

ワインの分析 (4)

FT-NIRを用いたワインのぶどう品種によるクラス分け

はじめに

ワインの評価・鑑定には、嗅覚や味覚、視覚など感覚的な手法が利用されていますが、近年、種々の分析機器を用いた科学的な手法も導入されてきています。近赤外分光法 (FT-NIR) では、スペクトルからアルコール度数や糖分、揮発性成分などを同時に定量できることが知られています。赤外吸収スペクトルには、ワインに含まれる各成分の割合や分子構造など多様な情報が含まれており、これらの情報の組み合わせを定性分析にも利用できます。ここでは、Thermo Scientific™ TQ Analystケモメトリックソフトウェアを用いてワインのクラス分けを試みた結果を報告します。

装置と実験

ワインのスペクトル測定には、フーリエ変換赤外分光装置 Thermo Scientific™ Nicolet™ iS50 FT-IR分光光度計を用いました (図1)。光源、ビームスプリッターを交換して、近赤外領域で測定を行いました。測定条件を以下に示します。

<サンプル詳細>

赤・白ワイン 6種類 (Sample 1~6)

<測定手法>

近赤外領域の透過測定、光路長1 mmの石英セル使用

<測定条件>

分解能: 8 cm⁻¹、積算回数: 32回 (約20秒)

CaF₂ ビームスプリッター、DTGS検出器、白色光源使用



図1. フーリエ変換赤外分光装置Nicolet iS50 FT-IR分光光度計

クラス分けのメソッドを作成するため、ぶどう品種や地域の異なる赤・白各3種類、計6種類のワインについてスペクトルを測定しました。光路長固定の石英セルを用い、試料を入れ替えながら、おのおの10回ずつ測定しました。

図2に、ワインの近赤外スペクトルを示します。成分のほとんどが赤外吸収の強い「水」であることから、各スペクトルとも類似した形状に見えます。しかしながら、アルコール度数、糖度、酸度など、さまざまな有機物成分の違いが、倍音振動ピークとして異なる波数領域に現れます。各試料間での成分のわずかな違いは、吸光度レベルで10⁻³ abs.程度となります。FT-NIRでは10⁻⁴ abs.程度の変化でさえも精度よく検出できるため、このように水のバックグラウンドが強いスペクトルでも、精度よくクラス分けできると期待できます。

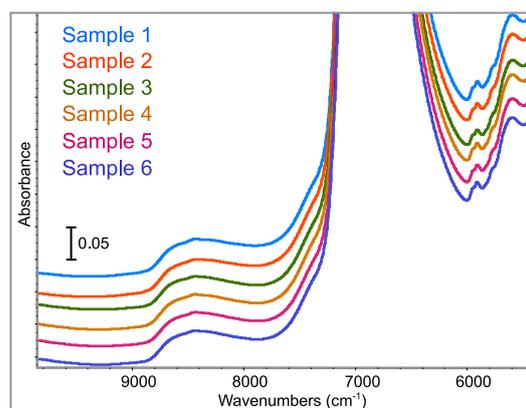


図2. ワインの近赤外スペクトル

メソッドの作成と分類

メソッドの作成には、TQ Analystケモメトリックソフトウェアを用いました。メソッドの作成は、次の順序で行われます。

- 1) クラス分けの手法を選択 (図3)
- 2) サンプルごとにクラスを設定 (図4)
- 3) キャリブレーションの実行と分類 (図5)

今回、スペクトル进行分类するための手法としてDistance Matchを選択しました。Distance Matchは、未知物質が複数の標準物質に対してどの程度似ているかを、類似度で分類する手法です。類似度は、分類された各クラス (既知物質) のスペクトルの差分を利用して数値化できます。TQ Analystケモメトリックソフトウェアでは数値の範囲が0~100で、0が最もよい一致を示します。

