

Complément à l'article « La RMN du liquide voit le cœur des légumes et des viandes... puisque ce sont des gels », Hervé This, Linda Weberskirch, Marion Plassais, Alan Luna, Agathe His et Sara Skoglund (L'Act. Chim., 2010, 337, p. 10)

Détail du calcul de la taille des pores

En Maple, le calcul est simplement :

> restart;

Calcul de la taille des pores dans un gel de gélatine à x %

On veut calculer la taille moyenne des pores dans un gel de gélatine à x %. Pour cela, on part d'un volume de $V \text{ m}^3$; la masse est : $V \cdot 10^3 \text{ kg}$.

Si l'on a x % de gélatine (en masse), cela signifie que la masse de gélatine est : $x \cdot V \cdot 10^3 / 100 \text{ kg}$.

Si la masse moléculaire de la gélatine est MM, alors le nombre de molécules de gélatine est : $(x \cdot V \cdot 10^3 / 100) \cdot 10^3 / \text{MM}$.

De sorte que le nombre de molécules de gélatine est : $\text{Na}(x \cdot V \cdot 10^3 / 100) \cdot 10^3 / \text{MM}$.

Supposons que ces molécules forment un réseau cubique. Pour une cellule cubique de ce réseau, il faut douze arêtes, mais chaque arête appartient à quatre cellules cubiques, de sorte qu'il en faut seulement trois en réalité. Ainsi, le nombre de cellules cubiques est de : $\text{Na}(x \cdot V \cdot 10^3 / 100) \cdot 10^3 / \text{MM}$.

Le volume d'une cellule est l^3 , où l est le côté d'une cellule.

On a : $l^3 \cdot \text{Na}(x \cdot V \cdot 10^3 / 100) \cdot 10^3 / \text{MM} = V$.

Et on cherche l, qui vaut :

> Eq:=l³*Na*x*V*(10³/100)*(10³/MM)=V;

$$Eq := \frac{10000 \, l^3 \, \text{Na} \, x \, V}{\text{MM}} = V$$

> sols:=solve(Eq, l) assuming l::real;

$$\text{sols} := \frac{100^{(1/3)} (\text{MM} \, \text{Na}^2 \, x^2)^{(1/3)}}{100 \, \text{Na} \, x} - \frac{100^{(1/3)} (\text{MM} \, \text{Na}^2 \, x^2)^{(1/3)}}{200 \, \text{Na} \, x} + \frac{\frac{1}{200} \, l \, \sqrt{3} \, 100^{(1/3)} (\text{MM} \, \text{Na}^2 \, x^2)^{(1/3)}}{\text{Na} \, x},$$

$$- \frac{100^{(1/3)} (\text{MM} \, \text{Na}^2 \, x^2)^{(1/3)}}{200 \, \text{Na} \, x} - \frac{\frac{1}{200} \, l \, \sqrt{3} \, 100^{(1/3)} (\text{MM} \, \text{Na}^2 \, x^2)^{(1/3)}}{\text{Na} \, x}$$

> sols[1];

$$\frac{100^{(1/3)} (\text{MM} \, \text{Na}^2 \, x^2)^{(1/3)}}{100 \, \text{Na} \, x}$$

> simplify(%);

$$\frac{10^{(2/3)} (\text{MM} \, \text{Na}^2 \, x^2)^{(1/3)}}{100 \, \text{Na} \, x}$$

Données numériques

On suppose que les molécules de gélatine ont une longueur de 300 nm (Gaillard *et al.*, fiche immunoanalytique, citée par Cazor*).

On suppose que la gélatine a une masse moléculaire de 285 000. On calcule une taille en mètres de :

> evalf(subs(MM=285 000, Na=6e23, x=1, sols[1]));

$$3.621578223 \, 10^{-8}$$

Comme les molécules de gélatine ont une longueur de 300 nm, soit $3 \times 10^{-7} \text{ m}$, on voit que l'espace est encombré. Mais on a considéré des molécules linéaires, et un remplissage sans aucun défaut.

* Cazor A., Étude des solutions obtenues par traitement thermique en phase aqueuse de tissus végétaux (racines de *Daucus carota* L.) ou animaux. Recherche des mécanismes responsables de la constitution de ces solutions (« bouillons ») par spectroscopie par résonance magnétique nucléaire quantitative du proton (q 1H RMN) et par électrophorèse (SDS-PAGE) : analyse des modifications microstructurales ou chimiques des tissus traités et suivi cinétique des transferts des principales molécules sapides, thèse Université Paris 6, 2007.