1 Einleitung

Die Qualität eines Produktes und speziell eines Weines wird häufig direkt mit dessen Herkunft in Verbindung gebracht. Dies führte bereits in der Vergangenheit dazu, dass in vielen Ländern Systeme zur kontrollierten Herkunftsbezeichnung von Weinen (und anderen Agrarprodukten) eingeführt wurden. Beispielhaft können für Wein an dieser Stelle Frankreich (Appelation d'Origine Contrôlée (AOC)), Italien, (z.B. Denominazione di Origine Controllata, DOC), Spanien (z.B. Denominación de Origen, DO) oder Österreich (z.B. Districtus Austriae Controllatus, DAC) genannt werden [*16, 168*]. Im Ursprung lassen sich all diese Systeme auf das französische AOC System zurückführen, welches wiederum eng mit dem ebenfalls aus Frankreich stammenden Terroir-Konzept verbunden ist [*16, 24*]. Auf den Begriff Terroir und das dahinterstehende Konzept soll unter 2.1 näher eingegangen werden, es handelt sich hierbei um eine Art Überbegriff für alle Faktoren, die einen Einfluss auf die Qualität eines Weines haben können (hauptsächlich Klima, Boden und Topographie) [*34, 128, 206*]. In Deutschland stand die Weinqualität in der Vergangenheit in erster Linie mit einem bestimmten Mostgewicht in Verbindung, welches beispielsweise eine Grundvoraussetzung zur Erlangung von Prädikaten (Kabinett, Spätlese etc.) ist [*10*]. In den vergangenen Jahren rückte aber auch hierzulande verstärkt eine zur geografischen Herkunft in Relation stehende Qualitätsauffassung in den Fokus. Hierbei kann auch von einer Bedeutung der Harmonisierung des europäischen Weinmarktes durch Verordnung (EG) Nr. 479/2008 ausgegangen werden [*9*]. Dies führte dazu, dass vermehrt die Namen bestimmter Einzellagen (Pechstein, Kieselberg) oder auch Angaben zum Ausgangsgestein (z.B. vom Buntsandstein, Schiefer) bei der Etikettierung in den Vordergrund gestellt werden. Denn sowohl die Systeme zur kontrollierten Herkunftsbezeichnung von Weinen als auch mit dem Terroirkonzept in Verbindung stehende Begriffe ermöglichen eine verbesserte Positionierung der Produkte auf dem globalisierten Weinmarkt. In Deutschland ist in diesem Zusammenhang der Riesling von besonderer Bedeutung, da diese Rebsorte die in Deutschland am meisten verbreitete ist (bestockte Rebfläche 2010: 22601 ha, 22,1 % der Gesamtfläche), weltweit vermarktet wird und als besonders durch das Terroir beeinflusst gilt [*8, 67, 91, 168*].

Während der Einfluss bestimmter mit dem Terroir in Zusammenhang stehender Faktoren auf die Zusammensetzung eines Weines kaum zu bestreiten ist, stellt sich die Frage, inwieweit und in welcher Form sich das Terroir bzw. einzelne Faktoren auf Riesling Weine auswirken. Zu diesem Zweck wurden in einer früheren Studie bereits Rebflächen ausgewählt und Weine produziert, um sensorische, bodenkundliche, klimatische und topographische Daten zu erheben und auszuwerten [*17*]. Insgesamt wurden während des früheren Projektes und im

Dieses Werk ist copyrightgeschützt und darf in keiner Form vervielfältigt werden noch an Dritte weitergegeben werden.
Es gilt nur für den persönlichen Gebrauch.

Zuge der vorliegenden Arbeit etwa 200 Riesling Weine hergestellt, wobei der Probensatz zwei unterschiedliche Arten der Vinifizierung, fünf Weinbauregionen, fünf Jahrgänge, sieben Ausgangsgesteinstypen und 25 Einzellagen umfasst. In der vorliegenden Arbeit sollte insbesondere die chemische Zusammensetzung der Weine einer eingehenden Prüfung unterzogen werden, da diese bislang nicht mit dem nötigen Fokus erfolgen konnte. Aus diesem Grund sollten insbesondere chemisch analytische Verfahren angewendet werden um Daten zu erheben, die es nach multivariater statistischer Auswertung erlauben den Einfluss des Terroirs bzw. seiner Bestandteile auf die Eigenschaften und die Zusammensetzung der Weine näher zu beschreiben oder gar Marker für bestimmte Terroirs zu finden. Im Fokus steht hierbei die Differenzierbarkeit von Weinen anhand von Ausgangsgestein, Einzellagen, Weinbauregionen, Vinifizierungsvariante und Alter. Als weiteres Ziel wurde die Korrelation eines aromachemischen Datensatzes mit einem sensorischen Datensatz formuliert, um künftig weitere Aussagen über die molekularen Ursachen für den bereits sensorisch festgestellten Terroir-Einfluss tätigen zu können. Zielsetzungen der vorliegenden Abeit waren daher:

- Die Durchführung einer Aromastoffanalytik (*multitarget profiling*) um für ihre sensorische Relevanz bekannte Aromastoffe durch Gaschromatographie-Massenspektrometrie zu erfassen und durch Stabilisotopenverdünnungsanalyse zu quantifizieren.
- Die Anwendung eines weiteren Aromastoffanalytikverfahrens (*nontarget profiling*) durch umfassende zweidimensionale Gaschromatographie-Massenspektrometrie (*Comprehensive two-dimensional gas chromatography*), um einen Großteil der flüchtigen Fraktion der Weine hinsichtlich einer Abhängigkeit vom Terroir zu bestimmen.
- Der Einsatz eines ^{1}H-NMR *profiling* um Erkenntnisse über einen Einfluss des Terroirs bei Riesling Weinen insbesondere auf die nicht flüchtige Fraktion zu erlangen.
- Die Weiterführung der sensorischen Untersuchung der Weine durch deskriptive sensorische Analyse, um die Bedeutung des Terroirs für die Riesling Weine über mehrere Jahrgänge hinweg untersuchen zu können.
- Die Durchführung einer umfangreichen multivariaten statistischen Auswertung der so erhaltenen Daten durch geeignete Verfahren wie Varianzanalyse, Hauptkomponentenanalyse, Diskriminanzanalyse und *partial least squares regression*.

Dieses Werk ist copyrightgeschützt und darf in keiner Form vervielfältigt werden noch an Dritte weitergegeben werden.
Es gilt nur für den persönlichen Gebrauch.

2 Literaturübersicht

2.1 Das Terroir – Konzept

Terroir ist ein französischer Begriff, für den das Deutsche, aber auch viele andere Sprachen wie Spanisch, Englisch und Italienisch, mit Ausnahme des Provenzalischen und seiner Dialekte, kein geeignetes Synonym kennen [*90, 208*]. Die Entstehung des Wortes Terroir verlief vom Lateinischen *territorium* (Stadtgebiet; Gebiet, i, *n*) aus über das vulgärlateinische *terratorium* hin zum heutigen Terroir [*201, 208*].

