

KLASIFIKIMI I VERËRAVE BAZUAR NË SPEKTROSKOPINË INFRA TË KUQE
E KOMBINUAR ME ANALIZËN PCA

TEMA PËR GRADËN BACHELOR I SHKENCËS NË INXHINIERI DHE
TEKNOLOGJI USHQIMORE

NGA

FJOLLA HAZIRI



UNIVERSITETI "ISA BOLETINI" MITROVICË
FAKULTETI I TEKNOLOGJISË USHQIMORE
DEPARTAMENTI I INXHINIERI DHE TEKNOLOGJI USHQIMORE

MITROVICË

MAJ, 2024

CLASSIFICATION OF WINES BASED ON INFRARED SPECTROSCOPY
COMBINED WITH PCA ANALYSIS

THESIS FOR THE DEGREE OF BACHELOR OF SCIENCE IN FOOD
ENGINEERING AND TECHNOLOGY

BY

FJOLLA HAZIRI



UNIVERSITY "ISA BOLETINI" MITROVICA
FACULTY OF FOOD TECHNOLOGY
DEPARTMENT OF FOOD ENGINEERING AND TECHNOLOGY

MITROVICË

MAY, 2024

KLASIFIKIMI I VERËRAVE BAZUAR NË SPEKTROSKOPINË INFRA TË KUQE E
KOMBINUAR ME ANALIZËN PCA

TEMA E PREZANTUAR

NGA

FJOLLA HAZIRI

NË

DEPARTAMENTIN E INXHINIERI DHE TEKNOLOGJI USHQIMORE

NË PLOTËSIMIN E PJESSHËM TË OBLIGIMEVE PËR TË FITUAR GRADËN BACHELOR I
INXHINIERISË DHE TEKNOLOGJISË USHQIMORE

MAJ, 2024



UNIVERSITETI "ISA BOLETINI" MITROVCË
FAKULTETI I TEKNOLOGJISË USHQIMORE
PROGRAMI: Inxhinieri dhe Teknologji Ushqimore

Aprovuar prej komisionit:

_____ Kryetar
Prof.dr. Aziz BEHRAMI

_____ Mentor
Prof.asoc.dr. Fatos REXHEPI

_____ Anëtar
Ass.dr. Malësore PLLANA

Data e aprovimit: _____

CLASSIFICATION OF WINES BASED ON INFRARED SPECTROSCOPY COMBINED WITH
PCA ANALYSIS

A THESIS PRESENTED

BY

FJOLLA HAZIRI

IN

DEPARTMENT OF FOOD ENGINEERING AND TECHNOLOGY

IN PARTIAL FULFILLMENT OF THE REQUIREMENT FOR THE DEGREE OF MASTER OF
SCIENCE IN ENVIROMENTAL PROTECTION ENGINEERING

MAY,2024



UNIVERSITY "ISA BOLETINI" MITROVICA
FACULTY OF FOOD TECHNOLOGY
DEPARTMENT OF FOOD ENGINEERING AND TECHNOLOGY

Approved from Commission:

_____ Chairman
Aziz BEHRAMI, Prof.dr.

_____ Mentor
Fatos REXHEPI Prof.asoc.dr

_____ Member
Malësore PLLANA, Ass.dr.

Date of approval: _____

FALENDERIM

Në rastin e diplomimit tim, do të doja të shpreh një falenderim të thellë për të gjithë ata që kanë qenë pjesë e këtij udhëtimi të mrekullueshëm. Së pari, dëshiroj të falënderoj familjen time për mbështetjen e pakursyer dhe inkurajimin gjatë gjithë kësaj kohe. Juve, prindërve dhe vëllezërve të mi, ju detyrohem për besimin që keni treguar ndaj mua dhe për të gjithë përkrahjen tuaj.

Gjithashtu, dua të falënderoj mentorët dhe profesorët e mi, që më kanë udhëhequr dhe më kanë inkurajuar të ndjek pasionin tim për dijen dhe të arratisjes së dijes. Me ndihmën tuaj të mrekullueshme dhe mësimet e vlefshme, kam arritur të zhvilloj një përkatësi dhe një kuptim të thellë të fushës sime të studimit.

Një falënderim i veçantë i takon edhe shoqërisë time të dashur dhe miqve të ngushtë. Juve, për qëndrueshmërinë dhe përkrahjen e vazhdueshme gjatë këtij rrugëtimi. Nga bisedat e zgjuara deri te momentet e përbashkëta të gëzimit, ju keni qenë burim i pafund i motivimit dhe frymëzimit për mua.

Sot, siç marr diplomën time, ju falënderoj të gjithë për pjesën tuaj në suksesin tim. Ky është një moment i rëndësishëm për mua, dhe juve i detyrohem për pjesën tuaj në arritjen time. Faleminderit për të qenë pjesë e kësaj udhëtimi të mrekullueshëm drejt suksesit.

ABSTRAKTI I PUNIMIT

Klasifikimi i verërave bazuar në spektroskopinë infra të kuqe e kombinuar me analizën PCA

nga

Fjolla Haziri

Bachelor i shkencës në Inxhinieri dhe Teknologji Ushqimore

Fakulteti i Teknologjisë Ushqimore, Mitrovicë, 2024

Prof. Asoc. Fatos Rexhepi, Mentor

Pijet alkoolike tradicionale të fermentuara janë vendase në një zonë të caktuar dhe përgatiten nga banorët vendas duke përdorur teknika të vjetra dhe lëndë të para të disponueshme në vend. Objektivi kryesor i kësaj pune ishte përcaktimi i drejtpërdrejtë i etanolit në pijet alkoolike tradicionale të fermentuara gjegjesisht vera duke përdorur spektroskopinë infra të kuqe e kombinuar metoden multivaribile PLSR duke verifikuar qëndrueshmërinë e modeleve të kalibrimit dhe për të vlerësuar cilësinë e pijeve.

Niveli i përcaktimit të etanolit në pijet alkoolike tradicionale të fermentuara në tregun vendor u bë duke përdorur spektroskopinë infra të kuqe ne regjionin e mesëm me regresion parcial PLSR. Kompletet e kalibrimit dhe spektri i mostrave reale u mblodhën me 32 skanime nga 600-4000 cm^{-1} . Një total prej 5 standardesh sintetike me përbërje etanol te deklaruar sipas prodhuesve (12–17 %) u përdorën për të ndërtuar dhe vërtetuar modelet. U vertetua regjioni me karakteristika me te mira te etanolit bazuar ne etanolin e paster dhe rezultoi se regjioni me I pranueshem eshte nga 100-1300 cm^{-1} . U verifikuan një numër i madh i para-trajtimeve, por para-trajtimi më i mirë ishte perdorimi I spektrave normale ne krahesim me ata derivative.

Modeli u zbulua se kishte koeficientët më të lartë të përcaktimit për kalibrimin dhe vlefshmërinë e kryqëzuar (0,91) dhe gabimin mesatar katror të parashikimit [0,1% (ë/ë)]. Për rëndësinë praktike, vlerat e parashikuara MIR-PLS u krahasuan me vlerat e deklaruara sipas prodhuesve. Vlerat e parashikuara të modelit u gjetën të jenë në përputhje të shkëlqyer me vlerat e deklaruara. Bazuar në përqindjen e marrë të rezultateve shihet se efektet e matricës së mostrave nuk ishin të perfillshme.

Teknika e propozuar, FTIR-PLSR në regjionin spektral $1000-1300\text{ cm}^{-1}$ u gjet e përshtatshme për të përcaktuar sasinë e etanolit në pijet alkoolike të fermentuara siç është vera. Ndër vererat e studiuara, përmbajtja mesatare e etanolit varionte nga 12-17% (v/v). Marsala u zbulua se kishte përmbajtjen më të lartë të etanolit ndërsa Cabernet kishte përmbajtjen më të vogël të etanolit. Metoda e zhvilluar ishte e thjeshtë, e shpejtë, e saktë dhe e saktë. Për më tepër, nuk kërkohej fare përgatitja e mostrës. Megjithatë, duhet theksuar se procedura aktuale ndoshta nuk është e përdorshme për qëllime rregullatore (p.sh. kontrollimi i etiketimit).

ABSTRACT OF THE THESIS

Classification of wines based on infrared spectroscopy combined with PCA analysis

by

Fjolla Haziri

Bachelor of Science in Food Engineering and Technology

Faculty of Food Technology, Mitrovica, 2024

Prof.Asoc. Fatos Rexhepi, Mentor

Traditional fermented spirits are indigenous to a particular area and are prepared by local people using age-old techniques and locally available raw materials. The main objective of this work was the direct determination of ethanol in traditional fermented alcoholic beverages, namely wine, using infrared spectroscopy combined with the multivariable PLSR method, verifying the stability of the calibration models and to evaluate the quality of the beverages.

The determination of the level of ethanol in traditional alcoholic beverages fermented in the local market was done using infrared spectroscopy in the middle region with PLSR partial regression. Calibration sets and spectra of real samples were collected with 32 scans from 600–4000 cm^{-1} . A total of 5 synthetic standards with ethanol composition declared by the manufacturers (12–17 %) were used to construct and validate the models. The region with the best characteristics of ethanol based on pure ethanol was verified and it turned out that the most acceptable region is from 100-1300 cm^{-1} . A large number of pre-treatments were verified, but the best pre-treatment was the use of normal rather than derivative spectra. The model was found to have the highest coefficients of determination for calibration and cross-validation (0.91) and root mean square error of prediction [0.1% (\ddot{e}/\ddot{e})]. For practical relevance, the MIR-PLS predicted values were compared with the declared values according to the manufacturers. The model predicted values were found to be in excellent agreement with the declared values. Based on the obtained percentage of results, it can be seen that the effects of the sample matrix were not significant.

The proposed technique, FTIR-PLSR in the spectral region 1000-1300 cm^{-1} was found suitable to determine the amount of ethanol in fermented alcoholic beverages such as wine. Among the wines studied, the average ethanol content ranged from 12-17% (v/v).

Marsala was found to have the highest ethanol content while Cabernet had the least ethanol content. The developed method was simple, fast, accurate and precise. Furthermore, no sample preparation was required at all. However, it should be noted that the current procedure is probably not usable for regulatory purposes (eg label control).

PËRMBAJTJE:

FALENDERIM.....	iii
ABSTRAKTI I PUNIMIT.....	iv
ABSTRACT OF THE THESIS.....	vi
PËRMBAJTJA.....	viii
LISTA E TABELAVE.....	x
LISTA E FIGURAVE.....	xi
LISTA E SHKURTESAVE.....	xiii
KAPITULLI 1	
1. Hyrje.....	1
KAPITULLI 2	
2. Njohhuri të përgjithsme të verës.....	2
2.1 Kimia e verës.....	2
2.1.1 Karbohidratet.....	3
2.1.2 Polisakaridet.....	5
2.1.3 Etanoli.....	7
2.1.4 Acidet.....	8
2.1.5 Komponimet fenolike.....	11
2.1.6 Fenoliciteti i verës dhe impakti shëndetësor.....	11
2.1.7 Ngjyra e verës.....	12
2.1.8 Aroma dhe shija e verës.....	13
2.2 Parametrat fiziko-kimik.....	14
2.2.1 Vlera e pH.....	14
2.2.2 Dendësia.....	14
2.3 Spektroskopia infra e kuqe.....	15
2.3.1 Parimi i punës i Spektroskopisë IK(FTIR).....	17
2.3.2 Analiza statistikore.....	18
2.4 Justifikimi i hulumtimit.....	19
2.5 Hipotezat dhe pyetjet e hulumtimit.....	19

KAPITULLI 3

3. Metodologjia.....	20
3.1 Aparatura dhe pajisjet e përdorura.....	20
3.1.1 Materialet dhe reagjentët e përdorur.....	20
3.1.2 Përgaditja e mostrave për analizën me FT-IR.....	21
3.2 Ecuria e punës eksperimentale.....	21

