

ВСТАНОВЛЕННЯ НЕСТАЛОЇ РІВНОВАГИ У ГОРІЛКАХ ЗА ДОПОМОГОЮ ^1H ЯМР СПЕКТРОСКОПІЇ

Кузьмін О.В., канд. техн. наук, доцент кафедри ГРД
ДонНУЕТ імені Михайла Туган-Барановського
м. Донецьк

Метою експериментальних досліджень є встановлення рівноважного стану гідроксильних протонів етанолу і води у горілках і горілках особливих, вироблених в Україні, за допомогою ^1H ЯМР спектроскопії.

^1H ЯМР аналіз горілок і горілок особливих проводився у сертифікованій лабораторії ІнФОВ ім. Л.М. Литвиненка НАН України (м. Донецьк), із використанням: Фур'є ЯМР спектрометра Bruker Avance II (400 МГц); капіляра з дейтеророзчинником (ацетоном- d_6); ампул №507 - НР для ЯМР спектроскопії високого розділення для частоти 400 МГц; дозатора. В якості експериментального матеріалу використовували 8 зразків горілок і горілок особливих різних виробників, торговельних марок, найменувань та рецептур.

Зразки горілок і горілок особливих з несталою рівновагою характеризуються відсутністю унітарного сигналу ($\text{H}_2\text{O}+\text{EtOH}$), тому гідроксильна група протонів представлена двома розділними піками води (H_2O) і спирту (EtOH) (рис. 1, с1-с8). Компонента мультиплета гідроксильного протону етанолу (EtOH) для всіх зразків представлена у вигляді окремого розширеного синглету (s) округлої форми, який знаходиться у «слабкішому полі» з хімічним зрушенням $\delta_{\text{EtOH}}=5,34$ ppm. Компонента протона води (H_2O) для всіх зразків горілок представлена у вигляді синглету (s) з хімічним зрушенням $\delta_{\text{H}_2\text{O}}=4,72$ ppm. Форма сигналу протонів H_2O - викривлена крива гауса, з розширеною основою і деякою асиметрією вершини, пік якої має зміщення відносно осьової лінії.

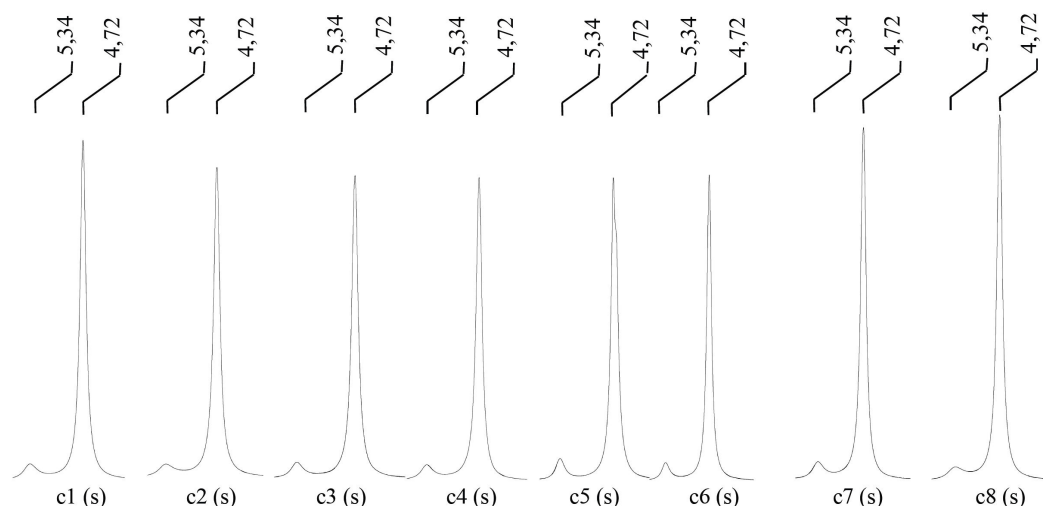


Рис. 1 - Видозміни ^1H ЯМР спектрів гідроксильної групи протонів

Різниця у хімічних зрушеннях між ОН-протоном (EtOH) і протоном води (H_2O) для всіх зразків складає $\Delta\delta_1=0,62$ ppm. Це може свідчити про те, що не були створені умови для утворення структури води з гідроксильним протоном спирту, тому можна стверджувати, що для цих зразків термодинамічна рівновага ще не наступила.

Науковий керівник – док. техн. наук
професор Топольник В.Г.