

О.І. Торяник, д-р хім. наук, проф. (ХДУХТ, Харків)

О.Г. Дьяков, канд. техн. наук, доц. (ХДУХТ, Харків)

ДОСЛІДЖЕННЯ САМОДИФУЗІЇ У ВОДНИХ РОЗЧИНАХ АГАРОІДУ МЕТОДОМ ЯМР

Структура води і водних систем, до яких відносяться і харчові продукти, визначається станом сітки водневих зв'язків. У відповідність з моделлю сітки безперервних водневих зв'язків у водній системі існують лінійні і скривленні водневі зв'язки. Лінійні водневі зв'язки є більш високоенергетичними ніж скривленні. Якщо в системі збільшується кількість лінійних водневих зв'язків вона переходить в більш організований впорядкований стан. При цьому середнє значення енергії водневих зв'язків також збільшується. У системах, що містять окрім розчинника один і більше компонентів, молекулярна рухливість залежатиме від складу і концентрації компонентів, які у свою чергу впливають на структурний стан системи. Таким чином, за даними молекулярної рухливості можна судити про зміни структурного порядку досліджуваної системи. Для об'єктивної оцінки структурних змін в системі необхідно використовувати енергетичний параметр, що характеризує міжмолекулярні взаємодії. Такий параметр може бути отриманий при аналізі температурних залежностей кінетичних властивостей досліджуваних речовин.

В загальному вигляді для всіх кінетичних процесів, позначивши кінетичний параметр через K , можна записати загальну формулу температурної залежності у вигляді

$$K(t) = A \exp\left(\frac{E}{RT}\right) \quad (1)$$

де A – коефіцієнт пропорційності, E – енергія активації, R – універсальна газова стала.

Енергія активації являє собою потенціальний бар'єр і характеризує міжмолекулярні взаємодії. Обчислити енергію активації можна з температурної залежності кінетичного параметра за виразом

$$E = R \frac{\Delta \ln D}{\Delta \frac{1}{T}} \quad (2)$$

Ця формула передбачає, що коефіцієнт A є незмінною величиною для відносно малих інтервалів температур, на яких розраховується енергія активації.

Методом ЯМР були проведені дослідження самодифузії у чистій воді та водних розчинах агароїду концентрацій 2% і 4% в інтервалі температур 10...70 °С. На рис.1 наведено експериментальні результати та їх математична обробка.

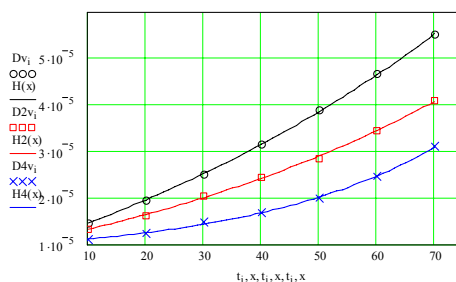


Рис.1 Експериментальні та апроксимовані дані коефіцієнтів самодифузії

За формулою (2) була розрахована енергія активації для всіх досліджених зразків. Результати розрахунку наведені на рис.2

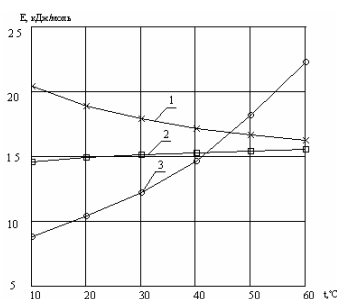


Рис.2 Залежність енергії активації від температури
1 – чиста вода, 2 – 2% агароїду, 3 – 4% агароїду.

Аналіз одержаних результатів показує, що із збільшенням концентрації агароїду зменшується коефіцієнт самодифузії. Такий результат є очікуваним. Аналіз поведінки енергії активації показує, що у чистій воді вона зменшується із зростанням температури і свідчить про руйнування сітки водневих зв'язків. У розчинах енергія активації збільшується із зростанням температури. Це дозволяє припустити, що молекули агароїду сумісно з молекулами води утворюють структуру, в якій енергія міжмолекулярних зв'язків збільшується.