

МЕХАНИЗМ ВИДОИЗМЕНЕНИЯ ГИДРОКСИЛЬНЫХ ПРОТОНОВ ВОДНО-СПИРТОВЫХ СМЕСЕЙ В ПРОЦЕССЕ СОЗДАНИЯ ВОДОК

Цель. Исследование механизма видоизменения гидроксильных протонов этанола и воды в процессе создания водно-спиртовых смесей.

Методы. ^1H ЯМР спектроскопия водно-спиртовых смесей, методы оценки физико-химических и органолептических показателей воды, этанола, водно-спиртовых смесей.

Результаты. Экспериментально доказана зависимость скорости и характера установления термодинамического равновесия, а также получение оптимальных органолептических характеристик водки в зависимости от способа водоподготовки и времени контакта компонентов водно-спиртовых смесей.

Научная новизна. На основании проведенного исследования установлено принципиальное различие поведения водно-спиртовых смесей, полученных из спирта и воды, прошедшей различную обработку.

Практическая значимость. Получены системы с установившемся и неустойчивым равновесием гидроксильных протонов в водно-спиртовых смесях, которые имеют отличительные органолептические свойства.

На сегодняшний день спектроскопия ядерного магнитного резонанса (ЯМР) достойно завоевала популярность среди физических методов исследования, который все больше находит применение в науке, медицине, биологии, физике, химии, а также промышленности и сельском хозяйстве.

Принцип работы ЯМР-спектроскопии основан на использовании магнитных свойств некоторых атомных ядер, способных резонировать на характеристичных частотах электромагнитного спектра при помещении их в сильное магнитное поле, что позволяет идентифицировать ядра в различном химическом окружении.

Группы протонов имеют различный химический сдвиг - безразмерный параметр, определяющий положение сигнала в спектре, за единицу измерения которого принимается 1 млн. доля (м.д.) резонансной частоты, относительно условного нуля - сигнала эталонного соединения.

Для выполнения ряда лабораторных экспериментов и измерений использовано научное и сертифицированное оборудование на предприятиях: ООО «Донецкий ликеро-водочный завод «Лик»; ИнФОРУ им. Л.М. Литвиненко НАН Украины (г. Донецк); Донецкий региональный испытательный центр воды коммунального предприятия «Компания «Вода Донбасса». Использованные приборы, а также материалы, реактивы и посуда: Фурье-ЯМР-спектрометр Bruker Avance II (400 МГц): напряженность магнитного поля - 9,4 Тл; рабочая частота на ^1H - 400 МГц; капилляр специальной формы с дейтерорастворителем $(\text{CD}_3)_2\text{CO}$ (ацетон- d_6 , дейтероацетон, ДАЦ) использован для обеспечения работы системы дейтериевой стабилизации при записи спектров; ампулы №507-НР высокой точности для ЯМР-спектроскопии высокого разрешения (частота 400 МГц); мерная пипетка; дозатор; питьевая вода; вода умягченная за счет Na -катионитного обмена; вода технологическая – деминерализованная посредством обратного осмоса; спирт этиловый ректификованный (СЭР) класса «Люкс»; модельные ВСС с заданной крепостью $(40,0 \pm 0,2) \%$ об.; ВСС из СЭР класса «Люкс» и питьевой воды; ВСС из СЭР класса «Люкс» и воды технологической – умягченной за счет Na -катионитного обмена; ВСС из СЭР класса «Люкс» и воды технологической – деминерализованной, посредством обратного осмоса.

Молекула этанола состоит из 6 протонов, расположенных в 3-х магнитно неэквивалентных протон-содержащих группах: метильной (CH_3), метиленовой (CH_2), гидроксильной (OH), с относительной интенсивностью - 3:2:1.

Между тремя протон-содержащими группами этанола, имеющими разные частоты резонанса, существует ядерное спин-спиновое взаимодействие, причем n эквивалентных протонов (спин 1/2) одной группы расщепляют резонанс соседней группы на $(n+1)$ линий с интенсивностью по треугольнику Паскаля.

Вывод. На основании проведенного исследования установлено принципиальное различие поведения ВСС полученных из спирта и воды, прошедшей различную обработку. Система с неустойчивым равновесием для: ВСС из СЭР класса «Люкс» и питьевой воды имеет отличительные органолептические свойства - дегустационную оценку - 9,43 балла (внешний вид - бесцветная жидкость с осадком; запах – резкий спиртовый; вкус - тяжелый); ВСС из СЭР класса «Люкс» и деминерализованной воды посредством обратного осмоса с дегустационной оценкой – 9,30 балла (внешний вид - бесцветная жидкость без осадка; запах – резкий спиртовый; вкус - кисло-горький, жгучий). Система с установившимся равновесием характерна для ВСС из СЭР класса «Люкс» и воды технологической – умягченной за счет Na -катионитного обмена, которая отличается наилучшими органолептическими свойствами с наибольшей дегустационной оценкой – 9,49 бал. (внешний вид - бесцветная жидкость без осадка; запах – резкий спиртовый; вкус - горьковатый, смягченный). Полученные результаты согласуются с традиционной технологией получения продукта, включающей использование термодинамически равновесной (природной) воды.

Таким образом, в работе получены экспериментальные доказательства зависимости как скорости и характера установления термодинамического равновесия так и получения оптимальных органолептических характеристик водки от способа водоподготовки и времени контакта компонентов ВСС.

Показано, что для обеспечения получения высоких характеристик водочных продуктов, полученных с использованием воды обратного осмоса необходимо проведение дополнительных исследований с целью поиска оптимальных параметров постобработки ВСС.