

Дистанционное определение содержания органических растворителей в бинарных смесях методом спектроскопии комбинационного рассеяния

С.В. Пацаева, Т.А. Доленко, С.А. Буриков, В.И. Южаков*

Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова,
119991, г. Москва, ГСП-1, Ленинские горы, д. 1, стр. 2

Поступила в редакцию 15.10.2013 г.

Методом спектроскопии комбинационного рассеяния света исследованы бинарные смеси метилового, этилового, изоамилового спиртов и уксусной кислоты с водой в различных соотношениях. При изменении концентрации органического растворителя в растворе от воды до чистого растворителя наблюдаются изменения интенсивностей полос валентных колебаний СН- и ОН-групп в диапазоне 2600–3800 см⁻¹. Для количественной характеристики парциальной концентрации органического компонента выбрана интегральная интенсивность $I_{\text{СН}}$ валентных колебаний СН-групп, нормированная на суммарную интенсивность полос СН- и ОН-колебаний ($I_{\text{СН}} + I_{\text{ОН}}$) в диапазоне 2600–3800 см⁻¹. При такой нормировке для спектров всех смесей интенсивность $I_{\text{СН}}/(I_{\text{СН}} + I_{\text{ОН}})$ линейно зависит от объемной доли органического растворителя во всем исследованном диапазоне его концентраций. Это дает возможность бесконтактным способом определять содержание органических растворителей, в том числе горючих и токсичных, в их смеси с водой. Относительная погрешность определения объемной доли этанола, метанола и уксусной кислоты в воде составила 0,5; 1,1 и 1,5% соответственно.

Ключевые слова: комбинационное рассеяние света, СН- и ОН-группы, водные растворы, органические растворители, определение концентрации; Raman scattering, СН- and ОН-groups, aqueous solutions, organic solvents, determination of concentration.

Введение

Несмотря на то что в настоящее время проблема обнаружения различных органических веществ, в том числе взрыво- и огнеопасных компонентов, в жидком состоянии является весьма актуальной, она еще далека от своего решения, особенно в плане практического использования. Ясно, что при этом на передний план должны выходить высокочувствительные бесконтактные методы анализа, работающие в режиме реального времени [1]. Существующие физико-химические способы обнаружения опасных органических соединений предполагают отбор и анализ проб. Например, возможно детектирование таких веществ с помощью специальных соединений, меняющих окраску в их присутствии [2], однако в этом случае невозможно обнаружить опасное вещество бесконтактно, не нарушая герметичность упаковки.

Дистанционные (или бесконтактные) методы исследования органических компонентов в газовой, твердой и жидкой фазах основываются на оптиче-

ских методах с использованием лазеров в качестве источника возбуждающего излучения [3]. Для обнаружения и количественной диагностики органических компонентов применяются флуоресцентные методы анализа [4], метод дифференциальной оптической абсорбционной спектроскопии в ИК-диапазоне с отражением излучения от топографической мишени [5], спектроскопия с использованием лазерно-искровой эмиссионной спектрометрии [6, 7]. Одним из эффективных современных методов лазерной колебательной спектроскопии органических компонентов смесей является метод матричной ИК-спектроскопии, заключающийся в стабилизации получаемых в газовой фазе продуктов в среде инертного вещества при низких температурах и их регистрации с помощью ИК-спектров [8–11].

Для обнаружения органических соединений, в том числе горючих и токсичных жидкостей, как в открытых, так и в закрытых прозрачных пластиковых или стеклянных контейнерах, весьма перспективным является применение метода спектроскопии комбинационного рассеяния (КР) света, реализуемого в дистанционном варианте [6, 12, 13]. Известно много публикаций по спектроскопии КР водных растворов органических соединений [14–16]. Большинство из них посвящено изучению молекулярных взаимодействий в бинарных растворах [14, 16],

* Светлана Викторовна Пацаева (spatsaeva@mail.ru);
Татьяна Альдефонсовна Доленко (tdolenko@lid.phys.msu.ru);
Сергей Алексеевич Буриков (burikov@lid.phys.msu.ru);
Виктор Илларионович Южаков.

процессам образования ассоциатов и гидратов в смесях [15, 16], а не решению практических задач количественного анализа.

