



# Einblick in die FT-IR-Technologie

Labor für Wein- und Getränkeanalytik

Sanoll Christof

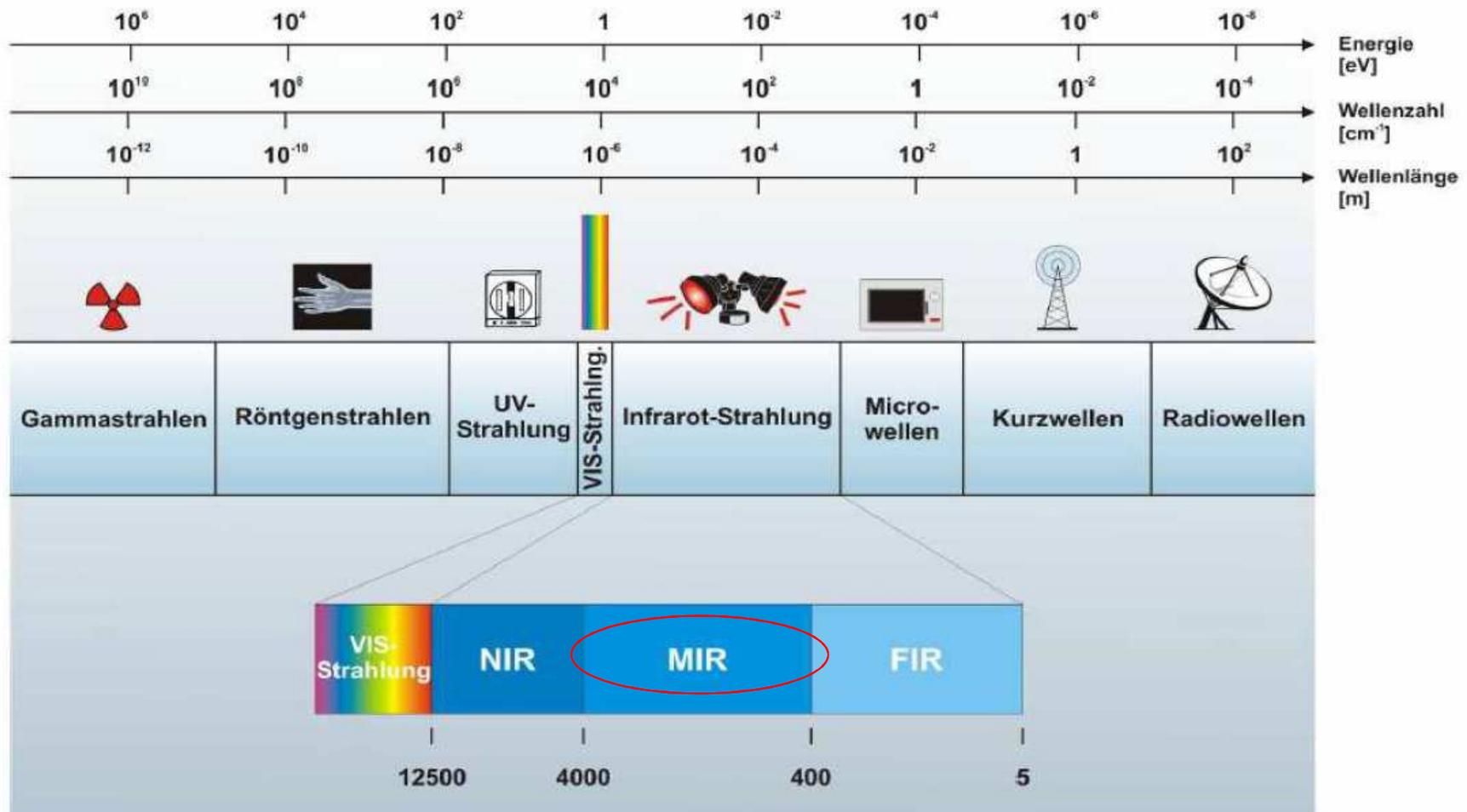
# IR-Spektrometer

---

- Was kann es?
- Betreuung und Weiterentwicklung
- Einblick über Technologie
- Möglichkeiten der Anwendung
- Was ist eine Kalibrierung
- Mostanalysen 2018



# Die elektromagnetische Strahlung



Vis-Strahlung ist die für uns Menschen sichtbare elektromagnetische Strahlung

# Absorptionsverhalten



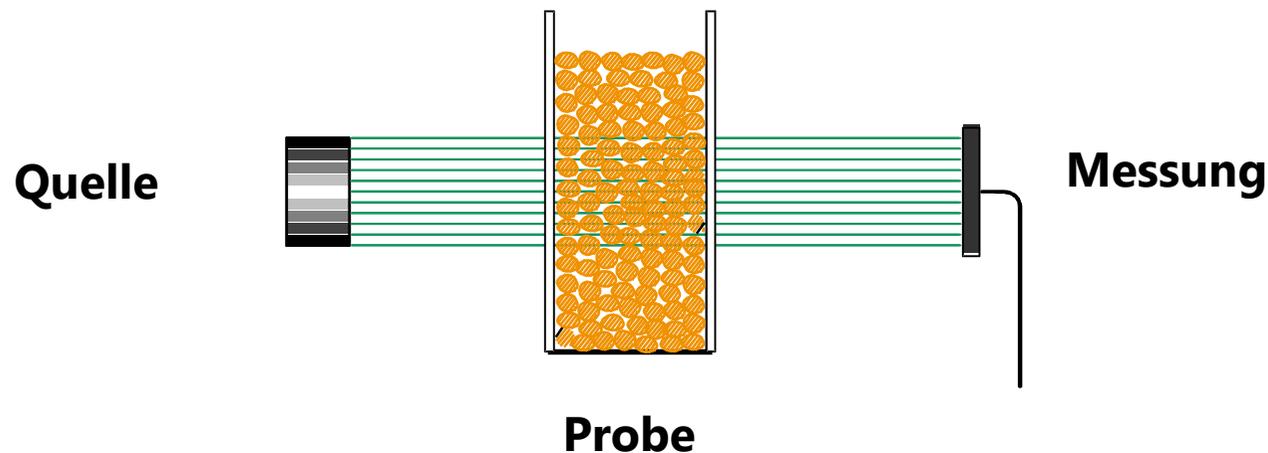
Bereich	Absorptionsverhalten	Wellenlänge Range (nm)
Near Infrared (NIR)	Obertöne Kombinationen	700-2500
Middle Infrared (MIR)	Grundschrwingungen	2500-5x10 <sup>4</sup>
Far Infrared (FIR)	Molekülrotationen	5x10 <sup>4</sup> -10 <sup>6</sup>