In Bezug auf Wein wird der Begriff Terroir verwendet um eine komplexe und für jeden Wein spezifische Kombination von Faktoren zu umschreiben, die einen Einfluss auf die sensorischen Qualitäten des Weines haben [*34, 128, 206*]. Auf Grund der hohen Zahl an möglichen Einflussfaktoren, ist es sehr unwahrscheinlich, dass es irgendwo auf der Welt zwei Weinberge gibt, die sich in allen Charakteristika gleichen [*51*]. Unterscheiden sich zwei Terroirs so sollen, selbst wenn diese zwei Terroirs räumlich sehr nah beieinander liegen, subtile Unterschiede in Geruch und Geschmack des Weines vorhanden sein [*24*]. In Frankreich spricht man in diesem Zusammenhang auch vom *gôut de terroir*, der Wein schmeckt also nach seinem Terroir, ein Umstand der in der Vergangenheit allerdings auch mit negativen Assoziationen verbunden war [*16, 90, 130, 208*]. Ein weiterer in diesem Kontext häufig gebrauchter Begriff ist die Typizität [*136, 208*]. Ein Wein hat laut Vaudour (2002) dann die größtmögliche Typizität erreicht, wenn er geschmacklich dem entspricht, was Menschen eines bestimmten Landstriches seit Generationen von einem Wein erwarten, der in ebendiesem Landstrich aus von dort stammenden Trauben hergestellt wurde [*208*]. Während der Einfluss des Terroirs auf den Wein in der Regel nicht bestritten wird, herrscht Uneinigkeit darüber welche Faktoren zum Terroir hinzuzuzählen sind und zu welchem Ausmaß sie beitragen.

In der klassischen Sichtweise umfasst das Terroir einzig die naturgegebenen Standortparameter einer Reblage wie Klima (Makro-, Meso- und Mikroklima), Boden (Erdreich und Geologie) und Topographie, beziehungsweise deren Interaktion mit der Rebe sowie untereinander [*24, 111, 206, 216*]. Die Einzigartigkeit des Standortes eines jeden Weinbergs soll, über Jahrgänge hinweg, die einzigartige Qualität und Typizität eines Weins bedingen und zwar weitestgehend unabhängig von weinbaulichen und oenologischen Maßnahmen. Im Hinblick auf den Standort definiert Seguin (1986) ein gutes Terroir als eines, das eine langsame aber vollständige Reifung der Trauben ermöglicht und über Jahrgänge hinweg eine bestimmte Qualität liefert [*186*]. Einen starken Einfluss auf die Weinqualität soll

Dieses Werk ist copyrightgeschützt und darf in keiner Form vervielfältigt werden noch an Dritte weitergegeben werden.
Es gilt nur für den persönlichen Gebrauch.

das Terroir in Regionen mit kühlerem Klima haben [*186, 206*]. Die Frage, ob einem der Standortparameter eine besondere Rolle im Terroir - Konzept zukommt, wird von verschiedenen Autoren unterschiedlich beantwortet und kontrovers diskutiert. Dickenson (1990) beispielsweise hebt den Boden hervor, da klimatische Faktoren wie Regenmenge und Sonnenstunden, sowie die Topographie als weniger einzigartig für eine Lage angesehen werden könnten [*54*], während Bohmrich (1996) das Klima als entscheidender ansieht, da sein großer Einfluss sichtbar werde, wenn man die enormen sensorischen Unterschiede betrachte, die innerhalb von Weinen einer Rebsorte auftreten könnten, die aber aus unterschiedlichen warmen Regionen stammen [*24*]. Van Leeuwen und Seguin (2006) stellen fest, dass bei Weißweinreben, die Wasser- und Stickstoffversorgung zumindest moderat sein sollte, damit das Aromapotential der Trauben nicht negativ beeinflusst werde [*206*]. In seinen Schlussfolgerungen sieht Seguin (1986) jegliche Form von extremen Klimata als weitestgehend ungeeignet zur Produktion von Weinen hoher Qualität und Terroirs mit einem moderaten bis kühlen Klima, dessen Extreme (speziell hohe Niederschlagsmengen) durch den Boden abgefangen werden, als überlegen an [*186*].

Neben den Standortparametern hat auch der Mensch einen maßgeblichen Einfluss auf die sensorische Charakteristik eines Weines. Ob der Mensch deshalb als Bestandteil des Terroirs angesehen werden soll, ist umstritten. Traditionalisten möchten den Faktor Mensch weitestgehend aus der Terroir-Gleichung heraushalten [*80*]. Diese Sichtweise führt aber auch zu Einschränkungen bei der Wahl der Standortparameter, denn einige haben bereits in der Vergangenheit umfassende Veränderungen durch Menschenhand erfahren. Als Beispiele können an dieser Stelle das Umgraben von Böden, die Terrassierung von Hängen oder Maßnahmen zu Bewässerung und Drainage genannt werden. Der Eingriff des Menschen relativiert somit die natürlichen Gegebenheiten eines Standortes, was zu einer strengeren Definition des Terroirs führt, die nur solche Parameter umfasst, die nicht ohne größeren technischen und finanziellen Aufwand verändern lassen [*24, 110*]. Dem gegenüber steht eine Vielzahl von Autoren, die den Faktor Mensch als Bestandteil des Terroirs betrachten, der mit den anderen Faktoren interagiert [*24, 136, 186*]. Das Resultat hieraus ist eine Erweiterung des Terroir-Konzeptes nicht nur um weinbauliche und oenologische Maßnahmen, sondern auch um sozial-kulturelle, sozial-ökonomische, politische, mythische und mystische Aspekte [*24, 136, 186*]. Van Leeuwen und Seguin (2006) weisen in Bezug auf den Faktor Mensch darauf hin, dass die Menschheit schon dadurch einen wichtigen Beitrag zum Terroir leistete, dass ohne sie keine Weinberge existieren würden [*206*]. Die Autoren führen weiter aus, dass Weinreben auf Grund ihrer geringen Ansprüche an Wasser- und Mineralstoffversorgung auf schlechteren, flachgründigen, steinigen und steilen Böden angepflanzt worden seien, um die reicheren Böden als Weideland und für den Getreideanbau nutzen zu können. Die Wahl der

Dieses Werk ist copyrightgeschützt und darf in keiner Form vervielfältigt werden noch an Dritte weitergegeben werden.
Es gilt nur für den persönlichen Gebrauch.

Regionen in denen Weinbau betrieben wurde, erfolgte und erfolgt bis heute nur bedingt auf Grundlage der besonderen Eignung für den Weinbau, sondern häufig auch unter sozial-ökonomischen Aspekten. Schwierigkeiten beim Transport von Wein führten in der Vergangenheit beispielsweise dazu, dass Weinberge in der Nähe von Paris entstanden, da dort eine Nachfrage der Bevölkerung nach Wein bestand [*206*]. Der Weinbau in den Regionen um Bordeaux und La Rochelle hingegen florierte im Mittelalter, da die Häfen der Städte den Transport von Wein auf dem Seeweg ermöglichten [*206, 216*]. Eine Verbesserung der Transportmöglichkeiten, beispielsweise durch die Nutzung von Eisenbahnen, in Kombination mit anderen Einflüssen, wie der Reblauskatastrophe im Falle von Paris oder dem Niedergang der Häfen in La Rochelle und Bordeaux, führten dann zum Untergang des Weinbaus in den Regionen, deren Umweltbedingungen nur unzureichend für Weinbau geeignet sind [*206, 216*]. Einen direkteren Einfluss auf den Wein kann der Mensch in Weinberg und Weinkeller nehmen. Die Bedeutung des Menschen in dieser Hinsicht hebt Weigend (1954) hervor [*216*], der argumentiert, dass die Weine aus Südwestfrankreich bis Ende des 17. Jahrhunderts von mittelmäßiger bis schlechter Qualität gewesen seien, obwohl sich die Umweltbedingungen nicht von heutigen unterschieden. Erst durch eine Art Revolution im Weinbau und im Weinkeller konnte ein Produkt hoher Qualität erhalten werden [*216*]. Bohmrich (1996) beginnt seine Argumentation zum Einfluss des Menschen mit dem Hinweis, dass der auch noch so traditionell arbeitende Winzer seinen Einfluss im Weinberg und im Keller nicht ignorieren dürfe, auch wenn er sich selbst gerne als Verwalter der Natur sieht, der den Wein „mal machen lässt“ [*24*]. Angefangen bei der Auswahl von Rebsorte, Klon, Unterlage, Pflanzdichte und Pflanzengröße, über Reberziehung und Laubwandmanagement hat der Winzer eine Vielzahl von Möglichkeiten zur Einflussnahme auf die Rebe und die damit einhergehende Weinbeerenqualität [*24, 136*]. Bei der Weinbereitung schließlich entscheidet der Winzer darüber, ob der Terroircharakter eines Weines hervortritt oder nicht. Bohmrich (1996) spricht in diesem Zusammenhang an, dass ein kompetenter Winzer keinen hochqualitativen Wein aus Trauben schlechter Qualität herstellen könne [*24*]. Auf der anderen Seite stellt er aber auch fest, dass die Antwort auf die Frage, ob es einem Winzer möglich sei das Naturgegebene zu zerstören, während andere Winzer mit Trauben derselben oder einer nahegelegenen Lage hochwertige Weine herstellen, die von Kritikern bejubelt werden, nicht eindeutig mit „ja“ zu beantworten ist. Inkompetenz bei der Weinbereitung kann das natürliche Potential einer Lage einen Wein von großem Charakter und guter Qualität zu produzieren zerstören, hier liegt der Grund dafür, warum bestimmte Châteaus an Reputation gewonnen oder verloren haben und warum das Médoc Klassifizierungssystem von 1855 attackiert wird [*90*]. Ferner ist der europäische Winzer stärker daran interessiert durch Anwendung traditioneller oenologischer Verfahren den typischen, durch die Herkunft eines Weines bestimmten

