

Inhalt

1 Dichte, Alkohol und Extrakt

1.1	Volumenmasse, relative Dichte, Gewichtsverhältnis, Oechslegrade	11	1.2.1	Definitionen	17
1.1.1	Definitionen	11	1.2.2	Untersuchungsverfahren zum Gesamt-Trockenextrakt	19
1.1.2	Untersuchungsverfahren Volumenmasse und relative Dichte	14	1.3	Ethanol	21
1.1.3	Untersuchungsverfahren Mostgewicht	17	1.3.1	Definitionen	21
1.2	Gesamt-Trockenextrakt	17	1.3.2	Untersuchungsverfahren Ethanol	21
			Literatur		25

2 Kohlenhydrate, Zucker, Glucose, Fructose und Saccharose

2.1	Allgemeines	27	2.3.4	Reduzierende Zucker, reduzierende Substanzen – Summe Glucose und Fructose	32
2.2	Das Glucose/Fructose-Verhältnis	27	2.3.5	Sonstige Methoden	33
2.3	Bestimmung von Glucose, Fructose und Saccharose	29	2.4	Zuckeralkohole	33
2.3.1	Enzymatische Bestimmungen	29	2.4.1	Bedeutung und Interpretation	33
2.3.2	HPLC-Bestimmungen	31	2.4.2	Bestimmungsmethoden	34
2.3.3	Reduktometrische Verfahren	32		Literatur	35

3 Alkohole und Aldehyde

3.1	Methanol	37	3.2.2	Vorkommen von höheren Alkoholen	41
3.1.1	Eigenschaften und Bedeutung von Methanol	37	3.2.3	Analysenmethoden für höhere Alkohole	45
3.1.2	Vorkommen von Methanol	37	3.3	Glycerin und 2,3-Butandiol	48
3.1.3	Bildung von Methanol	38	3.3.1	Vorkommen und Bedeutung	48
3.1.4	Analysenmethoden für Methanol	39	3.3.2	Beurteilung der Glyceringehalte	48
3.2	Höhere Alkohole	41	3.3.3	Bestimmung von Glycerin und 2,3-Butandiol	49
3.2.1	Eigenschaften und Bedeutung von höheren Alkoholen	41			

3.3.4	Bestimmung der Nebenprodukte der technischen Glycerinherstellung mittels GCMS	51	3.3.6	Interpretation von 2,3-Butandiol-Gehalten.	53
3.3.5	2,3-Butandiol, Vorkommen und Bedeutung	51	3.3.7	Bestimmung von 2,3-Butandiol . . .	54
			Literatur.		54

4 Säuren

4.1	Allgemeines.	58	4.11	Gluconsäure	72
4.2	pH-Wert.	58	4.11.1	Vorkommen und Bedeutung	72
4.2.1	Bestimmung des pH-Werts.	59	4.11.2	Analytik der Gluconsäure	73
4.3	Gesamtsäure	59	4.12	Galacturonsäure, Glucuronsäure, Oxo-Gluconsäuren	73
4.3.1	Vorkommen und Bedeutung	59	4.12.1	Vorkommen und Bedeutung	73
4.3.2	Bestimmung der Gesamtsäure. . . .	59	4.12.2	Analytik von Galacturonsäure, Glucuronsäure, Oxo-Gluconsäuren . . .	74
4.4	Flüchtige Säuren	60	4.13	Brenztraubensäure und 2-Ketoglutarsäure	75
4.4.1	Vorkommen und Bedeutung	60	4.13.1	Vorkommen und Bedeutung	75
4.4.2	Bestimmung der flüchtigen Säuren	61	4.13.2	Analytik von Brenztraubensäure und 2-Ketoglutarsäure.	75
4.5	Essigsäure	61	4.14	Schleimsäure.	76
4.5.1	Vorkommen und Bedeutung	61	4.14.1	Vorkommen und Bedeutung	76
4.5.2	Analytik der Essigsäure	62	4.14.2	Analytik der Schleimsäure.	76
4.6	Weinsäure	63	4.15	L-Ascorbinsäure.	76
4.6.1	Vorkommen und Bedeutung	63	4.15.1	Vorkommen und Bedeutung	76
4.6.2	Analytik der Weinsäure	63	4.15.2	Analytik der L-Ascorbinsäure	77
4.7	Äpfelsäure	66	4.16	Shikimisäure	78
4.7.1	Vorkommen und Bedeutung	66	4.16.1	Vorkommen und Bedeutung	78
4.7.2	Analytik der Äpfelsäure	67	4.16.2	Analytik der Shikimisäure	78
4.8	Milchsäure.	69	4.16.3	Interpretation von Shikimisäuregehalten	82
4.8.1	Vorkommen und Bedeutung	69	4.17	Fumarsäure	84
4.8.2	Analytik der Milchsäure.	69	4.17.1	Vorkommen und Bedeutung	84
4.9	Citronensäure	70	4.17.2	Analytik der Fumarsäure	84
4.9.1	Vorkommen und Bedeutung	70	Literatur.		86
4.9.2	Analytik der Citronensäure.	70			
4.10	Bernsteinsäure	71			
4.10.1	Vorkommen und Bedeutung	71			
4.10.2	Analytik der Bernsteinsäure	71			

