



Application Note AN-RS-056

受染酒中甲醇的定量

保消费者免受染品的危害

全球范围内出现的一个令人担忧的表明,用非法、蒸工不合格的酒精会造成严重的人身伤害。以工业酒精(即木醇)原料自制的蒸馏酒,若冒充正酒出售,其内部往往含有甲醇。甲醇具有毒性,摄入后会致失明,严重可致人死亡,已在全球多地引致致命事故 [1-3]。

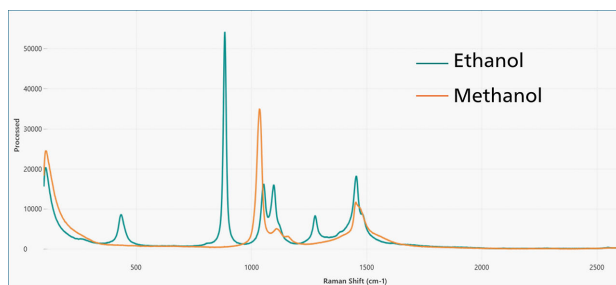
2012年9月成捷克共和国的地点:因20人用甲醇含量超

的烈性酒身亡,该国随即叫停了烈性酒的出售[2]。在通过多种手段展开全面研究后,捷克共和国正式将拉曼光谱法定为受染酒中甲醇的首选方法,用于甲醇的定性与定量分析。

本报告将阐明,如何将拉曼光谱法作为一高效、快速的手段,用于受甲醇污染的朗姆酒品。

引言

拉曼光法是一快速便的分析手段,可酒品中的甲醇染含量行定量。如 1 所示,于乙醇($\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$)和甲醇(CH_3OH)高度相似的分子,方法也是二者有效区分的理想技。



1. 乙醇（色）与甲醇（橙色）的拉曼光

拉曼光可透容器完成,且水不敏感,大特性使其成品中甲醇含量的非常合的工具。依托核心,无需容器,即可酒中体分数低至1%的甲醇的精准。在室境中,i-Raman NxG拉曼光搭配SpecSuite光分析件,一步提升了拉曼光法的能力,了酒中添加物的定量分析(2)。

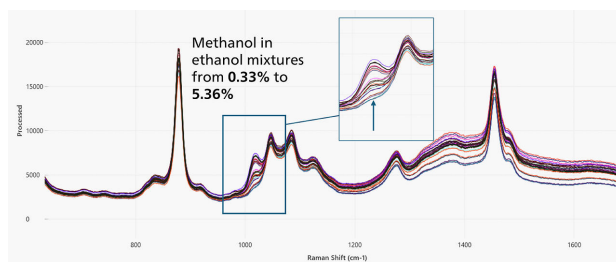


2. i-Raman NxG拉曼光搭配SpecSuite分析件, 是酒品中有害添加物的快速与定量的理想方案

部分

本研究以市售椰子朗姆酒基底,向其中添加甲醇配制成甲醇度在 0.33% 至 5.36% 之的待品。采用搭光探的 i-Raman NxG 785H 拉曼光各混合品采集拉曼光(3),本用研究所用相及器参数置表 1。

在 1000 cm^{-1} 附近的特征峰(3内注)度随甲醇度的升高呈明上升,当甲醇度到 1% ,特征峰的化尤著。



3. 不同甲醇度的受染朗姆酒拉曼光内: 特征峰度随甲醇 / 乙醇比例化而改

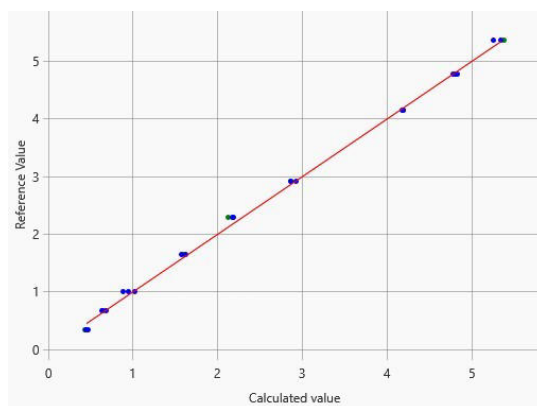
表 1 参数

	采集置	参数
i-Raman NxG 785H	激光功率	100
品瓶支架	分	1 秒
SpecSuite 件	平均次数	1

采用 SpecSuite 件上述数据行分析,并基于一化数据建立偏最小二乘(PLS)回模型。

在980–1040 cm⁻¹波数范内建的双因子模型,得到如 4 所示的校准曲,其交叉准差(SECV) 0.0794(表 2)。

由表 2 可知,模型决定系数 R² =0.9980,表明本研究采用的拉曼光法可可靠地混合酒品中的甲醇含量行定量分析。



4. 用于朗姆酒中甲醇含量的偏最小二乘 (PLS) 回模型

表 2

采用 i-Raman NxG 785H 建立朗姆酒中甲醇含量定 PLS 模型所用的回参数

参数	数
光理	均中心化 Savitzky-Golay 数法
相系数R ²	0.9980
校正准差(SEC)	0.0681
交叉准差(SECV)	0.0794

些果了拉曼光法可用于酒品中有害添加物的快速定量

。技可拓展用于食品、石油及品等其他介的 [4]。

参考料

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 AG
Ionenstrasse
9100 Herisau

info@metrohm.com

器配置



i-Raman NxG 785H

i-Raman NxG 785H 是常量控制和程控的理想之选,尤其用于速度、定性和可靠性要求高的场合。它在 100-2800 cm^{-1} 的 Raman 散射量范围内性能与效率的均衡之选。

系统支持高信号通量,活性高,非常适用于化学品与聚合物反、化工流程以及行品片的含量均匀度。i-Raman NxG 785H 能适配,甚至可透不透明容器行透射量,一步增了其多功能性。

i-Raman NxG 785H 是在挑战性操作环境中求可靠 Raman 分析的首选解决方案。

深入了解 i-Raman NxG 何以成完美掌控量控制量的理想之选:

- 高灵敏度光可在数秒内出果,并能到其微弱的 Raman 信号。
- 可与包括小管支架、比色皿支架、浸入式探和透射配置器在内的多附件兼容的柔性光探。
- 功能强大的 SpecSuite 件,不便于松采集 Raman 数据,可用于建立量化模型、行以及行常分析,可堆,有效省宝的台空。



小管支架附件,用于套管直径 9.5 mm 的室 Raman 探
。兼容 15 mm 直径小管。随附 6 个装 15 mm 硼硅
酸玻璃小管。