Dieses Werk ist copyrightgeschützt und darf in keiner Form vervielfältigt werden noch an Dritte weitergegeben werden.
Es gilt nur für den persönlichen Gebrauch.

Charakter eines Weines beizubehalten [*136*]. Demgegenüber fällt auf, dass der Stil von Weinen, die aus Teilen der Welt stammen, die nicht an Traditionen gebunden sind, häufig in großem Umfang im Keller beeinflusst werden [*24*]. Techniken in der Weinbereitung, wie Mostkonzentration, gekühlte Fermentation, Säuerung, Entsäuerung, Tannin-Zugabe und die exzessive Verwendung von Holz überdecken den Einfluss der Lage [*128*]. Die Möglichkeiten des Menschen, Einfluss auf das Produkt Wein zu nehmen, sind somit mannigfaltig und nicht zu vernachlässigen.

Die wissenschaftliche Betrachtung aller Faktoren des Terroirs wird durch deren Vielzahl und durch deren Interaktionen erschwert [*205, 206*]. Es ist daher notwendig, Einschränkungen vorzunehmen. So haben Gergaud und Ginsburgh (2008) in ihrer Studie nur solche Faktoren berücksichtigt, deren Einfluss auf Qualität, Geruch und Geschmack wirklich wahrscheinlich ist [*80*]. Vaudour (2002) weist darauf hin, dass Terroir bezogene Studien, die wissenschaftliche Akzeptanz erreichen sollen, auf Aspekte beschränkt sein müssen, für die quantifizierbare Kriterien vorliegen [*208*]. Generell kann zwischen zwei verschiedenen Typen von Terroir bezogenen Studien unterschieden werden. Einerseits gibt es Studien, deren Ziel eine Differenzierung von Weinen (und Trauben) unterschiedlicher Terroirs ist, während der Schwerpunkt der anderen Studien auf der Untersuchung von Potential und Möglichkeiten eines Weinbergs liegt [*25, 51, 208*].

Abschließend ist auf die 2010 durch die Internationale Organisation für Rebe und Wein (OIV) eingeführte Definition des Weinbauterroir-Konzeptes hinzuweisen:

> „Ein Weinbauterroir ist ein gebietsbezogenes Konzept, wobei für das jeweilige Gebiet kollektive Kenntnisse der Wechselwirkungen zwischen identifizierbaren physikalischen und biologischen Faktoren und den dort angewandten weinbaulichen Verfahren gewonnen werden, die den Produkten dieses Gebiets ihre Einzigartigkeit geben. Das "Terroir“ umfasst spezifische Eigenschaften des Bodens, der Topografie, des Klimas, der Landschaft und der biologischen Vielfalt.“ [*1*]

2.2 Terroir-Substantielle Ausprägungen

Die Auswirkungen des Terroirs bzw. der Herkunft auf die Zusammensetzung und auf die sensorischen Eigenschaften von Weinen wurden bereits weltweit in zahlreichen Studien untersucht. Gemeinsam haben die Studien, dass sie in der Regel versuchen, durch multivariate statistische Verfahren, Muster in Datensätzen zu erkennen, die dazu geeignet sind, die Proben zu differenzieren bzw. zu klassifizieren (Chemometrik). So wurde bereits eine Vielzahl von Arbeiten veröffentlicht, die hauptsächlich (Spuren-) Elementgehalte [*20, 33, 36, 73, 84, 86, 106, 109, 117, 135, 146, 170, 171, 190, 203, 204*] oder konventionelle

Dieses Werk ist copyrightgeschützt und darf in keiner Form vervielfältigt werden noch an Dritte weitergegeben werden.
Es gilt nur für den persönlichen Gebrauch.

Parameter (wie zum Beispiel Alkoholgehalt, Dichte und titrierbare Säure) [*15, 89, 137, 139, 140, 150, 152, 202, 205*] als Datengrundlage verwenden. Darüber hinaus wurden Arbeiten anhand speziellerer Daten zu Aminosäuren [*61*], biogenen Aminen [*179*], Isotopenverhältnissen [*48, 52, 72, 104, 129*] und molekularen Markern [*95*] publiziert. Insbesondere bei der Untersuchung von Rotwein wurde häufig auch das Polyphenolspektrum untersucht [*19, 60, 71, 82, 96, 100, 101, 114, 118, 131, 149, 159, 166*]. Im Rahmen dieser Arbeit sind aber Studien von besonderem Interesse, deren Fokus auf dem Einfluss des Terroirs bzw. der Herkunft auf die Sensorik bzw. das Aromastoffprofil von Weinen lag. Diese Arbeiten sollen daher im Folgenden ausführlicher behandelt werden.

2.2.1 Aromastoffprofil

Kwan und Kowalski (1980) untersuchten die flüchtigen Bestandteile von Pinot Noir Weinen aus Frankreich und den USA (Pazifischer Nordwesten (Oregon und Washington) sowie Kalifornien) und werteten die Ergebnisse mit Mustererkennungsverfahren aus. Insgesamt 137 Peaks konnten in allen 40 untersuchten Proben gefunden werden. Verbindungen, denen eine Schlüsselrolle bei der geographischen Differenzierung der Weine zukam, wurden durch Massenspektrometrie identifiziert. Die Autoren konnten zeigen, dass eine Unterscheidung der US-amerikanischen und französischen Weine anhand der Gehalte an Hexan-1-ol und Cyclohexan möglich war. Die Weine aus den zwei verschiedenen Regionen in den USA unterschieden sich in ihren *p*-Hydroxybenzaldehyd- und 2-Phenylethanol-Gehalten. [*107*]

In zwei Studien konnten Marais et al. (1981) 78 südafrikanische Rotweine (Pinotage, Cabernet Sauvignon) bzw. 60 südafrikanische Weißweine (Chenin blanc, Colombar) gaschromatographisch auf ihre Gehalte an flüchtigen Aromastoffen (Alkohole, Ester und organische Säuren) analysieren. Die Rotweine stammten aus den drei Anbaugebieten Stellenbosch, Durbanville und Worcester und konnten, für jede Rebsorte separat, ihrer Herkunft entsprechend differenziert werden. Die größte Bedeutung bei der Differenzierung hatten 3-Methylbuttersäure, 2-Methyl-1-propanol, Ethyldecanoat und Ethylacetat. Eine Unterscheidung der Weißweine entsprechend ihrer geographischen Herkunft (Stellenbosch, Robertson, Lutzville) gelang, wiederum separat für die beiden Rebsorten, ebenfalls. Isoamylacetat, Hexan-1-ol und 2-Phenylethanol waren die Verbindungen mit der größten Diskriminierungskraft. [*123, 124*]

Weißweine aus drei DOC-Regionen in Venetien (Italien) konnten von Moret et al. (1984) mit chemometrischen Methoden auf Grundlage von Aromastoffdaten klassifiziert werden. Die besten Ergebnisse (94,9 % korrekt klassifizierte Proben) konnten erzielt werden, wenn die Gehalte verschiedener Alkohole und organischer Säuren als Datengrundlage verwendet wurden. [*138*]

Dieses Werk ist copyrightgeschützt und darf in keiner Form vervielfältigt werden noch an Dritte weitergegeben werden.
Es gilt nur für den persönlichen Gebrauch.