К особому типу жидкостей относится этиловый спирт – по объему производства он занимает одно из первых мест среди органических продуктов. Поскольку этанол широко используется в производстве, в том числе в пищевой промышленности, где иногда выявляются случаи использования суррогатного алкоголя, то весьма актуальным является разработка чувствительных и надежных методов идентификации спиртов и определения концентрации водно-спиртовых растворов, в частности методом КР-спектроскопии. В спектре КР интенсивности колебательных полос групп молекул этанола монотонно увеличиваются с ростом концентрации спирта. На этом основан метод определения содержания этанола в водно-этанольных растворах и алкогольных напитках с помощью КР-спектроскопии [17–19].

Авторы работы [17] для определения концентрации этанола использовали интегральную интенсивность СН-полосы с максимумом 2941 см^{-1} и получили точность определения концентрации спирта 1%. В работе [18] концентрация этанола в растворах и алкогольных напитках определялась по интегральной интенсивности полосы с максимумом 888 см^{-1} или совокупности линий на частотах 888, 1062 и 1462 см^{-1} . При этом суммарная интенсивность перечисленных линий использовалась для нормировки наиболее интенсивной из них с максимумом 888 см^{-1} . Точность определения этанола в пробах составила от одного до нескольких процентов. Работы [17, 18] посвящены разработке недорогого КР-спектрометра для обучения студентов старших курсов, поэтому в них не ставилась задача прецизионных измерений.

Ранее в своих исследованиях мы показали, что соотношение компонентов в водно-этанольном растворе можно определить с хорошей точностью по соотношению интегральных интенсивностей полос колебаний СН-групп $I_{\text{СН}}$ и ОН-групп $I_{\text{ОН}}$ [19–21]. Регистрируемые значения интенсивности линий КР зависят от параметров экспериментальной установки (мощности лазера, чувствительности системы регистрации, прозрачности образца и т.д.), поэтому для прецизионного измерения концентрации этанола в пробах с помощью спектроскопии КР необходимо выбрать надлежащую нормировку полосы. Исключить зависимость метода от экспериментальных факторов удалось с помощью нормировки интенсивности полос СН-групп ($2600\text{--}3050\text{ см}^{-1}$) или ОН-групп ($3050\text{--}3800\text{ см}^{-1}$) на их суммарную интенсивность $I_{\text{СН}} + I_{\text{ОН}}$. Полученные зависимости нормированных интегральных интенсивностей $I_{\text{СН}}/(I_{\text{СН}} + I_{\text{ОН}})$ и $I_{\text{ОН}}/(I_{\text{СН}} + I_{\text{ОН}})$ от концентрации этанола в растворе, выраженной в объемных процентах, с высокой точностью аппроксимировались линейными функциями [19]. Эти линейные зависимости можно использовать для определения содержания этанола в водно-спиртовых растворах, в том числе для определения крепости алкогольных напитков бесконтактным способом.

Цель данной работы заключалась в исследовании спектров КР в бинарных смесях воды с метанолом, изоамиловым спиртом и уксусной кислотой, разработке метода определения концентрации компонентов, а также оценке погрешностей измерения концентрации компонентов в таких системах и водно-этанольных растворах с использованием спектроскопии КР света.

Методика эксперимента

Растворы органических жидкостей в воде приготавливали смешением объемов чистых растворителей в определенных пропорциях. Концентрации растворов выражены в объемных долях чистого вещества по отношению к суммарному объему жидкостей. Измерение спектров КР проводили на лазерном КР-спектрометре, подробно описанном в работах [20, 21]. Возбуждение спектров КР света осуществлялось излучением аргонового лазера с длиной волны 488 нм и мощностью около 350 мВт. Регистрация спектров проводилась ПЗС-камерой после прохождения сигнала через двойной монохроматор (Acton, решетка 900 штр./мм, фокусное расстояние 500 мм). Температура проб во время эксперимента поддерживалась равной $(22,0 \pm 0,2)^\circ\text{C}$. Спектры нормировались на мощность лазерного излучения и время накопления спектра.

Спектры КР бинарных смесей метанола, изоамилового спирта и уксусной кислоты с водой в области валентных колебаний СН- и ОН-групп

Колебательные спектры очень чувствительны к природе внутри- и межмолекулярных связей [22], что делает метод спектроскопии КР уникальным инструментом для решения задачи идентификации растворенных веществ [23, 24]. Спектры КР органических веществ представляют собой набор полос, обусловленных характеристическими колебаниями функциональных групп молекул – гидроксильных, карбоксильных, аминогрупп и т.д. (рис. 1, а, рис. 2, а, рис. 3, а). Для органических растворителей большинство таких спектральных линий находится в области $500\text{--}1500\text{ см}^{-1}$, которая называется «областью отпечатков пальцев». Совокупность полос КР в «области отпечатков пальцев» является индивидуальной характеристикой соединения и его идентификационным признаком.