# Grundschrwingungen im Molekül

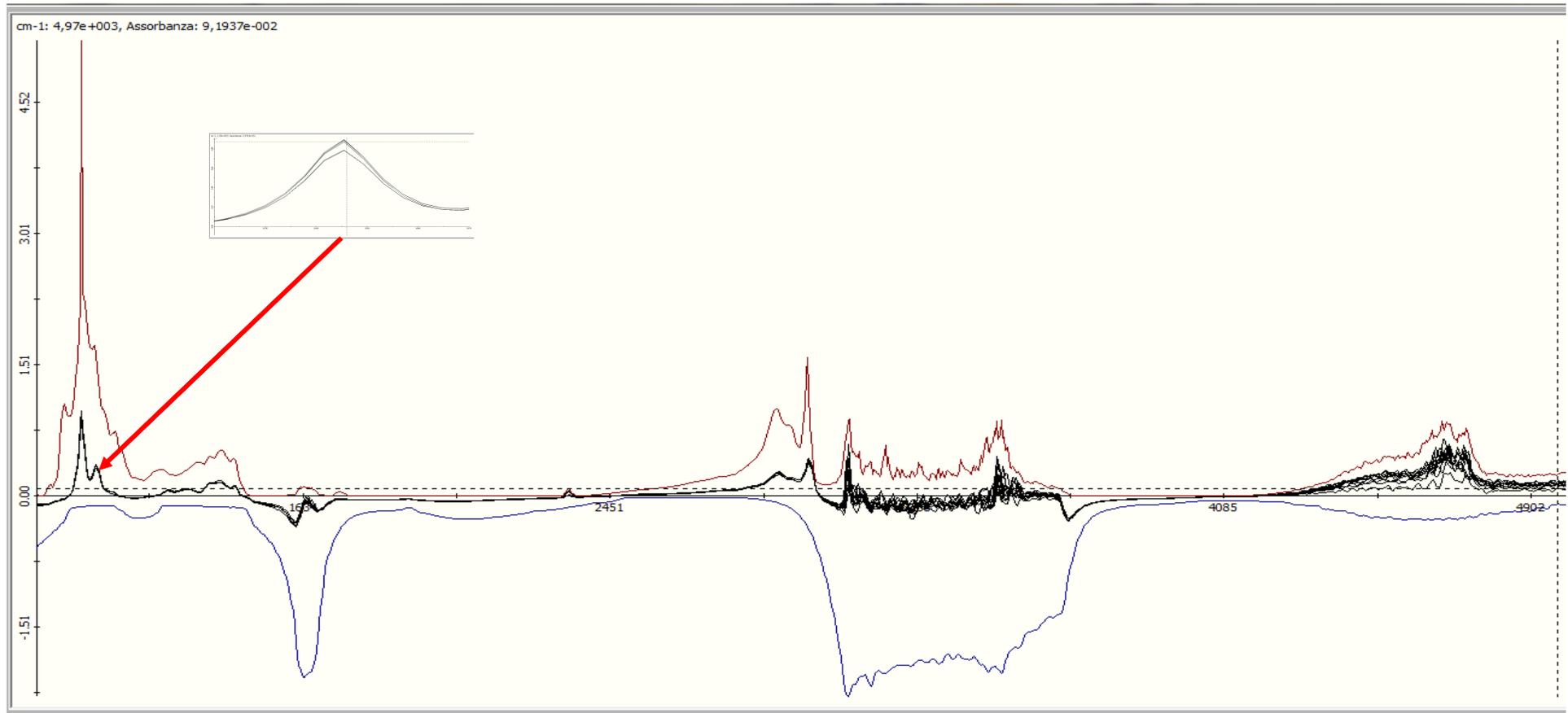
Die absorbierte Energie wird in kinetische Energie umgewandelt



Moleküle wie Alkohole, Zucker, organische Säuren, Stickstoffverbindungen und andere Inhaltsstoffe haben die Fähigkeit Energie, in Form von elektromagnetischer Strahlung zu absorbieren und zu emittieren