Etiévant et al. (1989) untersuchten Rotweine (Sechs Rebsorten) aus den drei Regionen Narbonne, Bordeaux und Angers auf ihren Gehalt an organischen Säuren. Bei der statistischen Auswertung zeigte sich, dass eine geographische Differenzierung der Rotweine möglich ist. Die Variablen mit dem höchsten Beitrag zu Unterscheidung waren 2-Hydroxyglutarsäure, Butansäure und 3-Methylbutansäure. [*62*]

Weine aus der roten Rebsorte Nebbiolo wurden von Armanino et al. (1990) untersucht, um zu zeigen, dass es möglich ist, die Herkunft der Weine anhand von Daten zum Phenolgehalt und zu den flüchtigen Verbindungen festzustellen. Die Proben stammten aus den Regionen Barolo, Barbaresco, Gattinara und Nebbiolo d'Alba, die teilweise in direkter räumlicher Nachbarschaft im Piemont liegen. Die zur Erzielung guter Klassifizierungs- und Vorhersageergebnisse wichtigsten flüchtigen Verbindungen, waren (Z)-Hex-3-en-1-ol und 2-Phenylethanol. [*11*]

Der Einfluss der Herkunft auf die Gehalte an gebundenen und freien Monoterpenen sowie C_{13}-Norisoprenoiden wurde von Marais et al. (1992) analysiert. Hierzu untersuchten die Autoren Riesling Weine aus Deutschland, Norditalien und Südafrika auf eine Vielzahl von Komponenten. Sowohl der Gesamtdatensatz der erhobenen Daten als auch Unterdatensätze erlaubten eine Klassifikation der Weine entsprechend ihrer Herkunft mit geringer Fehlerquote (mittlere Fehlerquote ca. 2 %). [*125*]

Bei der Untersuchung von Cabernet Sauvignon Weinen aus verschiedenen Regionen des Napa Valleys in Kalifornien konnten Shimoda et al. (1993) nur geringe Tendenzen zur Gruppierung von Weinen entsprechend ihrer Herkunft feststellen. Die Autoren untersuchten hierbei Weine von 20 unterschiedlichen Lagen aus sechs Weinbauregionen. Es wurden ausschließlich flüchtige Substanzen aus dem Headspace der Proben analysiert. [*188*]

Forcen et al. (1993) klassifizierten mallorquinische Rotweine und Moste anhand ihres Gehaltes an flüchtigen Verbindungen. Die untersuchten Weine wurden unter standardisierten Bedingungen aus Trauben der Rebsorten Manto Negro bzw. Callet hergestellt, die aus zwei unterschiedlichen Regionen Mallorcas stammen (zona Alta und zona Baja). Die wichtigste Rolle bei der geographischen Differenzierung der Proben spielten 2-Phenylacetat, (Z)-Hex-3-en-1-ol, 3-Methyl-1-butylacetat und (E)-Hex-2-en-1-ol. [*70*]

In spanischen Studien zu Weißweinen aus Galizien versuchten García-Jares et al. (1995), Weine aus der Region Rías Baixas von Weinen aus nahegelegenen Regionen zu differenzieren. Hierbei untersuchten sie die Weine auf flüchtige und hochflüchtige Verbindungen. Bei der statistischen Auswertung zeigte sich, dass eine Unterscheidung der

Dieses Werk ist copyrightgeschützt und darf in keiner Form vervielfältigt werden noch an Dritte weitergegeben werden.
Es gilt nur für den persönlichen Gebrauch.

Weine aus verschiedenen Regionen prinzipiell möglich ist, wobei es zu einigen Fehlklassifizierungen kam. [*77, 78*]

Riesling und Chardonnay Weine aus Ohio und Kalifornien wurden von Li und Hardy (1999) auf ihren Gehalt an organischen Verbindungen und anorganischen Elementen untersucht. Die Auswertung des Gesamtdatensatzes bzw. eines Unterdatensatzes zeigte größere Unterschiede zwischen den Rebsorten und kleinere zwischen den Regionen. Je nach Fragestellung bei der statistischen Auswertung konnte ein Großteil der Proben korrekt klassifiziert werden (zwischen 75 bis 100 %). [*113*]

Danzer et al. (1999) analysierten 165 deutsche Weine unterschiedlicher Rebsorten und Anbauregionen in Hinblick auf anorganische Inhaltsstoffe und auf Aromastoffe. Bei der geographischen Differenzierung der Weine anhand ihrer anorganischen Spurenelementgehalte konnte festgestellt werden, dass die Ergebnisse verbessert werden können, wenn die Ergebnisse der Aromastoffanalytik mit einbezogen werden. Bei einem Unterdatensatz aus 38 Weinen konnte die Herkunft für 90,2 % der Proben durch sechs Variablen korrekt festgestellt werden. Einen Beitrag hierzu lieferten neben den Elementen Ba, Si und V die organischen Verbindungen Furfural, 4-Methylpentan-1-ol und Octan-1-ol. [*45*]

Bei der Untersuchung französischer Rotweine konnten Sivertsen et al. (1999) feststellen, dass es anhand chemischer Daten möglich ist zwischen Weinen aus den Anbaugebieten Bordeaux, Burgund, Beujolais und Rhône zu differenzieren. Sie stellen fest, dass sich die chemischen Daten besser zur Unterscheidung der Weine eignen als die Ergebnisse einer sensorischen Untersuchung. Eine Vielzahl von flüchtigen Verbindungen unterschiedlicher Substanzklassen trug zur Differenzierung bei. [*194*]

Daten zum Metallgehalt, flüchtigen Verbindungen und zur phenolischen Zusammensetzung von Wein wurden von Rebolo et al. (2000) eingesetzt um Weine aus der Weinbauregion Ribeira Sacra von zwei anderen Weinbaugebieten Galiziens (Spanien) zu differenzieren. Sie stellten dabei fest, dass das Profil der flüchtigen Verbindungen der Weine sehr ähnlich war, aber gewisse quantitative Unterschiede zeigte. Die Autoren kommen zu dem Ergebnis, dass sich die flüchtigen Verbindungen nicht als Schlüsselkomponenten zur Differenzierung der Weine eignen, während Metallgehalt und phenolische Zusammensetzung der Weine als geeigneter erschienen. [*160*]

In einer weiteren spanischen Studie von Alvarez et al. (2003), gelang es den Autoren, Weine aus drei Unterregionen Valencias zu differenzieren. Hierzu wurden physikalisch-chemische Daten und Daten zu den flüchtigen Verbindungen der Weine statistisch ausgewertet. Es

Dieses Werk ist copyrightgeschützt und darf in keiner Form vervielfältigt werden noch an Dritte weitergegeben werden.
Es gilt nur für den persönlichen Gebrauch.

zeigte sich, dass eine geographische Differenzierung möglich ist, wobei eine Vielzahl der flüchtigen Verbindungen beiträgt. Nach Reduktion der Variablenanzahl konnte festgestellt werden, dass 2-Methylpropan-1-ol die höchste Diskriminierungskraft der flüchtigen Verbindungen hatte. [*7*]

