

# Trauben-, Most- und Wein-Analyse per FTIR

Rainer Amann, Staatliches  
Weinbauinstitut Freiburg

Nicht zu Unrecht behaupten die Herstellerfirmen, dass die FTIR-Spektroskopie die Weinanalytik revolutioniert hat. Damit kann jeder Schüler, der ein „Schnupperpraktikum“ am Weinbauinstitut macht, gleich am ersten Tag innerhalb einer Minute eine umfassende Weinanalyse durchführen. Nachfolgend ein kleiner Einblick in Möglichkeiten und Grenzen der FTIR-Spektroskopie.

Bei der FTIR-Analyse handelt es sich um eine physikalische Methode, bei der die Lichtabsorption des Weines im mittleren Infrarot- (= IR-) Bereich gemessen wird. Zur Berechnung der Infrarot-Spektren wird ein mathematisches Verfahren, die Fourier-Transformation, angewandt. Daraus ergibt sich der Name FTIR-Spektroskopie = Fourier-Transform-Infrarot-Spektroskopie. Geläufiger sind die Bezeichnungen WineScan und GrapeScan. Dabei handelt es sich nicht um eine Methodenbezeichnung, sondern um Markennamen für das Gerät des in Deutschland führenden Herstellers Foss. Das Gerät für Wein (WineScan) und Trauben bzw. Most (GrapeScan) ist das gleiche. Für die Mostanalytik benötigt man nur eine zusätzliche GrapeScan-Software, für die Analyse von Traubenproben eventuell eine Filtrationseinheit.

Trotz der einfachen Messmethode wird man den WineScan auch zukünftig nicht in Wohnzimmern von Weinliebhabern antreffen, die schnell einmal ihre sensorischen Eindrücke analytisch absichern möchten. Denn der Gerätepreis entspricht je nach Zubehör (automatischer Probengeber, GrapeScan-Software, Filtrationseinheit für Moste) dem Preis von drei bis vier Mittelklasse-Autos. Listenpreise möchte der Hersteller in Publikationen nicht nennen. Bei dieser Preisklasse fällt auch großen Genossenschaften die Entscheidung schwer, ob sich die Ausgabe rentiert. Die Betriebskosten sind dage-



Das vom Freiburger Weinbauinstitut verwendete WineScan-Gerät.

Bild: WBI

gen im Vergleich zu herkömmlichen Analysemethoden gering, die Wartung ist unkompliziert.

Bevor man mit einem FTIR-Gerät Weine analysieren konnte, war eine aufwändige Kalibrierung (= Eichung) erforderlich. Dabei wurde eine große Anzahl von Weinen mit konventionellen Methoden analysiert. Dann wurden die FTIR-Spektren dieser Kalibrierweine aufgenommen und der Einfluss der verschiedenen Inhaltsstoffe auf diese Spektren berechnet. Für deutsche Weine erfolgte diese Eichung zum großen Teil an der Forschungsanstalt Geisenheim und wird dort ständig weiterentwickelt.

Prinzipiell lassen sich die einzelnen Weininhaltsstoffe umso besser analysieren, je stärker ihr Gehalt das FTIR-Spektrum beeinflusst. Als Faustregel kann man sagen, dass Substanzen unter 100 mg/l nicht und Substanzen unter 1 g/l bestenfalls ungenau bestimmbar sind. Die Methode eignet sich aber nicht nur zur Messung von definierten

Infrarotlicht absorbierenden Inhaltsstoffen des Weines, man kann damit auch die Dichte, die titrierbare Gesamtsäure und den pH-Wert erfassen. Bei der konventionellen pH-Messung wird der Gehalt an Protonen ( $H^+$ -Ionen) bestimmt, der im Wein zwischen 0,1 mg/l (pH 4)

## Ungenauigkeiten bei einzelnen Säuren

und 1 mg/l (pH 3) liegt. Der WineScan kann diese Protonen nicht direkt messen, sondern über den Einfluss des pH-Wertes auf den Dissoziationsgrad der Säuren. Der Extraktgehalt wird beim WineScan nicht angegeben, lässt sich aber leicht aus Dichte und Alkoholgehalt berechnen.