KAPITULLI 4

4. Diskutimi.....	29
-------------------	----

KAPITULLI 5

5. PËRFUNDIME.....	31
CONCLUSION.....	32
Referencat.....	33

LISTA E TABELAVE

Tabela 1: Abosrbimet karakteristike IR të disa grupeve funksionare.....	16
Tabela 2: Vererat e testuara per nivelin e alkoolit dhe te krahesuara me alkoolin e deklaruar ne ato mostra.....	27
Tabela 3: Parametrat fiziko-kimik te vererave.....	28

LISTA E FIGURAVE

Figura 1. Projektionii i Fischerit për një karbon tetraedrik.....	3
Figura 2. Projektioni Fischer i aldehidit (R)=glicerik.....	4
Figura 3. Glukozë (grupi karbonilik në krye).....	4
Figura 4. Celuloza.....	5
Figura 5. Amiloza.....	6
Figura 6. Amilopektina.....	6
Figura 7. Glikogjeni dhe lidhjet 1-4 dhe 1-6.....	7
Figura 8. Acidi Kolik.....	9
Figura 9. Acidi propanoik,Acidi metil-4-propanoik,Acidi etil-3-metil-6-oktanoik.....	10
Figura 10. Acidi trans-hidroksi-4-ciloheksankarboksilik,Acidi ciklopentanokarboksilik.....	10
Figura 11: Krahesimi i Spektrave IK te mostrave te veres me përmbajtje te ndryshme te alkoolit.....	22
Figura 12. Krahesimi i spektrit IK te alkoolit te pastër dhe mostrën e veres me alkool 17 %.....	22
Figura 13. Krahasimi i spektrit bazë IK dhe atyne të derivuar te alkoolit te pastër.....	23
Figura 14. Krahasimi i spektrit IK te derivuar ne rendin 1 per etanolin e pastër dhe mostrën e verës.....	23
Figura 15. Krahesimi i spektrit IK te derivuar ne rendin 2 per etanolin e pastër dhe mostrën e verës.....	24
Figura 16. Kahasimi i spektrit të plotë në analizën kemometrike PCA.....	24
Figura 17. Krahasimi 3D i PCA për spektrin e plotë.....	25
Figura 18. PCA e formës 3D me 3 parametra vetëm për regjionin 950-1550 cm^{-1}	25

Figura 19. Lakorja e kalibrimit bazuar në spektrin IK të mostrave të verës mr përmbajtje të caktuar të alkooli vetëm në regjionin 950-1560 cm-1.....	26
Figura 20. Lakorja e probalitetit të rezultateve bazuar në gabimin e mundshëm.....	26

LISTA E SHKURTESAVE

PCA.....	Principal Component Analysis
IK.....	Infra e Kuqe
FTIR.....	Fourier Transform Infrared
PLSR.....	Partial Least Squares Regression
UIBM.....	Universiteti “Isa Boletini” Mitrovicë
ATR.....	Average True Range

KAPITULLI I

1. HYRJJE

Vera është rezultat i fermentimit të rrushit dhe është prodhuar mbi mijëra vite në shumë pjesë të ndryshme të botës. Prodhimi i tij është një process relativisht i thjeshtë që mund të kryhet edhe pa ndërhyrjen njerëzore. Kërkesa e vetme do të ishte prania e rrushit dhe majasë, dhe në kushte të favorshme mund të ndodh një fermentim spontan ndodh konvertimi i sheqerit në rrush në alkool, dioksid karboni dhe nxehtësi. Megjithatë, vera cilësore nuk është detyrë e lehtë. Për këtë arsye, shqetësimi i verërave përreth bota me kalimin e viteve është për të kontrolluar procesin e fermentimit, por edhe për të gjetur mënyra për të dhënë karakteristikat unike të verërave të tyre për t'i bërë ato të dallueshme.

Kategorizimet kryesore të verërave kanë të bëjnë me ngjyrën e verës që rezulton dhe mënyrën që prodhohet, pra ka kategori të ndryshme sipas sasisë së CO₂ dhe sheqerit. Duke pasur parasysh faktin se sipërfaqja totale botërore e mbjell me varietetet e rrushit përvitin 2017 vlerësohet të jetë 7.6mHa dhe se rrushi është një grup kulturash që janë të lidhura ngusht me nocionin terroir i cili përfshinë së si klima, toka dhe praktikat bujqësore të një rajoni të caktuar ndikojnë në shijen e produktit final, ekzistojnë dhe klasifikime gjeografike me një rëndësi të tillë për tregun që mund të ndryshojë edhe çmimin përfundimtar të verës.

Prodhimi i verës së bardhë është më i thjeshtë si procedurë dhe përbëhet nga pesë hapa: vjellja, shtypja, vendosja, fermentimi dhe amballzashi.

Verë është një përzierje komplekse e disa qindar përbërjeve, shumë prej të cilave luajnë një rol të rëndësishëm në cilësinë e tij edhe pse janë të pranishme në përqëndrime të ulëta.

Në përgjithësi, pavarësisht nga ngjyra e saj, vera përbëhet nga mesatarisht 86% ujë, 12% etanol, glicerinë, polisaharide dhe elemente të tjera gjurmë 1%, acidet 0,5% dhe komponimet e avullueshme 0,5%.

KAPITULLI II

2.NJOHURI TË PËRGJITHSHME TË VERËS

Vera mund të përkufizohet si lëngu zakonisht i fermentuar i një produkti bimor (si fruta) i përdorur si një pije. Në shumë vende verërat janë prodhuar nga kohra të lashta nga të gjitha mënyra të materialeve bimore dhe jo vetëm nga frutat. Shndërrimi i lëndëve të para ushqimore në produkte të përfunduara të fermentuara është shpesh konsiderohet si një nga shembujt më të mirë të përpunimit të "vlerës së shtuar". Nëse ky është rasti, atëherë ndoshta asnjë proces apo produkt tjetër nuk e ilustron këtë më shumë sesa fermentimi i rrushit në verë. Prodhimi i verës mbështetet shumë në mikrobiologjinë dhe biokiminë moderne, tradicionale teknikat dhe praktikat e provuara dhe të vërteta të prodhimit janë ende të rëndësishme, dhe në shumë raste, të nevojshme për të prodhuar produkte me cilësi të lartë. Kështu, bërja e verës shërben jo vetëm si shembull i përpunimi me vlerë të shtuar, por edhe si shembull i një teknologjie të lashtë që ka adoptuar shkencën e shekullit njëzet e një [1].

2.1 Kimia e verës

Vera është një përzierje komplekse e komponimeve kimike në një tretësirë hidro-alkoolike me një pH rreth 4. Kimia e verës dhe cilësia e saj rezultuese varen nga arritja e një ekuilibri midis tre aspekteve të kokrrave të përdorura për prodhimin e verës: përmbajtjes së tyre të sheqerit, aciditetit, dhe prania e komponimeve dytësore. Hardhitë ruajnë sheqerin në rrush përmes fotosintezës dhe acidet shpërbëhen kur rrushi piqet. Komponimet dytësore ruhen gjithashtu gjatë sezonit. Anthocyanins i japin rrushit një ngjyrë të kuqe dhe mbrojtje nga rrezet ultravjollcë. Taninet shtojnë hidhërimin dhe mprehtësinë që vepron për të mbrojtur hardhinë kundër dëmtuesve dhe kafshëve kullosëse.[2]

2.1.1 Karbohidratet

Karbohidratet ndodhen në çdo organizëm të gjallë. Sheqeri dhe amidoni në ushqime, celuloza në dru, letër dhe pambuk janë pothuasje karbohidrate të gjalla.

Karbohidratet në përgjithësi klasifikohen sipas thjeshtësie ose kompleksiteti. **Sheqerat e thjeshta** ose **monosakaridet** janë karbohidratet, si glukozë dhe fruktozë dhe nuk mund të konvertohen në molekula më të vogla sheqerore ose hidrolizohen.

Karbohidratet komplekse përbëhen nga dy ose më shumë sheqerore të thjeshta, të lidhura së bashku me lidhje acetalike.

Për faktin se karbohidratet kanë disa qendra kirale, prej kohësh njihet nevoja e një metode të shpejtë për të paraqitur stereokiminë e karbohidrateve.

Kimisti gjerman Emil Fischer zhvilloi një metodë të bazuar në projektimin e një atomi karboni tetraedrik në një sipërfaqe të sheshtë. Këto projeksione Fischerit shumë shpejt u adoptuan dhe janë tashmë një mënyrë e zakonshme për paraqitjen e stereokimisë së qendrave kirale, veçanërisht në kiminë e karbohidrateve. Një karbon tetraedrik paraqitet në projektimin e Fischerit me dy vijat kryqezuese. vijat horizontale paraqet lidhjet që dalin nga plani i faqes së librit dhe vijat vertikale paraqet lidhjet që futen në planin e faqes së librit.

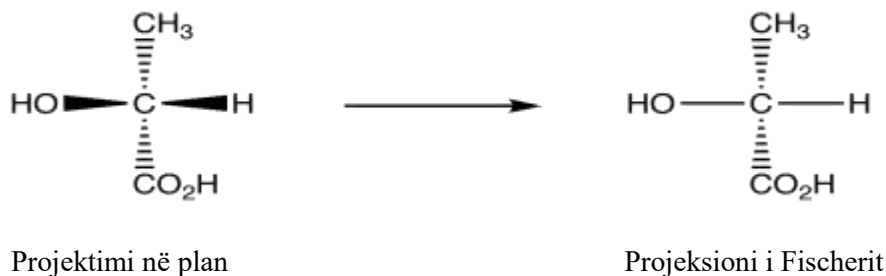


Figura 1.: Projektionii i Fischerit për një karbon tetraedrik

Për shëmbull, alhedidi (R)-glicerik, monosakaridi më i thjeshtë, mund të skicohet si në figurën më poshtë;

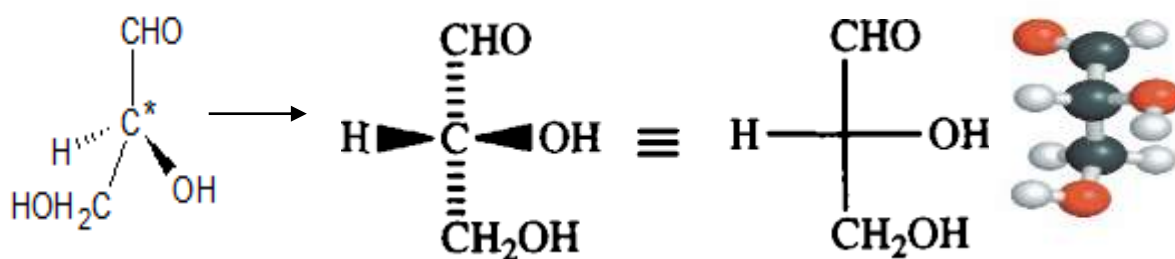


Figura 2.: Projektioni Fischer i aldehidit (R)=glicerik

Për faktin së, një molekulë kirale e dhënë mund të skicohet në shumë mënyra, është shpesh e nevojshme të krahasojmë dy projektione për të verifikuar nëse ato përfaqësojnë të njëjtin, enantiomer të ndryshëm. Për të realizuar këtë identifikim, projektionet e Fischerit mund të rrotullohen në planin e letrës vetëm në dy mënyra: levizja e një projektioni të Fischerit në ndonjë mënyrë tjetër nënkupton intervenimin e tij.