# Infrarotspektrum WineScan

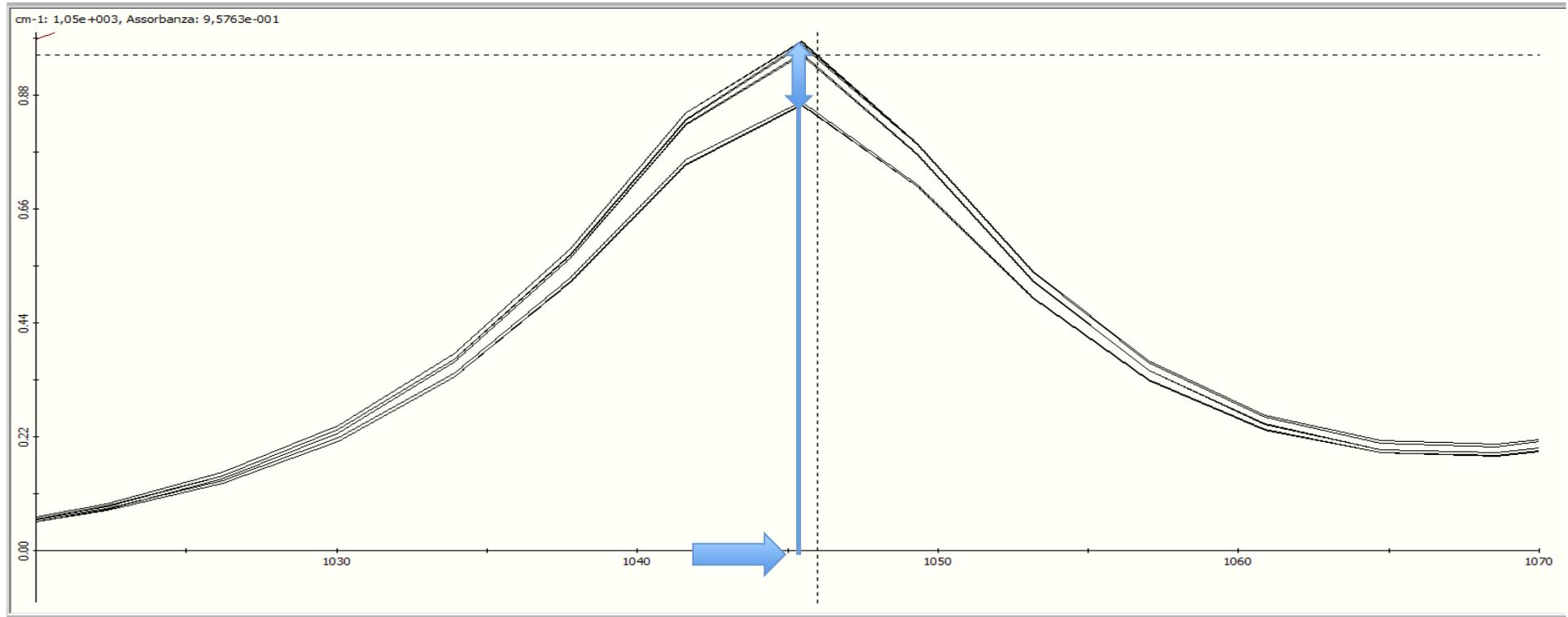


Das Spektrum wird in einem Wellenzahlenbereich von  $900\text{ cm}^{-1}$  bis  $4900\text{ cm}^{-1}$ ; bzw.  $3300\text{ nm}$  bis  $17000\text{ nm}$  aufgenommen

Für Messungen, bzw. Ermittlung der Werte wird nicht der gesamte Wellenzahlenbereich verwendet

Im Wellenzahlenbereich von  $900\text{ cm}^{-1}$  bis  $3000\text{ cm}^{-1}$  wird in über 1000 Punkten die Absorbanz gemessen um das IR-Spektrum zu erstellen

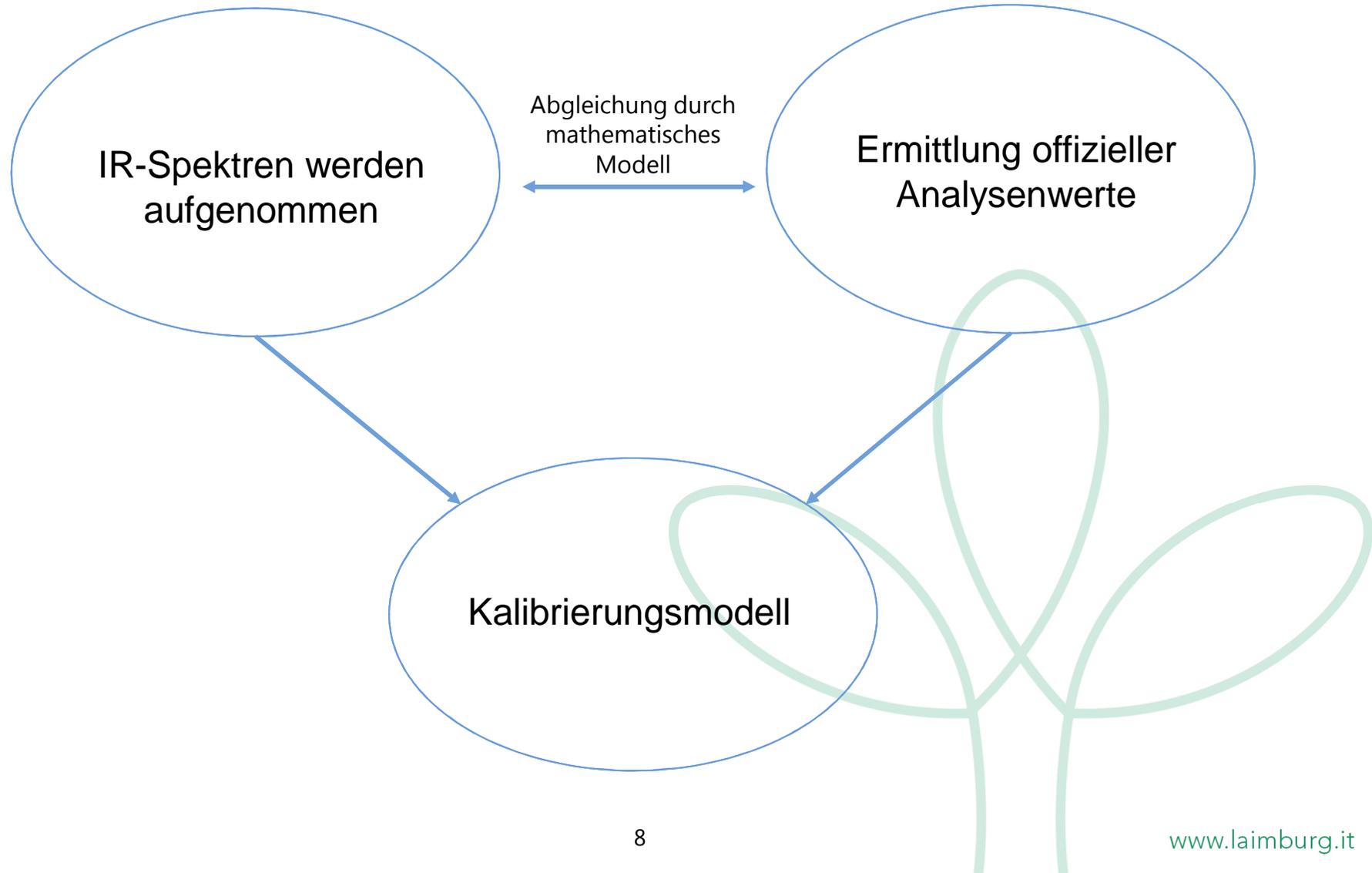
# Isolierung eines Signals



Die genaue Wellenzahl wird zur Charakterisierung eines bestimmten Inhaltsstoffes, z. B. Alkohol verwendet. Qualitative Analyse

