

Supplementary Information

Characterization of the Volatile Profile of Brazilian Moscatel Sparkling Wines Through Solid Phase Microextraction and Gas Chromatography

*Karine P. Nicolli,^a Juliane E. Welke,^b Mayara Closs,^a Elina B. Caramão,^a Gustavo Costa,^b Vitor Manfroi^b and Claudia A. Zini^{*a}*

^aInstituto de Química, Programa de Pós-Graduação em Química and ^bInstituto de Ciência e Tecnologia de Alimentos, Universidade Federal do Rio Grande do Sul (UFRGS), Avenida Bento Gonçalves, 9500, 91501-970 Porto Alegre-RS, Brazil



Figure S1. Two-dimensional gas chromatography showed superior potential compared to one-dimensional gas chromatography for the characterization of Brazilian Moscatel sparkling wines, which showed a homogeneous volatile signature.

*e-mail: cazini@iq.ufrgs.br

Table S1. Relative area percentage of the headspace volatile components of 23 Moscatel sparkling wines using HS-SPME and ID-GC/qMS

No.	Compound	LTPR _(exp)	A ₁	A ₂	M ₁	M ₂	M ₃	M ₄	M ₅	M ₆	M ₇	M ₈	M ₉	M ₁₀	M ₁₁	M ₁₂	M ₁₃	M ₁₄	M ₁₅	M ₁₆	M ₁₇	M ₁₈	M ₁₉	M ₂₀	M ₂₁					
Acid																														
3	hexanoic acid	997	2.85	1.49	2.01	2.21	2.05	2.53	2.11	2.23	1.82	2.73	3.89	2.59	2.55	3.25	0.99	3.07	0.95	1.94	1.78	1.33	3.61	2.18	2.15					
5	2-ethyl hexanoic acid	1124	-	-	0.05	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0.08	-	-	-	-	-	-	-				
6	sorbic acid	1078	-	-	-	-	-	-	-	3.77	0.38	-	-	-	-	-	-	-	4.16	-	-	-	0.71	-	-	-				
7	octanoic acid	1201	7.15	5.64	10.46	6.21	10.44	11.48	6.55	6.66	4.38	8.10	11.78	5.50	14.86	5.69	2.02	5.83	2.52	3.67	2.52	18.57	9.30	5.92	8.01					
8	nonanoic acid	1273	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0.05	-	-	0.04	-	-	0.57	-	0.05	-	0.72	-					
9	decanoic acid	1381	12.92	9.99	6.60	10.40	6.35	5.43	17.12	6.68	10.78	8.65	11.78	10.28	7.04	10.74	9.51	11.19	6.30	12.86	8.82	11.55	6.89	16.27	8.63					
10	dodecanoic acid	1565	0.12	0.11	-	-	-	-	0.05	0.12	0.10	-	0.14	0.03	0.15	-	0.17	0.09	0.17	-	0.09	0.14	-	-	-	-				
Alcohol																														
11	3-methyl-1-butanol	731	3.22	2.01	1.62	4.21	4.84	2.20	2.39	1.99	8.67	2.83	10.60	2.84	2.88	3.22	0.60	2.57	2.34	2.81	1.29	2.30	5.14	3.19	2.04					
12	2-methyl-1-butanol	735	-	-	0.17	-	-	0.49	0.40	0.56	-	-	-	-	1.06	0.46	0.38	-	0.09	-	0.64	1.79	-	1.30	-					
14	2,3-butanediol	793	0.16	0.15	0.45	0.83	0.31	0.15	0.27	0.13	-	-	-	-	0.10	0.18	0.09	0.57	-	0.44	0.11	0.38	0.23	0.70	0.14					
16	Z-3-hexenol	857	-	-	-	0.28	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0.32	0.07	-	-	-	0.23	-					
17	1-hexanol	872	0.22	0.15	0.14	2.35	0.42	0.27	0.23	0.08	0.44	0.23	0.84	0.13	0.16	0.49	0.27	0.27	0.05	0.64	0.27	0.32	0.32	1.81	0.09					
18	2-heptanol	904	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0.05	-	-	-	-	-	0.06	-	-	-	-	-	-					
19	1-heptanol	973	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0.04	-	-	-	-	-	-					
22	2-ethyl-1-hexanol	1031	-	-	0.13	-	-	0.07	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1.39	-				
24	1-octanol	1074	-	-	-	1.17	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-					
26	2-phenyl ethyl alcohol	1114	4.95	4.37	3.33	5.29	2.19	5.31	8.99	2.09	4.42	4.68	2.69	2.39	4.34	5.41	16.64	5.78	2.28	7.76	3.82	15.01	7.08	3.83	2.63					
30	1-dodecanol	1477	0.14	0.25	0.09	0.46	0.17	0.22	0.30	0.16	0.08	0.06	-	0.13	0.10	0.13	-	-	0.05	0.10	-	-	-	0.22	0.26	-				
Ester																														
34	ethyl butanoate	803	-	0.06	0.12	0.33	0.07	-	0.11	-	0.06	0.11	-	0.04	-	-	-	-	0.18	0.38	0.10	-	0.11	0.14	0.13	0.03				
35	ethyl lactate	817	0.08	0.57	0.05	0.08	0.42	0.05	0.10	0.14	0.14	0.07	0.60	0.06	0.10	-	-	0.13	-	0.10	-	1.25	0.13	-	0.03					
38	isoamyl acetate	877	0.70	-	0.11	-	0.14	0.09	-	0.09	0.24	0.15	0.24	0.39	0.15	0.05	0.09	0.14	0.05	0.39	0.08	0.23	-	-	0.17					
42	ethyl hexanoate	1002	1.65	0.95	2.58	3.06	2.49	1.45	1.56	1.45	1.49	3.06	3.33	2.35	1.45	2.20	0.59	2.01	1.17	1.51	1.05	1.30	3.72	2.53	1.75					
43	Z-3-hexenyl acetate	1009	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0.35	-	-	-	-	-					
44	hexyl acetate	1016	0.30	-	0.07	0.28	0.05	-	-	-	0.09	0.08	0.13	0.13	-	-	0.08	0.05	0.03	2.50	0.08	0.08	-	0.18	0.06					
46	ethyl 2-furoate	1055	-	-	-	-	-	0.04	0.04	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0.07	-	-	-	-	-	-					
51	ethyl sorbate	1098	-	-	-	-	-	-	-	-	10.20	-	-	-	-	-	-	-	4.81	-	7.68	-	-	-	-					
55	methyl octanoate	1126	0.03	0.05	-	-	0.07	-	0.05	0.04	-	0.02	-	0.05	-	-	0.03	-	-	0.04	-	-	-	-	0.05	-				
58	diethyl succinate or diethyl butanedioate	1184	3.90	4.01	5.06	12.31	5.12	9.07	8.33	4.49	3.87	2.79	1.30	3.02	7.38	7.42	3.44	5.95	4.95	6.58	4.19	3.69	10.85	11.31	4.23					
61	ethyl octanoate	1199	23.99	24.16	30.36	17.43	32.83	34.06	17.98	25.54	18.78	30.71	31.64	34.49	29.55	20.27	29.75	30.21	23.69	17.94	18.19	6.14	27.59	17.42	27.63					
62	octyl acetate	1213	-	-	-	0.08	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0.51	-	-	-	-	0.07	-				
63	ethyl benzeneacetate	1246	0.03	0.08	0.16	0.84	0.31	0.15	0.20	0.39	0.13	0.21	0.37	0.07	0.25	0.37	0.19	0.21	0.15	0.36	0.17	0.27	0.20	0.52	0.14					
64	isoamyl hexanoate	1254	0.05	-	-	0.07	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-					
65	2-phenyl ethyl acetate	1258	1.58	-	0.57	-	-	0.79	-	0.41	0.38	0.72	-	0.65	0.47	0.50	2.54	0.68	-	1.15	0.65	1.22	0.11	-	0.93					

