

# Ramanova spektroskopie: pomocník alkoholika

Štěpán Remes<sup>1</sup>, Vladimíra Jiříčková<sup>2</sup>

Gymnázium Christiana Dopplera<sup>1</sup>

Gymnázium Jaroslava Vrchlického Klatovy<sup>2</sup>

stepanremes7@gmail.com<sup>1</sup>, jirickova.vladimira@seznam.cz<sup>2</sup>

## Abstrakt

Methanol je životu nebezpečná látka, která se může vyskytovat v alkoholických nápojích. Naším cílem bylo určit zapomocí Ramanovy spektroskopie kalibrační křivku z naměřených dat předem namíchaných roztoků methanolu s ethanolem o různých poměrech a podle ní určit koncentraci roztoku s neznámým poměrem methanolu s ethanolem a nakonec ověřit, zda se nevyskytuje methanol v komerčních či domácích lihovinách.

## 1 Úvod

### 1.1 Methanol a ethanol

Methanol  $\text{CH}_3\text{OH}$  je nejjednodušší alkohol, jedná se o uhlovodíkový zbytek methyly, na který je navázána alkoholová skupina. Oproti tomu ethanol  $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$  je alkoholem ethanu.

Ethanol  $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$  je lidstvu známý již od starověku, kdežto methanol, nejjednodušší alkohol, byl objeven teprve v novověku. Methanol vzniká při kvašení v malém množství. Pokud se ale nápoj destiluje špatně, může se methanol koncentrovat, což není bezpečné.

Samotný methanol je sice pro lidské tělo neškodný, ale za přítomnosti enzymu alkoholdehydrogenázy se oxiduje na formaldehyd a dále s aldehyddehydrogenázou na kyselinu mravenčí, která je pro lidský organismus velmi nebezpečná - hromadící se kyselina mravenčí v sítnici může zapříčinit oslepnutí, ve větších dávkách i smrt.

Naštěstí se ale ethanol váže na alkoholdehydrogenázu silněji než methanol, tudíž působí jako protijed. Ethanol se metabolizuje na acetaldehyd a dále na kyselinu octovou, která zdaleka není tak nebezpečná jako kyselina mravenčí.

### 1.2 Ramanova spektroskopie

Molekuly vibrují (mění se délka a úhel chemických vazeb) a každá velmi specificky. Tyto vibrace je možné změřit pomocí dvou spektroskopií - infračervené a Ramanovy (tyto metody jsou komplementární).

Když na molekulu posvítíme infračerveným zářením, excituje se na vyšší vibrační hladinu a tam již zůstane. V Ramanově spektroskopii nesvítíme na molekulu infračerveným paprskem, ale viditelným laserem. Fotony laserového svazku se na molekule nepružně rozptýlí. Foton předává molekule část své energie a ta se excituje do vyššího vibračního stavu. Tuto změnu energie rozptýleného fotonu, která odpovídá energii kmitu dané vazby, následně měříme a dokážeme tak určit o kterou vazbu se jedná.



Obrázek 1: Fotografie použitého spektrometru Reinshaw inVia<sup>tm</sup>

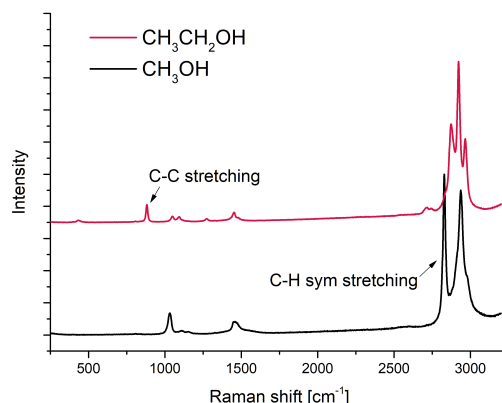
Výstupem Ramanovy spektroskopie je tedy spektrum, který ukazuje závislost rozdílu vlnové délky rozptýlených fotonů oproti původním fotonům. Každá molekula má své specifické píky v Ramanově spektru, které opovídají různým kmitům vazeb. Toho se využívá například při identifikaci drog, my ji použili pro identifikace methanolu v roztoku a jeho množství.