Martí et al. (2004) untersuchten den Headspace spanischer Weine aus zwei Regionen in Katalonien durch direkte Überführung in ein Massenspektrometer. Bei den Proben handelte es sich um Verschnitte aus den Rebsorten Garnatxa (Grenache) und Cariñena (Carignan) in unterschiedlichen Anteilen. Die Ergebnisse der Studie zeigten, dass sich die Weine der beiden untersuchten Regionen signifikant unterscheiden. Der von den Autoren gewählte *nontarget* Ansatz sieht eine Identifizierung der für die Differenzierung verantwortlichen Verbindungen in erster Instanz nicht vor. Relevante Masse-zu-Ladungs-Verhältnisse (m/z) waren 70, 73, 88, 101 und 115. [*127*]

Mit Gaschromatographie und Flammenionisationsdetektion konnten Schreiner et al. (2007) in Weinen der Rebsorte Grüner Veltliner die Konzentrationen von 176 flüchtigen Verbindungen semiquantitativ bestimmen. Die 59 untersuchten Proben kamen aus neun österreichischen Weinbaugebieten, allerdings wurden zur Herkunftsanalyse nur 44 Weine aus 3 Gebieten herangezogen. Bei der Auswertung der erhobenen Daten, konnten je nach verwendeter statistischer Methode und betrachteter Teildatenmenge unterschiedlich gute Vorhersagen (bis zu 77 % korrekt) für die Herkunft der Proben gemacht werden. [*185*]

Vilanova et al. (2007) untersuchten den Einfluss des Terroirs auf die flüchtigen Verbindungen von zwölf Albariño Weinen aus Galizien. Ziel der Studie war es, die Weine anhand ihrer Gehalte an Primär- und Sekundäraromastoffen entsprechend ihrer Herkunft aus dem Norden bzw. dem Süden Galiziens zu trennen. Es zeigte sich, dass die Weine aus dem Norden höhere Gehalte an freien Terpenen und Acetaten aufwiesen, während die Weine aus dem Süden durch hohe Gehalte an höheren Alkoholen und Estern geprägt waren. Bei der multivariaten statistischen Auswertung clusterten Weine derselben Herkunft miteinander. [*213*]

Die Klassifizierung von Riesling Eisweinen gemäß ihrer Herkunft aus Kanada oder Tschechien anhand von Aromastoffprofilen gelang Setkova et al. (2007). Bei der statistischen Auswertung zeigte sich nicht nur eine klare Clusterung der Weine entsprechend ihrer Herkunftsländer, es konnte auch zwischen den Regionen Ontario und British Columbia in Kanada unterschieden werden. [*187*]

Aznar und Arroyo (2007) untersuchten in einer profiling Analyse spanische Rot- und Weißweine aus sieben verschiedenen Regionen Spaniens. Anhand quantitativer Daten zu 26

Dieses Werk ist copyrightgeschützt und darf in keiner Form vervielfältigt werden noch an Dritte weitergegeben werden.
Es gilt nur für den persönlichen Gebrauch.

flüchtigen Verbindungen aus unterschiedlichen Substanzklassen konnten die Autoren in einer PCA neben der klaren Differenzierung zwischen Rot- und Weißweinen auch ein herkunftsspezifisches Clustern der Weine ausmachen. [*12*]

In einer Untersuchung spanischer Weißweine konnten Jurado et al. (2008) Weine mit unterschiedlicher Herkunftsbezeichnung differenzieren. Hierzu wurden 18 flüchtige Verbindungen quantifiziert. Die Erstellung von statistischen Modellen zeigte, dass die Differenzierung der Weine entsprechend ihrer Herkunft aus vier unterschiedlichen Regionen Spanien möglich war, wobei eine Vielzahl der Variablen, insbesondere Ester, an der Diskriminierung der Proben beteiligt waren. [*98*]

Eine von Falque et al. (2008) veröffentlichte Studie befasste sich mit dem Einfluss der Herkunft auf die flüchtigen Verbindungen in Albariño Weinen. In 29 rebsortenreinen Weinen aus drei Unterregionen der Region Rías Baixas in Galizien wurden 36 flüchtige Verbindungen quantifiziert. Bei der Auswertung der Daten konnten teils deutliche Unterschiede zwischen den Weinen gefunden werden. Die multivariate statistische Auswertung zeigte, dass sich einige Substanzklassen wie beispielsweise Terpene und Alkohole besser zur geographischen Trennung der Weine eignen als andere wie zum Beispiel die flüchtigen Phenole. [*63*]

Pinotage Weine aus sieben Weinbauregionen Südafrikas wurden von Weldegergis und Crouch (2008) hinsichtlich ihres Gehaltes an 39 flüchtigen Verbindungen untersucht. Die angewendete multivariate statistische Analyse konnte keine Muster aufdecken, die zur geographischen Differenzierung der Weine geeignet wären. [*217*]

In einer Studie von Berna et al. (2009) wurden französische, australische und neuseeländische Sauvignon Blanc Weine aus sechs Regionen analysiert. Die flüchtigen Bestandteile der Weine wurden mit unterschiedlichen *targeted* (Gaschromatographie-Massenspektrometrie) und *nontarget-* (*metal oxide sensor-based electronic nose (MOS-Enose); Mass spectrometry-based electronic nose (MS-e-nose)*) Techniken untersucht. Die statistische Auswertung zeigte zunächst, dass einige Gruppen große Ähnlichkeit aufwiesen, welche daraufhin vereinigt wurden. Die so gebildeten Übergruppen konnten unabhängig von der Analysemethode differenziert werden. Bei der Zielkomponentenanalyse wurden Ethylacetat, Neroloxid, Hexan-1-ol, (E)-Hex-2-enylbutanoat, Pentylacetat, Ethylhex-4-enoat und Propyldecanoat als Verbindungen identifiziert, mit denen sich die Gruppen gut charakterisieren lassen. [*21*]

Die *MS-Enose* wurde auch von Cynkar et al. (2010) zu Differenzierung von Tempranillo Weinen aus Spanien bzw. Australien eingesetzt. Je nach eingesetztem statistischem Verfahren lag die Rate der korrekten Klassifizierungen bei mindestens 80 %. Die

Dieses Werk ist copyrightgeschützt und darf in keiner Form vervielfältigt werden noch an Dritte weitergegeben werden.
Es gilt nur für den persönlichen Gebrauch.

Analyseergebnisse zeigten, dass Informationen zur geographischen Unterscheidung der Weine im Profil der flüchtigen Verbindungen enthalten sind. Die Art der Messmethode machte es den Autoren aber unmöglich festzustellen, welche diskreten Verbindungen die Unterschiede verursachten. [*43*]

2.2.2 Sensorische Eigenschaften

Der Einfluss der Weinbergslage und speziell des Bodens auf Weine der Rebsorte Chardonnay wurde von Noble (1979) untersucht. Hierbei stellte sich heraus, dass erst nach 30monatiger Alterung signifikante sensorische Unterschiede zwischen den Lagen festgestellt werden konnten. Die sechs Monate alten Weine zeigten diese Unterschiede nicht. Ein Einfluss des Bodens konnte ebenfalls nicht beobachtet werden. [*142*]

1984 untersuchten Noble et al. (1984) 20 Rotweine aus 4 AOC-Regionen im Weinbaugebiet Bordeaux durch deskriptive Analyse. Zusätzlich analysierten sie 4 weitere Weine des Weinbaugebiets zum Vergleich. Bei der Auswertung der Ergebnisse konnte keine signifikante Varianz der Weine zwischen den Weinbaugebieten festgestellt werden. [*145*]

