

Indice

Agradecimientos	5
Índice de figuras	10
Índice de cuadros	13
Publicaciones ISI a la fecha.....	14
Resumen general.....	15
Abstract.....	17
Capítulo Uno.....	19
1 Análisis de metales mayoritarios en vinos chilenos mediante espectrometría de absorción atómica.	20
1.1 Resumen	20
1.2 Introducción	21
1.3 Materiales y métodos	23
1.3.1 Muestras de vinos.....	23
1.3.2 Reactivos y soluciones	24
1.3.3 Preparación de las muestras de vino.....	24
1.3.4 Análisis de metales.....	25
1.3.5 Análisis de datos.....	26
1.4 Resultados y discusión	26

1.4.1	Análisis de absorción atómica.....	26
1.4.2	Contenido de metales de acuerdo a los cultivares.....	28
1.4.3	Contenido de metales de acuerdo al área de origen	31
1.4.4	Análisis de componentes principales	32
1.5	Conclusiones	34
1.6	Referencias.....	35
Capítulo Dos.....		40
2	Efecto del momento de descube sobre la concentración de metales mayoritarios, contenido fenólico y el color en vino tinto en Vitis Vinífera cultivar País	41
2.1	Resumen	41
2.2	Introducción	43
2.3	Materiales y Métodos	46
2.3.1	Vinificación y tratamientos	46
2.3.2	Mineralización y análisis de metales.....	47
2.3.3	Cuantificación de compuestos fenólicos y análisis de color	48
2.4	Resultados y discusión	49
2.4.1	Metales	49
2.4.2	Compuestos fenólicos y color	50

2.5	Conclusiones	56
2.6	Referencias	58
Capítulo Tres		61
3	Estudio electroquímico del efecto de metales de transición y bisulfito sobre la oxidabilidad de ácido cafeico, catequina, ácido gálico y quercetina.	62
3.1	Resumen	62
3.2	Introducción	64
3.3	Material y Métodos	67
3.3.1	Soluciones modelo y tratamientos.....	67
3.3.2	Condiciones experimentales.....	68
3.4	Resultados y discusión	68
3.5	Conclusiones	76
3.6	Referencias	77
Capítulo Cuatro.....		80
4	Discriminación varietal y de origen en vinos chilenos a partir de su composición de metales e información espectroscópica.	81
4.1	Resumen	81
4.2	Introducción	83
4.3	Materiales y métodos	86

4.3.1	Muestras de vino	86
4.3.2	Análisis de metales.....	86
4.3.3	Análisis ESI-FT MS	86
4.3.4	Análisis quimiométrico	87
4.4	Resultados y Discusión	88
4.4.1	Análisis discriminante de vinos blancos de acuerdo al valle de origen y sus cultivares.....	90
4.4.2	Análisis discriminante de vinos tintos de acuerdo al valle de origen y sus cultivares	94
4.5	Conclusiones	99
4.6	Referencias.....	101
	Anexos.....	106

Anexo 1. Analysis of major metallic elements in Chilean wines by atomic absorption spectroscopy. *Ciencia e Investigacion Agraria* (2010) 37:77-85

Anexo 2. Varietal discrimination of Chilean wines by direct injection mass spectrometryanalysis combined with multivariate statistics. *Food Chemistry* (2012) 131: 692-697

Índice de figuras

Figura 1.1. Concentración de los elementos metálicos mayoritarios de acuerdo a los cultivares analizados.....	30
Figura 1.2. Concentración de los elementos metálicos mayoritarios de acuerdo al valle de origen.....	33
Figura 1.3. Peso de los primeros dos componentes para cada elemento metálico analizado por espectrometría de absorción atómica en vinos chilenos (□) vinos blancos; (■) vinos tintos.....	34
Figura 2.1. Cambios en la concentración (ug/g) de Zn (■), Cu (■) y Fe (■) en vinos cv. País como resultado de los distintos tiempos de descube (4, 9 y 20 días). 49	49
Figura 2.2. Variación de los porcentajes de color debidos a fenómenos de: copigmentación (negro), antocianinas libres (gris oscuro) y pigmento polimérico libre (gris claro) en el cv. País en función del tiempo de maceración: (a) 4 días, (b) 9 días y (c) 20 días. DS ± 2%.....	52
Figura 2.3. Análisis de componentes principales, contribución de las variables analizadas en cada tratamiento de momento de descube: (■) 4, (■) 9 y (■) 20 días. PPL: pigmentos poliméricos largos; Cu: cobre total; % Ant Libres: porcentaje de color debido a antocianinas libres; % Pig pol: porcentaje de color debido a pigmentos poliméricos; Zn: zinc total; Fe: hierro total; PPC: pigmentos poliméricos cortos; % Copig: porcentaje de color debido a fenómenos de copigmentación; Ant: Antocianinas totales; FT Folin: fenoles totales medidos por el método de Folin Ciocateau y Tan: taninos totales.....	55