Die Genauigkeit für die Parameter pH-Wert, Gesamtsäure, reduzierende Zucker und (mit Einschränkungen) Dichte ist sehr gut. Für die Einzelsäuren Äpfel-, Milch- und Weinsäure

*Fortsetzung nächste Seite*

## Zweiter Anbieter

Neben Foss gibt es noch einen zweiten Anbieter für FTIR-Geräte. Die französische Firma Cetim hat aber bisher in Deutschland erst ein Gerät (Markenname Bacchus) verkauft, so dass Foss nahezu eine Monopolstellung zukommt. Ein Vorteil des Cetim-Gerätes ist, dass man es mit einem UV-Gerät gekoppelt kaufen und damit auch Farbwerte von Rotweinen bestimmen kann. Generell machte das Gerät bei ausführlichen Tests am WBI einen guten Eindruck. Für die Preisentwicklung wäre eine verstärkte Konkurrenz wünschenswert. Die einheitliche Verwendung der Foss-Geräte hat dagegen den Vorteil, dass gemeinsam an verschiedenen Instituten eine ständig verbesserte Kalibrierung erarbeitet und dann allen Anwendern zur Verfügung gestellt werden kann. □

darf keine mit enzymatischen bzw. colorimetrischen Methoden vergleichbar genaue Bestimmung erwartet werden. Vor allem bei Süßweinen traten teilweise größere Abweichungen zu den Vergleichsanalysen auf. Die Verfolgung des BSA gelingt mit der für den Praktiker in der Regel ausreichenden Präzision. Allerdings findet der WineScan nach komplettem Abbau der Äpfelsäure noch bis zu 0,5 g/l, gelegentlich sogar 0,7 g/l. Sofern – z. B. im Rahmen von Forschungsprojekten – eine hohe Genauigkeit erforderlich ist, lässt sich der WineScan zur Analyse einzelner Säuren nicht verwenden.

Zu beachten ist, dass der WineScan nicht zwischen rechtsdrehender L(+)- und linksdrehender D(-)-Milchsäure unterscheidet. Führt man enzymatische Vergleichsmessungen durch, dann muss man beide Formen analysieren und die Summe bilden. Weine ohne BSA enthalten meistens 0,1 bis 0,3 g/l D-Milchsäure und unter 0,1 g/l L-Milchsäure. Beim BSA entsteht aus L-Äpfelsäure ganz überwiegend L-Milchsäure, aber besonders bei Beteiligung von *Pediococcus*- und *Lactobacillus*-Stämmen kann auch der D-Milchsäure-Gehalt ansteigen.

Gute Ergebnisse liefert die Bestimmung von Glucose und Fructose für halbtrockene bis süße Weine. Dadurch kann man leicht Weine mit zugesetzter Süßreserve von nicht vollständig durchgegorenen unterscheiden. Letztere weisen deutlich mehr Fructose als Glucose auf, während durch Süßung etwa gleiche Teile Fruchtzucker und Traubenzucker in den Wein gelang-

gen. Die Untersuchung von bei der Gärung „steckengebliebenen“ Weinen zeigt häufig, dass diese selbst bei über 20 g/l Restzucker praktisch keine Glucose mehr enthalten.

Bei der Glycerinanalytik (Gehalte meistens 5 bis 9 g/l) liegen die Abweichungen zur enzymatischen Messung nur selten über 0,5 g/l. Bei der flüchtigen Säure beträgt die Differenz zwischen dem WineScan und dem durch Destillation bestimmten Wert normalerweise maximal 0,2 g/l, überwiegend sogar nicht mehr als 0,1 g/l. Diese Genauigkeit ist im Hinblick auf die geringen Mengen erstaunlich gut.

## Auswertung erfordert viel Sachverstand

Trotzdem muss man bedenken, dass ein WineScan-Wert von 0,5 g/l einem mit Destillation bestimmten Wert zwischen 0,3 und 0,7 g/l (= 0,5 g/l +/- 0,2 g/l) entsprechen kann. Zitronensäure (in den meisten Weinen 0,1 bis 0,3 g/l) sowie freie oder gesamte Schweflige Säure lassen sich aufgrund zu niedriger Konzentration nicht mit brauchbarer Genauigkeit bestimmen.

Insgesamt ist die Weinanalytik ausgereift, gravierende Verbesserungen sind kaum noch zu erwarten. Während das Gerät ohne Vorkenntnisse nach kurzer Einweisung bedient werden kann, erfordert die Auswertung viel Sachverstand. Man hat eine große Fülle von Messwerten und muss die unterschiedliche Genauigkeit berücksichtigen, wie für flüchtige Säure geschildert. „Exotische“ Proben können teilweise völlig falsche Ergebnisse liefern. Dazu gehören zum Beispiel sehr

dunkle Rotweine (deutlich dunkler als Dornfelder), separat ausgebaute Pressfraktionen und hochgrätige Auslesen.

Ein Beispiel: Bei einer 2003er Riesling Beerenauslese mit zirka 19 Vol. % Gesamtalkohol fand der WineScan nur 0,46 g/l flüchtige Säure, der durch Destillation bestimmte Gehalt betrug 1,1 g/l. Bei manchen anderen Beeren- und Trockenbeerenauslesen entsprach dagegen die mit WineScan gemessene flüchtige Säure dem Vergleichswert.