5 Phenole

5.1 Vorkommen und Bedeutung	90	5.3.2 Chromatographische Methoden zur simultanen Bestimmung einzelner nichtflüchtiger Phenole	94
5.1.1 Flavonoide	90	5.3.3 Indirekte Bestimmung von Phenolen	99
5.1.2 Nichtflavonoide Phenole	90	5.4 Anthocyane	102
5.1.3 Polymere Phenole (Tannine)	91	5.4.1 Vorkommen und Bedeutung	102
5.2 Gründe für Phenolanalysen	92	5.4.2 Interpretation des Anthocyan-spektrums	103
5.3 Analysenmethoden zur Bestimmung von Phenol-verbindungen	92	5.4.3 Analytik der Anthocyane	107
5.3.1 Fotometrische Bestimmung von Summenparametern	93	Literatur	111

6 Stickstoffverbindungen

6.1 Aminosäuren	118	6.2.5 Methoden zur Bestimmung biogener Amine	126
6.1.1 Vorkommen und Bedeutung von Aminosäuren	118	6.2.6 Detaillierte Beschreibung von Methoden zur Bestimmung biogener Amine	127
6.1.2 Vorkommen von Aminosäuren in Mosten	118	6.3 Sonstige stickstoffhaltige Verbindungen	130
6.1.3 Einfluss der Weinbereitung auf den Gehalt an Aminosäuren	120	6.3.1 Vorkommen und Bedeutung	130
6.1.4 Vorkommen von Aminosäuren im Wein	120	6.3.2 Charakterisierung und Bestimmung hefeverwertbarer Stickstoffverbindungen	131
6.1.5 Methoden zur Bestimmung von Aminosäuren	120	6.4 Allergene Stoffe	132
6.2 Biogene Amine	124	6.4.1 Allgemeines	132
6.2.1 Bedeutung biogener Amine	124	6.4.2 Rechtsgrundlagen	132
6.2.2 Gesundheitsbezogene Wirkung biogener Amine	124	6.4.3 Bestimmung allergener Stoffe	133
6.2.3 Vorkommen biogener Amine	125	Literatur	135
6.2.4 Önologische Interpretation der Gehalte biogener Amine in Trauben und Wein	126		

7 Aromastoffe

7.1 Allgemeines	140	7.2.3 Bestimmung des glycosidisch gebundenen Aromapotenzials	148
7.2 Analytik von Aromastoffen	146	7.2.4 Authentizitätsprüfungen des Weinaromas	149
7.2.1 Isolierung und Anreicherung	146		
7.2.2 Chromatographischer Nachweis der Aromastoffe	148		

7.2.5	Bestimmung des Aromaprofils von mit Eichenholz aromatisierten Weinen	151
-------	--	-----

Literatur.	155
-----------------------------	-----

8 Sonstige organische Verbindungen

8.1 Ethylcarbamat	158	8.4 Ochratoxin A	163
8.1.1 Vorkommen und Bedeutung	158	8.4.1 Vorkommen	163
8.1.2 Analytik von Ethylcarbamat.	159	8.4.2 Toxizität	163
8.2 Ethylenglycol und Diethylen-glycol	160	8.4.3 Analytik von Ochratoxin A.	164
8.2.1 Analytik von Diethylenglycol (DEG) und Ethylenglycol (MEG)	161	8.4.4 Ergebnisinterpretation.	165
8.3 Hydroxymethylfurfural (HMF) (5-Hydroxymethylfuran-2-carbaldehyd, 5-Hydroxymethyl-2-furaldehyd) und 4-Methylimidazol	162	8.5 Pestizide	166
8.3.1 Vorkommen und Bedeutung	162	8.5.1 Vorkommen und Bedeutung	166
8.3.2 Ergebnisinterpretation und Analytik	163	8.5.2 Rechtliche Beurteilung von Pflanzenschutzmittelrückständen in Wein.	167
		8.5.3 Quantitative Bestimmung von Pflanzenschutzmittelrückständen	168
		Literatur.	170

