



Bayerische Landesanstalt für  
Weinbau und Gartenbau



# Einblick in die Technik und das System FTIR

Dr. Martin Geßner

Fachzentrum Analytik  
oenologische und pflanzliche Analytik



# Fouriertransformationsinfrarotspektrometer



# Fouriertransformationsinfrarotspektrometer

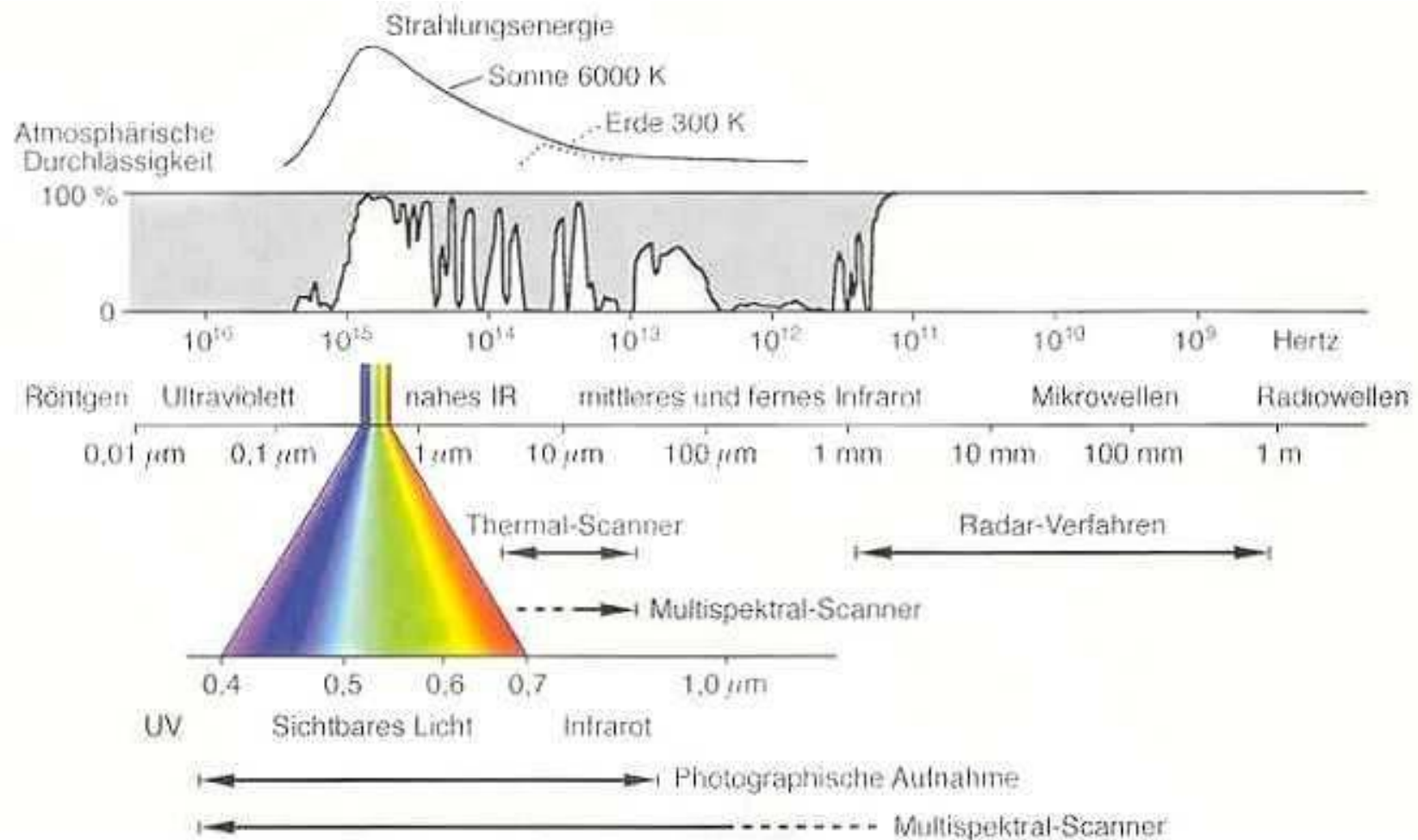




# Fouriertransformationsinfrarotspektrometer



# Das elektromagnetische Spektrum



# Was versteht man unter Infrarotspektroskopie?

- Schwingungsspektren von organische Substanzen bedingt durch Infrarotstrahlung (Wärme)
- Rückschlüsse auf Bindungsformen und funktionelle Gruppen sind möglich.

- **Messbereiche**

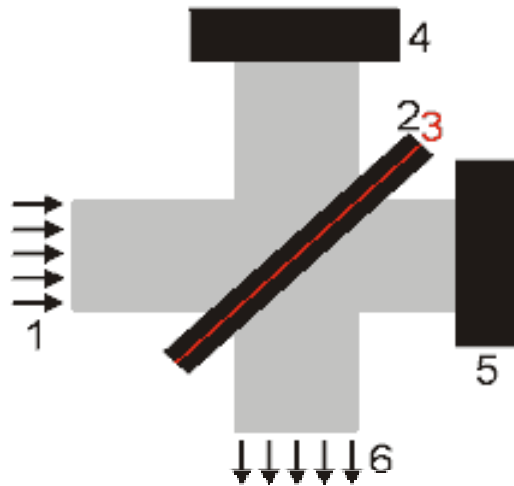
NIR: nahes IR (700 nm - 2500 nm)