Figura 2.4. Estructura molecular del complejo M-cianidin-3-glucósido (M, metal) (R, glucósido) [8].	56
Figura 3.1. Polifenoles usados en los análisis: a) ácido cafeico, b) (+)catequina, c) ácido gálico y d) quercetina.	68
Figura 3.2. Voltamogramas de: a) ácido cafeico, b) ácido cafeico más Fe-Cu, c) ácido cafeico más SO ₂ y d) ácido cafeico más Fe-Cu y SO ₂ . Velocidad de barrido 0,1 Vs ⁻¹ .	69
Figura 3.3. Voltamogramas de: a) catequina, b) catequina más Fe-Cu, c) catequina más SO ₂ y d) catequina más Fe-Cu y SO ₂ . Velocidad de barrido 0,1 Vs ⁻¹ .	71
Figura 3.4. Voltamogramas de: a) ácido gálico, b) ácido gálico más Fe-Cu, c) ácido gálico más SO ₂ y d) ácido gálico más Fe-Cu y SO ₂ . Velocidad de barrido 0,1 Vs ⁻¹ .	72
Figura 3.5. Voltamogramas de: a) ácido cafeico, b) ácido cafeico más Fe-Cu, c) ácido cafeico más SO ₂ y d) ácido cafeico más Fe-Cu y SO ₂ . Velocidad de barrido 0,1 Vs ⁻¹ .	73
Figura 3.6 Gráficas de cajas de los fenoles usados en los análisis voltamétricos, las cajas representan la carga (Q) en μC involucrada en los procesos de oxidación de cada fenol, se ha restado la carga correspondiente al voltamograma base.	75

Figura 4.1. Ejemplos de los espectros de masas obtenidos de los cultivares blancos (a) Chardonnay y (b) Sauvignon blanc y cultivares tintos (c) Cabernet Sauvignon, (d) Carménère, (e) Pinot noir, y (f) Syrah.92

Figura 4.2. Análisis de componentes principales para la discriminación de vinos blancos por tipo de variables usadas: (a) valle usando metales, (b) variedad usando metales, (c) valle usando iones m/z , (d) variedad usando iones m/z , (e) valle usando metales e iones m/z y (f) variedad usando metales e iones m/z . Las gráficas están hechas en función del valle de origen: Casablanca (círculo) y Maule (triángulo); y su variedad: Chardonnay (círculo) y Sauvignon blanc (triángulo).93

Figura 4.3. Análisis de componentes principales para la discriminación de vinos blancos por tipo de variables usadas: (a) valle usando metales, (b) variedad usando metales, (c) valle usando iones m/z , (d) variedad usando iones m/z , (e) valle usando metales e iones m/z y (f) variedad usando metales e iones m/z . Las gráficas están hechas en función del valle de origen valle de origen: Casablanca (círculo), Colchagua (triángulo), Elqui (cruz), Itata (equis), Maipo (rombo) y Maule (triángulo invertido); y variedad: Carménère (círculo), Cabernet Sauvignon (triángulo), Pinot noir (cruz) y Syrah (equis).97

Índice de cuadros

Cuadro 1.1. Muestras de vino usadas para los análisis de abundancia de elementos metálicos (K, Mg, Ca, Na, Fe y Zn) ordenadas por región vinícola chilena.	23
Cuadro 1.2. Condiciones analíticas para el análisis de abundancia de minerales en vinos chilenos mediante análisis con espectrometría de absorción atómica.	26
Cuadro 1.3. Resumen de las concentraciones de los elementos metálicos analizados (K, Mg, Ca, Na, Fe y Zn) en las muestras de vinos analizadas.	29
Cuadro 2.1. Contenido fenólico de los vinos sometidos a distintos momentos de descube.	50
Cuadro 2.2. Porcentajes de los tres primeros componentes del análisis de componentes principales de las variables analizadas: concentración de metales, contenido fenólico y color.	54
Cuadro 4.1. Muestras de vino usadas para la discriminación varietal y por valle. La descripción está ordenada por año de vendimia y valle de origen.	87
Cuadro 4.2. Porcentaje acumulados de los primeros tres componentes al utilizar tres grupos diferentes de variables para la discriminación de vinos blancos: sólo cationes metálicos, sólo iones m/z y cationes metálicos con iones m/z en conjunto.	94
Cuadro 4.3. Porcentaje acumulados de los primeros tres componentes al utilizar tres grupos diferentes de variables para la discriminación de vinos tintos: sólo cationes metálicos, sólo iones m/z y cationes metálicos con iones m/z en conjunto.	99

Publicaciones ISI a la fecha

1. Varietal discrimination of Chilean wines by direct injection mass spectrometry analysis combined with multivariate statistics.

Evelyn Villagra, Leonardo S Santos, Boniek Gontijo Vaz, Marcos N. Eberlin, V. Felipe Laurie.

2012

Food Chemistry 131: 692-697.

2. Analysis of major metallic elements in Chilean wines by atomic absorption spectroscopy

V. Felipe Laurie, Evelyn Villagra, Jaime Tapia, Jorge Eduardo S. Sarkis, Marcos A. Hortellani.

2010

Ciencia e Investigacion Agraria 37:77-85