

근적외선열차스펙트르에 의한 에틸알콜수용액의 고주파 및 초음파처리효과의 판정방법

황설주, 변영희

최근 각종 물리적 및 화학적처리에 의하여 알콜음료의 맛을 개선하려는 연구들이 많이 진행되고있으며 숙성효과를 높이기 위하여 초음파처리, 기상회합, 자화처리 등 각종 물리적처리방법들이 적용되고있다.[3] 그러나 처리효과는 맛으로만 판정할뿐 수소결합상태의 변화에 기초하여 정량적으로 해석하지 못하고있다.

우리는 고주파 및 초음파처리를 한 에틸알콜수용액의 온도의존근적외선흡수스펙트르($8\ 000\sim6\ 000\text{cm}^{-1}$)를 측정하고 그로부터 얻은 근적외선열차스펙트르를 해석하여 처리효과를 판정하기 위한 연구를 하였다.

30% 에틸알콜수용액을 가지고 시료를 다음과 같이 제조하였다.

시료 1: 처리하지 않은 에틸알콜수용액(비교)

시료 2: 고주파처리한 에틸알콜수용액(10MHz, 30s)

시료 3: 초음파처리한 에틸알콜수용액(20MHz, 30s)

실험은 온도조종장치를 결합한 근적외선분광기(《SPECORD 61 NIR》)에서 두가지 방법으로 하였다.

주어진 온도에서 시료 1, 2, 3에 대하여 근적외선흡수스펙트르를 측정한 결과는 그림 1과 같다.($6\ 160\sim7\ 900\text{cm}^{-1}$, 온도 11°C , 큐벳두께 1mm) 다음 온도를 변화시키면서 시료 1, 2, 3에 대하여 선행연구[1]에서와 같은 방법으로 온도의존근적외선흡수스펙트르를 측정하였다. 측정은 온도를 20°C 에서 55°C 까지 서서히 올리는 동안 $6\ 160\sim7\ 900\text{cm}^{-1}$ 에서 8회 왕복하면서 진행하였다.

그림 1에서 보는바와 같이 알콜수용액에 일정한 물리적처리를 하면 근적외선흡수스펙트르가 낮은 파수쪽으로 약간 이동하지만 눈에 띄게 나타나지 않았다. 스펙트르에서 미세하게 나타나는 처리효과는 스펙트르를 해석하여 알수 있다.

먼저 주어진 온도에서 에틸알콜수용액들의 근적외선흡수스펙트르를 봉우리분해법[2, 4]으로 분해하였다. 알콜수용액에 초음파처리를 하면 알콜과 물분자들과의 수소결합상태가 달라지므로 근적외선흡수스펙트르에서 물분자들의 수소결합상태변화를 연구하였다.

물에서 각이한 수소결합상태에 놓여있는 물분자들은 5개 부류 즉 수소결합이 전혀 없는 자유물분자(S0), 1개의 수소결합을 이루는 물분자(S1), 2개의 수소결합을 이루는 고리형성에 참가한 물분자(S2), 3개 또는 4개의 수소결합을 이루는 그물형성에 참가한 물분자(S3,

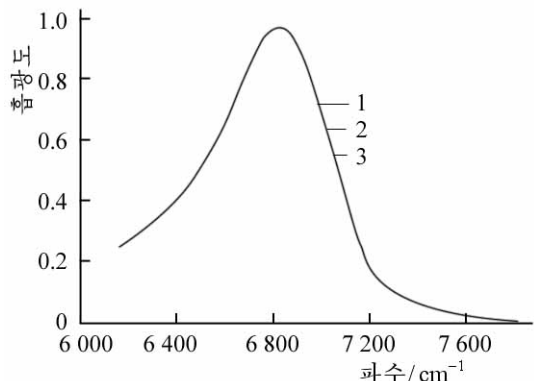


그림 1. 근적외선 흡수스펙트르
1-3은 시료번호

S4)로 나누어볼수 있다. 또한 알콜수용액은 순수 물과는 달리 CH- 의 신축진동에 의한 흡수띠[6]가 나타나므로 이것을 포함하여 봉우리개수를 6개로 정하고 근적외선흡수스펙트르를 분해하였다. 봉우리분해는 계산프로그램 MATLAB에서 비선형최소두제곱법으로 하였다. 계산결과는 표와 같다.