Спектры КР в области валентных колебаний СН- и ОН-групп бинарных смесей метанола, уксусной кислоты и изоамилового спирта с водой с различным соотношением компонентов показаны на рис. 1, б, рис. 2, б, рис. 3, б. Для изоамилового спирта приведены приблизительные соотношения компонентов раствора, так как из-за плохой растворимости спирта в воде концентрация изоамилового спирта в исследуемом объеме кюветы может отличаться от средней по образцу.

В области частот 2600–3800 см⁻¹ наблюдаются полосы валентных колебаний СН- и ОН-групп. Полоса колебаний СН-групп в диапазоне 2600–3100 см⁻¹ имеет несколько четко разрешающихся пиков. Количество, положение, ширина и интенсивность пиков колебаний СН-групп зависят от типа и концентрации органического компонента. Для изоамило-

го спирта валентные полосы СН имеют более сложную структуру из-за более сложного строения молекулы этого спирта по сравнению с двумя другими органическими растворителями. Структуру СН-полос можно использовать для идентификации растворителей в многокомпонентных жидких смесях при наличии каталога спектральных данных.

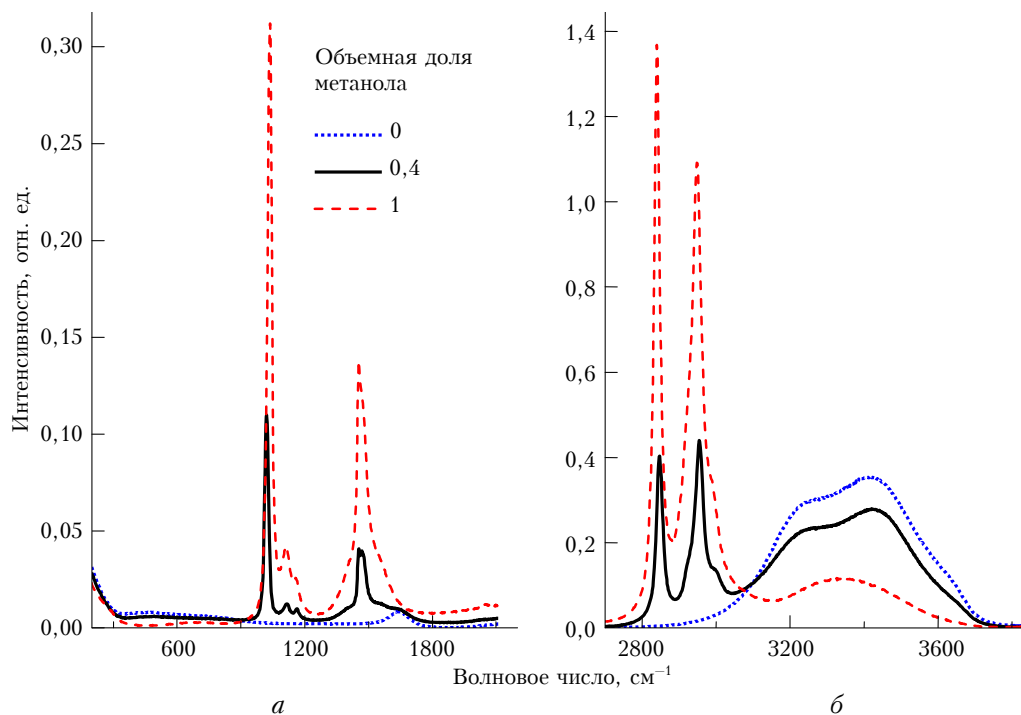


Рис. 1. Спектры КР для смесей метанол/вода с различным соотношением компонентов: *a* – в области низких частот; *б* – в области валентных колебаний СН- и ОН-групп

