



Application Note 410000019-B

# 拉曼法定工假酒中的甲醇

## 保消者免受侵害

入非法造的酒精会健康来重的后果。些蒸烈酒常使用工溶如木醇来制,并被当作酒精料出售,其中往往含有甲醇。成分一旦被人体入,不可能致失明,重甚至可能致命。一已在多个大引致命事件[1-3]。

捷克共和国在2012年9月遭遇了此事件。当,由于有20人因用含有高度甲醇的烈酒而死亡[2],国被迫禁止

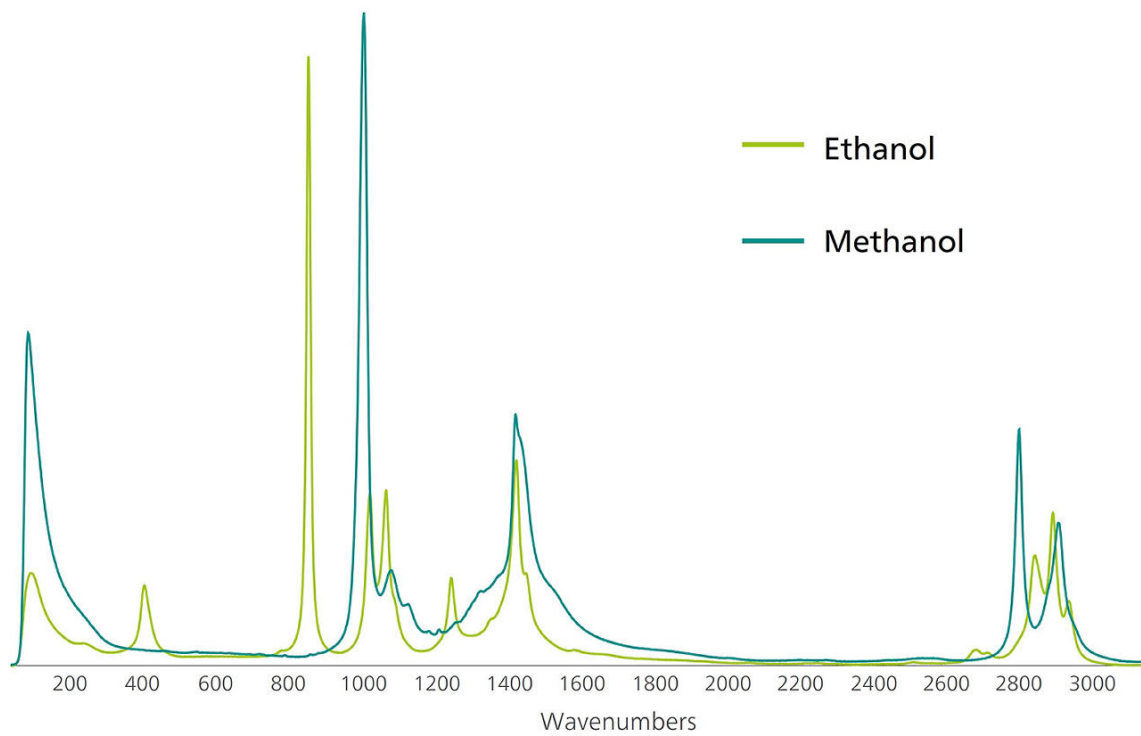
售烈酒。一系列使用不同工具的深入研究后,捷克共和国决定采用拉曼光学作定和量化受染烈酒中的甲醇含量的方法。

本用明解了何拉曼光学是理想的技,并展示了一个利用拉曼光分析含有甲醇朗姆酒的案例。

## 明

拉曼光是一快速、便的分析工具,可用于定量酒精品中的甲醇含量。是一理想的方法,用于区分非常相似的分

子,如乙醇( $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$ )和甲醇( $\text{CH}_3\text{OH}$ ),如1所示。



### 1. 乙醇（色）和甲醇（色）的拉曼光。

拉曼光相比于外光具有如下:

