
Dépendance en température de la diffusion du CO₂ dissous dans une solution hydroalcoolique : Le cas des vins de Champagne.

Alexandre Perret^{*†1}, David Bonhommeau^{‡1}, Gérard Liger-Belair¹, Clara Cilindre¹, Jean-Marc Nuzillard², Thibaud Cours¹, and Alexander Alijah¹

¹Groupe de spectrométrie moléculaire et atmosphérique (GSMA) – CNRS : UMR7331, Université de Reims Champagne-Ardenne – Moulin de la Housse - BP 1039 51687 REIMS CEDEX 2, France

²Institut de Chimie Moléculaire de Reims (ICMR) – CNRS : UMR7312, Université de Reims Champagne-Ardenne – Moulin de la Housse - BP 1039 51687 REIMS CEDEX 2, France

Résumé

D'un point de vue strictement chimique, le champagne est une solution hydroalcoolique complexe principalement composée d'eau, d'éthanol et de dioxyde de carbone dissous. La présence de CO₂ dissous dans le liquide est un élément clé impactant plusieurs propriétés sensorielles essentielles telles que la fréquence de formation des bulles et le grossissement des bulles dans le verre. En particulier, la diffusion des molécules de CO₂ est le mécanisme responsable de la nucléation et du grossissement des bulles (Liger-Belair, *Sci. Am.*, 288 : 80, 2003).

En considérant le champagne en première approximation comme une solution hydroalcoolique (12.5 % v/v) sursaturée en CO₂ dissous (à hauteur de 12 g/L), des simulations de dynamique moléculaire en champ de force classique (Perret et al, *J. Phys. Chem. B*, 118 : 1839, 2014) ont été menées tout en respectant les proportions du champagne (50 CO₂, 440 EtOH, 10 000 H₂O). Des simulations de replica exchange ont été utilisées pour équilibrer le système moléculaire à différentes températures (277, 281, 285, 289 et 293 K).

Les coefficients de diffusion du CO₂ déterminés à partir des simulations présentent un très bon accord avec les données expérimentales acquises sur un vin de Champagne (Autret et al, *Anal. Chim. Acta.*, 73 : 535, 2005). L'éthanol a été identifié comme principal responsable de la valeur du coefficient de diffusion du CO₂ dans le champagne. Ces résultats sont confirmés par deux méthodes expérimentales : la détermination des coefficients de diffusion du CO₂ à différentes températures par spectroscopie RMN 13C et par une approche indirecte basée sur la mesure fine du taux de grossissement des bulles de CO₂ qui remontent dans une flûte.

Mots-Clés: CO₂, diffusion, champagne, dynamique moléculaire, température, replica exchange

*Intervenant

†Auteur correspondant: alexandre.perret@etudiant.univ-reims.fr

‡Auteur correspondant: david.bonhommeau@univ-reims.fr