Karbohidratet me më shumë se një qendër kirale paraqiten në projektionet e Fischerit duke i rreshtuar qendrat kirale njëra pas tjetrës, dhe karboni i grupit karbonilik vendoset gjithnjë në majë ose pranë saj. Glukozi, për shembull ka katër qendra kirale të vendosura njëra pas tjetrës në projektionin Fischerit. Kjo paraqitje megjithatë, nuk jep një pikturë të saktë të konfiguracionit tredimensional të vërtetë të një molecule, që aktualisht mblidhet rreth vetes së saj një byzyltk.[3]

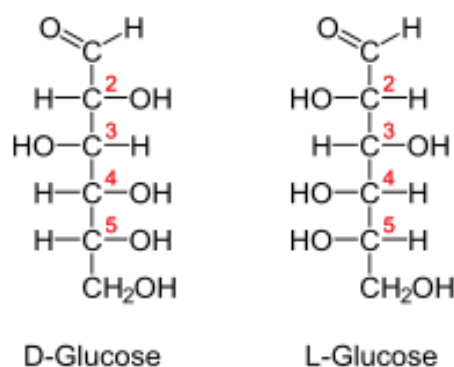


Figura 3: Glukoze (grupi karbonilik në krye)

2.1.2 Polisakaridet

Polisakaridet janë karbohidrate të përbërë, në të cilat dhjetëra, qindar dhe mijëra sheqere të thjeshta janë lidhur së bashku nëpërmjet lidhjeve glikozide, Meqenëse ato kanë vetëm një grup -OH anomerik të lirë në fundin e një vargu shumë të gjatë, polisakaridet nuk janë sheqere reduktues dhe nuk tregojnë mutorrotacion të dukshëm. Polisakaridet më të rëndësishme janë: Amidoni, celuloza dhe glikogjeni. Me origjinë bimore janë amidoni dhe celuloza ndërsa me origjinë shtazore është glikogjeni.

Polisakaridet formohen me procesin e polikondensimit. polikondensimi është process i bashkimit të molekulave të vogla për të formuar formula të mëdha me eliminimin e molekulave të vogla, siç është zakonisht molekula e ujit. Kur në polisakaride të gjitha tipat e monosakarideve janë të njëjta, ato komponime quhen homopolisakaride, ndërsa kur monosakaridet janë të ndryshme quhen heteropolisakaride.

Celuloza- është një karbohidrat kompleks, përbërësi kryesor i mureve të qelizës së bimëve dhe rrhjedhimisht përbërësi kryesor i shumë fabrikuesve të produkteve të fijeve, si letra dërrasa, pambuku dhe pëlhura.

Natyrë e përdor celulozën fillimisht si një material strukturor për t'i dhënë qëndrueshmëri bimëve. Gjethet, bari dhe pambuku për shembull janë të përbërë kryesisht nga celuloza.

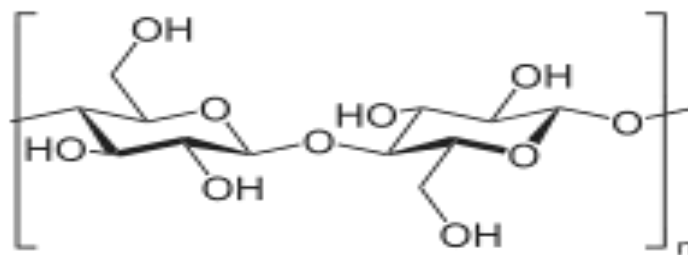


Fig 4. Celuloza

Amidoni dhe gliogjeni- Patatet, misri dhe drithërat përmbajnë sasi të madhe të amidonit, një polimer i glukozës. Amidoni mund të ndahet në dy fraksione: amilozi dhe amilopektina. Amilozi zë 20% të peshës së amidonit dhe përbëhet nga qindra molekula të glukozës.

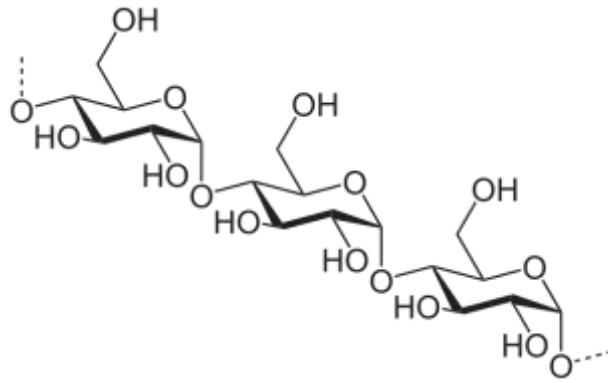


Figura 5: Amiloza

Amilopektina zë 80% të amidonit dhe ka strukturë më komplekse se amilozi. Ndryshe nga celuloza dhe amilozi që janë polimerë linearë, amilopektina përmban degëime të shkaktuara nga lidhja 1-6-L-glikozidike afërsisht çdo 25 njësi të glukozëa.

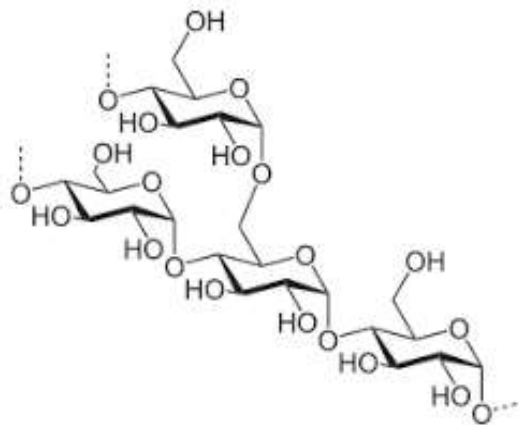


Figura 6: Amilopektina

Glikogjeni- është një polisakarid që shërben për të njëjtin funksion të depozitimit të energjisë te kafshët, sikurse amidoni ka te bimët. Karbohidratet e ushqimit të përditshëm që nuk nevojiten për energji të menjëhershme, shndërrohen nga organizmi në glikogjen si rezervë afatgjatë. Sikurse amilopektina e ndodhur tek amidoni, glikogjeni ka një strukture komplekse të degëzuar me të dyja lidhjet 1-4 dhe 1-6. Molekulat e glikogjenit janë më të mëdha sesa ato të amilopektinës- mbi 100 mijë nësi glukoze- dhe madje kanë më shumë degëzime.

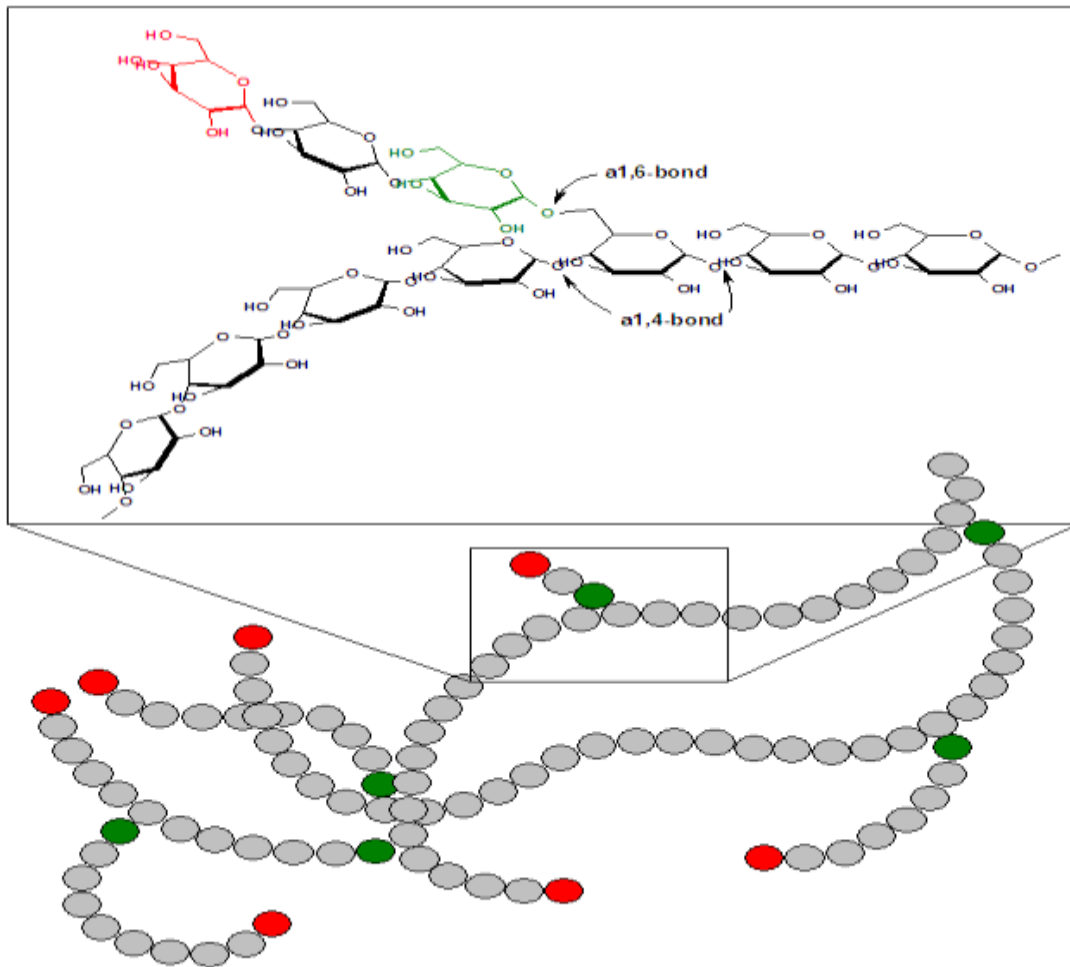


Figura 7: Glikogjeni dhe lidhjet 1-4 dhe 1-6

2.1.3 Etanoli

Etanoli, i njohur edhe si alkool etilik, është një substancë kimike me formulën kimike C_2H_5OH . Disa nga vetitë fizike dhe kimike të etanolit përfshijnë:

Vetitë Fizike:

- Etanoli është një lëng transparent, i pastrueshëm.
- Ka një aromë karakteristike dhe një shije të veçantë.
- Në tryezë, temperatura e shkrirjes së etanolit është $-114.14^{\circ}C$, ndërsa temperatura e tymit është $78.37^{\circ}C$.

- Densiteti i etanolit është rreth 0.789 g/cm³.

Vetitë Kimike:

- Etanoli është një alkool primar dhe përmban një grup hidroksi (-OH) në një atom karboni të lidhur me dy grupe alkil.

- Përveçse është një pije alkoolike popullore, etanoli përdoret gjithashtu si shumë produkte në kimin industriale për prodhimin e produkteve kimike dhe farmaceutike.

- Ai mund të reagojë me acid acetik për të formuar etil acetat, një lloj lëndë kimike që është përdorur si solvent dhe për aromatizues në ushqim dhe pije.

Etanoli, ose alkooli etilik, është një prej substanca që përdoret më së shumti në pije alkoolike, siç janë vera, birra dhe shumë lloje të tjera alkoolike. Rëndësia e etanolit në verë është e rëndësishme për shkak të disa arsyeve:

1. Kontributi në shijen dhe aromën e verës: Etanolit jep një pjesë të rëndësishme të shijes dhe aromës së verës. Një nivel i përshtatshëm i etanolit mund të rrisë kompleksitetin e shijes së verës dhe t'i japë një shije të karakteristikës së tij.

2. Përcaktues për nivelin e alkoolit: Përqindja e etanolit në verë përcakton nivelin e alkoolit të saj, që përftohet nga fermentimi i sheqerave të drunjta. Një nivel i duhur i etanolit siguron që verë të ketë një nivel të rëndësishëm alkooli për të mbajtur në balancë shijen dhe aromën e saj.

3. Ndikim në përmbajtjen e kalorive: Etanoli përmban kalori dhe konsumimi i verës nënkupton edhe konsumimin e kalorive nga alkooli. Një përcaktues i rëndësishëm për përmbajtjen e kalorive të një pije alkoolike.[5]

2.1.4 Acidet karboksile

Acidet zënë një vend të rëndësishëm midis komponimeve karbonilike. Ato janë të vlefshme jo vetëm si të tilla, por shërbejnë edhe si lëndë e parë për përgaditjen e derivateve, si kloruret e acideve, esteret, amidet dhe tioesteret. Acidet karboksilike janë të pranishme në shumicën e rrugëve biologjike.

Shumë acide karboksilike janë gjetur në natyrë: acidi acetik, $\text{CH}_3\text{CO}_2\text{H}$, është komponenti kryesor organik i uthullës, acidi butanoik, $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CO}_2\text{H}$, është përgjegjës për aromën e thartë të gjalpës të prishur dhe acidi heksanoik, $\text{CH}_3(\text{CH}_2)_4\text{CO}_2\text{H}$, është përgjegjës për aromën e padëshirueshme të dhive dhe çorapave të pista.