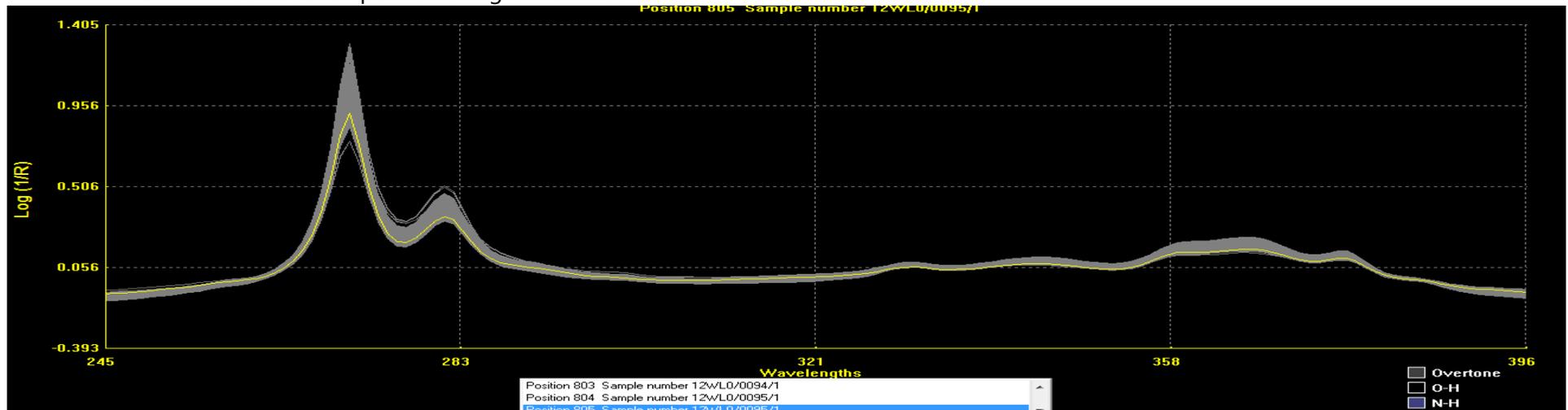
Die Intensität des Signales ist direkt proportional zu der Konzentration des Inhaltsstoffes. Je mehr Alkohol, desto intensiver das Signal im interessierten Wellenbereich

# Indirekte Messmethode

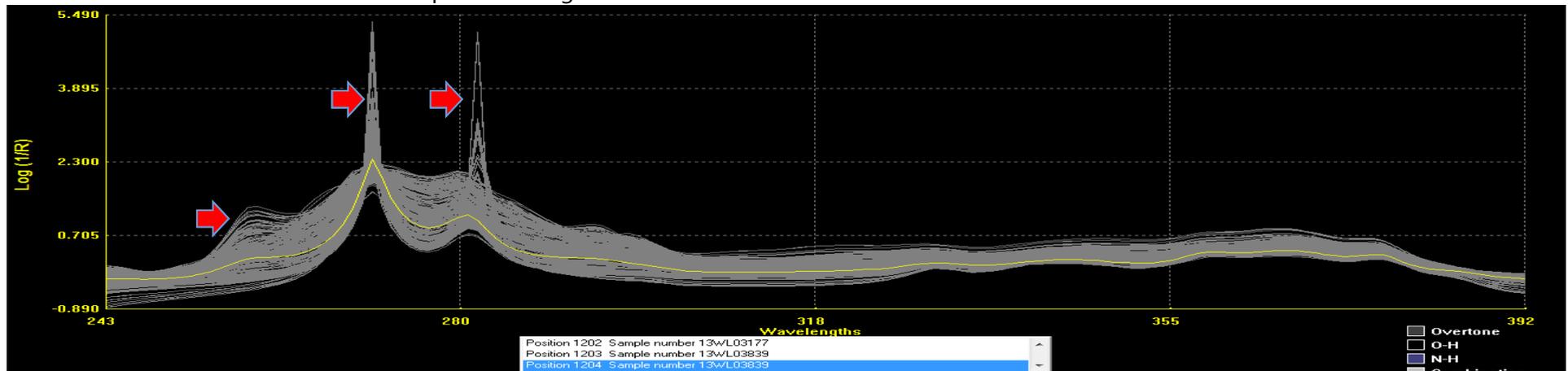


# Spektrenansammlung

Wein Verschiedene Spektren der gleichen Matrix stimmen überein



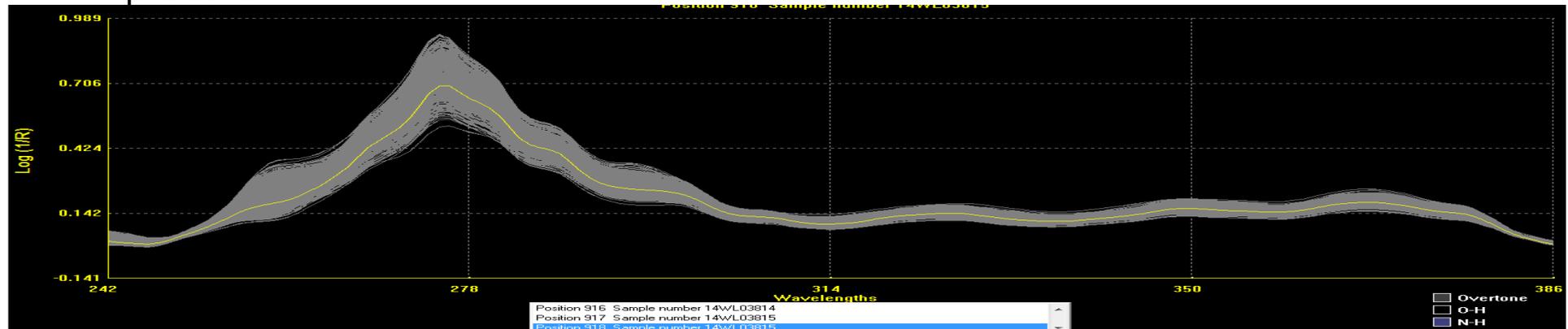
Destillate Verschiedene Spektren der gleichen Matrix stimmen überein



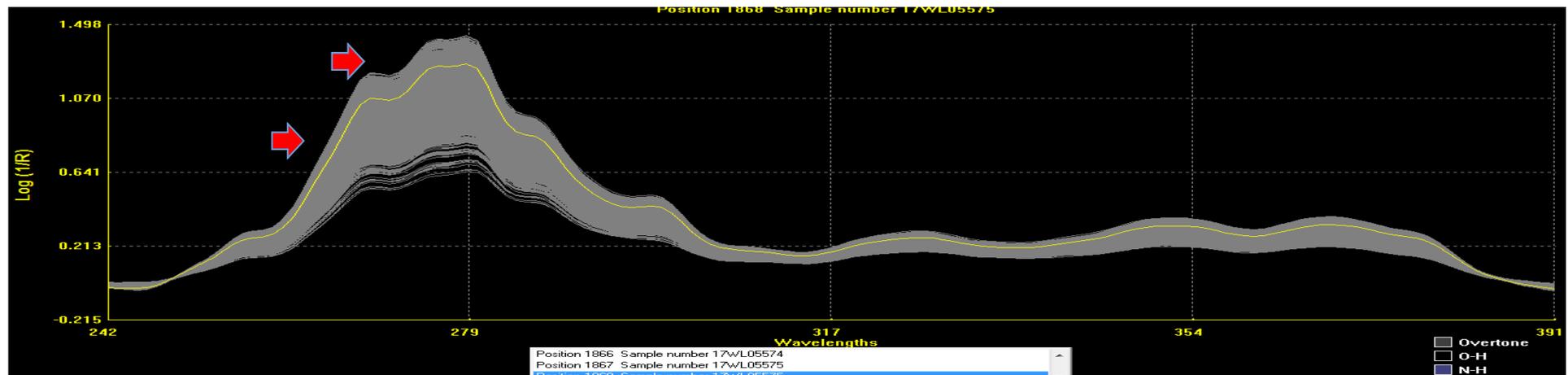
Die Form der Spektren verschiedener Matrizen unterscheiden sich sehr und sind nicht überlappbar

