



Application Note AN-NIR-147

近赤外分光法(NIRS) によるワイン中のエタノール含量測定

NIRS を用いたワイン中アルコール濃度の迅速測定

ワイン中のエタノール含量は、発酵過程中的測定、品質管理、および酒類に関する法的要件の確認などにおいて重要なパラメータです。ワイン中のエタノール含量の測定には、従来は時間のかかるガスクロマトグラフィー(GC)などの手法が用いられてきました。しかし、近赤外分光法(NIRS)を用いれば、試料の前処理を行うことなく簡便にアルコール含量を測

定することが可能です。

近赤外分光法(NIRS)は、迅速で使いやすく、化学薬品を用いない分析手法です。NIRS ソリューションは、ワインの発酵過程中的のアットライン測定や、品質管理用の実験室での測定のいずれにも利用することができます。

装置、部品、ソフトウェア

アルコール度数の異なる赤ワインと白ワインのサンプルを、OMNIS NIR Analyzer Liquid(1000~2250 nm)で測定しました。測定は、2mmフローセルと対応するフローセルホルダーを用いて透過モードで行いました。液体の移送には、OMNIS Sample Robot Sに内蔵されたペリスタリックポンプを使用しました(図1)。すべてのデータ取得と予測モデルの開発には、OMNISソフトウェアを用いました。



図 1. OMNIS NIR Analyzer Liquid および OMNIS サンプル ロボット S-WSM (1T/2P)

表 1.装置、部品 およびソフトウェアの概要

名称	部品番号
OMNIS NIR Analyzer Liquid	2.1070.0010
NIRS 12.5 mm クォーツキューベット フロー 2 mm	6.7401.320
ホルダー OMNIS NIR、フローセル	6.07401.100
OMNIS スタンドアローンライセンス	6.06003.010
OMNIS Stand-Alone: 1 装置ライセンス	6.06002.010
Quant Development ソフトウェアライセンス	6.06008.002
OMNIS サンプル ロボット S-WSM (1T/2P)	2.1010.1120
OMNIS サンプル ラック, 25 x 75 mL (PP)	6.02041.040
グリッパーフィンガー 28~48 mm	6.02601.040

測定結果

得られたワインの NIR スペクトル(図2)を用いて、エタノール含量の予測モデルを作成しました。検証には leave-one-out 法(一つ抜き交差検証法)を適用し

ました。NIR 予測値と参照値の関係を示す相関図は、図3 に示されており、各種の評価指標(FOM)も併せて表示しています。

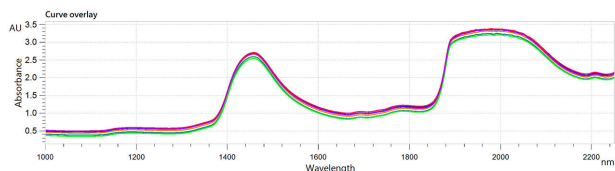


図 2. 2 mm のフローセルを備えた OMNIS NIR Analyzer Liquid で測定されたさまざまなワインのサンプルの NIR スペクトル

ワイン中のエタノール含有量の測定結果

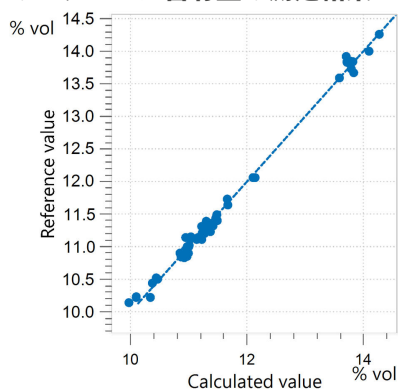


図 3. ワイン中のエタノール予測に関する相関図および各種評価指標（FOM）です。 参照として、ガスクロマトグラフィーによるワイン中のエタノール含量測定も実施しました。