Table S1. Relative area percentage of the headspace volatile components of 23 Moscatel sparkling wines using HS-SPME and 1D-GC/qMS (cont.)

No.	Compound	LTPRI _(exp)	A ₁	A ₂	M ₁	M ₂	M ₃	M ₄	M ₅	M ₆	M ₇	M ₈	M ₉	M ₁₀	M ₁₁	M ₁₂	M ₁₃	M ₁₄	M ₁₅	M ₁₆	M ₁₇	M ₁₈	M ₁₉	M ₂₀	M ₂₁		
Aldehyde																											
136	furfural	835	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	
140	decanal	1206	-	-	-	0.03	-	0.02	-	0.04	0.09	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0.10	-	
Norisoprenoid																											
158	vitispirane	1280	0.12	0.40	-	0.62	0.11	0.08	0.30	0.11	0.08	0.12	0.08	0.13	0.20	0.07	0.13	0.30	0.08	0.13	0.30	0.05	0.12	0.43	0.07	0.07	
159	β -damascenone	1386	-	-	-	0.09	-	0.15	-	0.05	0.06	0.06	0.06	0.09	-	-	-	-	0.08	-	-	-	-	-	-	-	
Phenol																											
162	2,3,5,6-tetramethylphenol	1307	-	-	-	-	-	-	-	-	0.06	-	-	0.06	-	-	0.08	-	-	-	-	-	-	-	-	-	
165	2,4-bis(1,1-dimethylethyl)-phenol	1515	-	-	-	0.18	0.11	0.05	-	0.48	-	0.18	1.15	-	0.46	-	-	-	-	0.23	-	-	-	-	-	0.13	
Pyran																											
167	2-ethenyltetrahydro-2,6,6-trimethyl-2H-pyran	970	-	0.11	0.05	0.24	0.04	0.02	0.12	0.06	0.03	0.07	0.13	-	-	0.13	0.04	0.04	-	0.05	0.05	0.03	0.28	0.13	0.06	0.06	
179	ni	1409	0.10	0.09	0.17	0.21	0.16	-	0.21	0.16	0.12	0.16	-	0.08	0.16	0.16	0.04	0.09	0.11	0.14	0.11	0.05	0.14	-	-	0.10	
180	ni	1475	-	-	0.29	-	-	0.07	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0.08	-	-	-	0.07	-	-	
181	ni	1536	-	-	0.12	-	-	0.05	-	0.09	0.11	-	0.05	0.09	-	-	-	0.15	-	-	-	-	-	0.14	-	0.11	

LTPRI: linear-temperature-programmed retention index; LTPRI_(exp): LTPRI that were experimentally obtained on DB-5 column; ni: not identified.