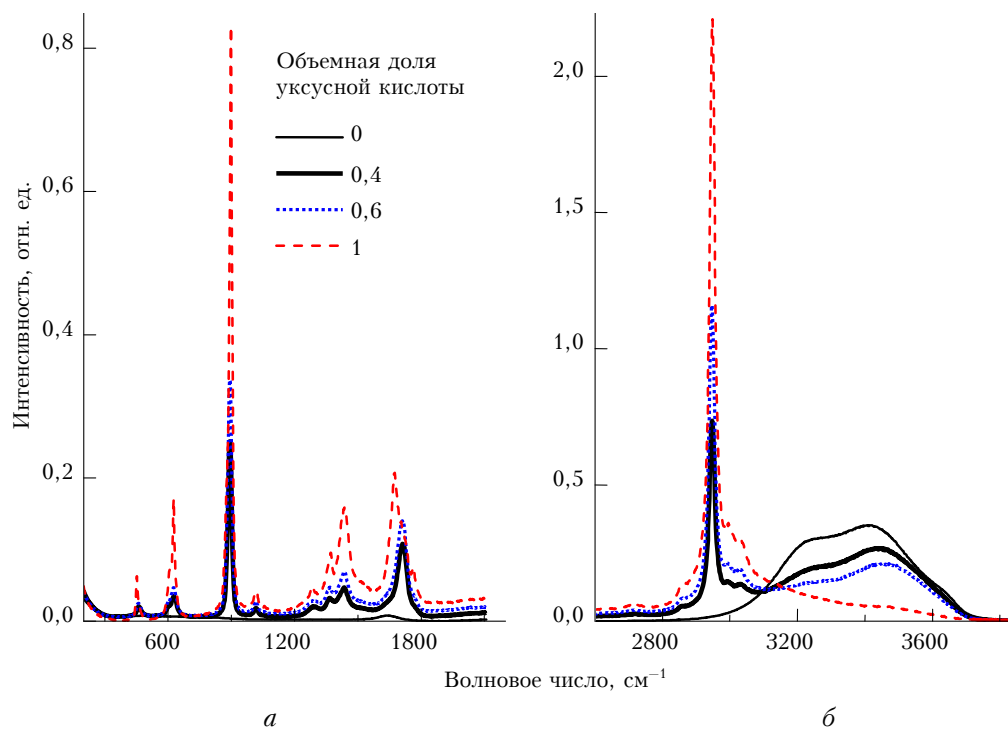


Рис. 2. Спектры КР для смесей уксусная кислота/вода с различным соотношением компонентов: *a* – в области низких частот; *б* – в области валентных колебаний СН- и ОН-групп

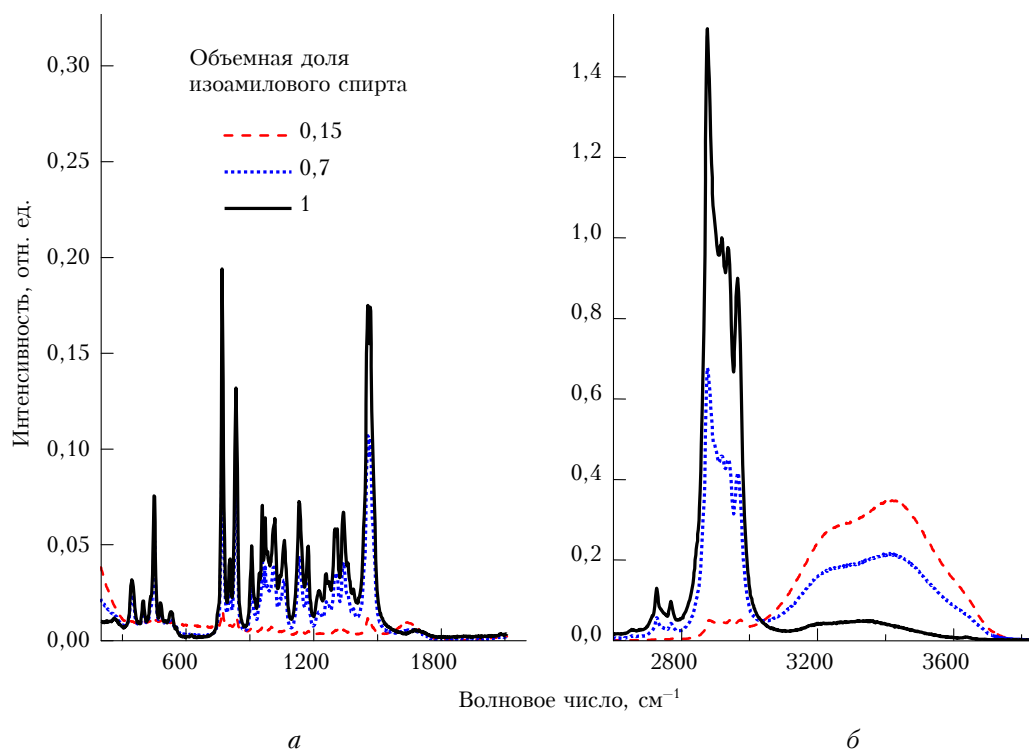


Рис. 3. Спектры КР для смесей изоамиловый спирт/вода с различным соотношением компонентов: *a* – в области низких частот; *б* – в области валентных колебаний СН- и ОН-групп