Eine von Noble und Shannon (1987) veröffentlichte Arbeit zu Rotweinen der Rebsorte Zinfandel konnte keinen Zusammenhang zwischen der Herkunft und den sensorischen Eigenschaften feststellen. Für die Studie wurden 24 kalifornische Weine einer deskriptiven Analyse mit sieben Geruchs- und drei Geschmacksattributen unterworfen. [*144*]

Heymann und Noble (1987, 1989) wendeten die deskriptive Analyse auf Cabernet Sauvignon Weine aus Kalifornien an. Die 21 untersuchten Weine stammten aus sieben Weinbauregionen, die vier geographischen Gruppen zugeordnet wurden. Darüber hinaus wurde jede geographische Gruppe gemäß der Winkler Skala klassifiziert. Für die deskriptive Analyse wurden zehn Geruchs- und drei Geschmacksattribute gewählt. Die Autoren stellten fest, dass sich die Weine aus kühleren Regionen sensorisch signifikant von den Weinen aus wärmeren Gebieten unterschieden. [*92, 93*]

Pinot Noir Weine der nah beieinander liegenden Weinbaugebiete Carneros, Napa und Sonoma in Kalifornien wurden von Guinard und Cliff (1987) untersucht. Die deskriptive Analyse der insgesamt 28 Weine erfolgte anhand von 11 Geruchs- und 3 Geschmacksattributen. Bei der Auswertung der Daten durch PCA konnte beobachtet werden, dass Carneros Weine einen von den Weinen der anderen Regionen separierten Cluster bilden. [*87*]

Sivertsen und Risvik (1994) untersuchten französische Rotweine aus den Hauptweinbaugebieten Bordeaux, Burgund, Beaujolais und Rhône, sowie aus kleineren Weinbaugebieten. Die Bewertungen der Prüfer in der deskriptiven Analyse anhand von 17

Dieses Werk ist copyrightgeschützt und darf in keiner Form vervielfältigt werden noch an Dritte weitergegeben werden.
Es gilt nur für den persönlichen Gebrauch.

Geruchs- und Geschmacksattribute zeigte, dass die Weine entsprechend ihrer Herkunft separierte Cluster bilden. [*195*]

In einem Experiment zu Weinen der Rebsorte Gewürztraminer stellten Reynolds et al. (1996) weinbergsspezifische, sensorische Unterschiede fest. Die Weine wurden unter standardisierten Bedingungen aus Trauben von drei verschiedenen Weinbergen hergestellt und durch deskriptive Analyse (acht Attribute) untersucht. Da für das Experiment eine Vielzahl von Einflussfaktoren wie Boden, weinbauliche Praktiken und Alter der Reben durch Auswahl geeigneter Flächen konstant gehalten wurden, müssen die sensorischen Unterschiede andere, weinbergsspezifische Ursachen haben. [*163*]

Riesling Weine aus dem Rheingau waren Gegenstand einer Veröffentlichung von Fischer et al. (1999). In einer deskriptiven Analyse wurden hierbei 20 Weine unterschiedlicher Weingüter, Weinbergslagen und Jahrgänge anhand von 4 Geschmacks- und 10 Geruchsattributen beschrieben. Die Auswertung zeigte, dass der Einfluss des Jahrgangs und des Weingutes auf die sensorische Qualität der untersuchten Weine größer war, als der der Weinbergslagen. [*69*]

Eine Studie zu Rotweinen aus den Weinbauregionen Bordeaux, Burgund, Beujolais und Rhône in Frankreich von Sivertsen et al. (1999) zeigte, dass sich insbesondere die Weine aus Bordeaux von den Weinen der anderen Regionen unterschieden. Die Untersuchung umfasste insgesamt 22 Rotweine, die von den Prüfern anhand von 17 sensorischen Attributen bewertet wurden. [*194*]

Douglas et al. (2001) charakterisierten 14 von der Niagara-Halbinsel stammende Riesling Weine. Sie stellten dabei fest, dass zwischen Weinen zweier Regionen (Beamsville Bench, Niagara Plains) innerhalb der Halbinsel signifikante sensorische Unterschiede bestehen. Von insgesamt 21 abgefragten Attributen variierten sieben signifikant zwischen den Regionen. [*57*]

Rebsortenreine Chardonnay, Garnacha und Macabeo Weine aus den Regionen Aragón und Navarra waren Gegenstand einer Arbeit von Navarro et al. (2002). Signifikante Unterschiede zwischen den beiden Regionen konnten nur für die Farbe festgestellt werden. [*141*]

Die sensorischen Eigenschaften von 76 Weinen der Rebsorte Mencía wurden von Vilanova und Soto (2005) bestimmt. Die Weinproben stammten aus fünf Unterregionen der Weinbauregion Ribeira Sacra in Gallizien, die sich hinsichtlich der klimatischen Gegebenheiten unterschieden. Bei der statistischen Auswertung der durch deskriptive Analyse (24 Attribute) erhaltenen Daten konnte gezeigt werden, dass die Weine der fünf

Dieses Werk ist copyrightgeschützt und darf in keiner Form vervielfältigt werden noch an Dritte weitergegeben werden.
Es gilt nur für den persönlichen Gebrauch.

Unterregionen drei Gruppen bilden, die sich hinsichtlich ihrer sensorischen Eigenschaften unterscheiden. [*214*]

In einer weiteren Studie zum Terroir in Kanada analysierten Schlosser et al. (2005) Chardonnay Weine von der Niagara-Halbinsel. Hierbei unterschieden sie zwischen den Regionen Bench, Lakeshore Plain und Lakeshore. Zusätzlich wurde je ein Chardonnay Wein aus Kalifornien, Frankreich und Australien untersucht. Insgesamt wurden 27 sensorische Attribute in einer deskriptiven Analyse bewertet. Subtile Unterschiede konnten die Autoren insbesondere zwischen den Weinen der Bench Region und den beiden anderen Regionen feststellen. [*181*]

Vilanova und Vilariño (2006) stellten bei ihrer Untersuchung spanischer Albariño Weine mittels deskriptiver Analyse (17 Attribute) fest, dass sich Weine aus Unterregionen der Weinbauregion Rías Baixas hinsichtlich ihrer sensorischen Eigenschaften unterschieden. [*212*]

Der Einfluss des Bodens auf die sensorischen Eigenschaften von Grenache Weinen stand im Fokus einer Arbeit von de Andrés-de Prado et al. (2007). Die Autoren stellten unter standardisierten Bedingungen Weine aus Trauben her, die aus zwei Weinbergen stammten, die sich mit Ausnahme des Bodens nur geringfügig unterschieden. Bei der sensorischen Untersuchung der Weine konnten Unterschiede festgestellt werden, die auf die unterschiedlichen Eigenschaften der Böden zurückgeführt werden können. [*49*]

Die sensorische Charakterisierung von Weinen der Rebsorte Malbec aus 7 Regionen Argentiniens war Gegenstand einer Veröffentlichung von Goldner und Zamora (2007). Beim Vergleich jeweils zweier Regionen miteinander konnten die Autoren sensorische Unterschiede feststellen. [*81*]

In der dieser Arbeit vorangehenden Dissertation beschäftigte sich Bauer (2008) bereits mit der Ausprägung der Terroirs bei deutschen Riesling Weinen. Hierzu untersuchte sie deutsche Riesling Weine der Jahrgänge 2004 und 2005 aus den Anbaugebieten Ahr, Mosel, Nahe, Pfalz und Rheinhessen. Im Fokus der Arbeit lag neben der sensorischen Differenzierung der Weine die Korrelation mit chemischen, bodenkundlichen und klimatischen Daten. Hierbei wurde auf der einen Seite eine Prägung der Weine durch das Terroir und insbesondere durch das Ausgangsgestein festgestellt. Es zeigte sich aber auch ein sehr starker Einfluss des Jahrgangs und des Weinausbaus. [*17*]