MIR: mittleres IR (2500 nm - 25000 nm)

# Was ist Fourier-Transform-Technik?

- Rechenverfahren zur Auswertung von spektroskopischen Daten
- Möglichkeit zur Aufnahme gesamter und komplexer Spektren in kurzer Zeit
- Umsetzung der Interferogramme in Spektren und Substanzkonzentrationen

# Aufbau eines Interferometers (Michelson-Interferometer)



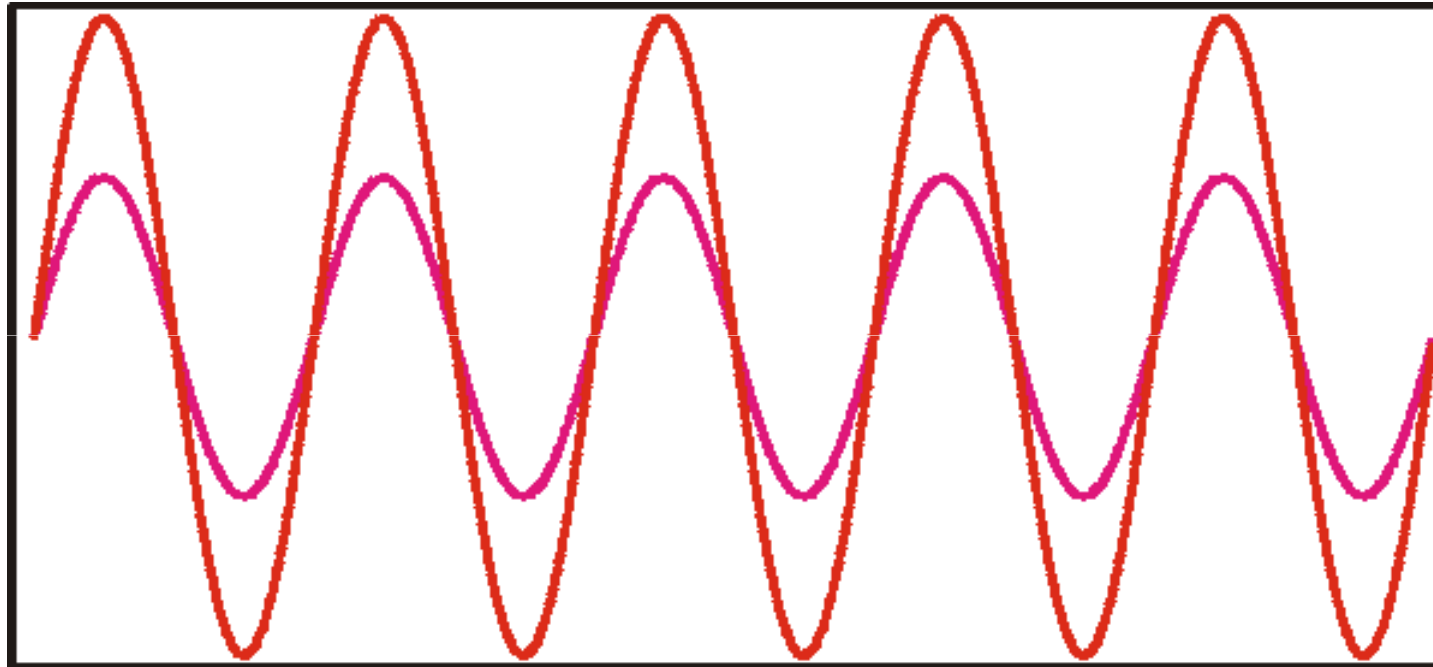
- 1 einfallendes Lichtbündel
- 2 Strahlenteiler (ST)
- 3 aktive Schicht des ST
- 4 fester Spiegel
- 5 beweglicher Spiegel
- 6 austretendes Lichtbündel

Im Interferometer wird der von der Lichtquelle ausgesandte Strahl in zwei Teilstrahlen zerlegt, die zwei getrennte optische Wege zurücklegen und anschließend wieder interferieren.

Danach interagiert der Strahl mit der Probe und gelangt schließlich auf den Detektor.



