mit der Sensorik hat. Möglicherweise haben diese Verbindungen eine Art Zeigerfunktion.

8. Synergismen und Antagonismen prägen in vielen Fällen den Zusammenhang zwischen Sinneseindruck und Konzentration verschiedener Inhaltsstoffe. Augenfällige Beispiele dieser gegenseitigen Beeinflussung sind beispielsweise die fast vollständige Aufhebung des positiven Einflusses einer Reihe bekannter Marillenaromastoffe durch den synchron erfolgenden negativen Einfluss freier Fettsäuren oder die teilweise Kompensation der Wirkung typischer Vorlaufkomponenten durch die Wirkung von Nonanal bei den Zwetschkendestillaten.

Abschließend muss noch darauf hingewiesen werden, dass trotz der großen Zahl an erfassten Verbindungen der Einfluss weiterer hier nicht bestimmter Verbindungen einen beträchtlichen Unsicherheitsfaktor darstellt. Zusätzlich ist die Zahl der untersuchten Destillate mit 30 Proben je Obstart als eher untere Grenze für statistische Untersuchungen zu bewerten, und eine entsprechend gute Repräsentation der zugehörigen Grundgesamtheit ist nur mit Einschränkungen gegeben. Außerdem konnte eine Zuordnung der Destillate auf spezifische Sorten bzw. Klone auf Grund fehlender Angaben

in den meisten Fällen nicht vorgenommen werden, und die Möglichkeit einer Verfälschung der Resultate durch Inhomogenität der Stichproben ist damit in gewissem Umfang gegeben.

Abschließend möchten die Autoren noch Herrn MANFRED GÖSSINGER für die Unterstützung bei der Probenbeschaffung und Sinnenprüfung danken.

Literatur

- ADAM, L., MEINL, J., CHRISTOPH, N. und VERSINI, G. 1995: Beitrag zur Beurteilung von Williamsbirnenbränden und Zwetschgenwässern. *Kleinbrennerei* 47(9): 188-199
- BATTAGLIA, R. 1986: Analytik und Beurteilung von Williamsbirnenbranntweinen mit Hilfe chemometrischer Methoden. *Mitt. Geb. Lebensmittelunters. Hyg.* 77: 14-23
- BAUDLER, R., ADAM, L., ROSSMANN, A., VERSINI, G. und ENGEL, K.-H. 2004: Täuschungen auf der Spur : Herkunftsnachweis - Mit Analytik stabiler Isotope sollen Obstbrände geographischen Regionen zugeordnet werden. *Kleinbrennerei* 56(10): 4-6
- BINDLER, F. und LAUGEL, P. 1985: Neue Versuche zur Identifizierung von Obstbranntweinen. *Dt. Lebensmittel-Rundsch.* 81(11): 350-356
- BRANDES, W., KARNER, M. und EDER, R. 2003: Bestimmung von sortentypischen Aromastoffen in 'Williams-Christ'-Bränden und deren Destillationsverhalten. *Mitt. Klosterneuburg* 53: 103-112
- BRANDES, W., KARNER, M. und EDER, R. 2005: Geschwindigkeitsbestimmende Parameter und sensorischer Einfluss der 1,1-Diethoxyethanbildung während der Lagerung von Destillaten. *Mitt. Klosterneuburg* 55: 76-84
- FREITAG, D. 2006: Buttersäure - eine Zumutung für die Nase. *Kleinbrennerei* 58(6): 8-9
- GUAN, S. und PIEPER, H.J. 1998: Untersuchungen über charakteristische Inhaltsstoffe in Destillaten aus Obstmaischen, die als Leitsubstanzen zur sicheren Erkennung Nachläufen geeignet sind. *Dt. Lebensmittel-Rundsch.* 94(11): 365-374
- HOLZER, H. 1985: Zur analytischen Beurteilung von Spirituosen. *Ernährung/Nutrition* 9(7): 521-523
- JUNG, O. 2005: Wissenschaftliche Unterstützung der Qualitätsbrennerei : Analytische Kennzahlen - Hilfe bei der Beurteilung von Obstbränden. *Kleinbrennerei* 57(6): 8-10
- JUNG, O. und ADAM, L. 2005: Wissenschaftliche Unterstützung der Qualitätsbrennerei : Analytische Kennzahlen - Ethylcarbamate. *Kleinbrennerei* 66(8): 4-6
- MISSLHORN, K. 1992: Zum Rohstoffnachweis bei Obstbränden aufgrund gaschromatographischer Messwerte. *Branntweinwirtschaft* (3): 74-78
- NOSKO, S. 1974a: Zur Beurteilung von Williams-Christ-Branntweinen, 1.Mitteilung. *Dt. Lebensmittel-Rundsch.* 70(11): 397-400
- NOSKO, S. 1974b: Zur Beurteilung von Williams-Christ-Branntweinen, 2.Mitteilung. *Dt. Lebensmittel-Rundsch.* 70(12): 442-447
- PIEPER, H.J. und RAU, T. 1987: Neuer Vorlaufabtrennungs-Test für die Praxis der Obstbrennerei. *Alkohol-Industrie* 100(3): 53-56

- POSTEL, W. und ADAM, L. 1982: Gaschromatographische Charakterisierung und Beurteilung von Spirituosen, Teil 1. Alkohol-Industrie 95(13): 287-289
- PRELL, W., STEINER, R., FEGER, W. und ZIEGLER, M. 2001: Herstellung von Apfelaromakonzentraten durch Hochdruckextraktion mit Kohlendioxid, Dt. Lebensmittel-Rundsch. 97(11): 421-427
- REINHARD, C. 1978: Beitrag zur Untersuchung und Beurteilung von Obstbranntweinen. Dt. Lebensmittel-Rundsch. 76(8): 299-301
- SCHOLTEN, G. 2002: Inhaltsstoffe von Obstbränden. Destillat-Magazin (3): 26-28
- UNTERWEGER, H. und BANDION, F. 2003: Zur gaschromatographischen Bestimmung von Essigsäure in Gemüsesäften. Mitt. Klosterneuburg 53: 203-213

Manuskript eingelangt am 27. Dezember 2006