

# Die Datenbank Seed Oil Fatty Acids (SOFA)

## Ein Werkzeug zur Bearbeitung entwicklungs- geschichtlicher und oleochemischer Fragen

Bertrand Matthäus, Kurt Aitzetmüller (Münster) und Holger Friedrich (Bonn)

**D**ie Samenöle der Pflanzen enthalten verschiedene Fettsäuren, die als natürliche Rohstoffe für die oleochemische Industrie interessant sind oder auch für eine pharmazeutische Nutzung in Frage kommen. Darüber hinaus bieten „ungewöhnliche“, nur von Vertretern bestimmter Pflanzenfamilien gebildete Fettsäuren die Möglichkeit, Verwandtschaftsverhältnisse zwischen einzelnen Pflanzengruppen näher abzuklären. Am Institut für Lipidforschung der Bundesanstalt für Getreide-, Kartoffel- und Fettforschung (BAGKF) sind über viele Jahre die in der Fachliteratur verstreuten Angaben zum Vorkommen und Gehalt einzelner Fettsäuren in Pflanzensamen gesammelt worden. Gemeinsam mit der Zentralstelle für Agrardokumentation und -information (ZADI) ist diese Sammlung jetzt in eine online recherchierbare Datenbank überführt worden. Damit erschließen sich neue Dimensionen bei der gezielten Suche nach bestimmten Fettsäuren.

### Hintergrund

Vor rund 10 Jahren, im Juni 1992, wurde auf der Umweltkonferenz „UNCED“ in Rio de Janeiro mit dem Übereinkommen über die Biologische Vielfalt ein Abkommen von 157 Staaten und der Europäischen Gemeinschaft unterzeichnet, mit dem versucht werden soll, die Artenvielfalt unter den lebenden Organismen jeglicher Herkunft auch für nachfolgende Generationen zu sichern. Das „gemeinsame Erbe der Menschheit“ soll – über nationale kommerzielle Erwägungen hinaus – für alle Länder verfügbar und nutzbar gehalten werden. Hinter dem Abkommen stand auch der Gedanke, natürliche Rohstofflieferanten für aktuelle und künftige Nutzungen zu bewahren. Dazu gehören auch Erkenntnisse über das im Pflanzenreich insgesamt vorhandene genetische Potenzial, das in den Pflanzensamen gespeichert ist. Bisher sind nur wenig Informationen über dieses Potenzial verfügbar. Jeden Tag verschwinden viele dieser Pflanzen von der Erde, sodass die

Erforschung der Zusammensetzung der Samen zu einem Wettlauf mit der Zeit wird.

### Fettsäuren und phylogenetische Fragen

Die Samen von Pflanzen dienen – anders als ihre grünen Teile – als Reservoir für Lipide, Kohlenhydrate und Proteine, die bei der Keimung in Energie umgesetzt werden und zum Wachstum der Pflanze führen. Gerade Lipide (Fette) sind in vielen Pflanzensamen sehr stark enthalten, da es sich um energiereiche Stoffe handelt. Hauptkomponenten der Fette sind in der Regel Triglyceride, die aus verschiedenen Fettsäuren aufgebaut sind.

Die in unseren essbaren Speiseölen üblicherweise vorhandenen Fettsäuren wie Palmitinsäure, Stearinsäure, Linolsäure oder Linolensäure kommen in fast allen Pflanzensamen in mehr oder weniger großen Mengen vor. Sie sind somit für eine verwandtschaftliche Einordnung der

Pflanzen ohne Bedeutung. Ungewöhnliche Fettsäuren entstanden im Zuge der Evolution durch Mutationen. Heute sind sie oftmals auf Arten beschränkt, die während der Evolution in bestimmten Nischen überlebt haben oder zu sehr alten Pflanzenfamilien gehören. Hier sind Fettsäuren mit ungewöhnlichen Strukturen dann oft in erheblichen Mengen enthalten. So finden sich Fettsäuren mit Kohlenstoffringen, mit ungewöhnlicher Lage der Doppelbindung oder mit ungewöhnlichen Kettenlängen vor allem in archaischen Familien aus der Frühzeit der Evolution der Angiospermen (Bedecktsamer), während die Vertreter der jüngeren Pflanzenfamilien eher oxidierte und konjugierte Fettsäuren in ihren Samen aufweisen.

