



Application Note AN-RS-056

Cuantificación de metanol en bebidas alcohólicas contaminadas

Proteger a los consumidores de bebidas contaminadas

Una alarmante tendencia mundial pone de manifiesto el grave dano que puede ocasionar la ingestión de alcohol ilegal y destilado de forma inadecuada. Las bebidas alcohólicas caseras elaboradas con disolventes industriales (como el alcohol metílico) y presentadas como bebidas alcohólicas legítimas suelen contener metanol. El metanol provoca ceguera y puede causar la muerte si se ingiere. Esto ha tenido consecuencias fatales en todo el mundo [1–3]. El punto de inflexión para la República Checa se produjo en septiembre de 2012. La venta de licores fuertes se

prohibió temporalmente después de que 20 personas fallecieron por el consumo de bebidas alcohólicas con niveles peligrosos de metanol [2]. Tras un estudio exhaustivo con diversas herramientas de análisis, la República Checa adoptó la espectroscopia Raman como método de elección para identificar y cuantificar el metanol en bebidas alcohólicas contaminadas. Esta nota de aplicación demuestra cómo la espectroscopia Raman puede emplearse como un método de análisis rápido y eficaz para muestras de ron contaminadas con metanol.

INTRODUCCIÓN

La espectroscopia Raman es una herramienta analítica rápida y sencilla para cuantificar la cantidad de contaminación por metanol presente en las bebidas alcohólicas. Es un método ideal para diferenciar moléculas muy similares como el etanol ($\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$) y el metanol (CH_3OH), como se muestra en la Figura 1.

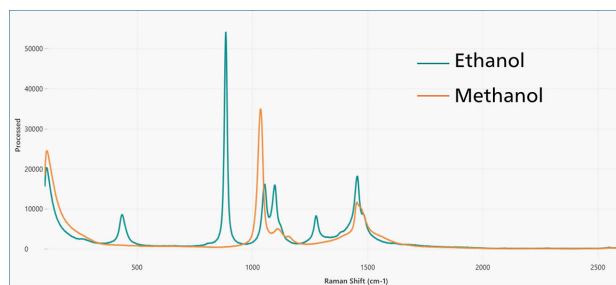


Figura 1. Espectros Raman de etanol puro (verde) y metanol puro (naranja).

La capacidad de los espectrómetros Raman para medir a través de recipientes y su baja sensibilidad al agua los hacen idóneos para medir metanol en muestras de bebidas. Estas dos propiedades clave permiten la detección precisa de metanol hasta aproximadamente un 1 % en volumen en el campo, sin necesidad de abrir las botellas para su análisis. En el laboratorio, el software i-Raman NxG y SpecSuite amplía las capacidades de detección de la espectroscopia Raman al permitir cuantificar adulterantes. (Figura 2)



Figura 2. El sistema i-Raman NxG, combinado con el software SpecSuite, resulta ideal para la detección rápida y el análisis cuantitativo de adulterantes peligrosos en bebidas alcohólicas.

EXPERIMENTO

Este estudio de ejemplo analiza ron de coco comercial al que se le añade metanol en concentraciones entre 0,33 % y 5,36 %. Se utiliza el espectrómetro i-Raman NxG 785H con sonda de fibra óptica para obtener los espectros Raman de las mezclas (Figura 3). La Tabla 1 detalla el equipo y la configuración del instrumento utilizados en este estudio. El pico alrededor de 1000 cm^{-1} (resaltado en el recuadro de la Figura 3) aumenta visiblemente con la concentración de metanol, alcanzando un valor significativo aproximadamente al 1 %.

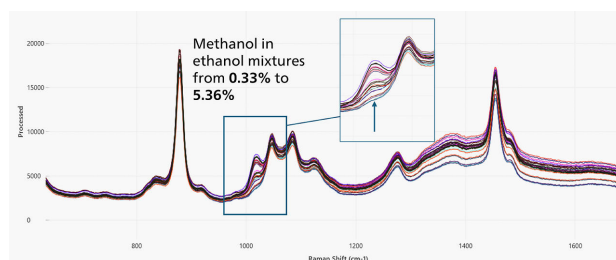


Figura 3. Espectros Raman de ron con metanol en diferentes concentraciones. Recuadro: Las intensidades de los picos reflejan los cambios en la proporción metanol:etanol.

Tabla 1. Parámetros experimentales.