# Monochromatische Interferenz

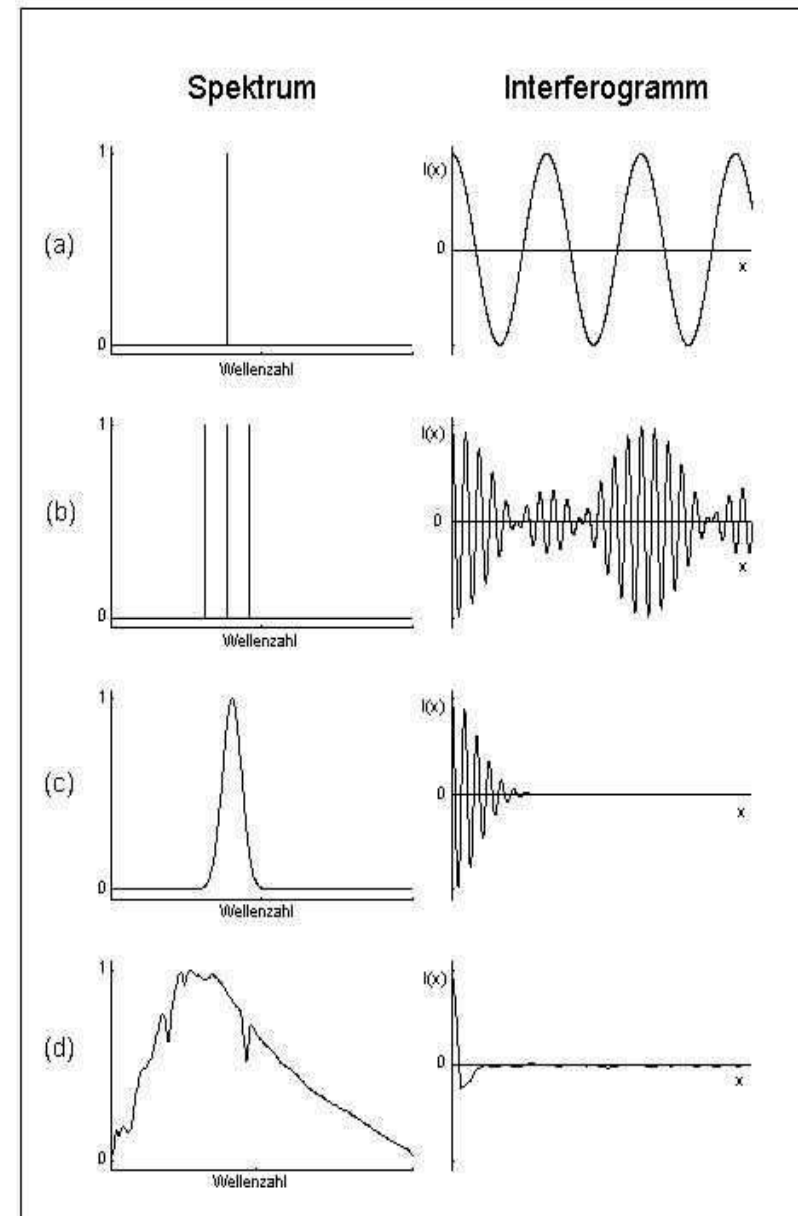


Überlagerung der Wellen

# Vom Interferogramm zum Spektrum

Das Spektrum ist die Fouriertransformation des Interferogramms.

Mathematik und PC liefert aussagekräftige Daten.



# Messung an FTIR-Geräten

Von der flüssigen Probe wird ein Interferogramm im Wellenlängenbereich von 2,5 bis 25  $\mu\text{m}$  aufgenommen.

Das Interferogramm wird mittels **Fourier Transform Berechnung** in ein **Infrarotspektrum** umgesetzt.

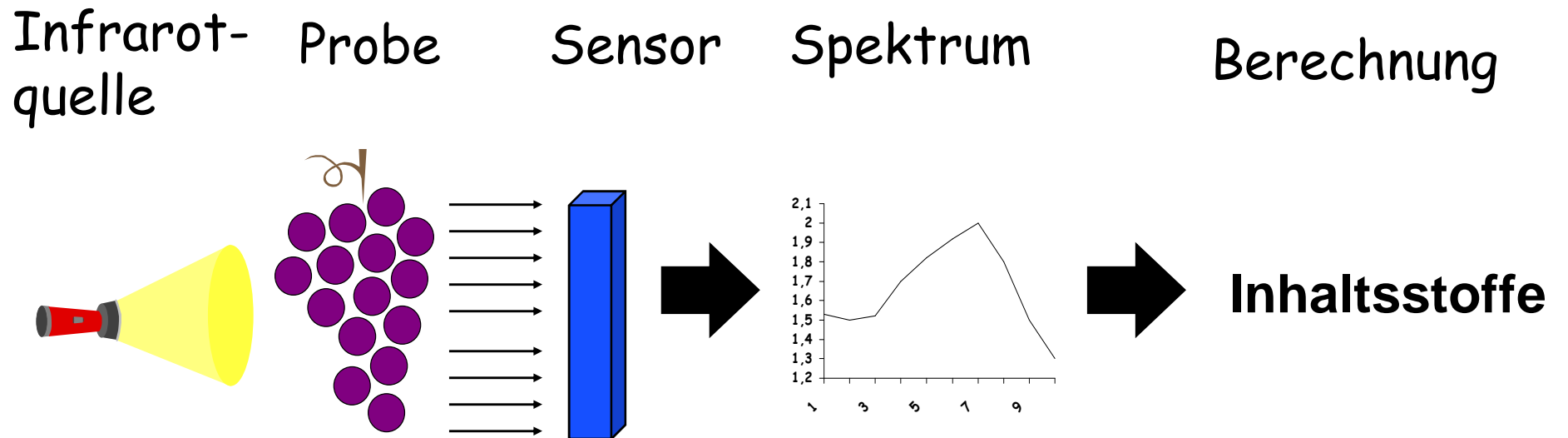
**FTIR** ist eine **indirekte Methode**.

Die gewonnenen Daten vom Instrument werden in mathematische Formeln eingesetzt und liefern dann **aussagefähige** Ergebnisse (Zahlenwerte).

Geräteeichung und Kalibration sind Voraussetzung für richtige Analysenwerte.

Die Kalibration hängt von der verwendeten Probenmatrix ab.