표. 수소결합상태가 각이한 물분자들의 함량(%)

구분	S0	S1	S2	S3	S4	\bar{n} *	결과
시료 1	5.64	5.54	26.42	34.57	27.83	2.73	찌르는 맛이 있다.
시료 2	2.48	6.25	27.73	37.21	26.63	2.79	맛이 좋다.
시료 3	2.61	7.96	25.52	37.79	26.13	2.77	맛이 좋다.

* \bar{n} 는 평균수소결합수이다.

표에서 보는바와 같이 알콜수용액을 처리하면 자유로운 물분자의 함량이 줄어들고 수소결합개수가 1, 2, 3인 물분자의 함량이 늘어난다는것을 알수 있다. 이것은 알콜수용액에 일정한 물리적처리를 하면 물분자속에 알콜분자가 고르롭게 분산되면서 수소결합에 참가하지 않았던 자유물분자가 수소결합에 참가한다는것을 의미한다. 따라서 평균수소결합수는 늘어나게 된다. 이 결과는 물리적처리를 하면 찌르는 맛이 적어진다는 결과와도 일치한다. 그러나 물분자들의 수소결합상태변화가 크지 않은것으로 하여 판정효과가 뚜렷하지 못하다.

근적외선흡수스펙트르에서 얻어지는 파수벡토르 W , 흡광도벡토르 D , 온도벡토르 T 를 3차원자료보간 및 평활하여 온도의존근적외선흡수스펙트르곡면을 얻었다. 등온스펙트르는 스펙트르곡면을 $T=f(W, D)$ 형식으로 얻고 온도등고선을 그리는 방법으로 얻었다.

높은 온도의 등온스펙트르에서 기준으로 정한 낮은 온도(20°C)에서의 등온스펙트르를 덜어 열차스펙트르를 얻었다.

초음파처리를 한 에틸알콜수용액(시료 3)의 근적외선열차스펙트르는 그림 2와 같다. 시

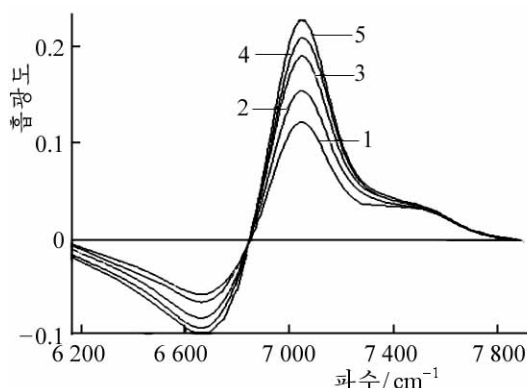


그림 2. 시료 3의 근적외선열차스펙트르
1-5는 온도가 각각 35, 40, 45, 50, 55°C인 경우

시료 1, 2의 근적외선열차스펙트르에서도 같은 현상이 나타난다. 그러나 시료 1, 2, 3의 근적외선열차스펙트르에서 수소결합종들의 흡광도차는 다른데 특히 6 660, 7 050 cm^{-1} 에서 온도에 따라 뚜렷하게 차이난다.

에틸알콜수용액들의 근적외선열차스펙트르로부터 6 660, 7 050 cm^{-1} 에서 온도에 따르는 수소결합종들의 흡광도차변화를 계산한 결과는 그림 3, 4와 같다.