Shembuj të tjerë janë acidi kolik, komponenti kryesor i acideve biliare të njeriut, dhe të acideve alifatike me varg të gjatë, të tillë si acidi palmitik, $\text{CH}_3(\text{CH}_2)_{14}\text{CO}_2\text{H}$, një pararendës biologjik i yndyrave dhe vajrave bimorë. [3]

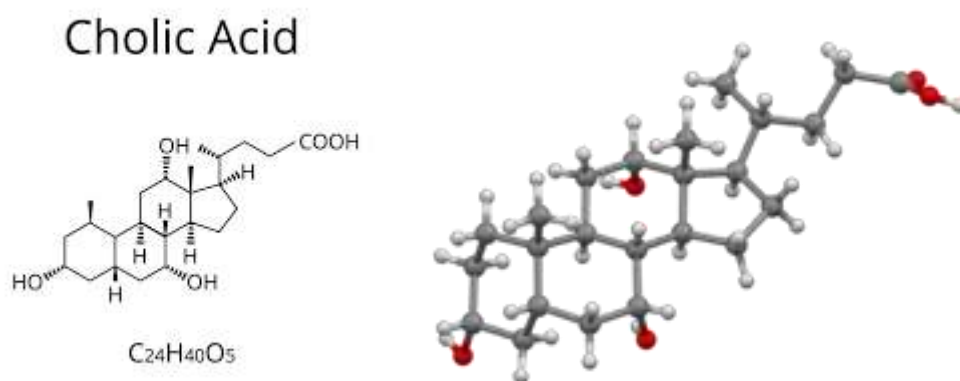


Figura 8: Acidi Kolik

Afërsisht pesë milionë tonë acid acetik prodhohet në vit në të gjithë botën për shumë qëllime, duke përfshirë përgaditjen e polimerëve të acetatit të vinilit të përdorura të ngjyrosësit dhe ngjitësit.

Rreth 20% e acidit acetik të sintetizuar nga industria fitohet nga oksidimi i acetaldehidit. Pjesa më e madhe e 80% që mbetet përgaditet nga reaksioni i metanolit me monoksid karboni katalizuar nga rodiumi.

Acidet karboksilike janë të pranishme në shumë procese industriale dhe në rrugë biologjike. Ato janë materialet fillestare nga e cila fitohen derivatet e tjera acilike. Një sqarim i vetive dhe reaksioneve të tyre është thelbësore për ta kuptuar kimin organike.

Acidet karboksilike të thjeshtë që rrjeshin nga alkanet me varg të hapur emërtohen në mënyrë sistematike me të njëjtin emër, duke i shtuar emrit të alkanit korrespondues prapashtesën -oik për acidet. Atomi i karbonit $-\text{CO}_2\text{H}$ numërohet si C1.

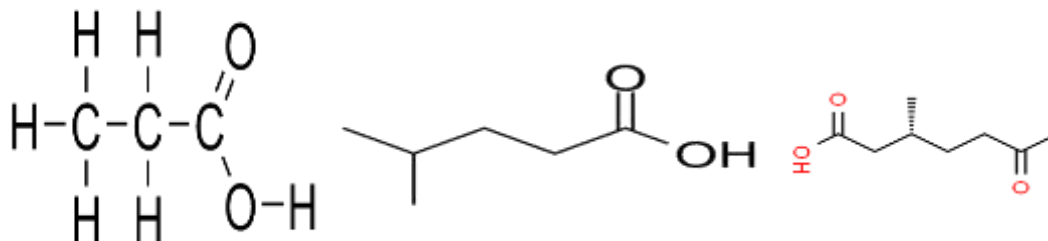


Figura 9: Acidi propanoik

Acidi metil-4-propanoik

Acidi etil-3-metil-6-oktanoik

Komponimet që kanë një grup $\text{-CO}_2\text{H}$ të lidhur në varg quhen acide karboksilike. Karboni CO_2H është C1 në këtë sistem. Si grup zëvendësues, CO_2H quhet grupi karboksil.[3]

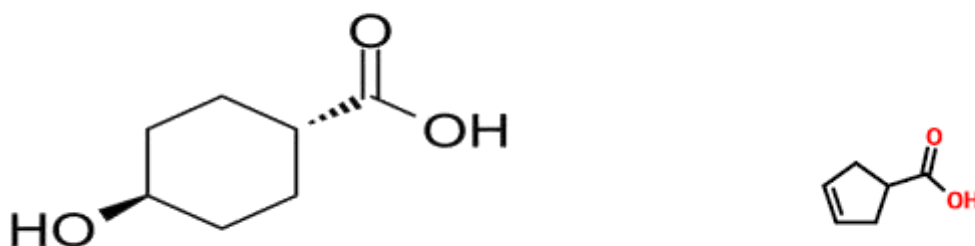


Figura 10: Acidi trans-hidroksi-4-ciloheksankarboksilik

Acidi ciklopentanokarboksilik

Meqenëse acidet karboksilike janë komponimet e para organike të izoluara dhe të pastruara, një numër i madh i tyre mbajnë emra të veçantë.

Karakteristikë dalluese e acideve karboksilike është aciditeti i tyre. Edhe pse më i dobët se acidet minerale të tilla, Acidi Hidroklorik (HCl), protonet e acideve karboksilike shpesh shpërndahen shumë më lehtë se alkolet, sepse jonet rezultante karboksilat janë të stabilizuara nga rezonanca midis dy formave ekuivalente.

Acidet karboksilike kanë vlera të pK_a rreth 5, por pK_a e saktë e një acidi të caktuar varet nga struktura. Acidet karboksilike të zëvendësuara nga grupet elektron-tërheqës janë me acide sepse jonet e tyre karboksilat janë të destabilizuara.

Metodat e sintezës së acideve karboksilike përfshijnë oksidimin e alkilbenzeneve, oksidimin e alkooleve primare ose aldehideve, reaksionin më reagentët e Grignard-it me CO₂ dhe idroliza e nitrileve. Reaksionet e përgjithshme të acideve karboksilike përfshijnë humbjen e protonit acid, zëvendësimin nukleofilik acilik në grupin e karbonilit, zëvendësimin të karbonit dhe reduktimin.

2.1.5 Komponentet fenolike

Fenolet mund të mendohen si derivate organike të ujit, të cilët kanë një prej hidrogjeneve të ujit të zëvendësuar nga një grup organik: H-O-H ndaj R-O-H dhe Ar-O-H. Fenolet ndodhen gjerësisht në natyrë dhe shërbejnë si ndërmjetës në sintezën industriale të produkteve të ndryshme si ngjitës dhe antiseptikë. Fenoli në vetvete është një dezinfektues i përgjithshëm që gjendet në katranin e qymyrit; metil salicilati është një agjent aromatizues i gjetur në vajin e shelgut; dhe polifenolet janë përbërës alergjikë të helmit të lisit dhe dredhkës. Vëreni se fjala fenol është emri i komponimit dhe emri i kësaj klase të komponimeve.

2.1.6 Fenoliciteti i verës dhe impakti shëndetësor

Fenolikët e verës mund të grupohen në dy kategori, flavonoidet dhe jo-flavonoidet. Flavonoidet përfshijnë antocianinët antocianinët, flavan-3-olet dhe flavonolet. Jo-flavonoidet e pranishme në verë janë acidet hidroksicinamike, acidet hidroksibenzoike, stilibenet dhe taninet e hidrolizueshme, të cilat janë oligomere të lidhura me esterin e aciet galike ose ellagjike.

Paradoksi francez i përmendur për herë të parë në 1992 nga Prof. Serge Renaud në Lancet mund të përkufizohet si mbrojtja nga sëmundjet kardiovaskulare me konsum të moderuar të alkool dhe në veçanti verën e kuqe. Që atëherë debati nëse është efekti mbrojtës i verës së kuqe në shëndet për shkak të franksionit joalkoolik, kryesisht polifenolet dhe etanoli është ende larg përfundoi. Megjithatë, një numër studimesh e kanë mbështetur nocioni se komponimet fenolike të pranishme në verë kanë një rol të madh në promovimin e shëndetit efektet e konsumit të moderuar të verës.[7]

2.1.7 Ngjyra e verës

Ngjyra është një nga atributet e një vere të kuqe e cila është relativisht e lehtë për t'u vlerësuar dhe e cila në përgjithësi lidhet me cilësinë. Në verërat e pjekura, ngjyra stabilizohet nga bashkë-reaksionet e pigmentimit dhe polimerizimit. Mund të ndodhin reaksione të bashkëpigmentimit përmes ndërveprimeve intramolekulare, me ç'rast një acid organik, një acil aromatik grup, ose një plavonoid është i lidhur në mënyrë kovalente me një kromofor antocianin ose ndërmjet ndërveprimeve të lirshme ndërmolekulare, në të cilat flavonoidet pa ngjyrë ose komponimeve të tjera fenolike reagojnë me forcë të dobëta hidrofobike me antocianin. Në këtë të fundit rezulton nga dukuritë kimike të njohura si kompleksi i transferimit të ngarkesës formimi ose ndërveprimet y-y të cilat ndodhin kur ndërveprojnë komponimet me ngarkesë të kundërt. Prandaj, në unazat e lidhura nga lidhja e dobët, densiteti elektronik transferohet nga unaza e pasur te varferi; meqenëse joni i flavilliumit në antocianin është i ngarkuar pozitivisht, bëhet një përbërje e përshtatshme për formimin e komplekseve me transferim të ngarkesës me substrate të pasura me elektron. Rrugët e tjera në të cilat ndodh bashkëpigmentimi janë: (1) vetë-shoqërimi nëse bashkë-pigmentimi është një antocianë, (2) një kompleks kur ndërveprimi është një metal dhe (3) që është kompleksi, kur ko-pigmentimi përfshin një aglikon, sheqer dhe protone të gjitha në të njëjtën kohë. Reaksionet e bashkëpigmentimit përcaktojnë ngjyrën karakteristike të kuqe-vjollcë intensive dhe është sugjeruar si hapi i parë që çon në formimin e polimerit antocianin të cilat janë pigmentet e pranishme në verërat e vjetëra. Gjatë verës dhe maturimit, këto konglomerate priren të shpërndahen duke i çliruar këto molekulat e antocianit në mjedisin acid të verës duke realizuar në humbjen e tyre ngjyrë kaltërosh; edhe pse disa komplekse të bashkëpigmentimit mund të mbijetojnë dhe të formohen gjatë fermentimit. Për më tepër gjatë maturimit, individit, molekula e antocianit tenton të humbasë sheqerin dhe përbërësit e tyre acil duke i bërë ato më shumë i ndjeshëm ndaj oksidimit që çon në nxirje. Për të kufizuar këto dukuri, është jetike që verërat kanë sasi të konsiderueshme flavonoidesh dhe tanine të kondensuar për t'u formuar të qëndrueshme polimere. Nxjerrja e njëkohshme e flavonoideve me antocianin gjatë fermentimit është thelbësore për stabilitetin afatgjatë të verës së kuqe pasi këto komponime fillojnë të polimerizohen me antocianin pothuajse menjëherë. Prandaj, ngjyra e kuqe e verërave është një pasqyrim jo vetëm i antocianineve, por edhe llojet dhe sasi të flavonoideve të nxjerra dhe të mbajtura gjatë dhe pas verës.[8]

2.1.8 Aroma dhe shija e verës

Ndër faktorët e ndryshëm që kontribuojnë në shijim e verës, aroma e saj dhe shija është ndoshta më e rëndësishmja. Termi dhe aroma është zakonisht shoqërohet me erën e një vere të re të freskët, ndërsa përdoret buqeta e verës për të përshkruar verërat e vjetra të cilat janë më pak të freskëta dhe më komplekse në aromën e tyre. Shija e verës lidhet me ëmbëlsirë, aciditetin, hidhësinë, kripësia dhe ndjenja e përgjithshme e gojës. Këta elementë strukturorë duhet të jenë në ekuilibër dhe harmonia pasi ato nuk vlerësohen të veçuara, por në raport me njëri-tjetin. Aroma e verës rrjedh nga: (1) Aroma që e ka origjinën nga rrushi dhe modifikimi gjatë përpunimit të rrushit, (2) Aromat e prodhuara nga aktivitetet e majave dhe baktereve gjatë fermentimit, (3) buqeta (nga nxjerrja e drurit të lisit dhe reaksionet kimike gjatë ruajtjes) që rezulton gjatë plakjes së verërave. [9]

Shumica e komponimeve të paqëndrueshme që rrjedhin nga rrushi përgjegjës për aroma varietale e verërave raportohet si përbërës të fraksioneve të paqëndrueshme të shume fruta të tjera. Këto përfshijnë alkoolet alifatike, aldehidet, ketonet terpenet dhe derivatet e benzenit me përqendrimet e tyre përfundimtare të varura nga faktorët të tillë si varieteti i rrushit, praktikat e kulturës, lloji i tokës dhe klima.

