

# PHƯƠNG PHÁP KHÔNG PHÁ HỦY MẪU XÁC ĐỊNH HÀM LƯỢNG ETHANOL TRONG THỨC UỐNG CÓ CỒN SỬ DỤNG PHỔ HỒNG NGOẠI GẦN KẾT HỢP BÌNH PHƯƠNG TỐI THIỂU TỪNG PHẦN

*Nguyễn Phúc Thịnh<sup>1</sup>, Hàng Minh Châu<sup>1</sup>, Lê Tấn Đạt<sup>1</sup>, Nguyễn Ánh Mai<sup>1</sup>, Võ Bích Hiền<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>Khoa Hóa học, Trường ĐH Khoa học Tự nhiên-ĐHQG TP.HCM

<sup>2</sup>Khoa Điện tử và Kỹ Thuật, ĐH Việt Đức

Trong nghiên cứu này, phổ hồng ngoại gần kết hợp phương pháp bình phương tối thiểu từng phần được sử dụng để xác định hàm lượng ethanol có trong rượu mạnh. Sử dụng dữ liệu thu được bằng máy DLP NIRScan Nano trong khoảng bước sóng 900-1700 nm để xây dựng mô hình với 46 dung dịch chuẩn có nồng độ ethanol trong khoảng từ 25-70 % (v/v) trong nền mẫu giả với sự hiện diện của các alcol khác methanol, isobutanol, isoamyl alcohol, isopronal và ethyl acetate ở hàm lượng 0.015% (v/v). 80% số liệu được sử dụng để xây dựng mô hình và 20% còn lại được dùng để đánh giá mô hình. Các phương pháp tiền xử lý phổ được sử dụng là chuẩn hóa peak (Normalization), hiệu chỉnh phân tán nhiều lần (Multiplicative Scatter Correction) và hiệu chỉnh tín hiệu trực giao (Orthogonal Signal Correction). Khi sử dụng đồng thời cả ba phương pháp tiền xử lý phổ mô hình cho kết quả dự đoán tốt nhất với  $R^2$  và  $Q^2$  lần lượt là 0.998, 0.998, sai số tuyệt đối của bộ kiểm tra trong khoảng 0.32 – 2.02 %. Mô hình được ứng dụng để phân tích ethanol trong 15 mẫu rượu mạnh với sai số tuyệt đối trong khoảng 0.18 – 4.56 %. Kết quả dự đoán được kiểm tra bằng phương pháp sắc ký khí ghép nối đầu dò ion hóa ngọn lửa (GC-FID).

**Từ khóa:** *độ rượu, ethanol, rượu mạnh, phổ NIR, bình phương tối thiểu từng phần*

# NON-DESTRUCTIVE DETERMINATION OF ETHANOL LEVELS IN BRANDY USING PARTIAL LEAST SQUARES - NEAR INFRARED SPECTROSCOPY

*Nguyen Phuc Think<sup>1</sup>, Hang Minh Chau<sup>1</sup>, Le Tan Dat<sup>1</sup>, Nguyen Anh Mai<sup>1</sup>, Vo Bich Hien<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>Faculty of Chemistry, University of Science-VNU HCMC

<sup>2</sup>Faculty of Electrics and Engineer, Vietnamese-German University

In this study, first attempt to determine ethanol content in brandy was made using partial least squares and NIR spectroscopy. Spectra of alcoholic samples were acquired with portable DLP NIRScan Nano spectrophotometer in the wavelength range of 900 – 1700 nm. For establishment of PLS model 46 standard solutions containing 24.9 – 69.8% (v/v) ethanol in an artificial matrix consists of 0.015% (v/v) methanol, isobutanol, isoamyl alcohol, isopropanol, ethyl acetate. 80% of the data was used as training set and the other 20% as test set. Different spectra pretreatment methods namely, Normalize peak, Multiplicative Scatter Correction, Orthogonal Signal Correction were investigated. An excellent model with  $R^2$  and  $Q^2$  of 0.998, 0.998, respectively can be obtained when all three pretreatment methods were employed. The absolute errors of the test set and real samples were of 0.32 – 2.02 % and 0.18 – 4.56 %, respectively. The errors were evaluated using gas chromatography with flame ionization detector (GC-FID) as reference method.

**Key words:** *ethanol content, brandy, NIR, partial least square*