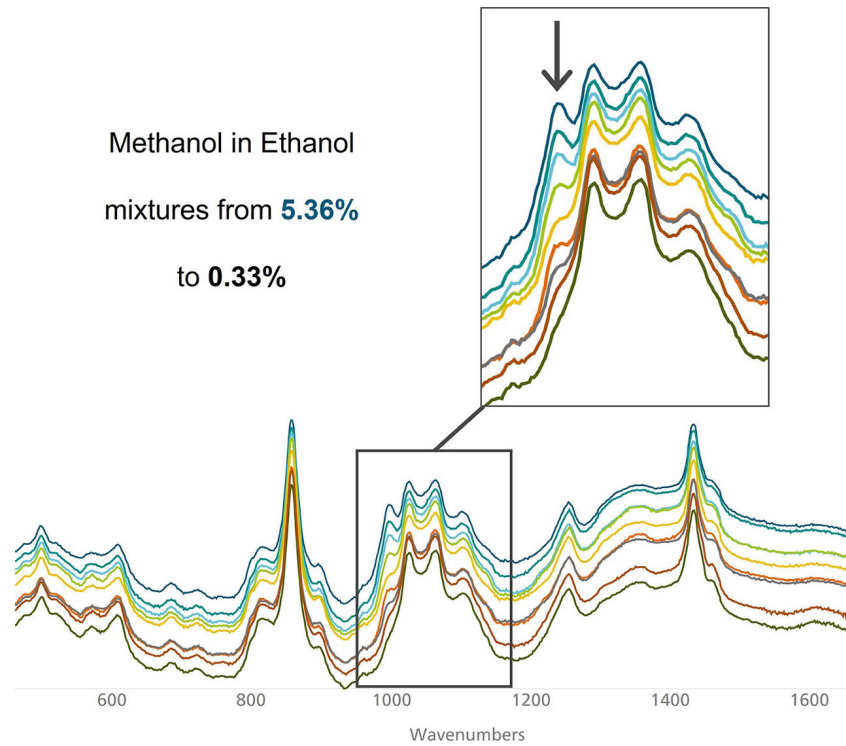
- 通透明容器行量的能力
- 水干不敏感

个特性使得拉曼技能在准低至1%体的甲醇,而无需打瓶子。



我在市售朗姆酒中入了度在0.33%和5.36%之的甲醇。  
i-Raman® Plus是一套敏的高分辨率室系,配有光探

,用于收集混合物的拉曼光,如2所示。表1列出了用于  
本用研究的相和器置。



2. 了不同甲醇度的朗姆酒的拉曼光, 箭所示的峰随着甲醇度的增加而增加。

在 $1000\text{ cm}^{-1}$ 附近的峰随着甲醇度的增加而明增加,在 1%明。

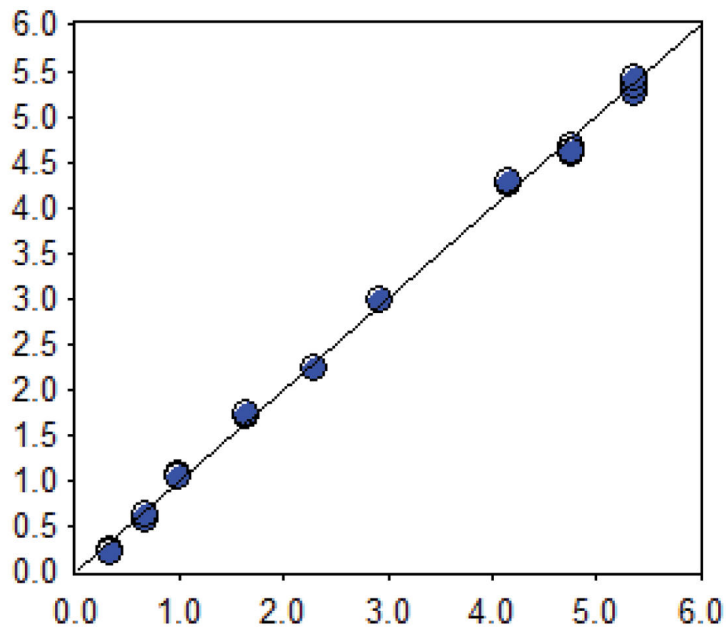
表1,参数

采集参数		
i-Raman Plus 785S	激光功率	100
采支架	采集	20s
Vision 件	平均	1

用Vision件些数据行分析,并一化数据建立偏最小二乘(PLS)回模型。在 $920\text{-}1580\text{ cm}^{-1}$ 范内通双因素模型出了3所示的校准曲,其交叉均方根差(RMSECV)

0.1069(表2)。表2中所示的 $R^2$ 0.9977意味着此使用的拉曼方法能可靠地定量混合醇品中的甲醇量。

## Calibration Set : Calculated vs Lab Data



3. 偏最小二乘回模型朗姆酒中甲醇的含量。

表2. 用于PLS模型的回参数,以使用i-Raman Plus 785S定朗姆酒中的甲醇。

参数	数
理	准正量
$R^2$	0.9977
校准均方根差	0.0976
交叉校准均方根差	0.1069

些果了拉曼可用于快速、定量酒精料中成公共安全的危物。技可以展到其他媒介中的假,如食品,石油和物 [4]。

## 参考文献

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](mailto:info@metrohm.com)

## 配置



### i-Raman Plus 785S

i-Raman<sup>®</sup> Plus 785S 是我屡殊的 i-Raman 便携式拉曼光系列的一部分,其采用我新的智能光技。款便携式拉曼光使用了具有高量子效率、TE 冷却功能和高范的 CCD 列器,即使集成 30 分,也能提供出色的低噪声性能。因此,可以量弱的拉曼信号。

i-Raman Plus 785S 具有光范和高分辨率的特点,其配置允在  $65\text{ cm}^{-1}$  至  $3350\text{ cm}^{-1}$  之行量。系基面小,形式巧并且能耗低,故此可随随地行研究的拉曼分析。i-Raman Plus 配有便于采的光探,并可以与一个比色皿支架、一个微、一个探支架的 XYZ 平移台、我公司内部的 BWIQ<sup>®</sup> 多量分析件和定件 BWID<sup>®</sup> 搭配使用。有了 i-Raman Plus,始可以使用高精度拉曼解决方案行定性和定量分析。



小管支架的配器,用于室量的拉曼探  
BAC100/BAC102,杆径 9.5 mm。与直径 15 mm 的  
小管兼容。一包有 6 个硼硅酸玻璃材的小管 (15  
mm)。



#### Vision 4.1

Vision 是一数据采集和方法件解决方案,用于 B&W  
Tek 便携式拉曼器、Metrohm XDS 室和程 NIRS 器  
的光分析和控制。用友好的形分析界面支持化学量学  
算法的用,以建、定和定量方法并行它。借助 Vision,  
可以存、管理、重新理和交数据。