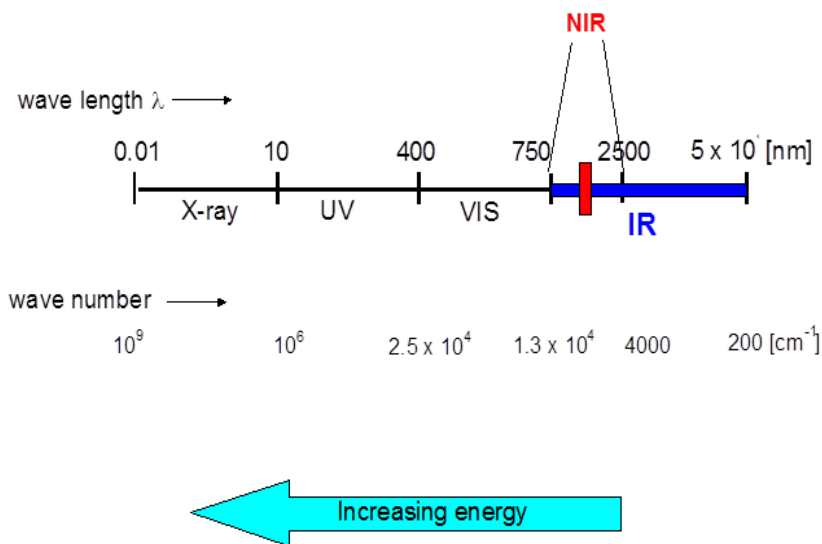


Спектроскопія у ближній інфрачервоній області (БІЧ-спектроскопія)

Головні аспекти

Молекулярні гармоніки та комбінації смуг в ближній інфрачервоній області, як правило, є дуже широкими, що робить спектр складним. Для отримання потрібної інформації часто потрібно використовувати метод багатовимірного калібрування. Цей метод калібрування використовує довідникові дані, отримані при різних вимірюваннях певної групи зразків. Використання відповідних даних і метод багатовимірного калібрування, надають можливість створити калібрувальну модель, яка дозволить аналізувати спектральні дані невідомих матеріалів.

БІЧ-спектроскопія – це метод визначення кількості конкретного інгредієнту зразку, що перебуває у рідкому стані. Ближня інфрачервона область випромінювання простягається в діапазоні від 750 нм до 2500 нм. Вимірювання поглинання в цьому діапазоні можна використовувати для визначення вмісту алкоголю у широкому спектрі алкогольних напоїв, таких як пиво, вино, спирт та лікери.



Пояснення до рисунку:
wave length – довжина хвилі;
wave number – хвильове число;
X-ray – рентгенівське випромінювання;
UV – ультрафіолетове випромінювання;
VIS – видиме світло;
NIR – близьке інфрачервоне випромінювання;
IR – інфрачервоне випромінювання;
Increasing energy – зростання енергії.

Рис. 1. Шкала електромагнітного випромінювання.

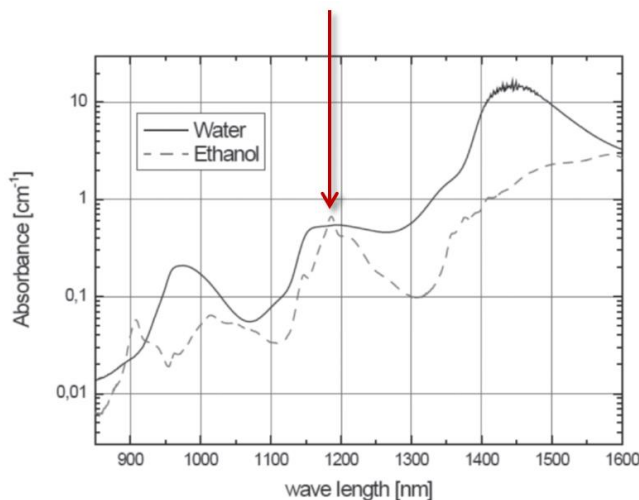
БІЧ спектр етанолу та води

Для кількісного визначення вмісту алкоголю в алкогольних напоях аналізується область спектру близького інфрачервоного випромінювання в діапазоні другої

гармоніки коливань розтягування С-Н зв'язку в області 1200 нм.

Використовується симетрична вібрація метильної групи, оскільки отриманий спектр коливань має чітку форму і є добре вираженим, тому що на ці коливання слабо впливають коливання інших зв'язків.

У прикладі, який графічно зображено нижче, у зазначеному спектральному діапазоні, вплив інших складових зразка є настільки малий, що отримані результати для алкоголю є надзвичайно точними. У зв'язку із селективністю та лінійністю методу вимірювань, система потребує тільки врегулювання кількості води та водного розчину етанолу.