Për shembull, terpenet, si linalooli, geranoili dhe nerli janë të identifikuar si komponimet përgjegjëse për aromat me lule të varietetit të rrushit Muscat. Megjithatë, pjesa e konsiderueshme e aromës dhe shija e verës rrjedh nga fermentimi i majave që përfshin esteret, alkoolet më të larta, komponimet karbonil, squfurin, fenolet e qëndrueshme. Për më tepër, rrushi, aroma e lëngut mbivendoset nga këto aroma fermentuese të cilat më pas formojnë vinoze lidhur me verërat e verës. Gjatë plakjes së verës (në varësi të kushteve të ruajtjes), ndodhin disa reaksione kimike që ndikojnë në përbërjen e përbërësve të paqëndrueshëm në verë dhe shndërrimi i aromës në buqetë.

Për verërat e vjetra në fuçi lisi, elementët aromatikë të drurit nxirren në verë pa dominuar më pas karakterin e verës. Përveç kësaj, zvogëlohet në acetate përgjegjës për fruta si aromat ndodhin gradualisht, derisa at oi afrohen ekuilibrit me acidet dhe alkoolet përkatëse të tyre. edhe pse janë identifikuar mbi 800 të paqëndrueshme në verërat, vetëm një numër relativisht i vogël i përbërjeve aktive të aromës kryesore specifike kanë identifikuar nga analiza shqisore. Rëndësia e secilit përbërës në aromës përfundimtare lidhet me perceptimin e erës së tij pragu, i cili përcaktohet si përqendrimi më i ulët që mund të zbulohet nga nihatja. prandaj, raporti përqendrim/prag, i njohur si “aktiviteti i erës vlera” mat kontributin e një përbërësi specific në aromën e një vere dhe gjithashtu bën dallimin midis një stili vere nga një tjetër.

Është e rëndësishme të thuhet se pragu i llogaritjes vlerat që gjenden në literaturën e përbërjeve të aromave të verës ndryshojnë pasi ato ndikohen nga tretësi i përfshirë, lloji i verës, prania e përbërjeve të tjera aromatike dhe mbrehtësia të shijuesit gjatë vlerësimit ndior të aromës së verës.[10]

2.2 Parametrat fiziko-kimik

2.2.1 Vlera e pH

Vera është një produkt fermentimi i kryesisht lëng frutash rrushi ose frutash të tjerë. pH luan një rol të rëndësishëm në fermentimet e verës. Gjatë fermentimit të frutave në verë, majat përdorin sheqerna të lëngut si substrate për rritjen dhe konvertimin e tyre ato futen në etanol, dioksid karboni dhe të tjera produktet përfundimtare metabolike. Këta përbërës kontribuojnë në përbërjen kimike dhe cilësinë shqisore të verës. Disa faktorë ndikojnë në fermentimin alkoolik, si p.sh shtimi i dioksidit të squfurit, temperatura e fermentimi, pH i mushtit, përbërja të lëngut të frutave, inokulimi me specifik maja, dhe ndërveprimet e mikroorganizmave [12].PH i preferuar i verës është rreth 3.6 dhe pH më i mirë për bakteret e majave dhe acidit laktik është rreth 4.5. Megjithatë bakteret e prishjes mundën gjithashtu rritet mirë në pH 4.5. Por, bakteret e prishjes nuk rriten shumë nën pH 3.6. Majatë e verës dhe bakteret e acidit laktik ende mund të metabolizohen në një interval pH prej 3.3-3.6. PH i ulët mund të zgjasë procesin e fermentimit për shkak të rritjes së ngadaltë të mikroorganizmat të përfshirë [13]. Vera e frutave duke përfshirë verën e rrushit është përgjithësisht e prodhuar nga fermentimi alkoolik i frutave përkatëse sipas llojeve të ndryshme të majave, *Saccharomyces cerevisiae*. Frutat si shegë, mango, papaja, banane, ananas, guava, kivi, hurma dhe pasion frutat përdoren për prodhimin e verës [11,14]

2.2.2 Dendësia

Dendësia e verës është një nga karakteristikat fizike të saj që ka një ndikim të rëndësishëm në cilësinë dhe shijen e verës. Rendësia e dendësisë së verës përfshin disa aspekte të rëndësishme:

1. Ndikimi në shije dhe teksturë: Dendësia e verës mund të ndikojë në shijen dhe aftësinë e saj për të përshtatur aromën dhe shijen e elementeve kimike që janë pjesë e saj. Dendësia e verës gjithashtu mund të ndikojë në teksturën e saj, duke i dhënë një ndjesi më të plotë në gojë dhe një përvojë më të pasur për konsumatorin.

2. Mundësia e fermentimit: Dendësia e verës mund të ndikojë në aftësinë e saj për të fermentuar saktë dhe për të ruajtur cilësinë e produktit gjatë procesit të fermentimit. Nëse dendësia është e tepërt e lartë ose e ulët, ajo mund të sjellë ndryshime në procesin e fermentimit dhe të cilësinë e verës së prodhuar.

3. Cilësia dhe qëndrueshmëria: Dendësia e verës gjithashtu mund të ketë një ndikim në cilësinë dhe qëndrueshmërinë e saj si produkt. Për shembull, një dendësi e lartë mund të kontribuojë në qëndrueshmërinë e verës gjatë ruajtjes dhe qëndrimit në temperaturat e caktuara.

Për shkak të këtyre dhe faktorëve të tjerë, dendësia e verës është një element i rëndësishëm për të konsideruar gjatë prodhimit dhe shërbesës së verës.

2.3 Spektroskopia infra e kuqe

Spektroskopia infra e kuqe është një teknikë analitike që përdoret për të identifikuar grupet funksionale në molekulat organike. Ekzistojnë dy lloje të spektrometrit që përdoren në spektroskopinë infra të kuqe: spektrometrat shpërndarës të rrezatimit infra të kuq dhe spektrometrat e transformimit Fourier të rrezatimit infra të kuq.

Gjatë procesit të spektroskopisë infra të kuqe kryhen hapat e mëposhtëm:

- Një rreze rrezaimi kalon nëpër kampion;
- Një mostër në një spektrometër thith rrezatimin infra të kuq;
- Pasi të zbulohet dhe analizohet përthithja, spektri i përthithjes shtypet ose shfaqet në një kompjuter.

Të gjitha përbërjet organike thithin rrezatimin infra të kuq në gjatësi vale të ndryshme përmes lidhjeve midis molekulave. Kur atomet çiftëzohen, ato vibrojnë vazhdimisht. Kur molekulat organike thithin rrezatimin infra të kuqe, lidhjet ndërmjet atomeve të ndryshme dridhen më shumë. Për shkak të kësaj, lidhjet kovalente në molekula gjithashtu vibrojnë dhe detyrohen të shtrihen, përkulen ose përdredhin.[3]

Të gjitha molekulat kanë një sasi të caktuar energjie dhe janë në lëvizje të vazhdueshme. Lidhjet e tyre tendosen, atomet tunden para e prapa, si dhe ndodhin edhe vibracione të tjera molekulare. Interpretimi i plotë i një spektri IK është i vështirë, sepse shumica e molekulave organike kanë djetëra tendosje e përkulje lidhjesh të ndryshme, prandaj ato shfaqin absorbime.

Ky kompleksitet bën që përdorimi i spektroskopisë IK të kufizohet vetëm te mostrat e pastra të molekulave të vogla, ndërsa për biomolekulat e mëdha dhe kompleksiteti është i dobishëm, sepse një spektër IK shërben si “gjurmë gishtash” për një komponim. [3]

Tabela 1. Absorbimet karakteristike IR të disa grupeve funksionare [15]

Grupi funksionor	Absorbimi(cm^{-1})	Intensiteti
Alkan C-H	2850-2950	Mesatar
Alken C-H C=C	3020-3100 1640-1680	Mesatar Mesatar
Alkin C-H C=C	3300 2100-2260	I fortë Mesatar
Halogjenalkan C-Cl C-Br	600-800 500-600	I fortë I fortë
Alkool O-H C-O	3400-3650 1050-1150	I fortë, i gjerë I fortë
Aren C-H Unazë aromatike	3030 1660-2000 1450-1600	I dobët I fortë Mesatar

Për të mbajtur mend pozicionet e absorbimeve në IK, zona IK nga 4000 cm^{-1} në 400 cm^{-1} mund të ndahet në katër pjesë, siç tregohet në 12.15.

- Zona nga 4000 në 2500 cm^{-1} u korrespondon absorbimevetë shkaktuara nga lidhjet njëfishe N-H, C-H dhe O-H. Lidhjet N-H dhe O-H absorbojnë në intervalin 3300 deri në 3600 cm^{-1} ; tendosja e lidhjes C-H ndodh rreth 3000 cm^{-1} .

- Zona nga 2500 në 2000 cm^{-1} është zona ku ndodh tendosja e lidhjes trefishe. Këtu absorbojnë lidhjet $\text{C}\equiv\text{N}$ dhe $\text{C}\equiv\text{C}$.
- Zona nga 2000 në 1500 cm^{-1} është zona ku absorbojnë lidhjet dyfishe ($\text{C}=\text{O}$, $\text{C}=\text{N}$ dhe $\text{C}=\text{C}$). Grupet karbonike zakonisht absorbojnë në intervalin 1680 deri 1750 cm^{-1} dhe tendosja e alkeneve ndodh zakonisht në një zonë të ngushtë nga 1640 në 1680 cm^{-1} .
- Zona IR poshtë 1500 cm^{-1} është zona e “gjurmë të gishtave” të spektrit IR. Këtu përfshihet një numër i madh absorbimesh të vibracioneve të lidhjeve njëfishe C-C, C-O, C-N dhe C-X.

Lidhjet e forta dhe të shkurta vibrojnë në një energji dhe një frekuencë më të lartë, sesa lidhjet e dobëta dhe të gjata, ashtu sikurse një sustë e shkurtër, e fortë vibron më tepër sesa një sustë e gjatë, e dobët. Kështu, lidhjet trefishe absorbojnë në një frekuencë më të lartë se sa lidhjet dyfishe, të cilat nga ana e tyre absorbojnë në një frekuencë më të lartë se sa lidhjet njëfishe. Gjithashtu, sustat që lidhin pesha të vogla vibrojnë më shpejt se sa sustat që lidhin pesha të mëdha. Kështu, lidhjet C-H, O-H dhe N-H vibrojnë me një frekuencë më të lartë se lidhjet midis atomeve më të rëndë C, O dhe N.[3]

Alkanet- Spektri IK i një alkani nuk jep shumë informacion, sepse nuk ka grupe funksionore dhe të gjithë absorbimet ndodhin për shkak të lidhjeve C-H dhe C-C. Lidhja C-H te alkanet shfaq një absorbim të fortë nga 2850 në 2960 cm^{-1} dhe lidhjet e ngopura C-C shfaqin një numër shiritash në intervalin 800 deri në 1300 cm^{-1} . Meqë shumica e komponimeve organike përmban pjesë të ngopura të ngjashme me alkanet, shumica e komponimeve organike i shfaqin këto absorbimeve karakteristike IR.