Für den Taxonomen ist das Wissen über ungewöhnliche Fettsäuren von Interesse, da hierdurch das Verständnis der Entwicklungsgeschichtlichen Zusammenhänge zwischen verschiedenen Pflanzenfamilien wächst. Beispiele für Fettsäuren, die charakteristisch für bestimmte Familien sind und somit eine chemotaxonomische Bedeutung haben, sind die Labalensäure (18:2n5c,6c) bei Mitgliedern der Familie Lamiaceae (Lippenblütler), die ernährungsphysiologisch und pharmazeutisch bedeutsame  $\gamma$ -Linolensäure (18:3n6c,9c,12c), die typisch für die Familie Boraginaceae (Borretschgewächse) ist, oder auch Cyclopenten-Fettsäuren, die nur bei den Flacourtiaceae, einer altertümlichen, weitgehend auf die Tropen/Subtropen beschränkten Pflanzenfamilie, vorkommen.





ID	Content	Plant	Family	Author	Year
TFP1_0645	10.004 20.60 50.000	Symphytum asperum Lapech.	BORAGINACEAE	Tracy, P.	1974
TFP1_0647	10.004 20.60 50.000	Symphytum asperum Lapech.	BORAGINACEAE	Tracy, P.	1974
TFP1_0648	10.004 20.60 50.000	Symphytum asperum Lapech.	BORAGINACEAE	Tracy, P.	1974
TFP1_0649	10.004 20.60 50.000	Symphytum asperum Lapech.	BORAGINACEAE	Tracy, P.	1974
TFP1_0650	10.004 20.60 50.000	Symphytum asperum Lapech.	BORAGINACEAE	Tracy, P.	1974

Author	Title	Year	Volume	Page	Year
Tracy, P.	Symphytum asperum Lapech. (BORAGINACEAE)	1974	21	1-2	1974

## Fettsäuren und oleochemische Fragen

Es besteht aber nicht nur Interesse an pflanzengeschichtlichen Zusammenhängen, sondern auch an der Möglichkeit, ungewöhnliche Fettsäuren für technische Anwendungen zu nutzen.

Neben den „gewöhnlichen“, in fast allen Pflanzensamen vorkommenden Fettsäuren sind inzwischen mehr als 500 Fettsäuren mit den unterschiedlichsten Strukturen bekannt, die bisher nur in einigen Pflanzenlipiden nachgewiesen wurden. Viele dieser ungewöhnlichen Fettsäuren sind toxisch oder zumindest ungenießbar, sodass sie für die menschliche Ernährung nicht in Frage kommen. Auch sind die Pflanzen, die solche Fettsäuren enthalten, für die konventionelle Pflanzenzüchtung bisher nicht von Interesse gewesen, da ihr Anbau nicht wirtschaftlich war. Viele dieser Pflanzen sind bereits vom Aussterben bedroht.

Mit den neuesten Entwicklungen im Bereich Gentransfer und Enzymdesign wird aber das Wissen über die Biodiversität der Pflanzen, deren Enzyme und auch der Fettsäurestrukturen hochinteressant, weil solche Fettsäuren als Vorstufen oder Zwischenprodukte für die Synthese hochwertiger Endprodukte in der oleochemischen Industrie von großer Bedeutung sein können.

Außerdem liegen in den Samen neben den ungewöhnlichen Fettsäuren auch die Enzymsysteme vor, die an der Synthese dieser Fettsäuren beteiligt sind. Kennt man die Fettsäurezusammensetzung der

verschiedenen Samenöle, so lassen sich mit Hilfe der modernen Biotechnologie diejenigen Gen-Sequenzen aufspüren, die für die Produktion von interessanten Fettsäuren verantwortlich sind. Es ist denkbar, diese Gene in agronomisch besser geeignete Kulturarten zu übertragen, um damit den gewünschten Inhaltsstoff in großem Maßstab zu produzieren.

