

Mineralwasser in unterschiedlichem Licht

Marion Egelkraut-Holtus, Shimadzu Europa GmbH, Duisburg, www.shimadzu.eu

Qualitätskontrolle mit UV-Spektroskopie

Mit 130 Litern pro Kopf und Jahr in Deutschland sind sie ein wichtiges Nahrungsmittel der täglichen Ernährung, sie liefern wichtige Mineralien und Spurenelemente, sie sind perlende oder stille Vertreter – Mineralwässer. Ihre Etiketten sind ihr Markenzeichen – und ihre Visitenkarte, denn darauf befindet sich die Information über die Inhaltsstoffe. Diese Etiketten sind eine Qualifizierung der Brunnen, aus denen das Wasser gezogen wird. Interessanterweise ist auf den Etiketten kein Tagesprüfdatum des Wassers, da die Informationen nicht schnell genug auf Etiketten gedruckt werden können. Prüft man die Aufdrucke der Flaschen, so findet sich ein mehrere Monate altes Datum von der Mineralwasseranalyse des Brunnens selber.

Trinkwasser ist eines der meist untersuchten Lebensmittel. Es ist unter ständiger Kontrolle der nationalen und europäischen Trinkwasserverordnungen. Die Kontrollen enthalten unter anderem die Analyse der Mineralien und Spurenelemente. Diese Analytik wird üblicherweise mit der Atomabsorptionsspektroskopie oder der ICP-OES Technik durchgeführt. Der totalorganische Anteil wird mittels der TOC-Technik bestimmt, Nitrat und Nitrit-Gehalte lassen sich mit UV-Spektroskopie ermitteln.

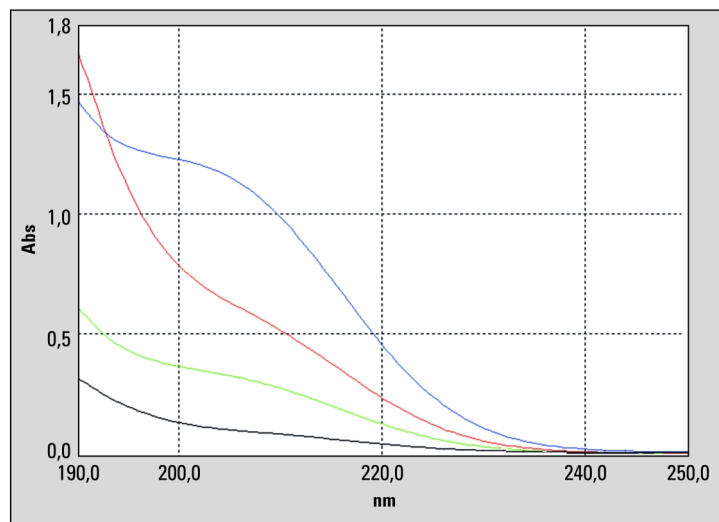


Abbildung 1: Ultraviolett-Spektren von vier verschiedenen stillen Mineralwässern

Viele Lebensmittel werden auch mit Hilfe der NIR-Spektroskopie charakterisiert, eine Messtechnik, die nicht so gut für die Identifizierung von Mineralwasser eingesetzt werden kann.

UV-Spektroskopie auch für Identifikation der Quellwässer

Die folgende Applikation zeigt, dass man mit der UV-Spektroskopie nicht nur Elemente und deren Salze bestimmen kann, sondern auch eine einfache Identifikation der Quellwässer durchführen kann. Wasser aus unterschiedlichen Quellen unterscheiden sich, und dieser Unterschied wird mit der Absorptionsspektroskopie und deren Spektren im UV als auch NIR gezeigt. Da Mineralwasser für den sichtbaren Bereich transparent ist, wurde das Augenmerk auf den ultravioletten und nahinfraroten Bereich gelegt.

Die Analyse im ultra-violetten Bereich

Die Spektren von vier gekauften stillen Wässern wurden im ultravioletten Bereich von 190-250 nm mit dem UV-3600 Spektralphotometer gemessen. Das Ergebnis ist in Abbildung 1 zu sehen. Eine 10 mm dicke Quarzküvette wurde für die Messungen eingesetzt und de-ionisiertes Wasser als Referenz dazu gemessen. Vergleicht man die Spektren untereinander, so erkennt man einen deutlichen Unterschied in den Kurven. Diese Unterschiede sind auf die Individualität der Wässer zurückzuführen.