# Spektrenansammlung

## Apfelsaft



## Traubenmost



Die Form der Spektren verschiedener Matrizen unterscheiden sich wesentlich, es ist daher nicht möglich eine universelle Kalibrierung zu erstellen

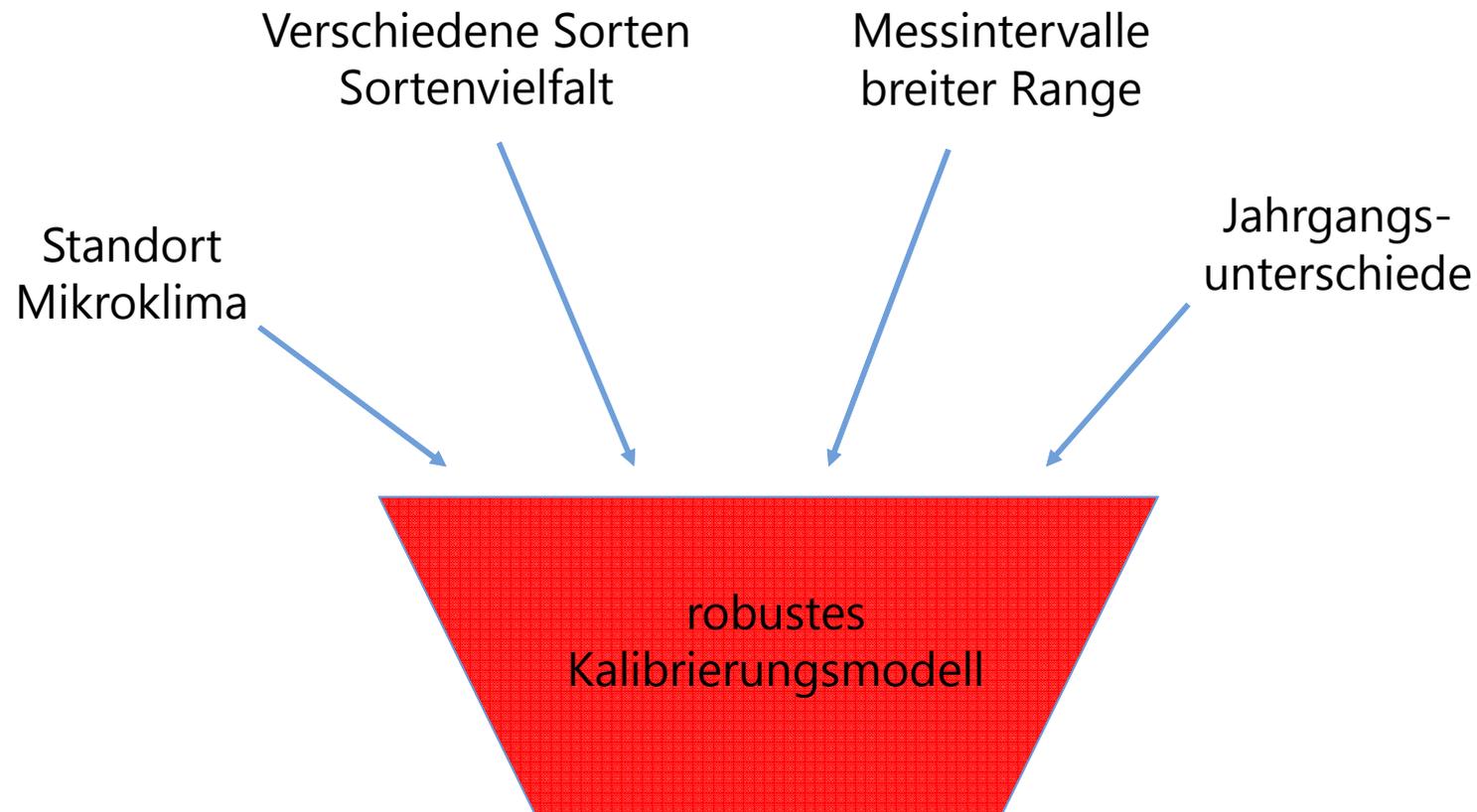
# Verschiedene Kalibrierungsmodelle

---

Jede Matrix benötigt eine eigene Kalibrierung

- Trockene Weine
- Süßweine
- Schwefeldioxid SO<sub>2</sub>
- Traubenmost
- Traubenmost in Gärung
- Destillate
- Liköre
- Apfelsaft

