

М.І. Погожих, д-р техн. наук, проф. (*ХДУХТ, Харків*)

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

І.М. Павлюк, асист. (*ХДУХТ, Харків*)

ПОБУДОВА ГРАДУЮВАЛЬНИХ КРИВИХ ДЛЯ ТЕРМОПРИСТАВКИ ДО ЯМР

Оскільки ЯМР це метод дослідження відлуння від системи протонів у досліджуваному зразку, то основним об'єктом ЯМР-досліджень звичайно є вода (оскільки саме вона є основним джерелом протонів) та її стан у харчових системах.

Вода має величезне значення в житті людини, тварин і рослин. Усі процеси травлення і засвоєння їжі людиною і тваринами відбуваються у водному середовищі. Вода є одним з шести основних харчових елементів здорового харчування людини поряд з вуглеводами, білками, жирами, вітамінами і мінералами. З огляду на вищесказане можна сміливо стверджувати, що вода та її фізико-хімічний стан у харчових системах є досить актуальним питанням, що оказує значний вплив на сучасну харчову промисловість, як в практичній її частині так і в науковій.

У ЯМР-дослідженнях найбільш показовим та корисним, в інформаційному розумінні, є знаходження так званої енергії активації E_A . Теоретичне обґрунтування енергії активації дав Я.І. Френкель при розробці кінетичної теорії рідин на основі квазікристалічної моделі. У цій моделі тепловий рух частинок зводиться до коливань у тимчасових положеннях ΔU рівноваги, розділених потенційним бар'єром. Перехід у нове положення рівноваги здійснюється в результаті переходу через потенційний бар'єр, який залежить від енергії міжмолекулярних взаємодій. Час осілого життя частинки рідини в одному положенні рівноваги визначається виразом:

$$\tau = \tau_0 \exp\left(\frac{\Delta U}{kT}\right),$$

де τ_0 – період коливань частинки у положенні рівноваги,

ΔU – енергія відповідаюча тимчасовому положенню рівноваги,

k – постійна Больцмана,

T – температура.

У теорії броунівського руху для коефіцієнта дифузії отримано вираз:

$$D = \frac{\delta^2}{6\tau},$$

де δ^2 – квадрат зміщення частинки за час τ .

Підставляючи значення τ в рівняння дифузії отримаємо:

$$D = \frac{\delta^2}{6\tau_0} \exp\left(-\frac{\Delta U}{kT}\right).$$

Якщо предекспоненту останнього рівняння позначити через D_0 , отримаємо рівняння температурної залежності дифузії відповідне емпіричному рівнянню Арреніуса, в якому енергія активації дифузії має сенс потенційного бар'єру, який визначається міжмолекулярними взаємодіями:

$$D = D_0 \exp\left(-\frac{E_A}{RT}\right).$$

У воді і водних системах енергія міжмолекулярної взаємодії, як і у всіх воднево – зв'язаних системах, є температуро - залежною величиною, тому обчислення енергії активації за експериментальної температурної залежності проводиться у вузьких температурних інтервалах, в межах яких можна знехтувати зміною D_0 і E_A від температури. Експериментально було підтверджено, що енергія активації самодифузії змінюється також як середня енергія водневих зв'язків і реально відображає енергетику досліджуваної системи. Таким чином знаходження енергії активації дає в руки дослідника досить простий і надійний інструмент вивчення структурних змін в водовмісних харчових системах. Отож саме для знаходження енергії активації і потрібна температурна приставка до ЯМР, яка дозволяє проводити дослідження зразків в температурному інтервалі 20...100° С. Цей метод вимірів є непрямим, тобто таким при якому шукане значення величини визначають на підставі результатів прямих вимірювань інших фізичних величин, функціонально пов'язаних з шуканою величиною. Суттєвим недоліком цих вимірів є обчислення похибок, саме тому встає питання градуювання самої приставки та побудови відповідних градуювальних кривих. Що і було виконано під час наших досліджень. Криві будувались для двох різних режимів роботи приставки (які відрізняються максимальною потужністю), в якості контрольного вимірювача температури зразку використовували термопару, а в якості вимірювача камери, в якій знаходиться зразок, термометр опору. Самі криві будувались з допомогою програми MathCad. Побудова даних кривих надає можливість вираховувати енергію активації під час ЯМР досліджень та отримувати інформацію стосовно енергетичних та структурних змін у зразку під час зміни його температурних параметрів.