



Application Note AN-RS-056

Quantificazione del metanolo negli alcolici contaminati

Proteggere i consumatori dalle bevande contaminate

Una preoccupante tendenza globale mette in luce i gravi danni che possono derivare dall'ingestione di alcol illegale e distillato in modo improprio. I distillati casalinghi preparati con solventi industriali (ad esempio, alcol metilico) e spacciati per bevande alcoliche legittime spesso contengono metanolo. Il metanolo provoca cecità e può essere letale se ingerito. Ciò ha già causato conseguenze fatali in tutto il mondo [1–3].

Il punto di svolta per la Repubblica Ceca è arrivato nel settembre 2012. La vendita di superalcolici è stata

temporaneamente vietata dopo che 20 persone sono morte a causa del consumo di alcolici con livelli pericolosi di metanolo [2]. Dopo uno studio esaustivo che ha utilizzato vari strumenti di screening, la Repubblica Ceca ha adottato la spettroscopia Raman come metodo di scelta per identificare e quantificare il metanolo negli alcolici contaminati.

Questa Application Note illustra come la spettroscopia Raman possa essere impiegata come metodo di screening rapido ed efficiente per campioni di rum contaminati da metanolo.

INTRODUZIONE

La spettroscopia Raman è uno strumento analitico rapido e semplice per quantificare la quantità di metanolo presente nelle bevande alcoliche. È un metodo ideale per distinguere molecole molto simili come l'etanolo ($\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$) e il metanolo (CH_3OH), come mostrato in **Figura 1**.

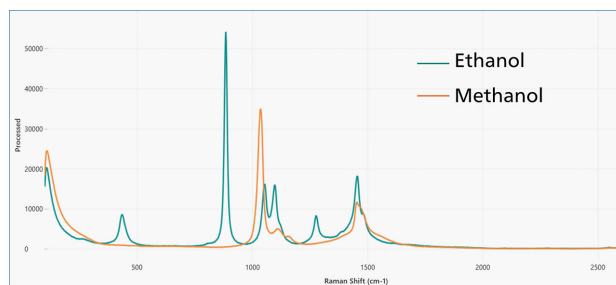


Figure 1. Spettri Raman dell'etanolo puro (verde) e del metanolo puro (arancione).

La capacità degli spettrometri Raman di effettuare misurazioni attraverso i contenitori e la loro scarsa sensibilità all'acqua li rendono particolarmente adatti alla misurazione del metanolo nei campioni di bevande. Queste due caratteristiche fondamentali consentono un rilevamento accurato del metanolo fino a circa l'1% in volume sul campo, senza la necessità di aprire le bottiglie per l'analisi. In laboratorio, l'i-Raman NxG e il software SpecSuite ampliano le capacità di rilevamento della spettroscopia Raman, aggiungendo la possibilità di quantificare gli adulteranti. (**Figura 2**)



Figure 2. Lo spettrometro i-Raman NxG, abbinato al software SpecSuite, è ideale per l'individuazione rapida e lo screening quantitativo di adulteranti pericolosi nelle bevande alcoliche.

ANALISI

Questo studio esemplificativo misura il rum di cocco disponibile in commercio addizionato con metanolo in concentrazioni comprese tra lo 0,33% e il 5,36%. Lo spettrometro i-Raman NxG 785H con sonda a fibra ottica viene utilizzato per acquisire gli spettri Raman delle miscele (**Figura 3**). La **Tabella 1** elenca le apparecchiature e le impostazioni dello strumento utilizzate per questo studio applicativo.

Il picco a circa 1000 cm^{-1} (evidenziato dall'inserto della **Figura 3**) aumenta visibilmente con l'aumentare della concentrazione di metanolo, diventando significativo a circa l'1%.

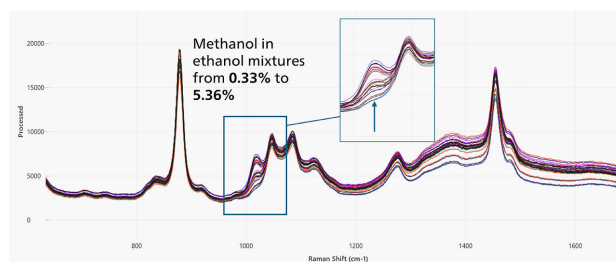
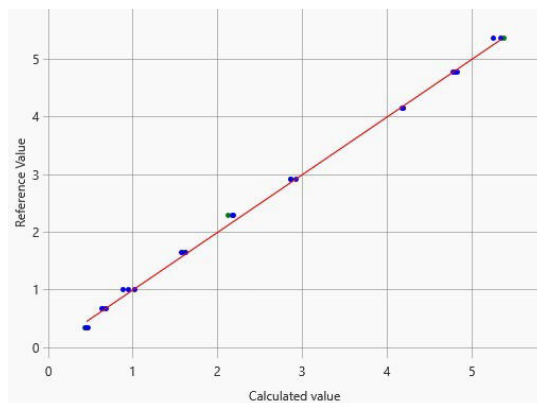


Figure 3. Spettri Raman di rum addizionato con metanolo a diverse concentrazioni. Nell'inserto: le intensità dei picchi riflettono le variazioni del rapporto metanolo:etanolo.