# Prinzip der IR-Spektroskopie



# Grapescan

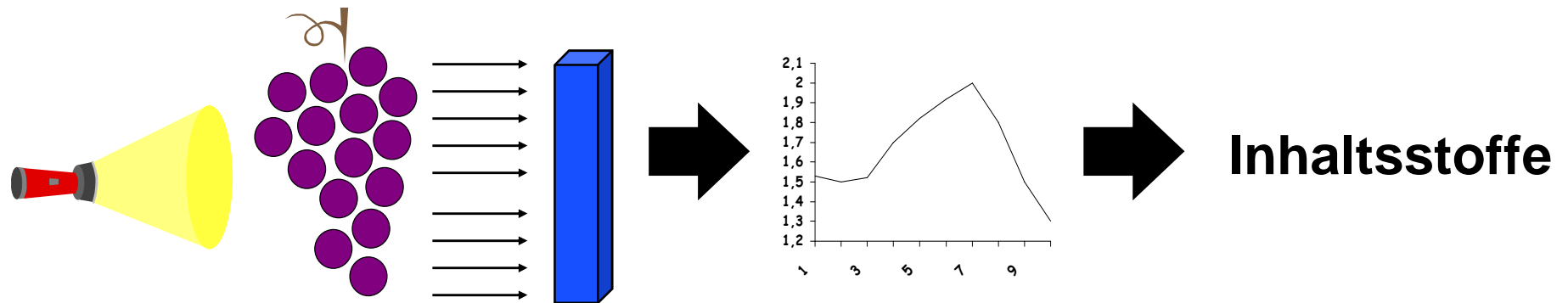
Infrarot-  
quelle

Probe

Sensor

Spektrum

Berechnung

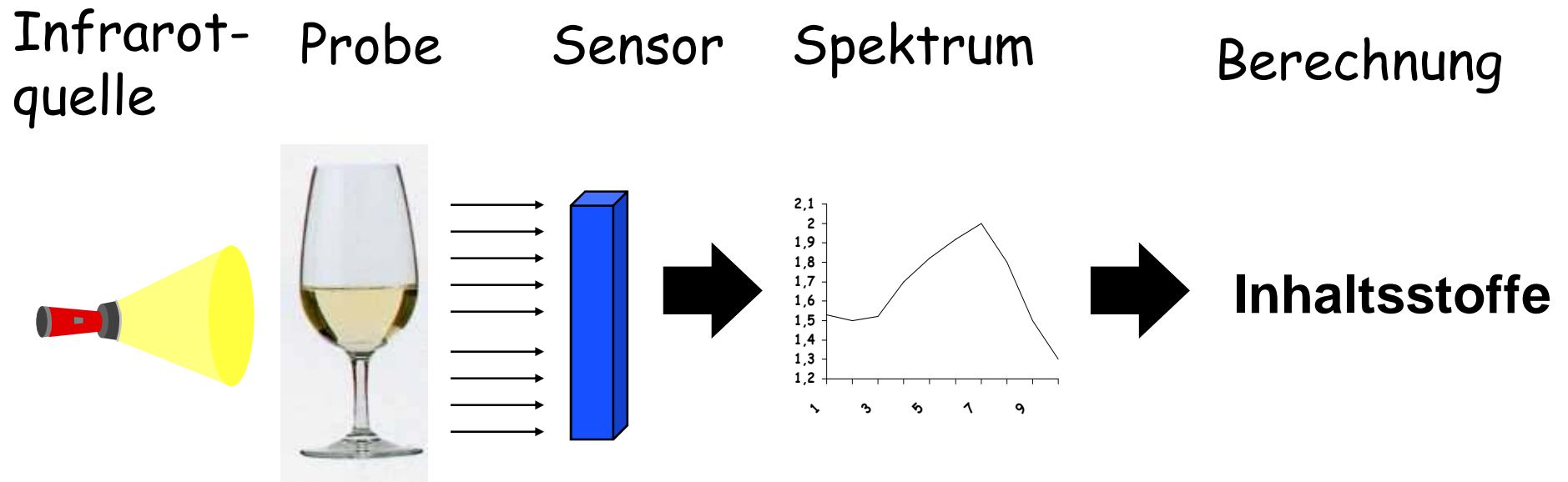


Proben sind Presssaft aus Trauben.

Reinigung, Kalibration und Messzyklus sind auf die Probe abgestimmt und für richtige Messergebnisse entscheidend.



# Winescan



*Proben sind gärender Most und Wein aus Trauben.*

Reinigung, Kalibration und Messzyklus sind auf die Probe abgestimmt und für richtige Messergebnisse entscheidend.