Полоса колебаний гидроксильных групп воды и спиртов расположена в более высокочастотной области и имеет большую ширину по сравнению с полосой колебаний СН-групп. При увеличении концентрации органического растворителя в водном растворе наблюдаются увеличение интенсивностей полос валентных колебаний СН-групп и одновременное уменьшение интенсивностей полосы колебаний ОН-групп. Вклад в валентные колебания СН-групп дают только молекулы органического растворителя. Основной вклад в формирование полосы ОН-колебаний вносят молекулы воды, но вклад гидроксильных групп спиртов также присутствует и зависит от концентрации спирта.

Определение концентрации органического компонента в водных растворах по спектрам КР

Для количественной характеристики парциальной концентрации органического компонента, как и в предыдущих работах по изучению водно-этанольных растворов [19–21], была выбрана интегральная интенсивность $I_{\text{СН}}$ валентных колебаний СН-групп, нормированная на суммарную интенсивность полос СН- и ОН-колебаний ($I_{\text{СН}} + I_{\text{ОН}}$) в диапазоне 2600–3800 см^{-1} . Значения интенсивности полосы СН интегрировались в диапазоне волновых чисел 2600–3050 см^{-1} , а полосы ОН – в диапазоне 3050–3800 см^{-1} . Оказалось, что для метанола и уксусной кислоты (рис. 4), как и для этанола [19], нормированная интенсивность $I_{\text{СН}}/(I_{\text{СН}} + I_{\text{ОН}})$ линейно зависит от объемной доли органического рас-

творителя во всем диапазоне концентраций для каждой из исследованных органических жидкостей (на рис. 4 это линейные аппроксимации $y(x)$, R^2 – среднеквадратическое отклонение полученных в результате аппроксимации значений ординат от исходных значений нормированных интегральных интенсивностей). Коэффициенты линейной регрессии концентрационной зависимости для водных растворов метанола и уксусной кислоты оказались очень близки между собой, но отличаются от такового для водно-этанольных растворов. При выбранной нами нормировке интенсивность полосы колебаний ОН-групп $I_{\text{ОН}}/(I_{\text{СН}} + I_{\text{ОН}})$ также линейно зависит от объемной доли органического растворителя, с тем же числовым значением коэффициента линейной регрессии, взятым с противоположным знаком.

Построенная таким образом концентрационная зависимость нормированной интенсивности может служить в качестве калибровочной зависимости для определения концентрации жидкостей в двухкомпонентной среде. Для растворов с неизвестным соотношением компонентов измеряется спектр КР, вычисляется нормированная интенсивность $I_{\text{СН}}/(I_{\text{СН}} + I_{\text{ОН}})$ и по этой величине с помощью коэффициентов линейной регрессии калибровочной зависимости вычисляется концентрация органического компонента в воде, выраженная в объемных долях или объемных процентах.

При расчете интегральных интенсивностей полос важную роль играет способ разделения вкладов частично перекрывающихся полос валентных колебаний СН- и ОН-групп. Например, на частотах менее 3050 см^{-1} проявляется крыло ОН-полосы,