Eine Untersuchung der Terroir bezogenen Typizität von Rotweinen wurde von Cadot et al. (2010) durchgeführt. Die Autoren stellten unabhängig von der eingesetzten Methode (Quantitative Deskriptive Analyse®, Just about right analysis) fest, dass es nicht möglich ist

Dieses Werk ist copyrightgeschützt und darf in keiner Form vervielfältigt werden noch an Dritte weitergegeben werden.
Es gilt nur für den persönlichen Gebrauch.

zwischen den Weinen zweier nahgelegenen Terroirs (AOC-Regionen: Anjou-Villages Brissac und Anjou rouge) zu unterscheiden, wenn alle Weine von Winzern hergestellt werden, die in einem der beiden Terroirs angesiedelt sind. Nichtsdestotrotz konnten sie in einigen der abgefragten Attribute gewisse Differenzen zwischen den Terroirs feststellen. [*30*]

In einer derzeit im Druck befindlichen Arbeit zeigen Cadot et al. (im Druck) weitere Ergebnisse zur Terroir bezogenen Typizität von Rotweinen aus dem Weinbaugebiet Val de Loire. Die Autoren stellten in einer Umfrage fest, dass eine Vielzahl der Befragten insbesondere den Boden als wichtig für die Typizität eines Weines erachtet. Eine sensorische Untersuchung der Weine zeigte aber, dass weniger die Umweltfaktoren als technische, vor allem oenologische Faktoren einen Einfluss haben. Nichtsdestotrotz konnte eine Beziehung zwischen dem aus der Umfrage erhaltenen Terroir-Verständnis und den sensorischen Eigenschaften der Weine gefunden werden. [*31*]

2.3 Speziellere Analysetechniken zur Untersuchung von Wein

2.3.1 ^{1}H-NMR metabolomics

Unter Metabolomik (engl. metabolomics) versteht man eine Forschungsrichtung, die sich mit der vollständigen Charakterisierung kleiner, molekularer Metabolite in Zellen, Geweben, Körperflüssigkeiten oder Organismen beschäftigt [*133*]. Typische Technologien, die hierbei eingesetzt werden, stammen aus den Bereichen Gaschromatographie-Massenspektrometrie (GC-MS), Flüssigchromatographie-Massenspektrometrie (LC-MS), Kernspinresonanz-spektroskopie (NMR) und Kapillarelektrophorese-Massenspektrometrie (CE-MS) [*46*]. In den vergangenen Jahren hat sich die Metabolomik zu einem Instrument entwickelt, welches nicht nur in der Medizin und Pharmazie sondern auch in weiteren Feldern eingesetzt wird. So erfreut sie sich auch einer stetig steigenden Aufmerksamkeit unter Wissenschaftlern aus dem Lebensmittelbereich. Einen Überblick über die Hauptaufgabenfelder der Metabolomik in der Lebensmitteluntersuchung und Landwirtschaft geben Dixon et al. (2006), Wishart et al. (2008) und Cevallos-Cevallos et al. (2009) [*37, 46, 55*]. Ein wichtiger Teilbereich ist hierbei die Authentizitätskontrolle hinsichtlich der geographischen Herkunft. In der Weinforschung wurden bereits einige Studien zum ^{1}H-NMR *metabolic profiling* zur Bestimmung der geographischen Herkunft von Weinen durchgeführt. Pfälzer Riesling Weine waren bereits Gegenstand eines ^{1}H-NMR *metabolic profiling*, allerdings hinsichtlich der Differenzierbarkeit der Weine nach Qualität bzw. von Weinen der Rebsorte Gewürztraminer und nicht hinsichtlich der geographischen Herkunft [*6*]. Zur Auswertung der ^{1}H-NMR Daten werden in der Regel multivariate statistische Verfahren eingesetzt (Chemometrik).

Dieses Werk ist copyrightgeschützt und darf in keiner Form vervielfältigt werden noch an Dritte weitergegeben werden.
Es gilt nur für den persönlichen Gebrauch.

Bereits 1993 veröffentlichten Vogels et al. eine Studie zur Bestimmung der geographischen Herkunft von Weinen durch ^{1}H- sowie ^{13}C-NMR. Hierbei gelang es 53 deutsche Weißweine aus sechs Jahrgängen entsprechend der Weinbaugebiete Rheingau, Rheinhessen und Mosel-Saar-Ruwer zu differenzieren. Anhand kleiner Fehlklassifizierungsraten konnte die Eignung beider Methoden demonstriert werden. [*215*]

41 Rotweine aus Apulien wurden von Brescia et al. (2002) durch ^{1}H-NMR analysiert [*26*]. Die multivariate statistische Auswertung ermöglichte eine Separierung der Weine entsprechend ihrer Herkunft aus drei Unterregionen Apuliens. Hierbei kam es nur zu einer geringen Anzahl von Fehlklassifizierungen.

Brescia et al. (2003) untersuchten 33 Weine unterschiedlicher Rebsorten aus drei Regionen Sloweniens, sowie aus Apulien in Italien. Bei der chemometrischen Auswertung der Daten ließen sich die Weine aus Italien von den Weinen aus Slowenien differenzieren. Hierfür waren hauptsächlich NMR-Signale von Aminosäuren verantwortlich. Der Versuch die Weine entsprechend der Unterregionen Apulien bzw. Slowenien zu separieren verlief nicht zufriedenstellend. [*27*]

Durch multivariate statistische Analyse von ^{1}H-NMR-Spektren gelang es Du et al. (2007) chinesische Rotweine aus drei Weinbauregionen zu differenzieren. Den höchsten Beitrag zu den spektralen Unterschieden hatten Prolin, Glycerin, Acetat, Succinat, Malat, Citrat, Lactat, Sorbat, 3-Hydroxy-2-butanon, 2,3-Butandiol und nicht näher spezifizierte Ethylester. [*58*]

Eine Differenzierung von Weinen unterschiedlicher Rebsorten und geographischer Herkunft erreichten Son et al. (2008) durch ^{1}H-NMR. Die Autoren zeigten unter anderem, dass sich Weine der Rebsorte Cabernet Sauvignon entsprechend ihrer geographischen Herkunft (Australien, Frankreich, Kalifornien) differenzieren lassen. Insbesondere die Prolinkonzentration eignete sich zur Separierung der Weine. [*197*]

Son et al. (2009) untersuchten koreanische Trauben und aus ihnen gewonnene Weine unter anderem durch ein ^{1}H-NMR. Als Probenmaterial wurden kommerziell erhältliche Trauben von 15 Weinbergen bzw. Produzenten verwendet. Ein Teil der Trauben wurde unter standardisierten Bedingungen zu Wein weiterverarbeitet. Bei der multivariaten statistischen Auswertung stellten die Autoren fest, dass eine Differenzierung der Weine dadurch möglich ist. Die deutlichsten Konzentrationsunterschiede konnten für Lactat, Prolin, Glycerin, 2,3-Butandiol, Malat, Tartrat, Citrat und Succinat gefunden werden. Ferner zeigten die Autoren, dass die Zusammensetzung der Beerenhaut und des Beerenfleisches von der geographischen Herkunft der Weinbeeren abhängig ist, die der Kerne aber nicht. [*196*]

Dieses Werk ist copyrightgeschützt und darf in keiner Form vervielfältigt werden noch an Dritte weitergegeben werden.
Es gilt nur für den persönlichen Gebrauch.

2.3.2 GC × GC-profiling

Die in den 1990er Jahren eingeführten zweidimensionalen chromatographischen Trenntechniken *comprehensive two-dimensional gas chromatography* (GC × GC) und *comprehensive two-dimensional high-performance liquid chromatography* (LC × LC) verfügen über eine hohe Leistungsfähigkeit bei der Auftrennung komplexer Proben [*29, 115*]. Dies ist unter anderem auf die gesteigerte chromatographische Peakkapazität zurückzuführen, die Vorteile bei der Bearbeitung unterschiedlicher analytischer Fragestellungen bringen kann [*207*]. Über die Vor- und Nachteile der Trenntechniken, sowie über Anwendungsmöglichkeiten wurde bereits von verschiedenen Autoren ausführlich berichtet [*4, 42, 44, 59, 207*].