Für solche Forschungsarbeiten ist es zunächst einmal wichtig zu wissen, welche Fettsäurestrukturen es in der Natur der Pflanzen überhaupt gibt und vor allem in welchen Pflanzen diese in welchen Mengen vorkommen.

## Die Datenbank „Seed Oil Fatty Acids (SOFA)“

Einen wichtigen Beitrag, um solche Informationen einem großen Nutzerkreis zugänglich zu machen, liefert seit einiger Zeit die neue Datenbank „Seed Oil Fatty Acids“ (SOFA) des Instituts für Lipidforschung (ehemals Institut für Chemie und Physik der Fette) der Bundesanstalt für Getreide-, Kartoffel- und Fettforschung (BAGKF) in Münster. Hier wird seit über 30 Jahren die einschlägige pharmazeutische, botanische und chemische Fachliteratur nach Informationen über die Fettsäurezusammensetzung von Pflanzensamen durchsucht und die entsprechenden Informationen gesammelt. Die im Institut seit langem geführte Lose-Blatt-Sammlung enthält neben den Fettsäurezusammensetzungen der Samen auch die Strukturen und Trivialnamen der Fettsäuren, sowie zum Teil auch

Abb. 1: Ergebnis einer Suche nach Pflanzen, die sowohl Stearidon- als auch g-Linolensäure enthalten.

Angaben über Ölgehalte, chemische Kennzahlen, Tocopherole und Sterole. Neben den Literaturdaten werden im Institut aber auch eigene Daten über die Zusammensetzung der Fettsäuren und anderer Fettbegleitstoffe von Pflanzensamen erarbeitet.

Obwohl es sich bei dieser Lose-Blatt-Sammlung um eine einzigartige Informationsquelle handelt, stand diese große Datenmenge nur einem kleinen Kreis von Fachwissenschaftlern der Ressortforschung zur Verfügung. Außerdem war die Suche nach Pflanzen mit bestimmten Fettsäurezusammensetzungen oder gar nach Fettsäure-Teilstrukturen in mehr als 17.000 Datensätzen mühsam, wenn nicht unmöglich.

In Zusammenarbeit mit der Zentralstelle für Agrardokumentation und -information (ZADI) wurde von Mai 1997 bis September 2000 mit Mitteln des BMVEL ein Projekt durchgeführt mit dem Ziel, die papiergebundenen Informationen in eine recherchierbare, elektronische Datenbank zu überführen. Dadurch sollte das im Institut für Lipidforschung gesammelte umfangreiche Wissen einem größeren Kreis von Interessenten zugänglich gemacht werden.

Während des Projekts wurden alle Arbeiten, die die Datenbank betrafen (z.B. Entwicklung von geeigneten Abfrage-Algorithmen) von der ZADI übernommen, während das Institut für Lipidforschung die fachspezifischen Arbeiten hinsichtlich der gesammelten Daten sowie die Eingabe der Informationen in die Datenbank durchführte.

Die Datenbank ist unter der Internetadresse [www.bagkf.de/sofa](http://www.bagkf.de/sofa) nach Beantragung einer Zugangsberechtigung beim Institut für Lipidforschung kostenfrei verfügbar.

### Beispiele für die Anwendung

#### Oleochemische Fragen

Mit Hilfe der Datenbank ist es möglich, in einem großen Pool von Daten nach bestimmten Fettsäuren in verschiedenen Pflanzenfamilien zu suchen. Die neue Datenbank gestattet dabei nicht nur die Suche nach einzelnen definierten Fettsäuren, sondern auch die Suche nach Teilstrukturen von Fettsäuren und nach deren Prozentgehalten im Samenöl. Interessiert beispielsweise das Vorkommen der in der Ernährung bedeutsamen Fettsäuren  $\gamma$ -Linolensäure (18:3n6c,9c,12c) oder Stearidonsäure (18:4n6c,9c,12c,15c), so kann man nach dem gemeinsamen Strukturelement \*6c,9c,12c\* suchen und erhält bei der Recherche 1182 Treffer. Sind nur die Pflanzen von Interesse, die sowohl Stearidon- als auch  $\gamma$ -Linolensäure enthalten, so ist es auch möglich, die beiden Fettsäuren in Kombination zu suchen. Diese Liste kann nach den Gehalten sortiert dargestellt werden; die Fettsäure mit dem höheren Gehalt wird jeweils zuerst angegeben (Abb. 1).