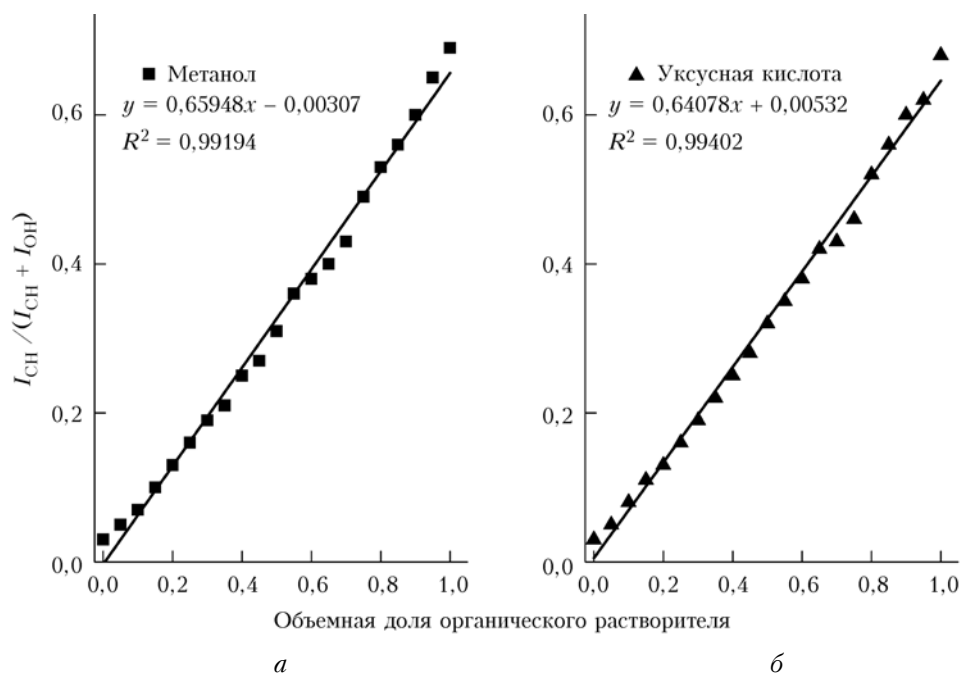


Рис. 4. Зависимость от объемной доли метанола (*а*) и уксусной кислоты (*б*) интегральной интенсивности I_{CH} валентных колебаний СН-групп, нормированной на суммарную интенсивность ($I_{\text{CH}} + I_{\text{OH}}$) колебаний СН- и ОН-групп в диапазоне 2600–3800 см^{-1}

а на частотах более 3050 см^{-1} — часть крыла валентной СН-полосы. Интегральная интенсивность каждой из полос колебаний СН и ОН рассчитывалась несколькими способами: интегрированием полос в различных пределах волновых чисел или интегрированием соответствующих составляющих после разложения спектрального контура на компоненты методом математической деконволюции [25]. Во всех случаях при условии соблюдения выбранной нормировки полос КР (на суммарную интенсивность СН- и ОН-полос) качество линейной аппроксимации концентрационных зависимостей практически не изменялось, поэтому для дальнейшей проверки алгоритма и оценки погрешности метода было выбрано вычисление интегральных интенсивностей в указанных спектральных диапазонах как наиболее простое на практике.

Оценка точности предлагаемого метода проводилась путем сравнения концентрации органического растворителя (этанол, метанола, уксусной кислоты) в растворе, определенной описанным выше способом по спектрам КР света, и номинальной, известной из приготовления растворов. Для каждого растворителя такое сравнение проводилось по серии спектров для 24 растворов с соотношением компонентов, меняющимся от 0 до чистого растворителя. Усредненная по серии спектров относительная погрешность определения объемной доли этанола, метанола и уксусной кислоты в воде составила 0,5; 1,1 и 1,5% соответственно. Для изоамилового спирта не удалось получить подобной концентрационной зависимости из-за плохой растворимости этого вещества в воде. Соответственно, невозможно было применить описанный метод для определения концентрации компонентов в смеси.

Отметим, что данный способ может быть применен и при детектировании сигнала КР через прозрачный пластиковый или стеклянный контейнер без вскрытия тары. Проведенные нами тестовые эксперименты показали, что погрешность измерения концентрации органического растворителя в запечатанной стеклянной бутылке при зондировании образца через стекло или пластик зависит от качества материала контейнера, но, в принципе, метод и в этом случае обеспечивает точность измерения концентрации органического соединения до нескольких процентов. Другие варианты реализации метода определения парциальных концентраций веществ в многокомпонентных жидкостях с помощью спектроскопии КР света включают зондирование жидкостей с помощью погружаемого в канистру, цистерну, бензобак световода или анализ жидкости в потоке непрерывным способом.

Заключение

Методом спектроскопии комбинационного рассеяния света исследованы бинарные смеси метилового, этилового, изоамилового спиртов и уксусной кислоты с водой в широком диапазоне концентраций. Изменение соотношения компонентов бинарных растворов проявляется в изменении соотношения интенсивностей полос валентных колебаний СН- и ОН-групп в диапазоне волновых чисел 2600–3800 см^{-1} . Для количественной характеристики парциальной концентрации органического компонента была выбрана интегральная интенсивность I_{CH} валентных колебаний СН-групп, нормированная на суммарную интенсивность полос СН- и ОН-колебаний ($I_{\text{CH}} + I_{\text{OH}}$) в диапазоне 2600–3800 см^{-1} .