In der Weinforschung wird die GC × GC auf der einen Seite zur *targeted (multi) component* Analyse eingesetzt. In verschiedenen Arbeiten wurden unter anderem Methoxypyrazine [*173-176*], Monoterpene [*169*], Alterungsmarker [*147*] oder Ethylcarbamat [*148*] in Wein bzw. in Trauben untersucht. Auf der anderen Seite eignet sich die Methode für *nontarget profiling* bzw. *fingerprinting* Analysen. Diese wurden in der Weinanalytik bislang hauptsächlich eingesetzt um das Aromastoffprofil von Weinen unterschiedlicher Rebsorten möglichst vollständig zu erfassen [*167, 218, 219*]. Gerade *nontarget profiling* bzw. *fingerprinting* Analysen sind aber dazu geeignet deutlich komplexere Fragestellungen zu untersuchen, die sich nicht anhand einzelner Verbindungen beantworten lassen. Hierbei dienen alle in einem Chromatogramm detektierbaren Peaks, bzw. das Chromatogramm selbst („image analysis“) als „Fingerabdruck“ einer Probe, der anschließend statistisch mit den „Fingerabdrücken“ anderer Proben verglichen werden kann [*207*]. Eine Übersicht über die verschiedenen Möglichkeiten zur chemometrischen Auswertung multidimensionaler chromatographischer Daten geben Zeng et al. (2011) [*226*]. In der Lebensmittelanalytik wurden *nontarget profiling* bzw. *fingerprinting* Analysen, unter anderem zur Untersuchung der geographischen Herkunft, bereits eingesetzt [*41, 94, 209*]. Im Weinbereich wendeten Kallio et al. (2008) eine profiling Analyse an, um 62 rebsortenreine Weine entsprechend ihrer Rebsorte und geographischen Herkunft zu differenzieren [*99*]. Die multivariate statistische Analyse der zweidimensionalen Chromatogramme zeigte, dass eine geographische Differenzierung der Weine möglich ist. Während die Fehlklassifizierungsrate von Weinen aus Frankreich bei rund 14 % lag, erreichte sie bei den argentinischen Weinen 84 %. In einer Studie zu Weinen, die einer Mikrooxigenierung mit unterschiedlich hoher Sauerstoffdosage unterworfen waren, zeigten Schmarr et al. (2010), dass ein *nontarget profiling* dazu geeignet ist, die Weine zu differenzieren [*183*]. Hierbei konnte der Einfluss der Mikrooxigenierung für verschiedene flüchtige Verbindungen wie Alkohole, Ester und Aldehyde nachvollzogen

Dieses Werk ist copyrightgeschützt und darf in keiner Form vervielfältigt werden noch an Dritte weitergegeben werden.
Es gilt nur für den persönlichen Gebrauch.

werden. Darüber hinaus gelang es den Autoren zu zeigen, dass die sauerstoffbedingten Veränderungen stark von der Rebsorte abhängig waren.

2.4 Die Flaschenalterung von Weißwein

Während der Alterung von Weißweinen in Flaschen tritt eine Vielzahl von chemischen Veränderungen auf, die hauptsächlich durch den pH-Wert des Weines, die Dauer der Lagerung und die Lagerungstemperatur beeinflusst werden [*5, 158*]. Gerade Weine der Rebsorte Riesling sind bekannt dafür, dass sie während der Flaschenlagerung ein intensives Alterungsaroma ausbilden [*191, 193*]. Wichtige, das Weinaroma maßgeblich prägende Substanzen und Substanzklassen wurden bereits hinsichtlich ihres Verhaltens bei der Alterung untersucht. So ist bekannt, dass die Konzentration der flüchtigen, aromaaktiven Ester im Laufe der Alterung durch fortlaufende Esterformation und -hydrolyse ein Gleichgewicht erreicht [*5, 74, 83, 151, 156, 158, 161, 191, 193*]. Ob die Konzentration der Ester bei der Gleichgewichtseinstellung steigt oder sinkt, ist abhängig von der Ausgangskonzentration, sowie vom pH-Wert des Weines und von der Lagerungstemperatur [*120, 151*]. Die Geschwindigkeit, mit der sich das Gleichgewicht einstellt ist unter anderem von der Kettenlänge der an der Esterbildung beteiligten Carbonsäure abhängig [*151*]. Die Konzentration der Fuselalkohole, Carbonsäuren und Lactone ändert sich während der Alterung der Weine nicht oder nur geringfügig [*116, 158, 161*]. Demgegenüber steht eine grundlegende Veränderung des Terpenprofils, die einen Wandel des Aromaeindrucks von fruchtig nach gereift bedingt [*164, 191*]. Während der Gehalt der Monoterpenalkohole Linalool, Geraniol und Citronellol sinkt, steigen die Konzentrationen der vier isomeren Linalooloxide, des Neroloxids, Hotrienols, Hydroxylinalools, α-Terpineols und Hydroxycitronellols [*5, 53, 156, 158, 164, 193*]. Darüber hinaus kommt es zu einem Anstieg der Konzentration der isomeren Anhydrolinalooloxide, von 2,6,6-Trimethyl-2-vinyl-tetrahydropyran und 2,2-Dimethyl-5-(1-methylpropenyl)-tetrahydrofuran sowie 1,8-Terpin [*156, 158*]. Vielfältige und komplexe chemische Reaktionen, wie Oxidationen, säurekatalysierte Cyclisierungen und Hydratisierungen sind für diese Veränderungen verantwortlich [*5, 156, 158*]. Eine insbesondere für das Aroma älterer Riesling Wein relevante Substanzklasse sind die C_{13}-Norisoprenoide zu denen β-Damascenon, die isomeren Vitispirane und 1,1,6-Trimethyl-1,2-dihydronaphthalin (TDN) gehören [*5, 156, 158, 193*]. Es handelt sich hierbei um Produkte des Carotinoid-Abbaus, die aus unterschiedlichen glykosidisch gebundenen Vorgängern vor oder nach der Fermentation freigesetzt werden können [*156, 158*]. Eine wichtige Bedeutung kommt 1,1,6-Trimethyl-1,2-dihydronapththalin zu, welches in älteren Riesling-Weinen hauptverantwortlich für die typische Kerosinnote ist [*191*]. Aus dem Kohlehydratabbau stammen Furanderivate wie Furfural, 2-Hydroxymethyl-5-furfural und Furan-2-Carbonsäure,

Dieses Werk ist copyrightgeschützt und darf in keiner Form vervielfältigt werden noch an Dritte weitergegeben werden.
Es gilt nur für den persönlichen Gebrauch.

deren Konzentration im Laufe der Lagerung zunimmt [*156, 158, 193*]. Während ein Großteil der im Wein vorhandenen Schwefelverbindungen typische Produkte des Hefemetabolismus sind, kommt es während der Lagerung der Weine zur Bildung von Dimethylsulfid, welches auf Grund seiner geringen Geruchsschwelle zum Aroma von Weinen beiträgt [*121, 158, 191*]. In einer Studie zu Effekten der Alterung auf die Konzentration von Schwefelverbindungen in Wein, konnten Fedrizzi et al. (2007) unter anderem auch für Methionol (3-(Methylthio)-propanol) eine Zunahme während der Alterung feststellen [*64*].

Dieses Werk ist copyrightgeschützt und darf in keiner Form vervielfältigt werden noch an Dritte weitergegeben werden.
Es gilt nur für den persönlichen Gebrauch.