Alkoolet- Grupi funksionor O-H i alkooleve dallohet lehtë. Alkoolet kanë një shirit karakteristik në intervalin 3400 deri në 3650 cm^{-1} , që zakonisht është i gjerë dhe intensiv. Nëse ky shirit është i pranishëm, është vështirë të ngatërrohet me diçka tjetër. [3]

2.3.1 Parimi i punës së spektroskopisë IK

Parimi i punës së spektroskopisë Infra e kuqe (IK) është se çdo substancë kimike absorbon dritën e caktuar në spektrin e tërheqjes së infra të kuqe me një mënyrë unike, në varësi të strukturës molekulare të saj. Ky proces i absorbit të dritës në shkallë të veçantë për çdo molekulë shërben si shenjues i identifikimit dhe analizës së substancave kimike në bazë të karakteristikave spektrale të tyre IK.

Kur drita e ndriçimit të spektroskopisë IK kalon në një substancë, një pjesë e dritës është e absorbuar nga lidhjet kimike ndërmjet atomeve në molekulën e substancës. Absorbimi i dritës në spektrin e IK krijon një spektër absorbues me pika të caktuara të absorbit (pika absorbuese) që korrespondojnë me vibracionet energjike të lidhjeve kimike. Me analizën e spektrit IK të një substancë, mund të identifikohen grupet funksionale të sintezës kimike, të verifikohet identiteti i substancës dhe të vlerësohet kompozita kimike e saj.

Kështu, parimi themelor i punës së spektroskopisë IR është marrja e të dhënave të spektrit absorbues të dritës infrarujë nga një substancë për të analizuar dhe identifikuar strukturën dhe karakteristikat kimike të asaj substancë.

2.3.2 Analiza statistikore

Analiza statistikore e spektroskopisë Infra e kuqe (IK) përdoret për të përpunuar dhe analizuar të dhënat e deriuara nga spektrat IR në mënyrë që të identifikohen dhe të interpretohen tiparet e ndryshme kimike të substancave. Këto janë disa teknika të zakonshme të analizës statistikore të spektroskopisë IK:

1. Analiza Komponenteve Kryesore (PCA): PCA përdoret për të zvogëluar dimensionet e të dhënave duke identifikuar tiparet themelësore dhe lidhjet midis tyre në spektra IR. Kjo ndihmon në identifikimin e tipareve të rëndësishme të spektrave dhe grupimeve të tyre.
2. Regresioni Linear: Përdoret për të vlerësuar lidhjet lineare midis të dhënave IR dhe variablave të tjerë të interesit të përfaqësuar në spektra, siç janë p.sh. përqendrimet e substancave kimike.
3. Analiza Diskriminuese: Kjo teknikë përdoret për të dalluar dhe identifikuar grupe të ndryshme të spektërve IR në bazë të karakteristikave të tyre spektrale.
4. Analiza Cluster (Grupimeve): Përdoret për të grupuar spektrat IR në segmente ose klasterë, duke identifikuar ngjashmëritë dhe dallimet midis tyre.

Përdorimi i analizave statistikore në interpretimin e spektrave IR ndihmon në zbulimin e informacioneve të fshehta, identifikimin e pika të rëndësishme dhe dallimeve midis spektrave, si dhe në përpilimin e modeleve të përputhshme për analizën e të dhënave IR..

2.4 Justifikimi i hulumtimit

Hulumtimi i etanolit në verë përmes spektroskopisë FTIR (Fourier Transform Infrared) është një metodë efektive për shkak të përfitimeve të mëposhtme:

- Identifikimi të Saktë: Spektroskopia FTIR mund të identifikojë etanolin me një shkallë të lartë të saktësisë, duke përdorur një spekër karakteristikë e cila tregon prezencën e etanolit në verë.
- Kontrolli i Cilësisë: Përdorimi i FTIR për të analizuar përmbajtjen e etanolit në verë mund të ndihmojë në kontrollimin e cilësisë dhe standardizimit të produktit përfundimtar.
- Monitorimi i Procesit të Prodhimit të Verës: Spektroskopia FTIR mund të përdoret për të monitoruar proceset e fermentimit dhe të pakënaqësisë në prodhimin e verës, duke lejuar për ndërhyrje të menjëhershme në rast të ndonjë defekti.
- Efikasiteti dhe Shpejtësia: FTIR ofron avantazhe nëse krahasohet me metoda tradicionale analitike si dhe ofron rezultate shpejt dhe me efikasitet më të madh.

Bazuar në këto arsye, hulumtimi i etanolit në verë përmes spektroskopisë FTIR është një mënyrë e efektshme dhe e praktike për të monitoruar përmbajtjen e etanolit dhe për të siguruar cilësi të lartë në prodhimin e verës.

2.5 Hipotezat

Etanoli është një përbërës i rëndësishëm i verës dhe analiza e tij sasiore dhe cilësore është e rëndësishme dhe metodat e aplikueshme janë me procedura të zgjatura dhe me kosto jo të vogël, andaj gjetja e një metode të shpejtë, ndjeshmëri të lartë dhe me kosto të lirë është një kërkesë komerciale por edhe nevoja e inspektoriateve ushqimore është në rritje për një metodë të tillë.

Spektroskopia IK është metodë shpesh e synuar përshkak se secila molekulë organike ka spektër i veçant, pra nëse merret për bazë spektri i plotë dhe jo pikë të veçanta. përdorimi i spektrit të plotë mund të përdoret për qëllime të ktilla por përmes metodës së softëerit multivariabil PLSR.

KAPITULLI III

3. METODOLOGJIA

Për këtë hulumtim puna eksperimentale është kryer në laboratorin e Kimisë Organike në UMIB. Aparaturat pajisjet materialet dhe reagjentët e përdorur gjatë këtij studimi janë të paraqitur më poshtë:

3.1 Aparatura dhe pajisjet e përdorura

Aparaturat dhe pajisjet e përdorura janë:

- FTIR Shimadzu IRAffinity-1
- ATR i tipit diamond
- Gotë laboratorike
- Peshore analitike
- pH metër

3.1.1 Materialet dhe reagjentët e përdorur

Mostrat që janë marrë për analizë janë:

1. Verëra komerciale me përqindje të ndryshme alkooli të deklaruar

Ndërsa reagjentët e përdorur janë:

1. Alkooli etilik 96% Alkaloid

1.1.2 Përgaditja e mostrave për analizën me FT-IR

Mostrat janë testuar për vlerën pH drejtpërdrejt me pH metër, më pas është bërë përcaktimi i dendësisë përmes matjes së raportit masë/vëllim. Analiza me FTIR është bërë me vendosjen direkte të mostrës së verës në pajisje të ATR.

1.2 Ecuria e punës eksperimentale

Puna eksperimentale është realizuar duke përdorur aparaturën FT-IR përmes së cilës është bërë inçizimi dhe analiza e spektrave të mostrave. Inçizimi i spektrave është bërë në regjionin 600-4000 cm^{-1} është zgjedhur të matet transmittanca.

Rezolucioni i punës së instrumentit ka qenë 4 cm^{-1} dhe numri i skanimeve ka qenë 16.

Para vendosjes së mostrës në aparaturë është bërë skanimi i prapavijës me qëllim eliminimin e perbersve që mund të vijnë nga analiza e ajrit. Në fund të secilit skanim është bërë pastrimi i kristalit ATR me aceton dhe në fund janë tharë me palomë e ndjeshme.

Secila mostër është vendosur me rend një nga një në aparaturë, ku në ekran pas disa sekondave kemi fituar spektrat e absorbimit.

Të gjithë spektrat për secilën mostër janë ruajtur dhe më pas është bërë mbimbulimi i spektrave për të bërë krahasimin e tyre me ane të programit të veçant për përpunim i spektrave OriginPro-2021, ku janë paraqitur në figurat në vazhdim.

Analiza e derivatit parë dhe të dytë, poashtu edhe analiza kemometrike Principal Component Analysis (PCA) është bërë me të njëjtin softëer të përmendur me herët. Analiza për përcaktim sasior të etanolit me metodën e krahasimit të spektrave e njohur Partial Least Square Regression (PLSR) poashtu është bërë me Origin Pro.

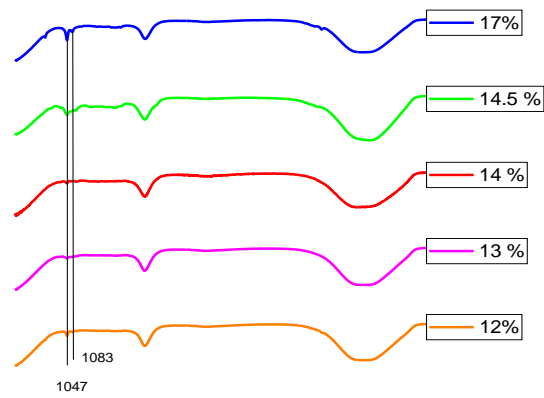


Figura 11: Krahesimi i Spektrave IK te mostrave te veres me përmbajtje te ndryshme te alkoolit

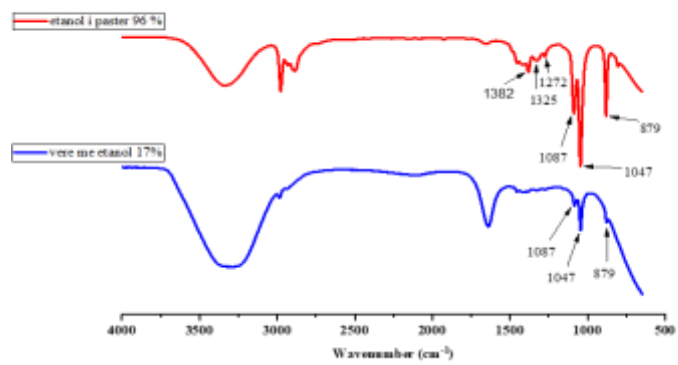


Figura 12. Krahesimi i spektrit IK te alkoolit te pastër dhe mostrën e veres me alkool 17 %

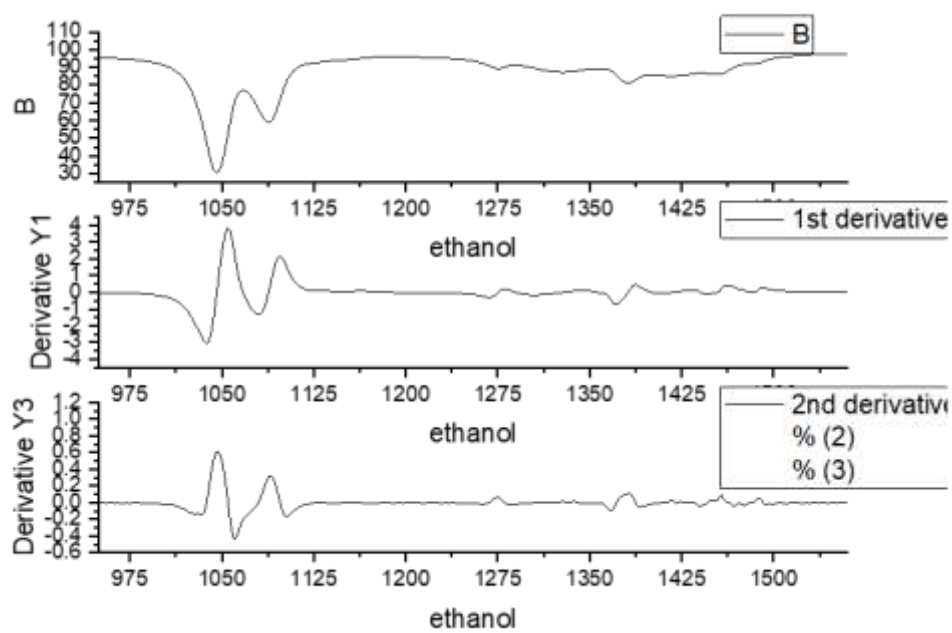


Figura 13. Krahasimi i spektrit bazë IK dhe atyne të derivuar të alkoolit të pastër