Equipment	Acquisition settings	
i-Raman NxG 785H	Laser Power	100
Vial holder	Int. time	1 s
SpecSuite Software	Average	1

Estos datos se analizan con el software SpecSuite y se desarrolla un modelo de regresión de mínimos cuadrados parciales (PLS) sobre datos normalizados. El modelo de dos factores desarrollado en el rango de 980–1040 cm⁻¹ proporciona la curva de calibración que se muestra en la Figura 4, la cual tiene un error de validación cruzada (SECV) de 0,0794 (Tabla 2). El valor de R² de 0,9980 que se muestra en la Tabla 2 significa que el método Raman utilizado aquí puede emplearse para cuantificar con confianza la cantidad de metanol en una muestra de alcohol mixto.

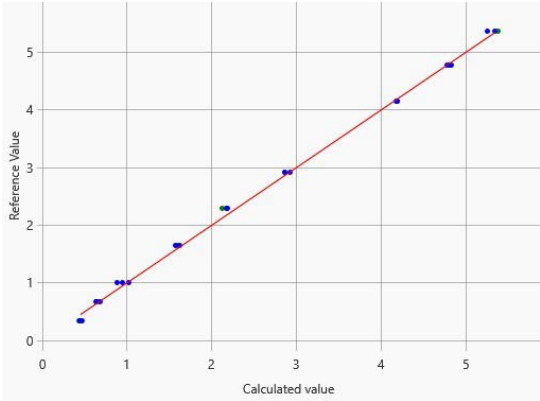


Figura 4. Modelo de regresión PLS para predecir la cantidad de metanol en el ron.

Tabla 2. Parámetros de regresión utilizados para el desarrollo del modelo PLS para determinar el metanol en ron con el i-Raman NxG 785H.

Parameter	Value
Spectral processing	Mean centering Savitzky-Golay derivative
R ²	0.9980
SEC	0.0681
SECV	0.0794

CONCLUSIÓN

Estos resultados validan que la espectroscopia Raman puede utilizarse para la detección rápida y cuantitativa de adulterantes peligrosos en bebidas

alcohólicas. Esta técnica puede ampliarse para investigar la adulteración en otros productos como alimentos, petróleo y fármacos [4].

REFERENCIAS

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 México
Calle. Xicoténcatl #181, Col
Del Carmen, Alcaldía
Coyoacán.
04100. Ciudad de México
México

info@metrohm.mx

CONFIGURACIÓN



i-Raman NxG 785H

El i-Raman NxG 785H es el espectroscopio ideal para tareas de control de calidad de rutina y la monitorización de procesos, sobre todo en los casos en los que la velocidad, la estabilidad y la fiabilidad resulten esenciales. Aporta una equilibrada combinación de rendimiento y eficiencia para medir la dispersión Raman a partir de 100–2800 cm^{-1} .

Diseñado para aportar un alto rendimiento de señal, este flexible sistema es ideal para la monitorización de reacciones químicas y poliméricas, la optimización de procesos y la realización de pruebas de uniformidad de contenido en comprimidos farmacéuticos. El i-Raman NxG 785H puede adaptarse fácilmente para efectuar medidas con vista a través, incluso en envases opacos, lo cual lo hace aún más versátil.

El i-Raman NxG 785H es la solución más indicada para equipos de profesionales que buscan análisis Raman fiables en entornos operativos muy difíciles.

Descubra por qué el i-Raman NxG es la forma perfecta de ponerse al mando de sus medidas de control de calidad:

- Los espectrómetros de alta sensibilidad proporcionan resultados en cuestión de segundos y pueden detectar señales Raman por más tenues que estas sean
- Sonda de fibra óptica flexible y compatible con una amplia gama de accesorios como un soporte de viales o un soporte de cubeta, una sonda de transflexión y un adaptador de vista a través
- Potente software SpecSuite que facilita tanto la recogida de datos Raman como la construcción del modelo cuantitativo, la identificación por comparación con las bibliotecas de espectros y los análisis de rutina
- Compacto y apilable para ahorrar un valioso espacio en la mesa de laboratorio.



Accesorio de soporte de viales

Accesorio de soporte de viales para el uso con sondas Raman para laboratorio con un diámetro de la espiga de 9,5 mm. Compatible con viales de 15 mm de diámetro. Se incluye un paquete de 6 viales de vidrio de borosilicato de 15 mm.