

**О.І. Торяник**, д-р хім. наук, проф. (*ХДУХТ, Харків*)  
**О.Г. Дьяков**, канд. техн. наук, доц. (*ХДУХТ, Харків*)

## **ЯМР-ДОСЛІДЖЕННЯ ВОДЯНИХ РОЗЧИНІВ ГЛЦЕРИНУ ЯК МОДЕЛЬНОЇ СИСТЕМИ**

Харчові продукти мають широкий спектр вологовмісту від одиниць відсотків у висушених продуктах до майже 100 відсотків у напоях. Значну інформативність щодо стану вологи в харчових продуктах дає метод ядерного магнітного резонансу. Інформативним вимірвальним параметром є час спін-спінової релаксації  $T_2$ , значення якого суттєво залежить від молекулярної рухливості молекул води у досліджуваному зразку. У системах з малою молекулярною рухливістю час спін-спінової релаксації  $T_2$  має малу величину, у той час як у системах з великою молекулярною рухливістю час  $T_2$  значно зростає. Таким чином враховуючи, що зв'язана волога у харчовому продукті має малу рухливість, а вільна велика за даними вимірювання часу спін-спінової релаксації можна робити висновки щодо наявності у продукті зв'язаної чи вільної вологи. Для цього треба мати достовірні дані часу спін-спінової релаксації  $T_2$ , при вимірюванні якого у зразках з великою молекулярною рухливістю виникають певні проблеми, вирішенню яких присвячена дана робота.

В методі спінової луни Хана на досліджуваній зразок, що знаходиться в магнітному полі подається два радіочастотних імпульси з інтервалом часу  $\tau$  після чого на відстані  $2\tau$  виникає сигнал спінової луни з амплітудою

$$A = A_0 \exp \left[ -\frac{2\tau}{T_2} - \frac{2}{3} \gamma^2 G^2 D \tau^3 \right],$$

де  $T_2$  – час спін-спінової релаксації,  $\gamma$  – гіромагнітне відношення для досліджуваних ядер,  $G$  – градієнт постійного магнітного поля,  $D$  - коефіцієнт самодифузії.

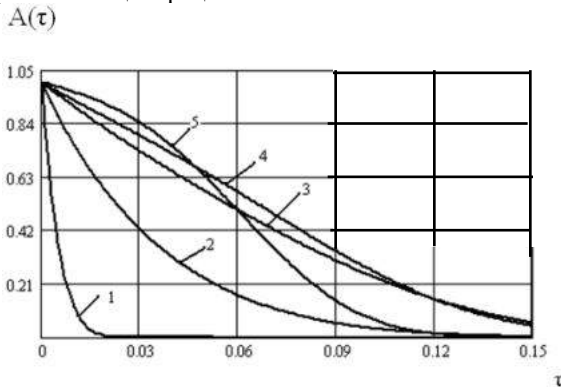
У наведеній вище формулі показник експоненти має дві складові, одна з яких релаксаційний член, а друга дифузійний. Таким чином залежність амплітуди спінової луни  $A$  від часу  $\tau$  є досить складною. Для зразків з малим часом  $T_2$  амплітуда спінової луни спадає швидко, тобто при малих значеннях  $\tau$  і дифузійною складовою можна знехтувати. При дослідженні одержуємо залежність  $A$  від  $\tau$  як дійсну експоненту, з якої легко розрахувати  $T_2$ . Для зразків з великою рухливістю і великим значенням  $T_2$  амплітуда спінової луни

спадає повільно, тобто при великих значеннях  $\tau$ , а це призводить до того, що дифузійний член суттєво впливає на спад амплітуди спінової луни від  $\tau$ . З такої залежності неможливо розрахувати час спін-спінової релаксації бо вона не є дійсною експонентою.

Завдання полягає в знаходженні межі значення молекулярної рухливості до якої з експериментальних даних можна з достовірною точністю розрахувати час спін-спінової релаксації. Експериментально молекулярна рухливість визначається коефіцієнтом самодифузії  $D$ , який обернено пропорційний в'язкості  $\eta$  і зв'язаний з нею відомим співвідношенням Стокса-Ейнштейна.

$$D = \frac{kT}{6\pi r\eta}$$

Для проведення досліджень було обрано модельну систему, яка являє собою водні розчини гліцерину, в'язкість яких можна змінювати у широких межах в залежності від концентрації. На рис. наведено залежність спаду амплітуди спінової луни від  $\tau$  для водних розчинів гліцерину різних концентрацій.



**Рисунок – Залежність спаду амплітуди спінової луни від  $\tau$  для водяних розчинів гліцерину різних концентрацій:  
1 – 100% ; 2 – 80% ; 3 – 60% ; 4 – 40% ; 5 – 0%**

На наведеному графіку видно, що дійсна експонента спаду амплітуди спінової луни від  $\tau$  спостерігається для зразків від чистого гліцерину до 60-ти відсоткового розчину, в'язкість якого становить порядку 11 сп. Таким чином, для харчових систем, в'язкість яких 11 сп і вище вимірювання часу спін-спінової релаксації двоімпульсним методом Хана дасть вірний результат.