При такой нормировке интенсивность $I_{\text{CH}}/(I_{\text{CH}} + I_{\text{OH}})$ линейно зависит от объемной доли органического растворителя для каждой из исследованных органических жидкостей во всем диапазоне концентраций. Это дает возможность бесконтактным способом (или дистанционно) определять содержание органического растворителя в его смеси с водой. Относительная погрешность определения объемной доли этанола, метанола и уксусной кислоты в воде составила 0,5; 1,1 и 1,5% соответственно. Отметим, что данный алгоритм определения концентрации водно-спиртовых растворов не зависит от аппаратных факторов и прозрачности среды, поскольку используются не абсолютные измерения интенсивностей спектра, а нормированные величины.

Работа выполнена при частичной поддержке гранта РФФИ № 13-01-00897-а.

- Bunte G., Schweikert W., Deimling J., Schnurer F., Krause H. Detection of Liquid Explosives and/or Flammable Liquids by Different Techniques // Detection of Liquid Explosives and Flammable Agents in Connection with Terrorism. NATO Science for Peace and Security. Series B: Physics and Biophysics. 2008. P. 179–188.
- Stancil M., Kyncl M. Some Detection Procedures for Liquid Explosives // Detection of Liquid Explosives and Flammable Agents in Connection with Terrorism. NATO Science for Peace and Security. Series B: Physics and Biophysics. 2008. P. 79–96.
- Wallin S., Pettersson A., Stmark H., Hobro A. Laser-based standoff detection of explosives: a critical review // Anal. and Bioanal. Chem. 2009. V. 395, N 2. P. 259–274.
- Fiddler M.N., Begashaw I., Mickens M.A., Collingwood M.S., Assefa Z., Bililign S. Laser Spectroscopy for Atmospheric and Environmental Sensing // Sens. 2009. V. 9, N 12. P. 10447–10512.
- Сакович Г.В., Чернов А.И., Силантьев С.В., Ворожцов А.Б., Павленко А.А., Максименко Е.В., Макогон М.М., Климкин А.В., Осипов К.Ю., Пономарев Ю.Н., Капитанов В.А., Азеев Б.Г. Макет дистанционного детектора взрывчатых веществ на основе изотопного CO₂-лазера // Ползуновский вестник. 2010. № 4. С. 38–46.
- Wiens R.C., Sharma S.K., Thompson J., Misra A., Lucey P.G. Joint Analyses by Laser Induced Breakdown Spectroscopy (LIBS) and Raman Spectroscopy at Stand-Off Distances // Spectrochim. Acta. A. 2005. V. 61, N 10. P. 2324–2334.
- Gottfried J.L., De Lucia F.C., Munson C.A., Miziolek A.W. Laser-induced breakdown spectroscopy for detection of explosives residues: a review of recent advances, challenges, and future prospects // Anal. and Bioanal. Chem. 2009. V. 395, N 2. P. 283–300.
- Jacob M.E. Matrix isolation study of the infrared spectrum and structure of the CH₃ free radical // J. Mol. Spectrosc. 1977. V. 66, N 2. P. 272–287.
- Rytter E., Gruen D.M. Infrared spectra of matrix isolated and solid ethylene. Formation of ethylene dimers // Spectrochim. Acta. A. 1979. V. 35, N 3. P. 199–207.
- Боганов С.Е., Кудряшов С.В., Рябов А.Ю., Климкин В.М., Климкин А.В., Егоров М.П., Нефедов О.М. Исследование превращения метана и циклогексана в тлеющем и микроволновом разрядах методом матричной ИК-спектроскопии // Изв. Томск. политех. ун-та. 2008. Т. 312, № 2. С. 143–148.
- Боганов С.Е., Кудряшов С.В., Рябов А.Ю., Климкин А.В., Егоров М.П., Нефедов О.М. Спектроскопическое исследование продуктов превращения метана и циклогексана в тлеющем разряде // Оптика атмосф. и океана. 2008. Т. 21, № 8. С. 741–746.
- Ramirez M.L., Ortiz W., Pacheco-Londono L.C., Hernandez-Rivera S.P. Remote Detection of Hazardous Liquids Concealed in Glass and Plastic Containers // IEEE J. Sens. 2010. V. 10, N 3. P. 693–698.
- Marley N.A., Mann C.K., Vickers T.J. Raman spectroscopy in trace analysis for phenols in water // Appl. Spectrosc. 1985. V. 39, N 4. P. 628–633.
- Tanabe K., Hiraisha J. Vibrational frequencies and line-widths of C–H stretching Raman bands of organic molecules in aqueous solution // Chem. Phys. Lett. 1980. V. 71, N 3. P. 460–462.
- Holden C.A., Hummcutt S.S., Sanchez-Ponce R., Craig J.M., Rutan S.C. Study of Complexation in Methanol/Water Mixtures by Infrared and Raman Spectroscopy and Multivariate Curve Resolution-Alternating Least Squares Analysis // Appl. Spectrosc. 2003. V. 57, N 5. P. 483–490.
- Dixit S., Poon W.C.K., Crain J. Hydration of methanol in aqueous solutions: a Raman spectroscopic study // J. of Phys.: Condens Matter. 2000. V. 12, N 21. P. L323–L328.
- Sanford C.L., Mantooth B.A., Jones B.T. Determination of Ethanol in Alcohol Samples Using a Modular Raman Spectrometer // J. Chem. Educ. 2001. V. 78, N 9. P. 1221–1225.
- Cleveland D., Carlson M., Hudspeth E.D., Quattrocchi L.E., Batchler K.L., Balram S.A., Hong S., Michel R.G. Raman Spectroscopy for the Undergraduate Teaching Laboratory: Quantification of Ethanol Concentration in Consumer Alcoholic Beverages and Qualitative Identification of Marine Diesels Using a Miniature Raman Spectrometer // Spectrosc. Lett. 2007. V. 40, iss. 6. P. 903–924.
- Буриков С.А., Доленко Т.А., Пацаева С.В., Южаков В.И. Диагностика водно-этанольных растворов методом спектроскопии комбинационного рассеяния света // Оптика атмосф. и океана. 2009. Т. 22, № 11. С. 1082–1088.
- Burikov S., Dolenko T., Patsaeva S., Starokurov Yu., Yuzhakov V. Raman and IR spectroscopy research on hydrogen bonding in water-ethanol systems // Mol. Phys. 2010. V. 108, N 18. P. 2427–2436.
- Буриков С.А., Доленко Т.А., Пацаева С.В., Южаков В.И. Лазерный анализатор жидкостей с комплексным программным обеспечением // Вода: химия и экология. 2010. № 1. С. 31–37.
- Доленко Т.А., Буриков С.А., Пацаева С.В., Южаков В.И. Проявление водородных связей водно-этанольных растворов в спектрах комбинационного рассеяния света // Квант. электрон. 2011. Т. 41, № 3. С. 267–272.
- Dolenko S.A., Burikov S.A., Dolenko T.A., Persiantsev I.G. Adaptive Methods for Solving Inverse Problems in Laser Raman Spectroscopy of Multi-Component Solutions // Pattern Recognition and Image Analysis. 2012. V. 22, N 4. P. 551–558.
- Burikov S.A., Dolenko S.A., Dolenko T.A., Persiantsev I.G. Application of Artificial Neural Networks to Solve Problems of Identification and Determination of