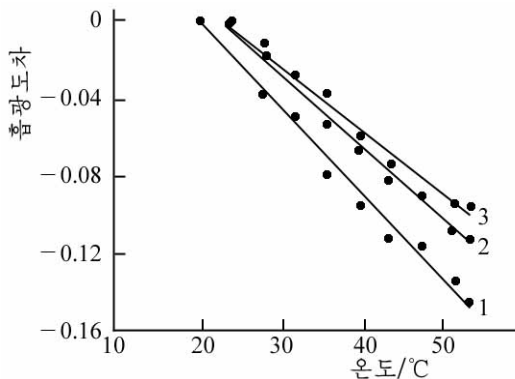


그림 3. 6 660cm⁻¹에서 수소결합에 참가한 OH기의 온도에 따르는 흡광도차변화
1-3은 시료번호

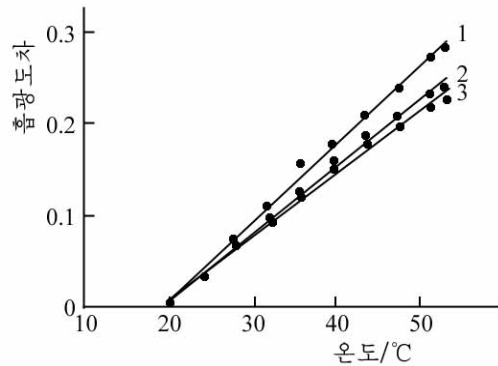


그림 4. 7 050cm⁻¹에서 수소결합에 참가하지 않은 OH기의 온도에 따르는 흡광도차변화
1-3은 시료번호

그림 3, 4에서 보는바와 같이 시료 2, 3과 시료 1에서 수소결합종들의 흡광도차가 크게 차이난다는것을 알수 있다. 이것은 시료 2, 3에는 시료 1에 비하여 수소결합한 OH기의 함량이 많고 수소결합하지 않은 OH기의 함량이 적다는것을 보여준다. 즉 알콜수용액을 물리적처리하면 처리하지 않은 용액에 비하여 수소결합한 물분자수가 늘어나게 된다.

또한 수소결합종들의 흡광도차와 온도사이에는 선형관계가 성립한다는것을 알수 있다. 이것은 선행연구결과[5]와도 잘 일치한다. 시료 1, 2, 3에서 수소결합종들의 온도-흡광도차변화곡선의 각결수는 각각 -0.004 4, -0.003 6, -0.003 2(6 660cm⁻¹ 수소결합한 OH기), 0.008 3, 0.007 0, 0.006 7(7 050cm⁻¹ 수소결합하지 않은 OH기)이다. 즉 고주파 및 초음파 처리한 시료는 처리하지 않은 시료보다 온도에 따라 안정하다.

실험결과 맛으로 판정하던 알콜수용액의 처리효과를 근적외선열차스펙트르로 정확히 판정할수 있다는것을 알수 있다.

맺 는 말

근적외선열차스펙트르를 해석하여 얻은 수소결합종들의 온도-흡광도차관계를 에틸알콜수용액의 고주파 및 초음파처리효과판정에 적용하여 맛으로 판정하던 알콜음료의 특성을 과학적으로 평가할수 있게 하였다.

참 고 문 헌

- [1] 김일성종합대학학보(자연과학), 60, 1, 95, 주체103(2014).
- [2] 김일성종합대학학보(자연과학), 55, 9, 118, 주체98(2009).
- [3] 유승극; 명주가공기술, 국가과학원발명국, 79~85, 주체98(2009).
- [4] C. Gainaru et al.; Phys. Rev. Letters, 107, 118304, 2011.
- [5] M. Czarnecki et al.; J. Phys. Chem., A 104, 27, 6356, 2000.
- [6] 阿部英幸; 分光研究, 44, 5, 247, 1995.

주체104(2015)년 2월 5일 원고접수

**Estimation Method of High Frequency Waves and Ultrasonic Waves
Processing Effect of Ethyl Alcohol Solution
by NIR Thermal Difference Spectra**

Hwang Sol Ju, Pyon Yong Hui

Using temperature-absorbance difference curve of hydrogen bond species found from NIR thermal difference spectra, we estimated high frequency waves and ultrasonic waves processing effect of ethyl alcohol solution.

This method enables us to scientize quality estimation method of alcohol drink which was based on only its taste.

Key words: NIR thermal difference spectra, hydrogen bond, ethyl alcohol