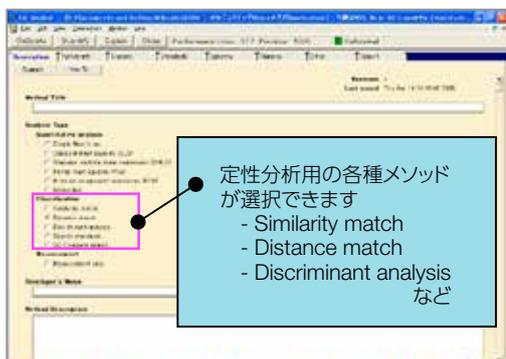


図3. TQ Analystケモメトリックスソフトウェアのメソッド種類選択画面

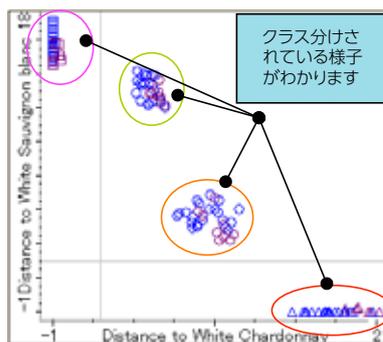


図5. 分類メソッドによりクラス分けされた標準サンプル

Index	Class Name	Abbrev.
0	White Chardonnay	01
1	White Sauvignon Blanc	02
2	White Riesling	03
3	Red Pinot noir	04
4	Red Sangre de toro	05
5	Red Merlot	06

図4. TQ Analystケモメトリックスソフトウェアの分類クラス設定画面

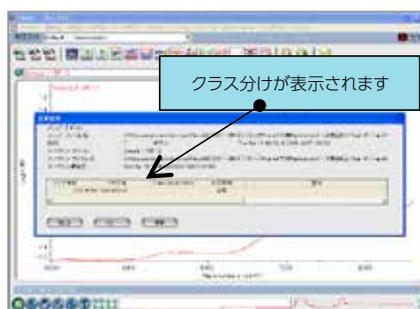


図6. クラス分けする場合の実際のソフトウェア画面

クラス分けのためのスペクトル領域は、9,843~5,355 cm^{-1} としました。キャリブレーションの結果、図5に示すように、各ワインが良好にクラス分けされている様子がわかります。TQ Analystケモメトリックスソフトウェアで作成したメソッドをThermo Scientific™ OMNIC™ソフトウェアにリンクさせ、Sample1~6を再び測定し、クラス分けを実施しました。図6に、その実行画面を示します。表1に、Distance Matchによるワインのクラス分け結果を示します。各ワインは、実際のクラスと非常によく一致し、2番目のクラスとは明らかに区別できる、という結果が得られました。

表1. 分類メソッドを用いたクラス分け結果の一覧

サンプル	分類クラス	分類クラスからの距離	2番目に近いクラス	2番目のクラスからの距離
1 シャルドネ	シャルドネ	0.26	メルロ	5.24
2 ソーヴィニオン・ブラン	ソーヴィニオン・ブラン	0.17	リースリング	9.44
3 リースリング	リースリング	0.43	ソーヴィニオン・ブラン	9.70
4 ピノ・ノワール	ピノ・ノワール	0.26	ソーヴィニオン・ブラン	4.81
5 サンジョベーゼ	サンジョベーゼ	0.43	シャルドネ	7.30
6 メルロ	メルロ	0.94	シャルドネ	3.52

研究用のみ使用できます。診断用には使用いただけません。
© 2020, 2022 Thermo Fisher Scientific Inc. All rights reserved.
All trademarks are the property of Thermo Fisher Scientific and its subsidiaries unless otherwise specified.
実際の価格は、弊社販売代理店までお問い合わせください。
価格、製品の仕様、外観、記載内容は予告なしに変更する場合がありますのであらかじめご了承ください。
標準販売条件はこちらをご覧ください。thermofisher.com/jp-tc FTIR099-B2208CE

サーモフィッシャーサイエンティフィック株式会社

分析機器に関するお問い合わせはこちら

TEL: 0120-753-670 FAX: 0120-753-671

Analyze.jp@thermofisher.com

facebook.com/ThermoFisherJapan

@ThermoFisherJP

thermofisher.com

まとめ

FT-NIRを用いてワインのクラス分類メソッドを作成し、クラス分けを行いました。その結果、実際のクラスと非常によく一致する結果が得られました。今回の実験では、ワインの「ぶどう品種」でクラス分けするメソッドを作成しましたが、この限りではなく、さまざまな指標、例えばワインの旨みや熟成などによるクラス分けも可能になるのではないかと考えられます。

参考文献

- J.Hirsch and L.Tenkl, FT-NIR Analysis of Wine, Application Note #50813, Thermo Electron Corporation (2004).