9 Zusatzstoffe, Behandlungsmittel, Kontaminanten

9.1 Zusatzstoffe und Verarbeitungshilfsstoffe	175	9.4 Konservierungsstoffe	194
9.2 Analytik von kolloidalen Zusatzstoffen	176	9.4.1 Sorbinsäure (2,4-Hexadiencarbonsäure E 200).	194
9.2.1 Bestimmung der Metaweinsäure (MWS)	176	9.4.2 Dimethyldicarbonat (DMDC, E 242)	196
9.2.2 Bestimmung von Lysozym	180	9.4.3 Natamycin (Pimaricin, E 235)	196
9.2.3 Bestimmung von Carboxymethylcellulose (CMC)	180	9.4.4 Allylisothiocyanat und Methylisothiocyanat	199
9.2.4 Bestimmung von Gummi arabicum	181	9.4.5 Nicht zugelassene Konservierungsstoffe	200
9.3 Schwefeldioxid	183	9.5 Organische Kontaminanten	200
9.3.1 Eigenschaften und Bedeutung von Schwefeldioxid.	183	9.5.1 Phthalate (Phthalsäureester)	201
9.3.2 Analysenmethoden für Schwefeldioxid	185	9.5.2 Bisphenol A (2,2-bis (4-hydroxyphenyl)-propan)	202
		9.5.3 Chlorige Kohlenwasserstoffe	202
		9.5.4 Styrol	203
		9.5.5 Naphthalin	204
		Literatur.	204

10 Mineralstoffe und Spurenelemente

10.1 Asche	208	10.12 Alkali- und Erdalkalimetalle	221
10.1.1 Bestimmung der Asche	209	10.12.1 Kalium	222
10.2 Aschenalkalität	209	10.12.2 Natrium	222
10.2.1 Bestimmung der Aschenalkalität	210	10.12.3 Calcium	224
10.3 Phosphat	210	10.12.4 Magnesium	224
10.3.1 Bestimmung von Phosphat	210	10.12.5 Bestimmung von Kalium, Natrium, Calcium und Magnesium	225
10.4 Sulfat	211	10.13 Spurenelemente (Aluminium, Chrom, Eisen, Kupfer, Mangan, Silber, Zink und Zinn)	227
10.4.1 Bestimmung von Sulfat	211	10.13.1 Vorkommen	227
10.5 Chlorid	211	10.13.2 Höchstgehalte an Spurenelementen	231
10.5.1 Bestimmung von Chlorid	212	10.13.3 Analytik von Spurenelementen	232
10.6 Nitrat	212	10.14 Blei, Cadmium und Arsen	234
10.6.1 Bestimmung von Nitrat	212	10.14.1 Eintragswege und Toxizität	234
10.7 Bestimmung von Phosphat, Sulfat, Chlorid und Nitrat mit der Anionenchromatographie	214	10.14.2 Vorkommen von Pb, Cd und As und ihre Höchstmengen	235
10.8 Cyanverbindungen	215	10.14.3 Analytik von Schwermetallen	237
10.9 Fluorid	217	10.15 Totalreflexions-Röntgen- fluoreszenzspektroskopie (TRFA, TXRF)	239
10.9.1 Allgemeines	217	10.15.1 Prinzip der TXRF-Messung	239
10.9.2 Analytik von Fluorid	217	10.15.2 Geräteaufbau	240
10.10 Bromid	218	10.15.3 Durchführung der Analyse und Quantifizierung	242
10.10.1 Allgemeines	218	10.15.4 Anwendungsbereiche	243
10.10.2 Analytik von Bromid	219	10.15.5 Validierung der Methode	243
10.11 Bor	219	Literatur	244
10.11.1 Allgemeines	219		
10.11.2 Vorkommen und Bedeutung	219		
10.11.3 Analytik von Bor	221		

11 Stabilisotopenanalytik von Wein

11.1 Allgemeines	250	11.2.3 Nachweis der Anreicherung mit dem $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$-Verhältnis	256
11.2 Bedeutung und Interpretation der Stabilisotopenverhältnisse	252	11.2.4 Nachweis und Bestimmung von Gärungskohlensäure in Schaumwein mittels $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$-Ver- hältnis	257
11.2.1 Nachweis der Anreicherung mit dem Deuterium/Wasserstoff-Ver- hältnis, D/H	252	11.2.5 Nachweis und Bestimmung von Gärungskohlensäure in Schaumwein mittels ^{14}C	258
11.2.2 Die Bestimmung der geografischen Herkunft über das D/H-Verhältnis.	256		