# Erstellung einer Kalibrierung

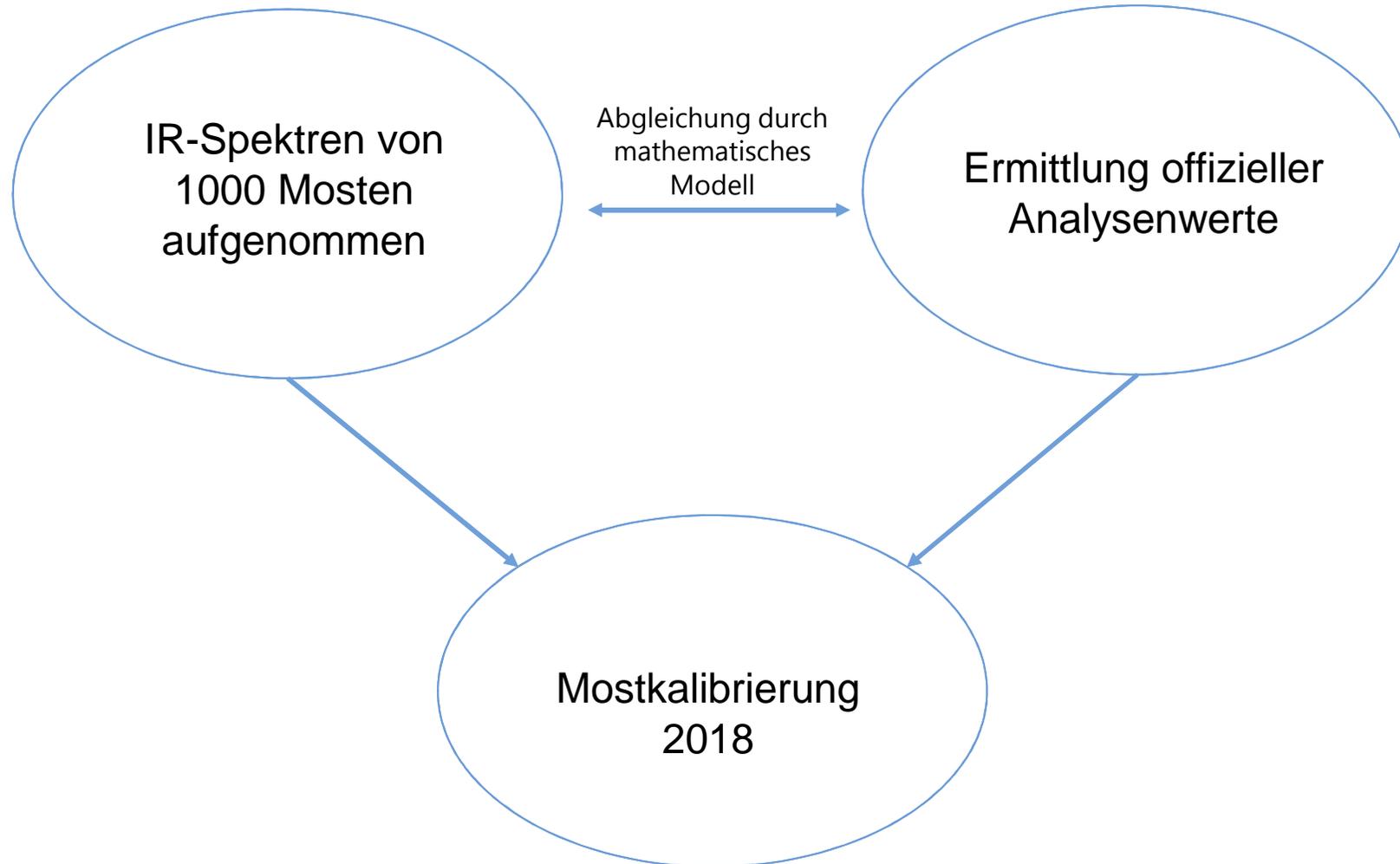


# Erstellung einer Kalibrierung

- Durch verschiedene Standorte und verschiedene Höhenlagen fließen verschiedene Mikroklimas ins Modell ein
- Verschiedene Sorten widerspiegeln die Sortenvielfalt Südtirols
- Die Beprobung von Reifebeginn bis Lesetermin, garantieren eine breite Spannweite der analysierten Parameter
- Die rund 1000 Mostproben wurden zwischen 2012 und 2017 gesammelt, so fließen die Jahrgangsunterschiede in die Kalibrierung ein

2012	100 Proben
2013	140 Proben
2014	100 Proben
2015	400 Proben
2016	130 Proben
2017	100 Proben

# Indirekte Messmethode



# Analysenmethoden

## 1. Von den 1000 Mostproben wurden folgende Parameter mit Labormethoden analysiert

<u>Parameter</u>	<u>Referenzmethode</u>
➤ KMW°	Refraktometer
➤ pH und Gesamtsäure	Potenziometrisch
➤ Weinsäure	Photometrisch
➤ Apfelsäure	Enzymatisch
➤ HVS, AminoN, AmmoniumN	Enzymatisch
➤ K <sup>+</sup>	Photometrisch

## 2) Von den 1000 Mostproben wurden je zwei IR-Spektren aufgenommen

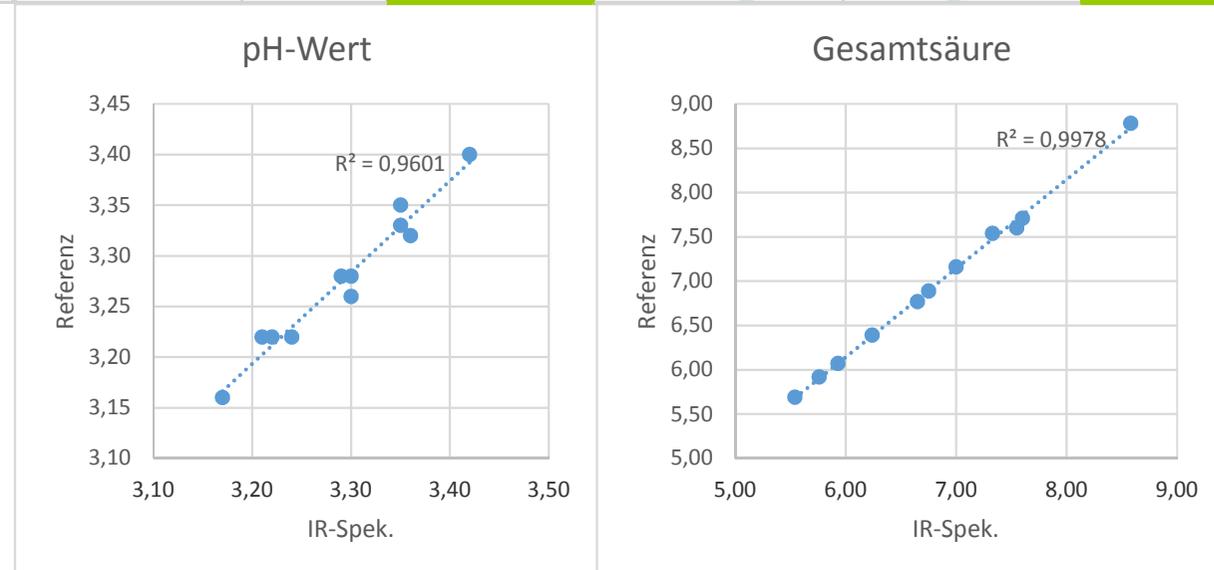
## 3) Durch ein mathematisches Modell wurde eine stabile Kalibrierung „Most 2018“ erstellt

# Kalibrierdaten Reifetest 2018

Parameter	Probenanzahl	Niedrigster Wert	Höchster Wert	R <sup>2</sup>
KMW°	996	10,39°	22,69°	0,9991
Gesamtsäure	1009	3,63 g/L	17,41 g/L	0,9995
pH	1009	2,67	3,74	0,9800
Apfelsäure	1008	0,9 g/L	10,18 g/L	0,9937
Weinsäure	996	3,88 g/L	12,56 g/L	0,9492
Hefeverwertbarer Stickstoff	1556	75 mg/L	331 mg/L	0,9909
Alfa-Amino-Stickstoff	1565	52 mg/L	217 mg/L	0,9896
Ammoniumstickstoff	1561	23 mg/L	134 mg/L	0,9793
Kalium	1009	772 mg/L	2233 mg/L	0,8905

