

І.А. Оносова, канд. екон. наук, доц. (*ДонНУЕТ, Донецьк*)

О.В. Кузьмін, канд. техн. наук, доц. (*ДонНУЕТ, Донецьк*)

ВИКОРИСТАННЯ ЯМР-АНАЛІЗУ ПІД ЧАС ОЦІНЮВАННЯ ЯКОСТІ ГОРІЛКИ

Майже усі харчові продукти за своїм складом належать до складних гетерогенних систем, що затрудняє спектрометричну ідентифікацію вміщуваних сполук. Горілка є досить простою фізико-хімічною системою: сумішшю спирту і води. Проте, кожен бренд продукту має спостережувані відмінності як на молекулярному рівні, так і за смаковим сприйняттям. Проведені в роботі Hu N., Wu D. та іншими авторами дослідження підтверджують, що ці відмінності істотні як на етапі створення водно-спиртової суміші, так і в кінцевому продукті – горілці, що йде у продаж. Дослідженням доведено, що основні відмінності продукту пов'язані з міцністю водневих зв'язків, це засвідчують інші автори – вони також пов'язують сприйняття органолептичних показників горілки із наявністю частки гідратів $\text{EtOH} \cdot (5,3 \pm 0,1) \text{H}_2\text{O}$.

Серед існуючих методів контролю алкогольної продукції на увагу заслуговує відомий як «раманівська спектроскопія» спосіб визначення складу водно-спиртової суміші з використанням методу спектроскопії комбінаційного розсіювання світла. У спектрі розсіяного випромінювання з'являються спектральні лінії, яких немає в спектрі первинного світла. Число і розташування ліній визначається молекулярною будовою розчину, що дозволяє встановити склад розчину (горілки). Раманівські спектрометри дозволяють проводити двовимірне і тривимірне картографування зразків.

Досвід використання експрес-методу контролю алкогольної продукції за показниками її інфрачервоного спектра має суттєвий недолік – необхідність використання сольової оптики, а на вміст води у зразках існують обмеження. Крім

того, ступінь використання класичного варіанту даного методу в практичних цілях істотно обмежується не тільки складністю проведення аналізу, а й труднощами інтерпретації отриманих даних.

На підставі проведеного аналізу існуючих методів можна констатувати: вони дозволяють встановити структуру надмолекулярних агрегатів горілки, але не характеризують ступінь їх рівноваги.

Завданням даного дослідження була розробка способу визначення рівноважного стану водно-спиртової рівноваги як кількісного аналітичного методу оцінки якості горілки із застосуванням ЯМР-аналізу ідентифікації органічних сполук. Спосіб полягає у визначенні стану рівноваги за характеристикою сигналів ОН-протона спирту і води.

В якості крайнього випадку служить дистилят (самогон, або інший аналогічний за способом приготування напій), оскільки через високотемпературну технологічну обробку водно-спиртовий розчин знаходиться в стані сталої рівноваги.

Слід відмітити: при дослідженні свіжо-виготовленої водно-спиртової суміші із заданою міцністю $(40,0 \pm 0,2)\%$ об. на спектрограмі помітні окремі сигнали ОН-протона спирту і води (рис.).

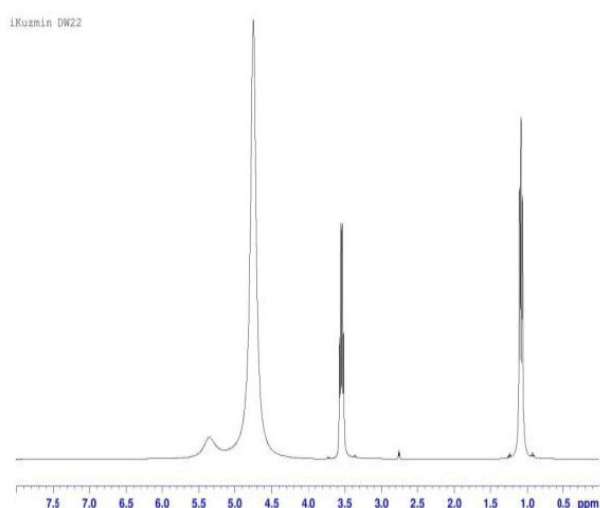


Рисунок – Одновимірний протонний спектр дослідженого зразка горілки

На спектрограмі видно, що в області гідроксильних протонів етанолу та води присутні два роздільних сигнали – ОН-етанолу ($\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$) і H_2O води. Компонента мультиплету гідроксильного (ОН) протона етанолу ($\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$) представлена у вигляді ледь помітної випуклості, яка знаходиться в більш слабкому полі з хімічним зсувом $\delta_{\text{OH}} = 5,35$ ppm. Сигнал протонів води (H_2O) представлений у вигляді подовженого синглету симетричної форми з розширеною основою, який знаходиться при $\delta_{\text{OH}} = 4,78$ ppm. Такий зразок є водно-спиртовою сумішшю з несталою рівновагою.

Проведені дослідження дозволяють запропонувати використання ЯМР-спектроскопії як ефективний кількісний аналітичний метод визначення стану рівноваги водно-спиртової суміші при оцінюванні якості горілки.