11.2.6	Das $^{18}\text{O}/^{16}\text{O}$ -Verhältnis	258	11.3.1	Allgemeines	260
11.2.7	Nachweis der geografischen Herkunft mit dem $^{18}\text{O}/^{16}\text{O}$ -Verhält- nis	258	11.3.2	Bestimmung des D/H-Verhält- nisses mittels IRMS	261
11.2.8	Nachweis der Wässerung	258	11.3.3	Hochauflösende NMR-Spektro- skopie	261
11.2.9	Weitere Anwendungen des $^{18}\text{O}/^{16}\text{O}$ - Verhältnisses	259	11.3.4	Bestimmung des $^{18}\text{O}/^{16}\text{O}$ -Verhält- nisses	263
11.2.10	Nachweis der geografischen Herkunft über das $^{87}\text{Sr}/^{86}\text{Sr}$ -Verhält- nis	260	11.3.5	Bestimmung des $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$ -Verhält- nisses	263
11.3	Analysentechniken zur Stabil- isotopenmessung	260		Literatur	264

12 Gase

12.1	Kohlendioxid (CO_2)	268	12.2	Schwefelwasserstoff (H_2S)	274
12.1.1	Vorkommen und Bedeutung	268	12.2.1	Vorkommen und Bedeutung	274
12.1.2	Bestimmungen von Kohlendioxid	268	12.2.2	Bestimmung von H_2S	274
12.1.3	Unterscheidung von endogener und exogener Kohlensäure durch die Bestimmung des $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$ -Verhält- nisses im Kohlendioxid	271		Literatur	275

13 Automatisierte Verfahren

13.1	Continuous-Flow-Analyse (CFA)	277	13.2	Sequenzielle Analyseautomaten	280
13.1.1	Allgemeines	277	13.2.1	Trauben und Most	281
13.1.2	Geräteaufbau und Funktion	277	13.2.2	Gärender Most	282
13.1.3	Beispiele für die praktische Anwen- dung der CFA	279	13.2.3	Wein	282
13.1.4	Qualitätssicherung	280	13.2.4	Geräte	283
				Literatur	284

14 Qualitätsmanagement

14.1	Allgemeines	285	14.2	Statistische Kennzahlen	288
14.1.1	Definition und Bestimmung der Messunsicherheit	287	14.2.1	Bestimmung der Wiederholstan- dardabweichung s_r und der Ver- gleichsstandardabweichung s_R	288
14.1.2	Bestimmung der Messunsicherheit aus den Einzelkomponenten nach dem „bottom-up“-Prinzip (EURA- CHEM/CITAC 2004)	287	14.2.2	Berechnung mit der Horwitz- Gleichung	290
14.1.3	Berechnung der Messunsicherheit aus der Vergleichsstandardabwei- chung nach dem „top-down“-Prin- zip (EURACHEM/CITAC 2004).	288	14.2.3	Weitere Kriterien der Methoden- validierung	290
			14.2.4	Nachweis-, Erfassungs- und Bestimmungsgrenze	291

14.3	Ergebnisinterpretation	293	14.4.2	Laborvergleichsuntersuchung (LVU), Proficiency Test	294
14.4	Maßnahmen zur internen Quali- tätskontrolle	293	14.4.3	Validierungsstudie (Method Perfor- mance Study)	294
14.4.1	Die Qualitätsregelkarte	294		Literatur.	295

15	FTMIR-Spektrometrie (Fourier-Transform-MIR-Spektrometrie)				
15.1	Prinzip der FTIRMessung	297	15.7	Validierung der Methode	302
15.2	Geräteaufbau	298	15.8	Amtliche Qualitätsweinanalyse (A. P.-Analyse) mit FTMIR.	304
15.3	Durchführung der Messung	299	15.9	Vor- und Nachteile des FTMIR-Ver- fahrens.	305
15.4	Standardisierung	300		Literatur.	306
15.5	Kalibrierung des Verfahrens	300			
15.6	Anwendungsbereiche	301			

16	^1H-NMR-Spektroskopie in der Weinanalytik				
16.1	Messprinzip der NMR	307	16.4	Non-targeted Analysen.	315
16.2	Quantitative ^1H -NMR	307		Literatur.	317
16.3	Methodenbeschreibung	311			

Service

Die Autoren und Herausgeber	319
Sachregister	321
Impressum	339