# Milchscan

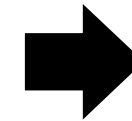
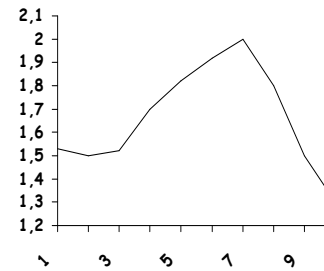
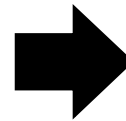
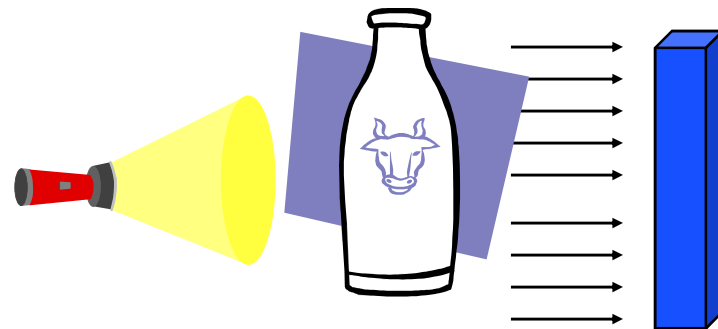
Infrarot-  
quelle

Probe

Sensor

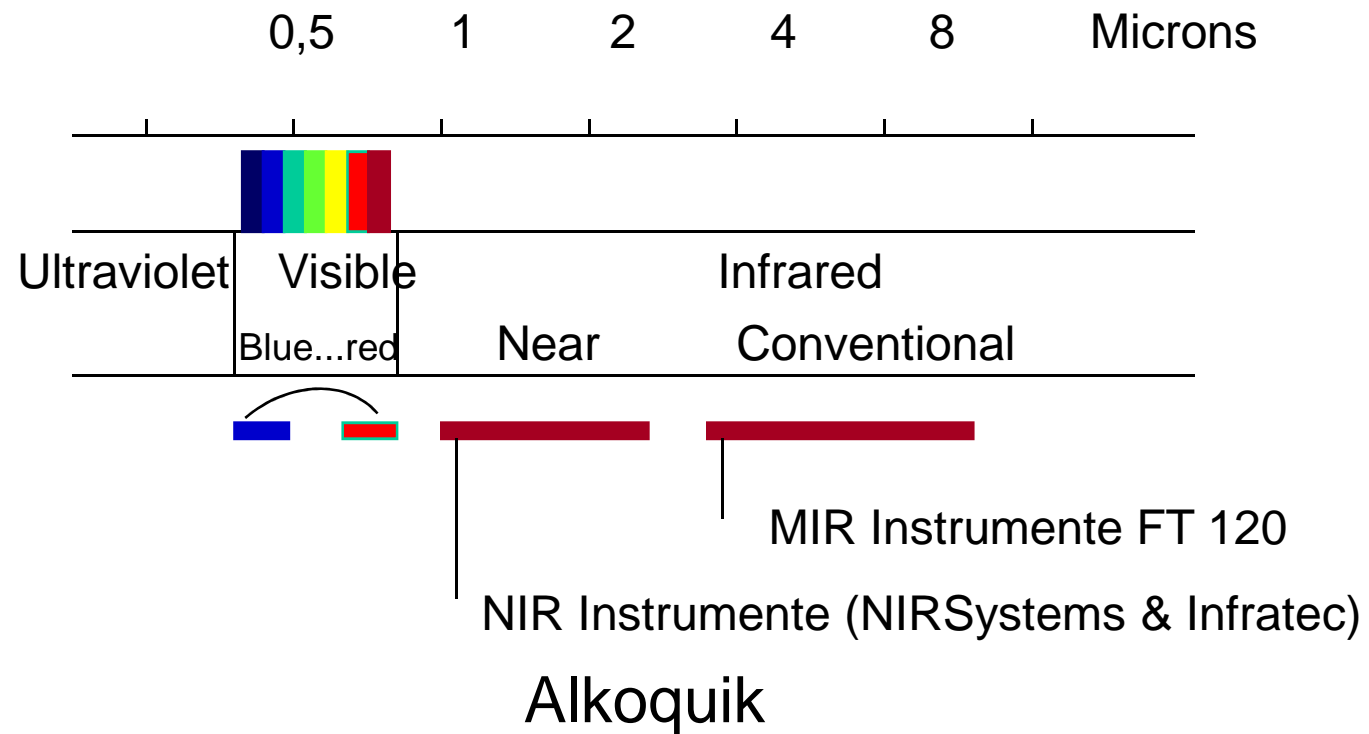
Spektrum

Berechnung

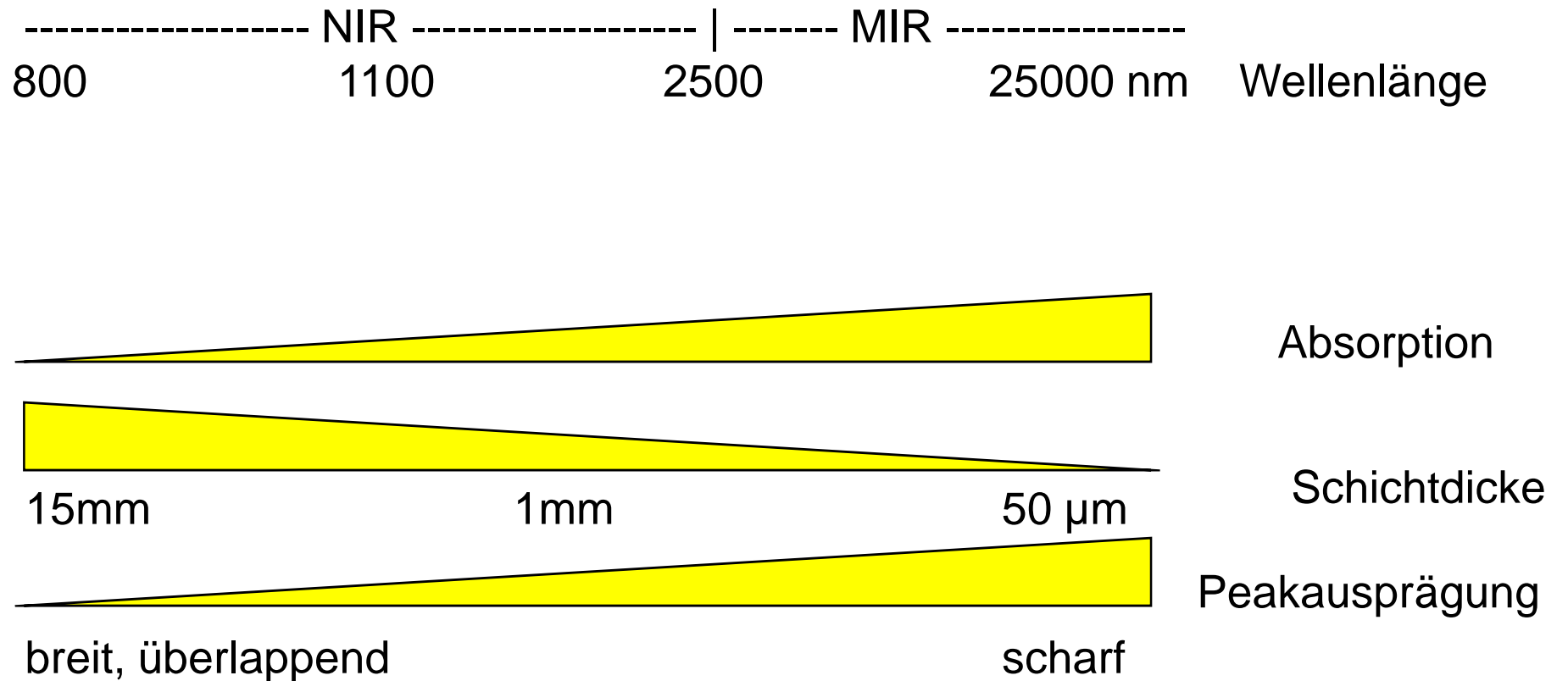


**Inhaltsstoffe**

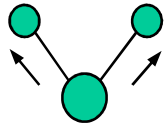
# Teile vom elektromagnetischen Spektrum



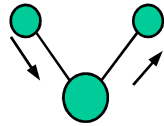
# NIR - MIR Eigenschaften



# Schwingungsformen

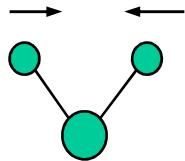


symmetrisch

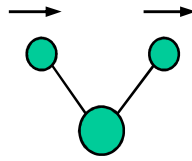


asymmetrisch

Valenzschwingung  
(=Streckschwingung)

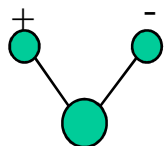


Spreizschwingung

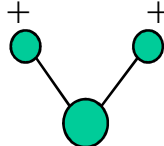


Pendelschwingung

Deformationsschwingung  
in der Ebene



Torsionsschwingung



Kippschwingung

Deformationsschwingung  
aus der Ebene

Infrarotstrahlung löst all diese Schwingungen aus.