Concentration of Salts in Multi-Component Water Solutions by Raman Spectra // Optical Memory and Neural Networks (Information Optics). 2010. V. 19, N 2. P. 140–148.

25. *Burikov S., Dolenko S., Dolenko T., Patsaeva S., Yuzhakov V.* Decomposition of water Raman stretching band with a combination of optimization methods // Mol. Phys. 2010. V. 108, N 6. P. 739–747.

S.V. Patsaeva, T.A. Dolenko, S.A. Burikov, V.I. Yuzhakov. **Remote determination of concentration of organic solvents in binary mixtures using Raman spectroscopy.**

Binary mixtures of methanol, ethanol, isoamyl alcohol, and acetic acid with water in various proportions have been studied using Raman spectroscopy. Upon variations in organic solvent concentration in water changes in intensities ratio for bands of CH- and OH-group stretching vibrations within a spectral range 2600–3800 cm^{-1} were observed. For quantitative characterization of partial concentrations of solvents mixed with water, we have chosen an integral intensity I_{CH} of CH-stretching band, normalized to the sum ($I_{\text{CH}} + I_{\text{OH}}$) of both CH- and OH-group stretching bands taken within the 2600–3800 cm^{-1} wavenumber interval. Using this type of intensity normalization, we get the value $I_{\text{CH}}/(I_{\text{CH}} + I_{\text{OH}})$ which depends linearly on the volume fraction of an organic solvent in aqueous solution throughout the whole studied range of its concentration. Raman spectroscopy with normalization to sum of both CH- and OH-group stretching bands gives possibility of non-contact detection and quantification of flammable or toxic liquid mixed with water. Relative accuracy of concentration determination for ethanol, methanol, and acetic acid in water was achieved as good as 0.5, 1.1, and 1.5%, respectively.