## 2 Popis práce

Začali jsme měřit Ramanovy spektra pro roztoky o známých koncentracích methanolu s ethanolem.

Tabulka 1: Specifické peaky methanolu a ethanolu

Látka	$k[\text{cm}^{-1}]$	typ kmitu
Methanol	2829	C-H sym stretching
Ethanol	882	C-C stretching



Obrázek 2: Ramanův posun methanolu a ethanolu

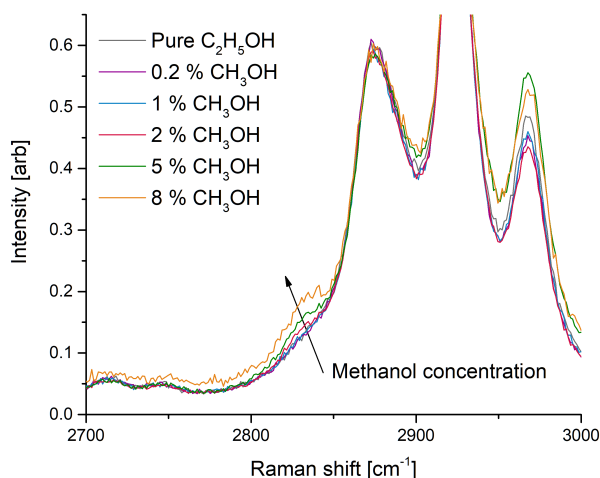
Kde  $k$  je relativní vlnočet.

Dále jsme vypočítali plochu pod vybranými peaky. Tyto hodnoty jsme dali mezi sebou do poměrů a zanesli je do grafu. Tím jsme určili kalibrační křivku, jejíž vzorec je:

$$y = 18.97 \ln(x) + 2.89 \quad (1)$$

Kde  $y$  je objemový poměr methanolu ku ethanolu a  $x$  poměr ploch pod grafem peaků methanolu a ethanolu. Z tohoto vzorce jsme spočítali objemový poměr neznámého vzorku.

Nakonec jsme měřili Ramanův posun lihovin zakoupených v obchodě a z domácí výroby (vodka, rum, víno, vínovice a jiné domácí pálenky). Protože jsme žádný methanol nebyli schopni identifikovat (viz. výsledky), postupným přikapáváním methanolu do roztoku ethanolu jsme určili hranici, kdy už jsme schopni ho rozpoznat.



Obrázek 3: Detekce methanolu je možná od 2 %

### 3 Výsledky a diskuze

Určili jsme, že v neznámém vzorku bylo  $36 \pm 1$  % methanolu. Odchylka byla spíše způsobena samotným pipetováním, než naším výpočtem. Dále jsme ověřili kvalitu vybraných lihovin jak z obchodu, tak z domácí výroby.

Ve všech vzorcích bylo nedetekovatelné množství methanolu. Měření methanolu v neprůhledných vzorcích (rum a víno) nám znemožnila silná fotoluminiscence. Také jsme při některých měřeních detekovali peaky způsobené částicemi kosmického záření.

### 4 Závěr

Podařilo se nám úspěšně pomocí kalibrační křivky, vytvořené za použití spekter různě namíchaných vzorků ethanolu s methanolem, určit poměr ethanolu s methanolem neznámého vzorku. Dále jsme zjistili, že methanol jsme schopni identifikovat ve vzorcích od minimální meze 2 % a toto stopové množství jsme v žádném z testovaných lihovin neobjevili.

### Poděkování

Chtěli bychom poděkovat především panu Ing. Aleši Vlkovi za vedení při práci.

### 5 Reference

[1]H. Vaskova. *Spectroscopic Determination of Methanol Content in Alcoholic Beverages*. 2014.