Ein weiteres interessantes Beispiel für eine Suche in der SOFA-Datenbank ist Nervensäure (24:1n15c). Sie wird in der Industrie als Kunststoffadditiv und Gleitmittel eingesetzt, ist vor allem aber für die pharmazeutische Industrie interessant. Im

Abb. 2: Ergebnis einer Suche nach Pflanzen, die Nervensäure mit Gehalten über 20 % enthalten

menschlichen Körper wird Nervensäure insbesondere in Geweben des Zentralen Nervensystems gefunden. Bei erblichen Nervenerkrankungen wie Multipler Sklerose und Adrenoleukodystrophie fehlt diese Fettsäure in den Myelin- oder Markscheiden, die die Nervenbahnen umgeben. Dieses Fehlen wird mit bestimmten Ausfallerscheinungen wie Sehverlust sowie Störungen beim Gleichgewichtempfinden, bei Bewegungsabläufen und beim Erinnerungsvermögen in Zusammenhang gebracht. Daher könnten Pflanzensamen mit einem hohen Gehalt an Nervensäure bei der Herstellung von pharmazeutischen Produkten eine Rolle spielen. Abbildung 2 zeigt das Ergebnis einer Suche nach Pflanzen mit Nervensäuregehalten von über 20 Prozent. Es werden neun Pflanzenarten angezeigt, wobei Samen von *Malania oleifera* aus der Familie Olacaceae die höchsten Gehalte an Nervensäure haben.

Die oleochemische Industrie kann die Datenbank für die Suche nach geeigneten Rohstoffen verwenden. Meist sollen Pflanzen die gesuchte Fettsäure in möglichst hohem Gehalt aufweisen, denn so



Abb. 3: Ergebnis einer Suche nach Pflanzen, die Palmitinsäure mit Gehalten über 70 % enthalten

lassen sich kostenintensive Syntheseschritte einsparen. Sucht man beispielsweise nach Pflanzen, die Palmitinsäure – eine bei der Herstellung von Seifen, Schmierölen und Imprägnierungen verwendete Fettsäure – in Gehalten von mehr als 70 % aufweisen, liefert die Datenbank 24 Treffer (Abb. 3). Der höchste gefundene Gehalt liegt hier bei 87 Prozent in den Samen von *Tapes japonica*.

Die Effizienz der Datenbank wird dadurch gesteigert, dass Abfragen nicht nur über die vorgefertigten Formulare möglich sind, sondern auch mit Hilfe der FQM-Abfragesprache. Mit dieser Expertensprache lässt sich eine Abfrage weitgehend frei gestalten und somit das Potenzial der Datenbank voll ausreizen.

**Phylogenetische Fragen**

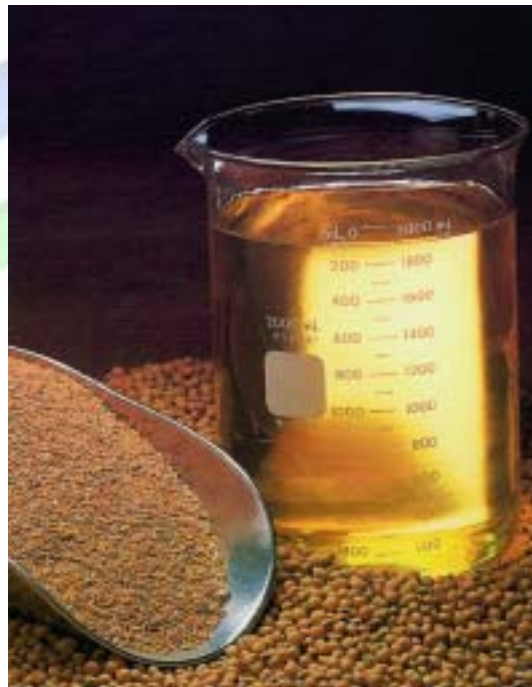
Neben der Suche nach geeigneten Rohstoffen sind es vor allem chemotaxonomische und phylogenetische Fragen, bei denen sich die Datenbank einsetzen lässt.

