

## **Benchtop-NMR zur Qualitätsbeurteilung von Trauben für die Weinbereitung**

**Dr. Kerstin Münnemann**

Rheinland-Pfälzische Technische Universität Kaiserslautern-Landau (RPTU)  
Laboratory for Advanced Spin Engineering (LASE)

Kerstin Münnemann<sup>1,2</sup>, Billy Salgado, Johnnie Phuong<sup>1,2</sup>, Julian Lueck<sup>3</sup>, Patrick Nickolaus<sup>3</sup>, Ulrich Fischer<sup>3</sup>, Lena Keller<sup>3,4</sup>, Daniel J. Holland<sup>5</sup>, Fabian Jirasek<sup>1,2</sup>, Hans Hasse<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Laboratory of Engineering Thermodynamics (LTD), RPTU Kaiserslautern, Germany

<sup>2</sup>Laboratory of Advanced Spin Engineering – Magnetic Resonance (LASE-MR), RPTU Kaiserslautern, Germany

<sup>3</sup>Weincampus Neustadt / Institute for Viticulture and Enology, Dienstleistungszentrum Ländlicher Raum (DLR) Rheinpfalz, Neustadt/Weinstraße, Germany

<sup>4</sup>Department of Applied Logistics and Polymer Sciences, University of Applied Sciences Kaiserslautern, Pirmasens, Germany

<sup>5</sup>Department of Chemical and Process Engineering, University of Canterbury, Christchurch, New Zealand

Die Sicherstellung einer qualitativ hochwertigen Weinproduktion erfordert eine schnelle und zuverlässige Analyse von Traubenpartien, wobei der Schwerpunkt auf Schlüsselparametern wie Zucker- und Säuregehalt, Fäulnisindikatoren und dem pH-Wert liegt. Traditionell wird zu diesem Zweck die Fourier-Transformations-Infrarotspektroskopie (FTIR) eingesetzt, die sich auf statistische Modelle stützt, um Spektraldaten mit Referenzanalysen zu korrelieren. Dieser indirekte Ansatz kann jedoch zu Ungenauigkeiten führen. Die Hochfeld-Kernspinresonanz-spektroskopie (NMR) bietet eine überzeugende Alternative, da sie eine direkte, kalibrierungsfreie Quantifizierung chemischer Spezies ermöglicht, ohne dass eine umfangreiche Probenvorbereitung erforderlich ist. Trotz dieser Vorteile ist die praktische Anwendung der Hochfeld-NMR-Spektroskopie in der routinemäßigen Wein- und Traubenanalyse aufgrund ihrer Größe, ihrer Kosten und der erforderlichen kryogenen Kühlung begrenzt.

Jüngste Fortschritte bei kompakten Benchtop-NMR-Geräten bieten mehr Mobilität, Flexibilität und Benutzerfreundlichkeit. Ihre geringere Magnetfeldstärke verringert jedoch die spektrale Auflösung, was die Quantifizierung komplexer Gemische wie Traubensaft und Wein deutlich erschwert. Um dieser Einschränkung entgegenzuwirken, wird in dieser Studie die Verwendung eines 80-MHz-NMR-Spektrometers in Kombination mit einem modellbasierten Datenverarbeitungsansatz zur Bewertung der Traubenqualität untersucht [1,2]. Wir zeigen, dass die Benchtop-NMR nicht nur eine schnelle Bewertung der wichtigsten Traubenparameter ermöglicht, sondern auch den pH-Wert von Saft- und Weinproben direkt aus den Spektraldaten abschätzen kann. Darüber hinaus zeigen wir, dass die Verwendung von Sequenzen zur Unterdrückung des Wassersignals eine präzise Analyse von fäulnisbedingten Komponenten, wie Essigsäure und Gluconsäure, in Traubenproben ermöglicht. Zudem wurde das Benchtop-NMR-Spektrometer zur Überwachung von Fermentationsprozessen eingesetzt, was seine vielseitige Einsetzbarkeit sowohl bei der Qualitätsbewertung als auch bei der Produktionskontrolle unterstreicht.

Literatur:

[1] Y. Matviychuck, S. Haycock, T. Rutan, D. J. Holland, *Anal. Chim. Acta* (2021), 1182, 338944.

[2] J. Phuong, B. Salgado, J. Heiß, E. Steimers, P. Nickolaus, L. Keller, U. Fischer, E. von Harbou, D.J. Holland, F. Jirasek, H. Hasse, K. Münnemann, *Food Research International* (2025) 203, 115741.