Tabella 1. Parametri di analisi.

Strumento	Impostazioni di acquisizione	
i-Raman NxG 785H	Laser Power	100
Vial holder	Int. time	1 s
SpecSuite Software	Average	1

Questi dati vengono analizzati con il software SpecSuite e viene sviluppato un modello di regressione ai minimi quadrati parziali (PLS) sui dati normalizzati. Il modello a due fattori sviluppato nell'intervallo da 980–1040 cm^{-1} fornisce la curva di calibrazione mostrata in **Figura 4**, che ha un errore di convalida incrociata (SECV) di 0,0794 (**Tabella 2**). Il valore R^2 di 0.9980 mostrato nella **Tabella 2** significa che il metodo Raman qui utilizzato può essere impiegato per quantificare con sicurezza la quantità di metanolo in un campione di alcol misto.

**Figure 4.** Modello di regressione PLS per prevedere la quantità di metanolo nel rum.**Tabella 2.** Parametri di regressione utilizzati per lo sviluppo del modello PLS per la determinazione del metanolo nel rum con lo spettrometro i-Raman NxG 785H.

Parametro	Valore
Spectral processing	Mean centering Savitzky-Golay derivative
R^2	0.9980
SEC	0.0681
SECV	0.0794

CONCLUSIONE

Questi risultati confermano che la spettroscopia Raman può essere utilizzata per lo screening rapido e quantitativo di adulteranti pericolosi nelle bevande

alcoliche. Questa tecnica può essere estesa all'analisi delle adulterazioni in altri settori, come alimenti, prodotti petroliferi e farmaci [4].

REFERIMENTI

1. Lachenmeier, D. W.; Schoeberl, K.; Kanteres, F.; Is Contaminated Unrecorded Alcohol a Health Problem in the European Union? A Review of Existing and Methodological Outline for Future Studies. *Addiction* **2011**, *106* (s1), 20–30. <https://doi.org/10.1111/j.1360-0443.2010.03322.x>.
2. Spritzer, D.; Bilefsky, D. Czechs See Peril in a Bootleg Bottle. *The New York Times*. USA September 17, 2012.
3. Collins, B. Methanol Poisoning: The Dangers of Distilling Spirits at Home. *ABC*. Australia June 13, 2013.
4. Gryniewicz-Ruzicka, C. M.; Arzhantsev, S.; Pelster, L. N.; et al. Multivariate Calibration and Instrument Standardization for the Rapid Detection of Diethylene Glycol in Glycerin by Raman Spectroscopy. *Appl Spectrosc* **2011**, *65* (3), 334–341. <https://doi.org/10.1366/10-05976>.

CONTACT

Metrohm Italiana Srl
Via G. Di Vittorio, 5
21040 Origgio (VA)

info@metrohm.it

CONFIGURAZIONE



i-Raman NxG 785H

L'i-Raman NxG 785H è ideale per il controllo di qualità di routine e il monitoraggio del processo, particolarmente dove la velocità, la stabilità e l'affidabilità sono essenziali. Offre una combinazione equilibrata di prestazioni ed efficienza per misurare una dispersione Raman compresa tra 100 e 2800 cm^{-1} .

Progettato per supportare un elevato flusso di segnale, questo sistema flessibile è ideale per il monitoraggio di reazioni chimiche e polimeriche, l'ottimizzazione dei processi e l'esecuzione di test di uniformità su compresse farmaceutiche. L'i-Raman NxG 785H può essere facilmente adattato per misure "see-through" anche attraverso contenitori opachi, aumentando la sua versatilità.

L'i-Raman NxG 785H è la soluzione abituale per i team che cercano un'analisi Raman affidabile in ambienti operativi difficili.

Scoprite perché l'i-Raman NxG è il modo perfetto per assumere il controllo delle vostre misure di controllo di qualità:

- spettrometri ad alta sensibilità forniscono risultati nel giro di secondi e sono in grado di rilevare i segnali Raman più deboli
- Sonda con conduttore ottico flessibile compatibile con un'ampia gamma di accessori, tra cui un supporto per vial, un supporto per cuvette, una sonda a immersione e un adattatore ST per la visualizzazione attraverso gli strati
- Potente software SpecSuite per una facile raccolta dei dati Raman oltre a una costruzione di modelli quantitativi, l'identificazione con librerie spettrali e analisi di routine

Compatto e impilabile per salvare spazio prezioso sul banco.



Accessorio di supporto per vial

Accessorio di supporto per vial per l'utilizzo con sonde Raman da laboratorio con diametro dello stelo di 9,5 mm. Compatibile con vial di 15 mm di diametro. Confezione da 6 vial in vetro borosilicato da 15 mm inclusa.