Eine in diesem Zusammenhang interessante Gruppe sind die  $n$ -5-NMIP-Fettsäuren (non-methylene-interrupted

polyenes), die eine isolierte Doppelbindung in 5-Stellung besitzen. Sie kommen in erster Linie in Algen oder anderen niederen Meereslebewesen vor. Im Pflanzenreich sind sie in nahezu allen Gymnospermen (nacktsamige Pflanzen) in mehr oder weniger großen Mengen zu finden. Dies deutet darauf hin, dass die Fähigkeit zur Bildung von  $n$ -5-NMIP-Fettsäuren in früheren Jahren im Pflanzenreich weit verbreitet gewesen sein muss. Später, bei den höher entwickelten Angiospermen (bedecktsamige Pflanzen), die in der Kreidezeit aus den Gymnospermen entstanden sind, muss dieser Syntheseweg weitestgehend verloren gegangen sein, da diese Fettsäuren in den Angiospermen nur bei einigen wenigen Familien vorkommen. Die interessanteste dieser Familien mit  $n$ -5-NMIP-Fettsäuren sind die Ranunculaceae (Hahnenfußgewächse), eine von den meisten Botanikern als eher ursprünglich eingeordnete Gruppe. In einigen Mitgliedern dieser Pflanzenfamilie werden noch  $n$ -5-Cis-C20-NMIP-Fettsäuren gefunden, die ansonsten nahezu ausschließlich auf die Gymnospermen beschränkt sind. Betrachtet man die höher entwickelten Pflanzenfamilien, so sind hier bis auf wenige Ausnahmen nur vereinzelt  $n$ -5-Fettsäuren, aber keine  $n$ -5-NMIP-Fettsäuren mehr zu finden.

Auch in allen Samen der bekannten Speiseöle haben sich einige wenige Fettsäuren durchgesetzt. Im Laufe der Evolution hat sich das Vorhandensein der  $n$ -5-NMIP-Fettsäuren offenbar als nicht mehr günstig oder notwendig erwiesen, sodass die für die Bildung notwendigen Enzymsysteme aus den Pflanzen verschwunden sind. Ebenso ging während der Evolution die Möglichkeit verloren, Ketten mit 18 C-Atomen auf 20 C-Atome zu verlängern.

So lassen sich Pflanzen aufgrund des Vorhandenseins charakteristischer Fettsäuren bestimmten Familien zuordnen, wodurch entwicklungsgeschichtliche Zusammenhänge der Pflanzen deutlicher werden.



**Breite Anwendungsmöglichkeiten**

Insgesamt bietet die Datenbank SOFA hervorragende Möglichkeiten sowohl bei der Suche nach Pflanzen mit bestimmten Fettsäuren für die oleochemische Industrie als auch bei der Aufklärung von entwicklungsgeschichtlichen Zusammenhängen zwischen verschiedenen Pflanzenfamilien und Pflanzen. Hier kann sie einen Beitrag liefern zum Verständnis der Enzymsysteme für die Fettsäure-Biosynthese im Pflanzensamen und deren Mutationen während der Evolution.

**BAGKF**

Dr. Bertrand Matthäus und Dr. Kurt

Aitzemüller, Bundesanstalt für Getreide-, Kartoffel- und Fettforschung, Institut für Lipidforschung, Piusallee 68/76, 48147 Münster, E-mail: [matthaus@uni-muenster.de](mailto:matthaus@uni-muenster.de)

**ZADI**

Dr. Holger Friedrich, Zentralstelle für Agrardokumentation und -information, In-

formationszentrum Verbraucherschutz und Ernährung, Villichgasse 17, 53177 Bonn, E-mail: [friedrich@zadi.de](mailto:friedrich@zadi.de)