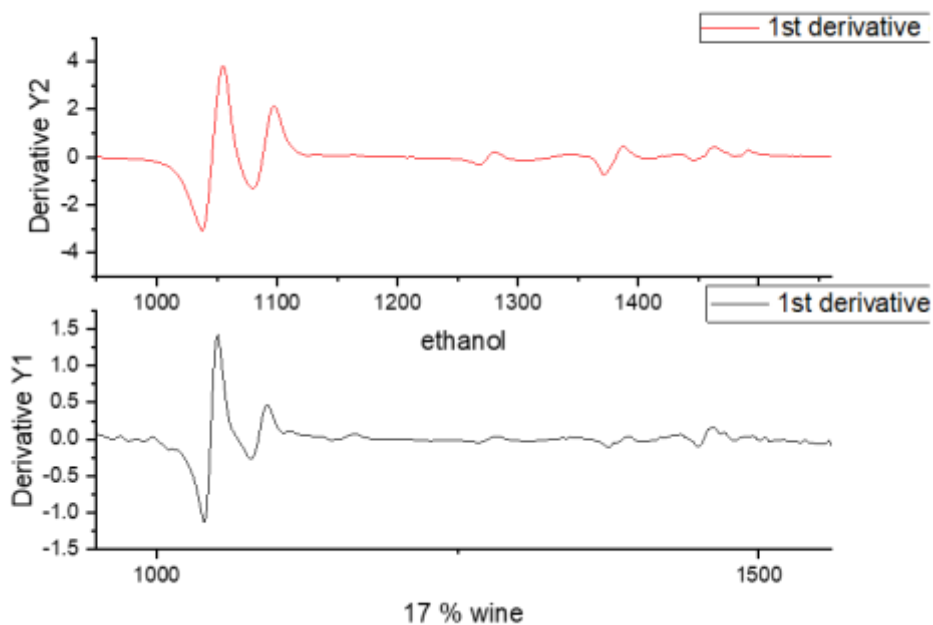


Figura 14. Krahasimi i spektrit IK të derivuar në rendin 1 për etanolin e pastër dhe mostrën e verës

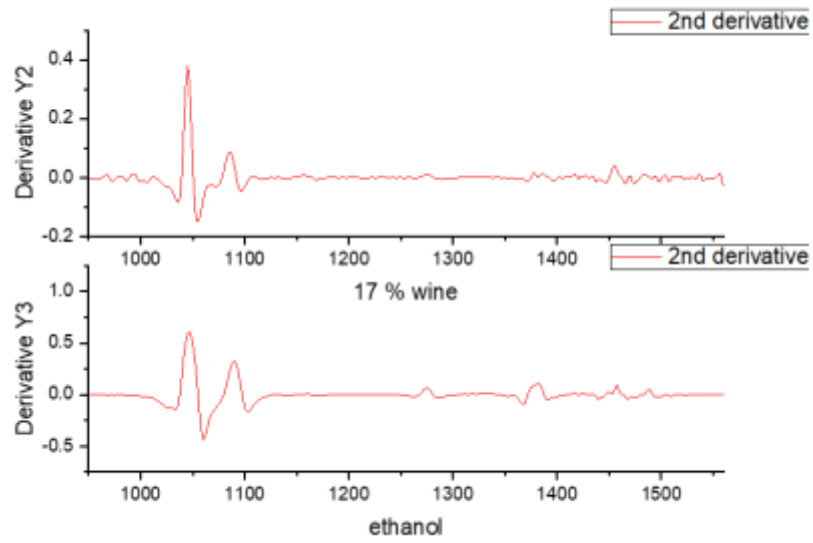


Figura 15. Krahesimi i spektrit IK te derivuar ne rendin 2 per etanolin e pastër dhe mostrën e verës

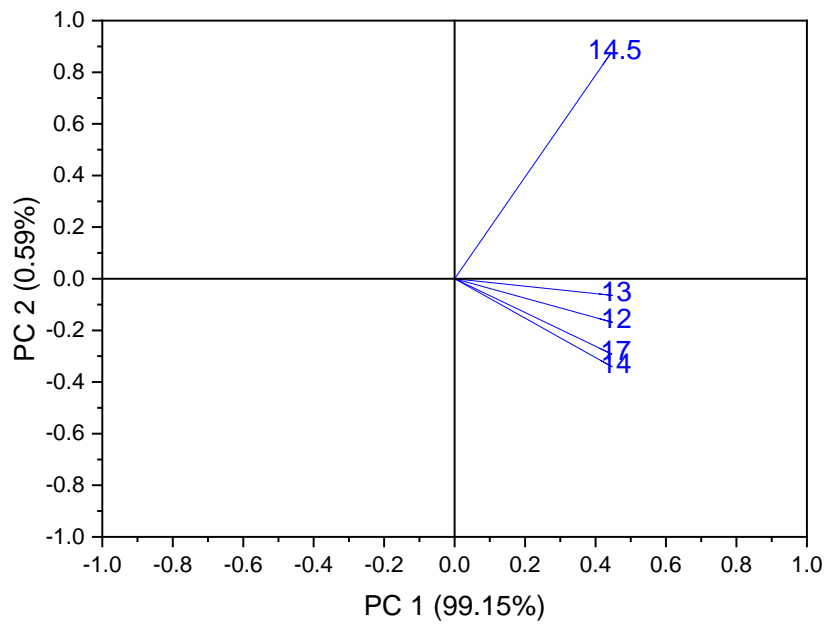


Figura 16. Kahasimi i spektrit të plotë në analizën kemometrike PCA

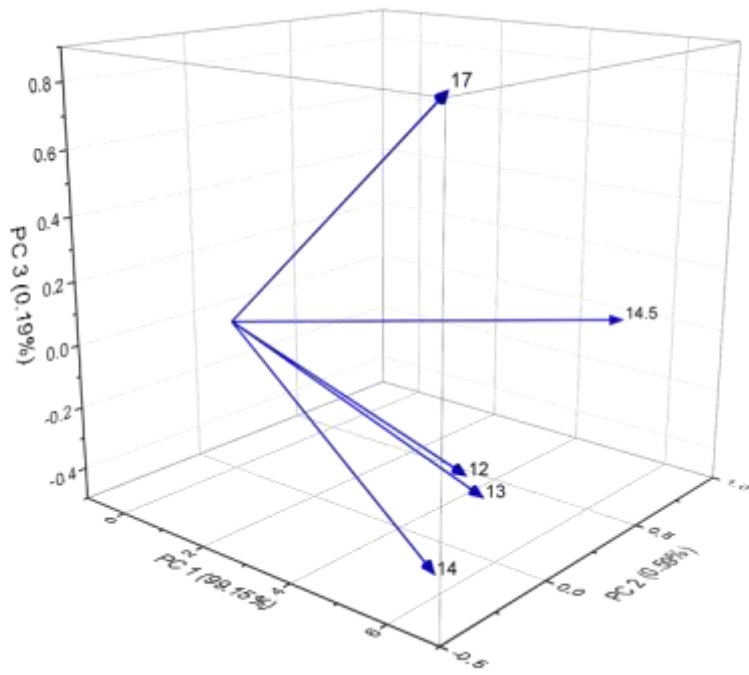


Figura 17. Krahasimi 3D i PCA për spektrin e plotë

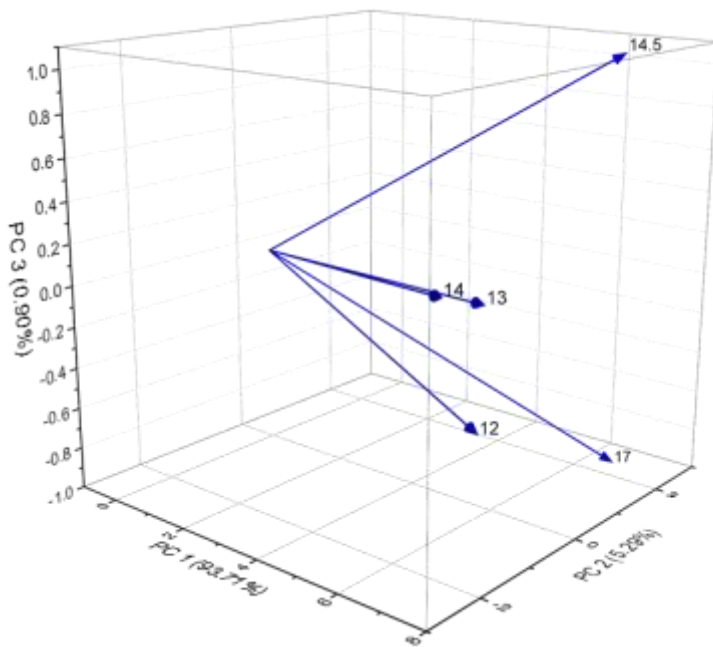


Figura 18. PCA e formës 3D me 3 parametra vetëm për regjionin $950-1550\text{ cm}^{-1}$

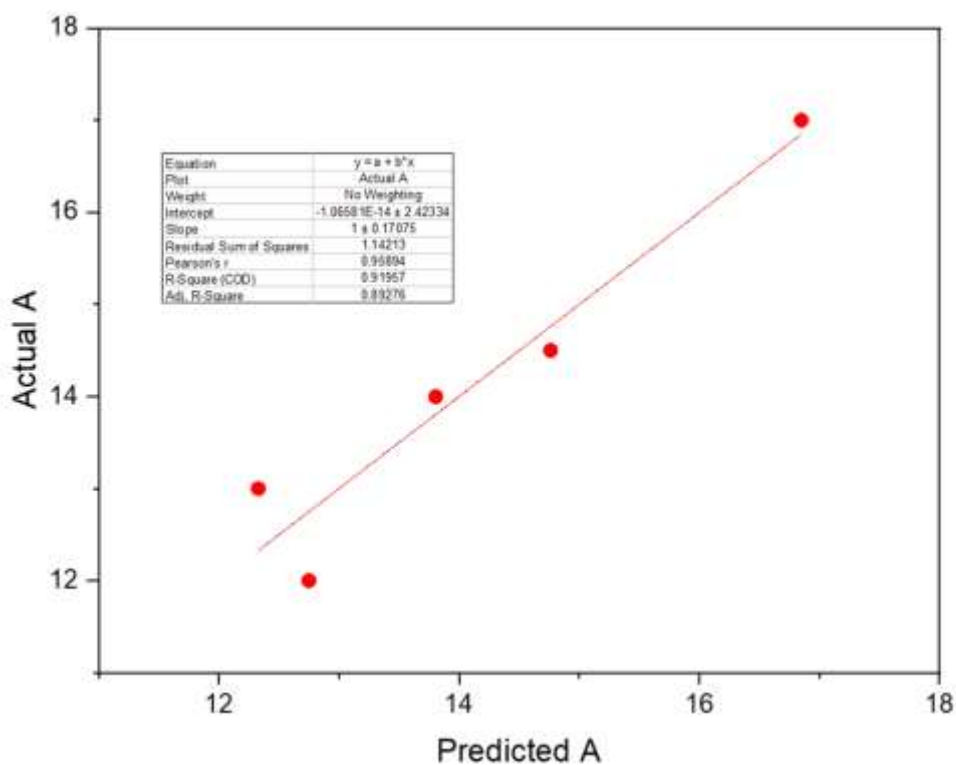


Figura 19. Lakorja e kalibrimit bazuar në spektrin IK të mostrave të verës nr përmbajtje të caktuar të alkooli vetëm në regjionin $950-1560 \text{ cm}^{-1}$