Generell sollte sich der Anwender bei weit vom Durchschnitt abweichenden Weinen nicht auf den WineScan verlassen. Entweder verzichtet man bei diesen Proben auf die FTIR-Analytik oder man erwirbt sich anhand von Vergleichsanalysen Erfahrung, wie weit die Ergebnisse verlässlich sind.

Die GrapeScan-Kalibrierung für Moste ist noch längst nicht so gut wie die Kalibrierung des WineScan. Hier sind aber schnelle Fortschritte zu erwarten, weil die deutschsprachigen Forschungsinstitute untereinander und mit der Fa. Foss eng zusammenarbeiten. Erstmals stand 2003 eine Mostkalibrierung zur Verfügung, die auf Referenzanalysen deutscher Moste beruhte. Wesentlich am Aufbau der Kalibrierung beteiligt sind die Forschungsanstalten in Neustadt und Geisenheim im Rahmen von zwei Doktorarbeiten.

## Man kann das Gerät nachkalibrieren

Für Mostgewicht und titrierbare Gesamtsäure ergaben die Vergleichsanalysen am WBI Freiburg überwiegend gute Resultate. Die mit FTIR ermittelten Äpfelsäurewerte waren im Herbst 2003 meistens 0,2 bis 0,5 g/l höher als die enzymatisch bestimmten (dabei ist zu beachten, dass überwiegend nur zwischen 1,0 und 2,5 g/l Äpfelsäure vorhanden waren). Die Weinsäurewerte lagen im Vergleich zur Rebeleinmethode meistens 0,5 bis 1,0 g/l zu niedrig.

Bei solchen in eine Richtung gehenden Abweichungen kann man das Gerät nachkalibrieren, das heißt besser an die eigenen Analysenergebnisse anpassen. Darauf wurde aber zunächst verzichtet, weil die Ursache für die Abweichungen unklar war. Möglicherweise führte die ungewöhnliche Zusammensetzung der 2003er Moste zu diesen Abweichungen und die vorhandene Kalibrierung passt in einem weniger extremen Jahr besser. Die Differenzen können aber auch daher kommen, dass die Kalibrierung für die Säuren

## Schwieriger Jahrgang 2003

Generell war die Genauigkeit der WineScan-Analysen für badische Weine des Ausnahme-Jahrgangs 2003 nicht ganz so gut wie sonst, zum Beispiel waren oft die gefundenen pH-Werte 0,1 bis 0,3 zu niedrig oder die Säurewerte 0,1 bis 0,3 g/l zu hoch. Wegen der schon im Most sehr niedrigen Äpfelsäuregehalte (zumeist 1 bis 2,5 g/l) war im Wein nicht immer mit Sicherheit erkennbar, ob ein teilweiser oder kompletter BSA stattgefunden hat. Die sichersten Aussagen erhält man, wenn man den Wein bereits vor dem BSA analysiert und dann die Änderungen mit dem WineScan verfolgt.

mit anderen Methoden erfolgte als die Analyse am WBI. Auch zwischen „konventionellen“ Methoden, zum Beispiel der chromatographischen und der enzymatischen Bestimmung von Äpfelsäure, kann es Unterschiede bei den Analyseergebnissen geben.

### Fäulnisabhängige Werte noch unsicher

Weil das 2003er Lesegut überwiegend völlig gesund war, wurden am WBI Freiburg keine Untersuchungen zur Messung der fäulnisabhängigen Werte Gluconsäure, Glycerin, Essigsäure, Ethanol und Glucose/ Fructose-Verhältnis durchgeführt. Ein Problem bei der Untersuchung von Traubenproben ist, dass die Zusammensetzung stark von Pressung und Maischestandzeit abhängig ist. Ebenso wichtig wie die Optimierung der Analytik ist für Genossenschaften die Frage, wie man die Analysendaten von Traubenproben und Mosten

zur Qualitätseinstufung des Lesegutes nutzen kann.

Sicher wird die FTIR-Analytik hier zunehmend hilfreich sein, aber man sollte auch keine übertriebenen Hoffnungen in sie setzen. Noch ist unklar, für welche von der Traubenfäulnis abhängigen Messwerte außer dem Glucose/Fructose-Verhältnis der GrapeScan brauchbare Ergebnisse liefern wird. Aber selbst wenn man alle genannten Messwerte genau analysieren könnte, wäre die Interpretation noch schwierig. Die Werte korrelieren sowohl untereinander als auch mit der Qualitätseinstufung durch visuelle Botrytis-Bonitur nicht sehr gut. Trauben mit gleichem Gluconsäuregehalt können zum Beispiel sehr unterschiedliche Mengen Glycerin enthalten oder sich im optisch eingeschätzten Botrytis-Befall stark unterscheiden. Es sind noch mindestens zwei bis drei Jahre Jahre mit unterschiedlichen Wetterbedingungen notwendig, bis man die Möglichkeiten und Grenzen der FTIR-Analytik von Mosten einigermaßen einschätzen kann. □