

En el presente trabajo se ha evaluado la utilización de la espectroscopia de infrarrojo medio (FT-IR) como herramienta rápida para la predicción de los diferentes compuestos fenólicos (antocianos y polifenoles totales) en extractos de uva durante la madurez fenólica. Para ello se utilizó un total de 120 muestras obtenidas por el método ITV Estándar de 8 variedades de uva tinta (Pinot Noir, Merlot, Tempranillo, Syrah, Garnacha, Cariñena, Monastrell y Cabernet sauvignon) en diferentes estadios de maduración. Las muestras se analizaron en modo absorbancia en el rango de 1000-3000 cm^{-1} . El método de referencia empleado fue la espectroscopia UV-Vis (resultados de las absorbancias a 520 nm y 280 nm de los extractos). Los datos colorimétricos del 75% de las muestras se emplearon en la construcción de diferentes modelos de calibración multivariante mediante regresión por mínimos cuadrados parciales (PLS) con validación cruzada. Se realizaron diferentes tratamientos a los espectros con objeto de mejorar las predicciones de los modelos: normalizado, corrección de la línea de base, corrección por MSC (*Multiplicative Scattering Correccion*), 1ª derivada, 2ª derivada (y combinación entre algunos de ellos). Se compararon con las calibraciones construidas a partir de los espectros originales. Las calibraciones se evaluaron teniendo en cuenta el número de factores empleados, el coeficiente de correlación, el error estándar de calibración (% SEC) y RPD (*residual predictive deviation*). El resto de los datos (25% de las muestras) se empleó en la evaluación de la capacidad predictiva de las calibraciones mediante el error estándar de predicción (% SEP). Los coeficientes de correlación que se obtuvieron en la predicción de antocianos y polifenoles totales fueron satisfactorios ($R^2 > 0.90$), con valores de RPD superiores a 3, lo cual indica que son calibraciones robustas. La aplicación de los diferentes tratamientos sobre los espectros no evidenció una mejora significativa sobre los modelos construidos con los espectros originales. Se concluyó que la espectroscopia de infrarrojo medio se puede emplear como un método analítico rápido en la predicción de los diferentes compuestos fenólicos de las uvas tintas y facilitar al enólogo información sobre su estado de madurez en poco tiempo.

Palabras clave: FT-IR, calibración multivariante, PLS, madurez fenólica, antocianos, polifenoles.

Este proyecto ha sido financiado por el MEC (proyecto AGL 2003-04995).