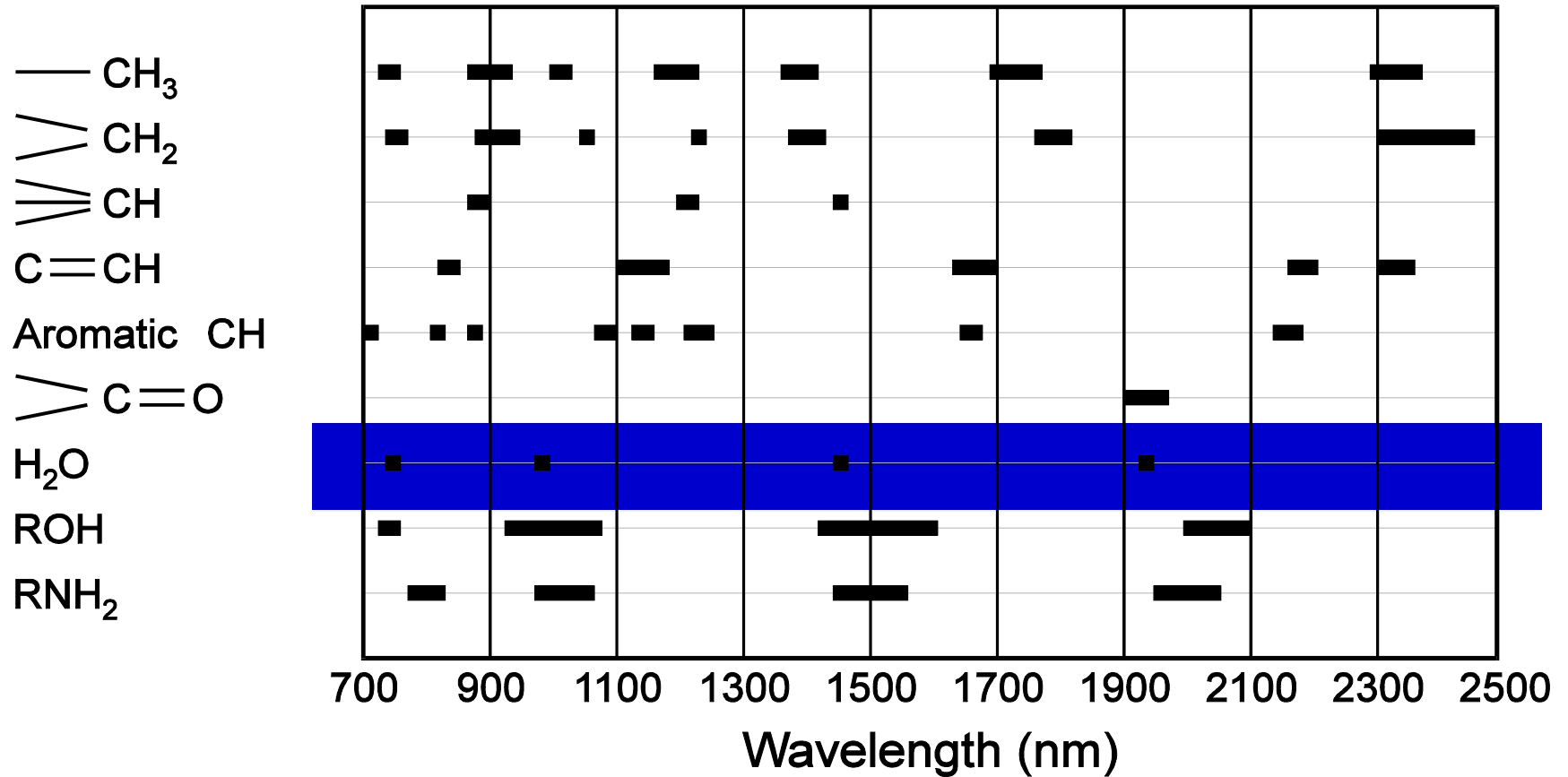
# Funktionelle Gruppen

- CH

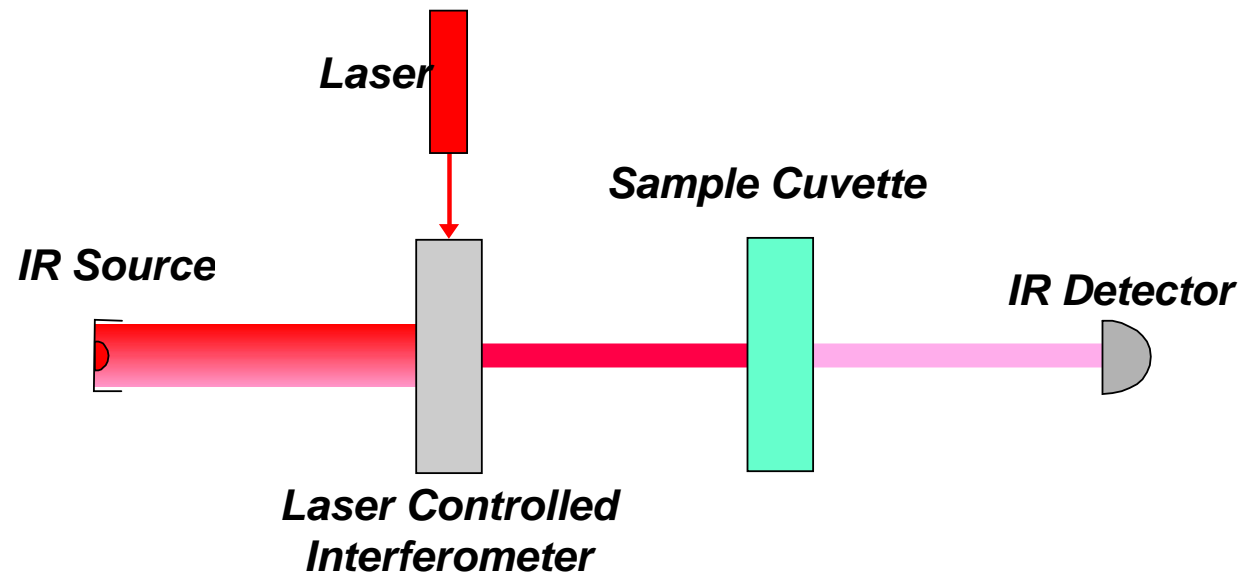
- OH

- NH

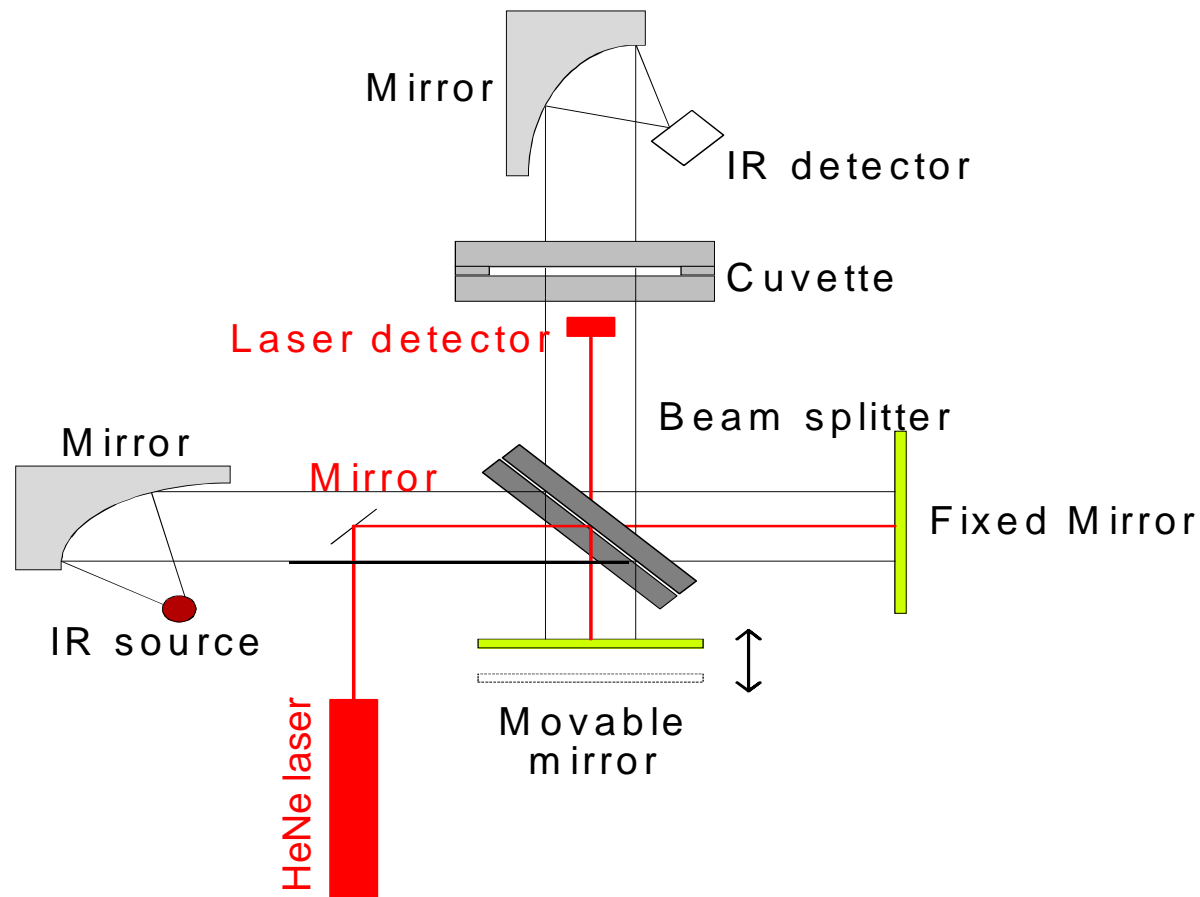
# Absorptionsbanden



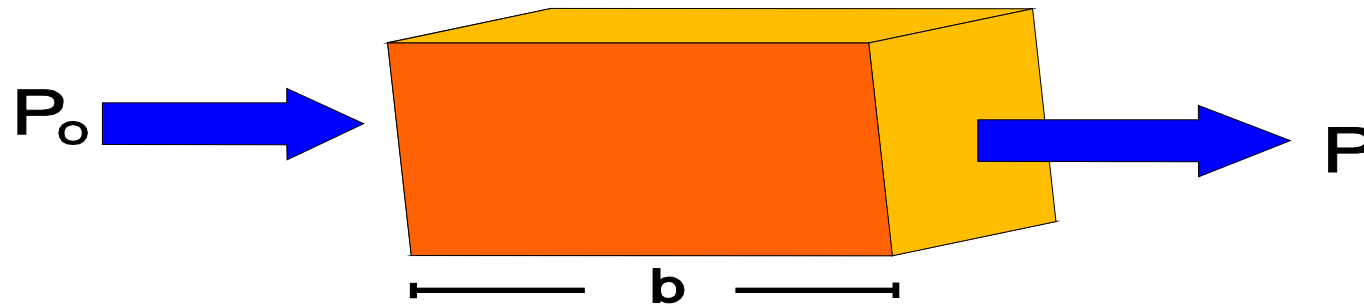
# Infrarot Messprinzip



# FT 120 FTIR-Prinzip



# Lambert-Beer-Gesetz



$$A = \log \frac{P_0}{P} \propto c$$

$A$  = Absorption (=Extinktion)

$a$  = Absorbtivität

(=Extinktionskoeffizient)

$b$  = Schichtdicke

$c$  = Konzentration

$$A = kc$$

$$A = abc$$

Konzentration =  
Absorption \* Koeffizient



# Voraussetzungen für den GrapeScan-Einsatz

## Forderungen an Gerätehersteller

- umfassende Gerätekalibration
- einfache Gerätebedienung

„robust“ =  
praxistauglich  
und zuverlässig

## Anforderungen an den Einsatzbereich

- Probennahme muss repräsentative Durchschnittsprobe liefern
- Fachkompetenz bei der Interpretation der Messergebnisse

# Gesundheitszustand vom Lesegut

## Sanitary-Index

- Grauschimmel, Edelfäule, Botrytis
- Sauer- und Essigfäule
- Hefeaktivität

Der Gesundheitszustand hat Einfluss auf den Gehalt an Trauben- und Mostinhaltsstoffen

Gluconsäure

Essigsäure

Glycerin

Gluc.-Fruct.-Verhältnis

Galaktarsäure

Milchsäure

Ethanol

Laccase-Aktivität

Vielen  
Dank