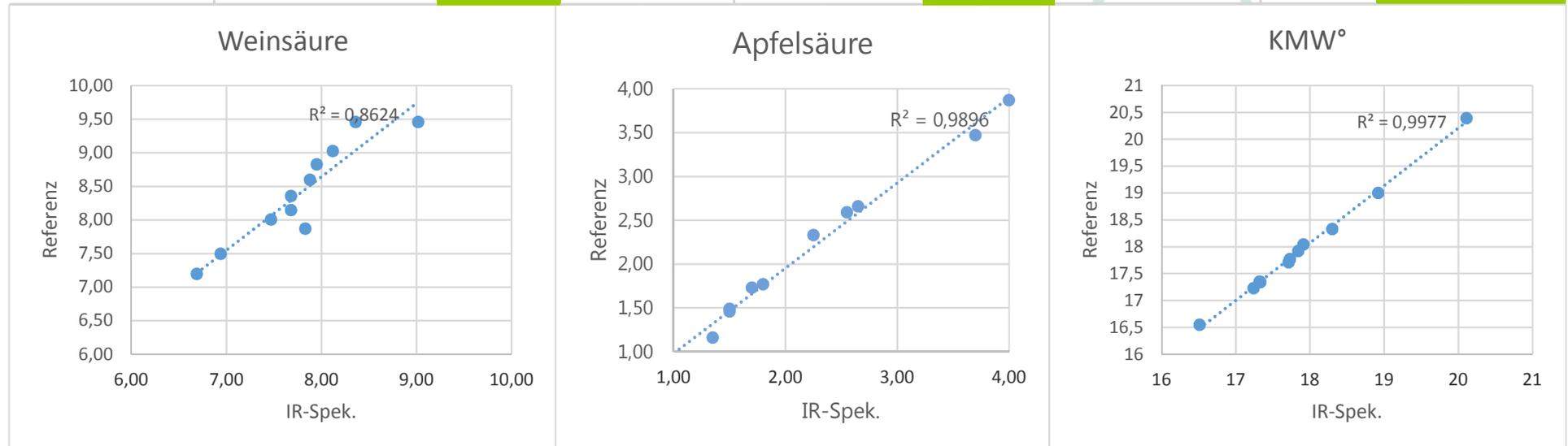
# Validierung mit Reifetestdaten 2018

Sorte	Standort	Potenziometrisch	IR-Spek.	Abweichung	Potenziometrisch	IR-Spek.	Abweichung
		pH-Wert	pH-Wert		Gesamtsäure (g/L)	Gesamtsäure (g/L)	
Weißburgunder	Terlan	3,36	3,32	-0,04	5,54	5,69	0,15
Chardonnay	Kurtinig	3,22	3,22	0,00	8,58	8,78	0,20
Chardonnay	Salurn	3,29	3,28	-0,01	7,60	7,71	0,11
Ruländer	Kurtinig	3,35	3,35	0,00	5,93	6,07	0,14
Ruländer	Salurn	3,30	3,26	-0,04	6,65	6,77	0,12
Gewürztraminer	Tramin	3,42	3,40	-0,02	5,76	5,92	0,16
Gewürztraminer	Tramin	3,24	3,22	-0,02	6,24	6,39	0,15
Sauvignon	Terlan	3,21	3,22	0,01	7,33	7,54	0,21
Sauvignon	Eppan	3,17	3,16	-0,01	7,00	7,16	0,16
Blauburgunder	Montan	3,35	3,33	-0,02	6,75	6,89	0,14
Blauburgunder	Neumarkt	3,30	3,28	-0,02	7,55	7,60	0,05