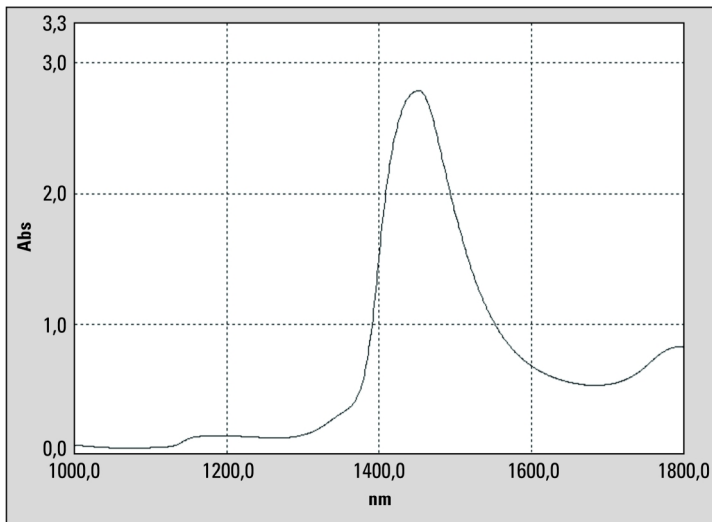


Abbildung 2: Nahinfrarot-Spektren von vier stillen Mineralwässern, gemessen in einer 2mm dicken Küvette

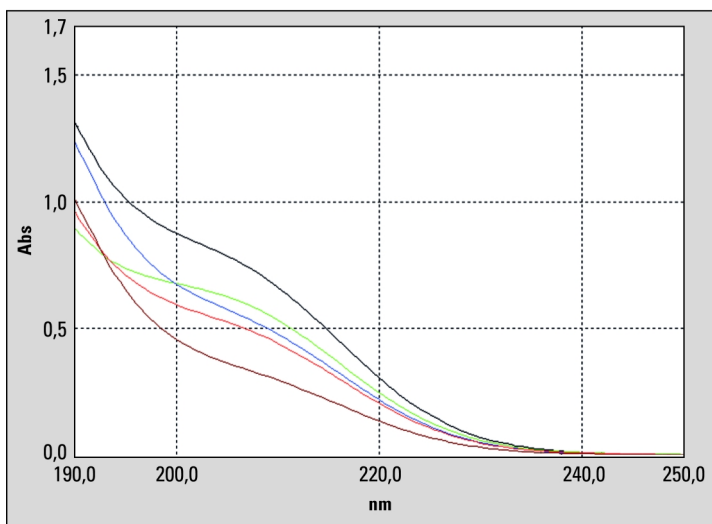


Abbildung 3: Fünf UV-Absorptionsspektren von Mischungen aus drei Mineralwässern, die verschiedenen Anteile sind in Tabelle 1 wiedergegeben; Rot=Standard 1, Blau=Standard 2, Schwarz=Standard 3, Grün=Standard 4, Braun=Standard 5

Die Standards der Kalibration wurden durch Mischung von drei Mineralwässern hergestellt (Tabelle 1). In Abbildung 3 sind fünf UV-Spektren dieser Standards dargestellt.

Wasser im Nahinfrarot

Die gleichen Wässer zeigten in dem nahinfraroten Bereich von 1000 - 1800 nm keine Individualitäten für das Wasserabsorptionssignal bei 1440 nm (Abbildung 2). Die Schichtdicke zur Messung der Wässer wurde mit 2 mm gewählt. Die Ursache ist die starke Absorption von Wasser im NIR-Bereich, wie es in Abbildung 2 zu erkennen ist. Dieser Wert befindet sich im linearen Messbereich des Geräts. Die Unterschiede im Wasser lassen sich im NIR nicht darstellen, da der NIR-Bereich von -CH, -OH, -NH Schwingungen repräsentiert wird. Mineralien sind anorganischer Natur.

Multiple Lineare Regression

Um die Behauptung zu verifizieren, dass sich im ultravioletten Bereich Unterschiede zeigen, wurde eine Multiple Lineare Regression an vier analytischen Wellenlängen im UV-Bereich durchgeführt. Es wurden die Wellenlängen 200, 205, 210, 215 nm aus gesucht und eine Kalibration auf-

Standard	A Wasser (%)	B Wasser (%)	C Wasser (%)
1	20	30	50
2	50	20	30
3	30	50	20
4	0	50	50
5	50	0	50

Tabelle 1: Mischverhältnisse für die Messungen mit dem UV-3600 von drei unterschiedlichen stillen Mineralwässern (siehe Abbildung 3)

Probe (theoretisch)	A Wasser (%)	B Wasser (%)	C Wasser (%)
1	10	80	10
2	30	30	40
3	20	60	20
Probe (berechnet)	A Wasser (%)	B Wasser (%)	C Wasser (%)
1	10,36	79,90	9,72
2	30,12	29,96	39,92
3	20,41	59,68	19,91

Tabelle 2: Das Ergebnis einer Modellrechnung in Bezug auf vier analytische Wellenlängen und drei Proben

Das Ergebnis aus diesem einfachen Mehr-Komponenten-Analysemodell (Tabelle 2) zeigt deutlich, dass die Mineralwässer unterscheidbar sind. Zu bemerken ist, dass auch im Bereich der UV-Spektroskopie von 190 bis 250 nm eine Mehrkomponentenanalyse anwendbar ist. Dies setzt natürlich eine Instrumententechnik voraus, die in diesem Bereich noch zuverlässige Messungen zulässt. Das Shimadzu UV-VIS-NIR Spektrophotometer UV-3600 ist besonders dazu geeignet.