決定係数 R^2	校正の標準誤差 SEC [vol %]	交差検証の標準誤差 SECV [vol %]
0.995	0.080	0.082

結論

このアプリケーションノートでは、ワイン中のエタノール含有量を検査するためのNIR分光法の実現可能性を示します。分析は数秒で完了します。化学薬

品は使用しないため、コストを削減できます。OMNISプラットフォームの自動化機能により、最大175サンプルの無人測定が可能です。

CONTACT

メトロームジャパン株式会
社
143-0006 東京都大田区平
和島6-1-1
null 東京流通センター アネ
ックス9階

metrohm.jp@metrohm.jp

システム構成



OMNIS NIR Analyzer Liquid

Near-infrared spectrometer for liquid samples. Developed and produced in accordance with Swiss quality standards, the OMNIS NIR Analyzer is the near-infrared spectroscopy (NIRS) solution for routine analysis along the entire production chain. Its application of the latest technologies and its integration in the modern OMNIS Software are reflected in its speed, operability, and flexible utilization of this NIR spectrometer. Overview of the advantages of the OMNIS NIR Analyzer Liquid: Measurements of liquid samples in less than 10 seconds; Temperature control on the sample from 25–80 °C; Automatic detection of the insertion and removal of the sample vessel; Simple integration in an automation system or link with additional analysis technologies (titration); Supports numerous sample vessels with different path lengths;



NIRS 12.5 mm 2 mm

フロークォーツキュベットは、例えば錠剤の溶解プロセスや反応動特性を持続的に監視することを可能にします。高い耐圧性および特別な気泡回収システムにより、あらゆる測定が非常に快適に行えるようになります。

最高の純度および均一性を備えたクォーツガラス製のウィンドウは、200 nm~2500 nmの波長域において80%以上の透過性を保証します。

様々な層厚のものをご利用いただけます：

層厚0.5 mm、容量 = 175 μ L (注文番号: 67401300)

層厚1 mm、容量 = 350 μ L (注文番号: 67401310)

層厚2 mm、容量 = 700 μ L (注文番号: 67401320)

層厚5 mm、容量 = 1750 μ L (注文番号: 67401330)

層厚10 mm、容量 = 3500 μ L (注文番号: 67401340)

スペック $h \times l \times w = 35 \text{ mm} \times 12.5 \text{ mm} \times 12.5 \text{ mm}$

ウィンドウ高さ = 8.5~15 mm

XDS Rapidliquid Analyzer のための NIRS スペーサーおよび DS2500 Liquid Analyzer のための DS2500 ホルダと互換性があります。



OMNIS NIR

Cuvette holder for the OMNIS NIR Analyzer for flow-through cells(6.7401.300; 6.7401.310; 6.7401.320; 6.7401.330; 6.7401.340).

OMNIS

A WHOLE NEW LEVEL OF PERFORMANCE

OMNIS

WindowsTMコンピュータ上のOMNISソフトウェアをスタンドアロン操作することが可能になります。

特徴:

- ライセンスには、既に1つのOMNISデバイスライセンスが含まれています。
- メトローム・ライセンシングポータルにて、アクティブ化する必要があります。

OMNIS

A WHOLE NEW LEVEL OF PERFORMANCE

OMNIS

A WHOLE NEW LEVEL OF PERFORMANCE



OMNIS Stand-Alone: 1

OMNIS Stand-Aloneシステム内の他の1台のOMNIS 装置稼働用装置セット1台。

以下の装置に対応しています:

- OMNIS 装置
- Metrohm USB 装置
- RS-232 装置(例: 天秤等)

Quant Development

Software license for the creation and editing of quantification models in a stand-alone OMNIS Software installation.

OMNIS Sample Robot S – WSM (1T/2P)

OMNIS Sample Robot S – WSM には、センサーとサンプル容器の洗浄および吸引のためのポンプ 2 台、ワークステーション 1 台、ロッドスターラ、ならびに多様な付属品が装備されており、全自動滴定をすぐに開始できます。このシステムでは 2 つのサンプルラックにおいて、120 mL のサンプルビーカー 32 個分のスペースが設けられており、モジュール式のシステムは、完全に組み立てられた状態で納品されるため、最短時間で運転開始できます。ご要望に応じて、システムは更に 2 台のペリスタリックポンプおよび追加のワークステーションでの拡張が可能ですので、スループットを倍増することができます。更なるワークステーションが必要な場合、Sample Robot S は L サイズまでの OMNIS Sample Robot に拡張することで最高 4 台までのワークステーションで 7 つのラックのサンプルを並行して処理し、スループットを 4 倍に増やすことができます。



OMNIS25 x 75 mL(PP)

25個のサンプルビーカーに適合した OMNISサンプルロボットピック&プレイスのための OMNISサンプルラック。以下のサンプルビーカーの使用が可能です: 6.01402.000、6.01402.003、6.1459.400。

合成樹脂: ポリプロピレン (PP)



2848 mm

外径が 28 ~ 48 mm のサンプルビーカーを掴むための OMNIS Sample Robot Pick&Place のグリッパフィンガー。