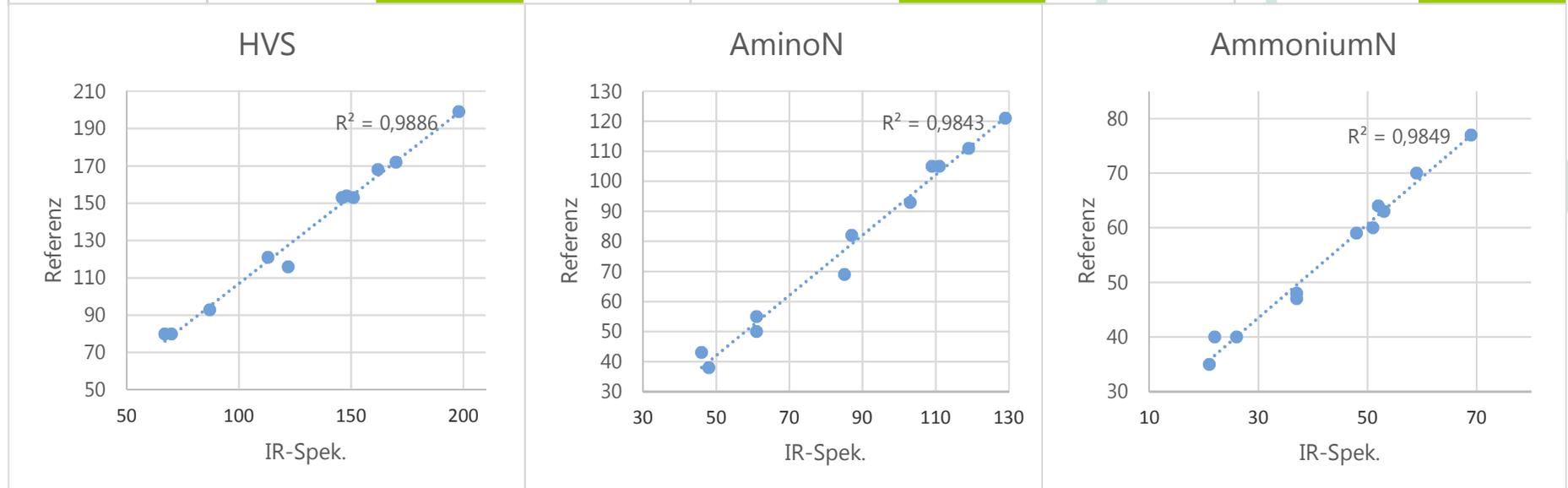
# Validierung mit Reifetestdaten 2018

Weinsäure Weinsäure (g/L)	IR-Spek. Weinsäure (g/L)	Abweichung	Apfelsäure Apfelsäure (g/L)	IR-Spek. Apfelsäure (g/L)	Abweichung	Refraktometer (°KMW)	IR-Spek. (°KMW)	Abweichung
6,69	7,20	0,51	1,80	1,77	-0,03	17,91	18,04	0,13
7,68	8,36	0,68	4,00	3,87	-0,13	17,33	17,34	0,01
7,83	7,87	0,04	3,70	3,47	-0,23	16,51	16,55	0,04
7,47	8,01	0,54	1,70	1,73	0,03	17,71	17,71	0,00
6,94	7,50	0,56	2,65	2,66	0,01	17,32	17,35	0,03
7,88	8,60	0,72	1,35	1,16	-0,19	18,92	19	0,08
7,95	8,83	0,88	1,05	0,94	-0,11	18,3	18,33	0,03
9,02	9,46	0,44	1,50	1,49	-0,01	20,11	20,39	0,28
8,12	9,03	0,91	1,50	1,46	-0,04	17,84	17,92	0,08
7,68	8,15	0,47	2,55	2,59	0,04	17,73	17,77	0,04
8,36	9,46	1,10	2,25	2,33	0,08	17,24	17,23	-0,01



# Validierung mit Reifetestdaten 2018

enz@mg/L HVS (mg/L)	IR-Spek. HVS (mg/L)	Abweichung	enz@mg/L Amin (mg/L)	IR-Spek. AminoN (mg/L)	Abweichung	enz@mg/L Ammon (mg/L)	IR-Spek. AmmonN (mg/L)	Abweichung
87	93	6	61	50	-11	26	40	14
198	199	1	129	121	-8	69	77	8
148	154	6	111	105	-6	37	48	11
162	168	6	109	105	-4	53	63	10
170	172	2	119	111	-8	51	60	9
146	153	7	87	82	-5	59	70	11
113	121	8	61	55	-6	52	64	12
70	80	10	48	38	-10	22	40	18
67	80	13	46	43	-3	21	35	14
151	153	2	103	93	-10	48	59	11
122	116	-6	85	69	-16	37	47	10

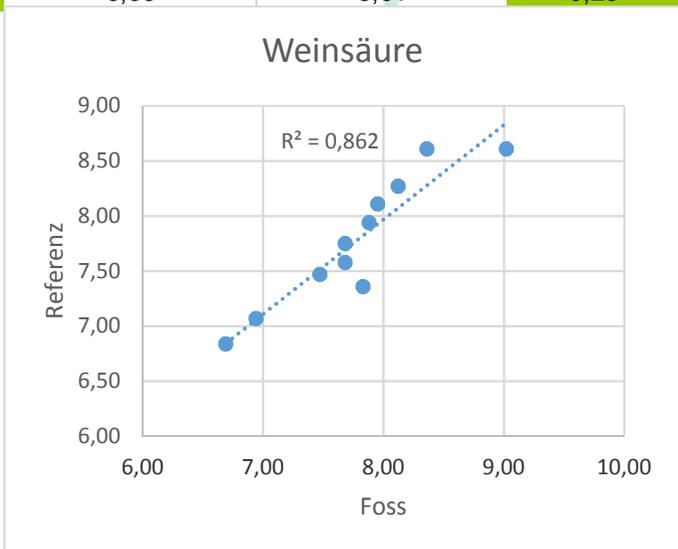
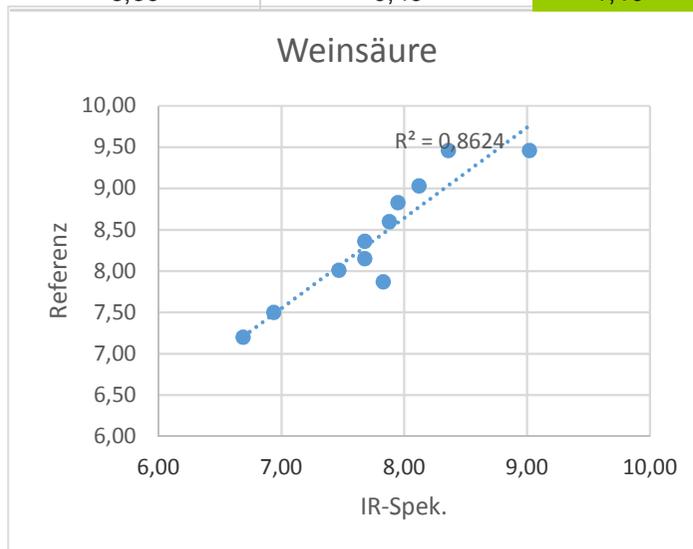


# Justierung mit Reifetestdaten 2018

Vorher

Nachher

Hyperlab@mg/L Weinsäure (g/L)	IR Spekt. Weinsäure (g/L)	Abweichung	Hyperlab@mg/L Weinsäure (g/L)	IR Spekt. Weinsäure (g/L)	Abweichung
6,69	7,20	0,51	6,69	6,84	0,15
7,68	8,36	0,68	7,68	7,75	0,07
7,83	7,87	0,04	7,83	7,36	-0,47
7,47	8,01	0,54	7,47	7,47	0,00
6,94	7,50	0,56	6,94	7,07	0,13
7,88	8,60	0,72	7,88	7,94	0,06
7,95	8,83	0,88	7,95	8,11	0,16
9,02	9,46	0,44	9,02	8,61	-0,41
8,12	9,03	0,91	8,12	8,27	0,15
7,68	8,15	0,47	7,68	7,58	-0,10
8,36	9,46	1,10	8,36	8,61	0,25



Danke für Ihre Aufmerksamkeit.  
Grazie per la Vostra attenzione.  
Thank you for your attention.



 Postadresse | Indirizzo postale

Laimburg 6, Pfatten | Vadena  
39040 Auer | Ora (Italy)

Steuer-Nr. + MwSt.-Nr. (cod.fisc. + part. IVA) VAT number: IT00136670213  
VWV Nummer/numero REA: BZ-201006 vom/del 17/10/2011

 [versuchszentrum@laimburg.it](mailto:versuchszentrum@laimburg.it)

 [centrodipersimentazione@laimburg.it](mailto:centrodipersimentazione@laimburg.it)

 [laimburg.research@pec.prov.bz.it](mailto:laimburg.research@pec.prov.bz.it)

 T +39 0471 969 500

 F +39 0471 969 599

 [www.laimburg.it](http://www.laimburg.it)