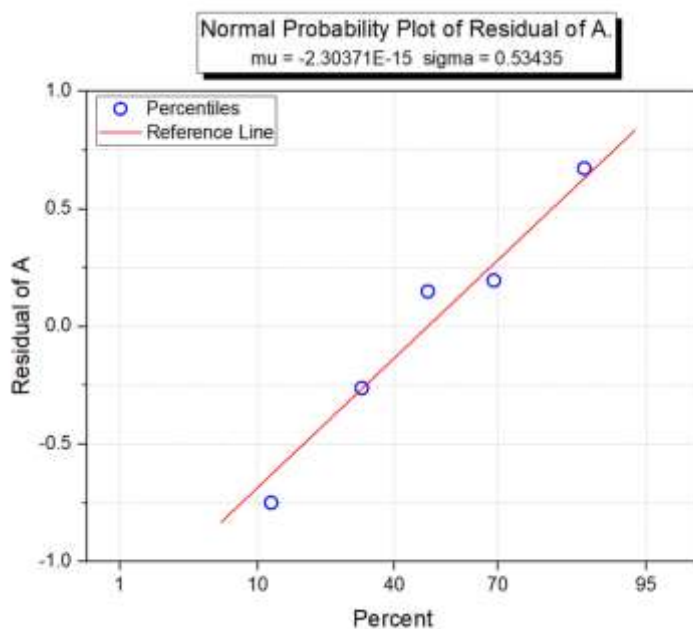


Figura 20. Lakorja e probalitetit të rezultateve bazuar në gabimin e mundshëm

Tabela 2. Vererat e testuara per nivelin e alkoolit dhe te krahesuara me alkoolin e deklaruar ne ato mostra

Lloji i mostrës testuar	Përqindja e deklaruar (%)	Përqindja e etanolit e përcaktuar (%)
Marsala	17	16.85184
Plantaze	14.5	14.76327
Terras	14	13.80582
Sefa Çine	13	12.3289
Cabernet	12	12.75019

Tabela 3. Parametrat fiziko-kimik te vererave

Lloji i mostrës testuar	Përqindja e deklaruar (%)	Përqindja e etanolit e përcaktuar (%)	pH	Dendësia (g/cm ³)
Marsala	17	16.85184	3.401	1.008 cm ³
Plantaze	14.5	14.76327	3.493	0.8749 cm ³
Terras	14	13.80582	3.777	0.977 cm ³
Sefa Ëine	13	12.3289	3.663	1.0165 cm ³
Cabernet	12	12.75019	3.577	0.974 cm ³

KAPITULLI IV

2. DISKTUIMI

Në figurën 1 kemi paraqitur 5 lloje të verërave me përqindje të ndryshëm të alkoolit të deklaruar. Spektri IK në përgjithësi është paraqitur i njëjtë nga vlera 400 deri në 4000, por ndryshimet më të mëdha vrehen tek vlera nga 1000 deri në 1300, e këto janë dyshime që vijnë nga vibrimet që i sjellë etanoli (C-O rreth 1050-1150 cm^{-1}). Këto dyshime për tu vërtetuar që burojnë nga vibrimet e lidhjeve në etanol e improvizuam krahasimin e spektrit të etanolit të pastër me atë verën me përqindje të alkoolit më të lartë (17%). Dhe krahasimi i paraqitur në figurën 2 tregon se vibrimet e etanolit janë kryesisht në regjionet 1000-1300 konkretisht pikët e evidentuara: 1382, 1272, 1325, ndërsa pikët më të shprehura janë 1047 dhe 1087 me qka edhe vërtetohet se këto pikë janë të etanolit në verë.

Për të kuptuar më mirë pikët e etanolit të pastër dhe mbasi synojmë përdorimin e spektrave derivativ atëherë kemi marrë etanolin e pastër dhe kemi krahasuar spektrin bazë me atë të derivuar të rendit të parë dhe të dytë. Dhe shohim se pikërisht pikët 1047 dhe 1087 janë pikërisht të njëjtit që kur të derivohen shfaqen në frekuenca pak të zhvendosura por tashmë është e qartë edhe nëse i përdorim të derivuar fjala është për monitorimin e të njëjtave vibracione.

Në figurën 4 e kemi krahasuar spektrin e pastër të etanolit dhe verës me përmbajtje të alkoolit 17% edhe të mostra e verës të njëjta pikë shfaqen në të njëjta frekuenca. Pra nëse e përdorim derivatin e parë. Të njëjtin krahasim kemi bërë edhe në figurën 5 me të vetmin krahasim që këtu kemi derivuar me derivatin e dytë.

Në figurën 6 kemi aplikuar klasifikimin e mostrave përmes analizës kemometrike multivariabile konkretisht PCA (principal component analysis) në të cilën parametra janë marrë frekuencat e spektrit të plotë dhe figura e paraqitur tregon që vetëm mostra 14.5 është e ndryshme nga të tjerat. Mirëpo kjo analizë e bërë është bazuar në dy parametra dhe modelin 2D dhe kjo mund të bëjë edhe gabime të mundshme gjegjësisht dy mostra që gabimisht mund të duken që ndodhen në të njëjtën pikë por realisht mund të jetë gjykim i gabuar.

Për ta sqaruar këtë gabim që mund të jetë real atëherë i kemi ndryshuar parametrat e PCA dhe kemi shkruar në versionin me 3 parametra dhe pamjen e prezentuar me 3D dhe rezultati i fituar tregon që figura paraprake ka pasur gabime të prezentuara sepse pamja me 3 parametra tregon klasifikimin e fituar që realisht është shumë më i përpunuar sepse që të gjithë mostrat dallojnë nga njëra-tjetra me përjashtim të mostrës me përmbajtje të alkoolit 12 dhe 13% që janë më së afërmi.

Meqë në spektrin bazë dhe atë të derivuar sipas alkoolit të pastër ndryshimet më të dukshme janë në regjionin 950-1550 atëherë kemi zgjedhur vetëm këtë regjion për të paraqitur klasifikimin e mostrave me analizën PCA me 3 parametra në formatin 3D.

Dhe klasifikimi që na e mundësoj ndarjen e të gjitha mostrave pa përjashtime, përfshirë 12 dhe 13 që më herët ishin afër.

Atëherë kemi formuar lakoren e kalibrimit bazuar në spektrin IK të mostrave të verës me përmbajtje të caktuar të alkoolit në regjionin $950-1560\text{cm}^{-1}$ ku lineariteti është 0.91 ku tregon që saktësia është 91%.

Ndërsa në fig 10 kemi paraqitur lakoren e probabilitetit me gabimet e mundëshme në mbetjet e rezultateve të fituara në krahasim me ato të deklaruara. kjo përqindje na tregon një saktësi mjaft të mirë me devijimet minimale të mostrës së parë dhe të tretë.

Në tabelën 1 kemi paraqitur dy kolona, kolona e parë është paraqitur me përqindjen e alkoolit të deklaruar në mostra ndërsa në kolonën e dytë kemi paraqitur përqindjen e alkoolit të testuar. Në përgjithësi janë të ngjashme përpos dy të fundit të cilat kanë dallime më të mëdha mes asaj të deklaruar dhe asaj të testuar. Por ky gabim jo doemos të jetë në metodën por mund të buron edhe nga përqindja e alkollit të deklaruar gabim.

Në tabelën 2 janë paraqitur po ashtu përqindja e alkollit të mostrave të deklaruar dhe të testuar po ashtu janë edhe vlerat e pH dhe dendësisë të testuar te këto mostra. Ndryshime në vlerat e pH dhe dendësisë jo doemos ndërlidhen me përqindjen e alkoolit në to por me rëndësi është që këto dy parametra janë të ndryshme në mostra të ndryshme të verës.

KAPITULLI V

3. PËRFUNDIME

Bazuar në hulumtimin tone vijmë deri te përfundimet vijuese:

- Percaktimi i etanolit në verë rezulton të jetë me një saktësi mjaft të lartë ku gabimi i mundshëm rezulton të jetë minimal.
- Identifikimi i strukturës së etanolit në mostra reale është shumë i qartë në regjionin ku nuk ka interferenca nga perbërësit e tjerë bazuar në etanolin e pastër dhe kjo është e mjaftueshme për identifikim të etanolit.
- Kombinimi i Spektroskopisë IK me Analizat multivariabile PCA dhe PLSR e fuqizon Spektroskopinë IK që përtej identifikimit struktural ajo të gjen aplikim edhe në përcaktime sasiore të etanolit në verë.
- Metoda e propozuar dhe që rrezulton të jetë me saktësi dhe ndjeshmëri të lartë ndër të tjera është me kosto analize të ultë, ekologjike, analizë të shpejtë dhe nuk kërkon përgatitje paraprake e mostrës të cilat paraqesin avatazhe të larta në krahasim me metodat tjera të analizës në aplikim.

CONCLUSION

Based on our research, we come to the following conclusions:

- The determination of ethanol in wine results in a very high accuracy, where the possible error results in a minimal result.
- The identification of the structure of ethanol in real samples is very clear in the region where there is no interference from other ingredients based on pure ethanol and this is sufficient for the identification of ethanol.
- The combination of IR Spectroscopy with PCA and PLSR multivariable analyzes empowers IR Spectroscopy that, in addition to structural identification, it also finds application in quantitative determinations of ethanol.
- The proposed method, which results in high accuracy and sensitivity compared to other methods, has a low analysis cost, ecological, fast analysis and does not require preliminary preparation of the sample, which presents high advantages in comparison with other applied methods of analysis.

REFERENCAT

1. Marianthi G. Basalekou, (2019), *Monitoring wine maturation with alternative chemical analytical methods. Prospects and challenges/* fq.22-23
2. Chrobak, Ula; Zimmer, Katarina (22 June 2022). "Climate change is altering the chemistry of wine". *Knowable Magazine*. doi:10.1146/knowable-062222-1. Retrieved 11 July 2022.
3. McMurry J. *Kimia Organike*. Tiranë: Erik, 2014.
4. Ifie, Idolo (2016) *The Effect of Procsing Conditions on the Bioactive Compounds, Aroma Profile and Sensory Attributes of Wine from Hibiscus sabdariffa*. PhD Thesis, University of Leeds/ [fq. 30-31](#)
5. Myers, Richard L.; Myers, Rusty L. (2007). *The 100 most important chemical compounds: a reference guide*. Westport, Conn.: Greenwood Press. fq. 122. ISBN 0313337586.
6. Ifie, Idolo (2016) *The Effect of Procsing Conditions on the Bioactive Compounds, Aroma Profile and Sensory Attributes of Wine from Hibiscus sabdariffa*. PhD Thesis, University of Leeds/ [fq. 37](#)
7. Ifie, Idolo (2016) *The Effect of Procsing Conditions on the Bioactive Compounds, Aroma Profile and Sensory Attributes of Wine from Hibiscus sabdariffa*. PhD Thesis, University of Leeds/ [fq.38-39-40](#)
8. Ifie, Idolo (2016) *The Effect of Procsing Conditions on the Bioactive Compounds, Aroma Profile and Sensory Attributes of Wine from Hibiscus sabdariffa*. PhD Thesis, University of Leeds/ [fq. 40-41](#)
9. Ifie, Idolo (2016) *The Effect of Procsing Conditions on the Bioactive Compounds, Aroma Profile and Sensory Attributes of Wine from Hibiscus sabdariffa*. PhD Thesis, University of Leeds/ [fq. 41](#)
10. Pradip D. Satav and Archana S. Pethe. Effect of pH on Physicochemical Parameters of Wine Produced from Banana. *Int.J.Curr.Microbiol.App.Sci* (2016) 5(2): 608-613. doi: <http://dx.doi.org/10.20546/ijcmas.2016.502.068>.
11. Torija, M.J., Rozes, N., Poblet, M., Guillamón, J.M., and Mas, A. 2003. Effects of fermentation temperature on the strain population of *Saccharomyces cerevisiae*. *Intern. J. Food Microbiol.* 80(1): 47-53.
12. Jacobson, J.L. 2006. *Introduction to wine laboratory practices and procedures*. Springer Science & Business Media, New York, pp 164-166, 269-271.

13. Reddy, L.V.A., Joshi, V.K., Reddy, O.V.S. 2012. Utilization of tropical fruits for wine production with special emphasis on mango (*Mangifera indica* L.) wine. In: *Microorganisms in Sustainable Agriculture and Biotechnology*. Springer Publisher, Netherland, pp. 679-710.
14. Reddy et al, 2012
15. Silverstein R. M., Webster F. X., Kiemle D. J., *Spektrometrie Identifikation of Organic Compounds*: Wiley, 2014