Пояснення до рисунку:

Water – вода;

Ethanol – етанол;

Absorbance – абсорбція (поглинання);

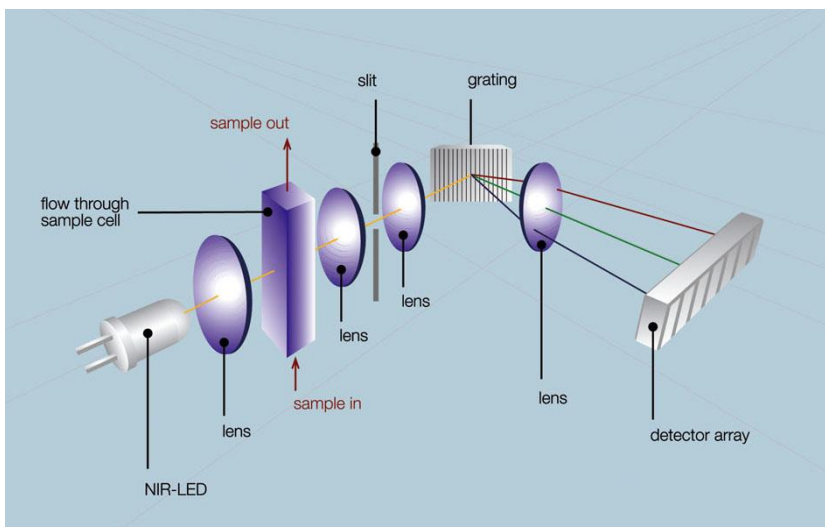
wave length – довжина хвилі.

Рис. 2. Спектр отриманий для етанолу та води в діапазоні довжин хвиль від 850 нм до 1600 нм.

Налаштування обладнання

Вузкий спектр алкоголю необхідно вимірювати спектрометром із великою роздільною здатністю.

За допомогою джерела світла детектора та дифракційної решітки можна виміряти інтенсивність світла, яке проходить, при різних довжинах хвиль. Спеціальна оптична установка проектує світло до детектора, який вимірює інтенсивність світла, яке пройшло через зразок. Втрата інтенсивності при певних довжинах хвиль пов'язана з кількістю певної речовини (наприклад етанолу) у зразку.



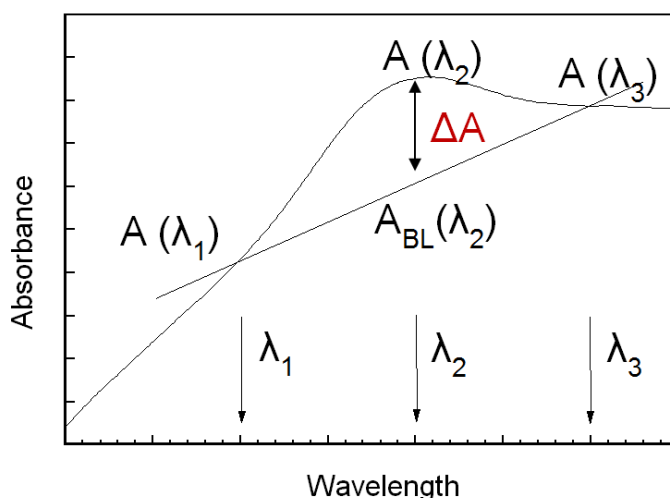
Пояснення до рисунку:
 NIR-LED – світлодіод, що випромінює у інфрачервоному діапазоні;
 lens – лінзи;
 sample – зразок;
 slit – щілина;
 grating – дифракційна решітка;
 detector array – множина детекторів;
 flow through sample cell – потік через комірку для зразка.

Рис. 3. Схема оптичної установки.

Метод оцінювання базової лінії

Застосовуючи цей метод, можна оцінити внесок алкоголю у величину вимірюного поглинання. Для цього оцінюється поглинання зразка в певному діапазоні близького інфрачервоного випромінювання при певних довжинах хвиль λ_1 , λ_2 , λ_3 .

Алгоритм методу заснований на вилученні фонового поглинання з отриманого спектру. Базова лінія проходить через дві точки – величина поглинання при λ_1 та λ_3 . На довжині хвилі λ_2 оцінюється значення ΔA (дивись рисунок нижче), використовуючи раніше розраховану базову лінію. Ця величина напряму пов'язана із кількістю етанолу в зразку.



Пояснення до рисунку:
 Absorbance – абсорбція (поглинання);
 wave length – довжина хвилі.

Рис.4. Метод оцінювання базової лінії за допомогою довжин хвиль λ_1 , λ_2 , λ_3 .

Застосування БІЧ-спектроскопії до визначення вмісту алкоголю у алкогольних напоях

Не зважаючи на те, що спектр, отриманий в області 1200 нм для алкоголю, взагалі кажучи, є досить чітким та вираженим, проте у напоях можуть існувати інші речовини, які також поглинають у ближній інфрачервоній області (напр., білки у пиві), і отже, призводять до збільшення поглинання у даному діапазоні. Це обумовлює не коректні (перебільшені) результати щодо вмісту алкоголю. Для вирішення цієї проблеми застосовуються відповідні методи корекції даних (багатовимірне калібрування).

Посилання

www.anton-paar.com/corp-en/products/group/alcohol-meter/

Данна стаття є перекладом на українську оригінальної **[статті](https://wiki.anton-paar.com/en/near-infrared-spectroscopy-nir/)** (<https://wiki.anton-paar.com/en/near-infrared-spectroscopy-nir/>)

Anton Paar GmbH <https://www.anton-paar.com>

Переклад виконаний співробітниками Донау ЛАБ УКРАЇНА <http://dlu.com.ua> - ексклюзивного дистриб'ютора продукції Anton Paar GmbH в Україні та Молдові



03028 Україна, м. Київ,

вул. Стратегічне шосе, 16

<http://dlu.com.ua>

Тел: +38 (044) 229-15-31

Факс: +38 (044) 229-15-30

e-mail: sale@dlu.com.ua