



Рис. ІЧ спектри жирів після проведення попередньої обробки.

Як видно з рисунку, найбільш відмінними частинами спектрів є спектральні лінії близькі до 3400, 3100, 2850, 1740, 1470, 1280, 1100, 940, 720 cm^{-1} .

Регресійний аналіз показав статистично значимі рівні залежності інтенсивності таких приведених ліній від складу жирів (долі атомів кисню, долі відповідних жирних кислот, подвійних зв'язків у них та інших особливостей), що дозволило створити методику аналізу жирів не прив'язану до наявності еталонного зразка.

Так відносна мала інтенсивність ліній поглинання в області 1450-950 cm^{-1} , та мала інтенсивність ліній поглинання в області 3470 cm^{-1} свідчить про жири з великою довжиною жирних кислот. В результаті чого спектри рідких тваринних жирів та оливкової і сонячної олій майже повністю співпадають між собою. Ці смуги дозволяють також виявити риб'ячі, пташинні та деякі рослинні жири, а їх відсутність свідчить дозволяє виявити рослинні жири, які не містять тригліцеридів (олія жожоба, піхтова олія).

Перелік використаних джерел.

1. Смит А. Прикладная ИК-спектроскопия: Пер. с англ. / А. Смит. – М.: Мир, 1982. – 328 с.
2. Тарасевич Б.Н. ИК спектры основных классов органических соединений. Справочные материалы / Б.Н. Тарасевич. – М.: МГУ имени М.В.Ломоносова, химический факультет, кафедра органической химии, 2012. – 55 с.

*Козуб П.А., Мігунов В.Л., Козуб С.М., Бердо Р.В.
 Харківський національний медичний університет*

УНІВЕРСАЛЬНА ЕМПІРИЧНА ТЕМПЕРАТУРНА ЗАЛЕЖНІСТЬ ТЕПЛОЄМНОСТІ

За більш ніж сторічну історію термодинаміки накопичено достатньо великий масив експериментальних даних, встановлено вклад різних чинників у теплоємність, розроблено багато методів її визначення та розрахунків [1]. Але все це так і не зробило термодинаміку

зручним і обов'язковим інструментом у наукових дослідженнях. І основною причиною цього є відсутність зрозумілих для науковців з інших галузей науки, та простих для розрахунків методів температурної залежності теплоємності.

Для розрахунків теплоємності використовують суто емпіричні, напівемпіричні та теоретичні залежності. Кожен з підходів має свої переваги і недоліки, але одночасне їх використання значно ускладнює співставлення отриманих даних та виконання комплексу термодинамічних розрахунків в цілому.

В більшості випадків теоретичні залежності не дуже підходять до реальних термодинамічних розрахунків, оскільки навіть за існуючою теорією вони отримані з деякими спрощеннями та допущеннями, які не завжди самі є строго теоретично обґрунтовані, крім того вони можуть бути розраховані тільки чисельними методами, оскільки вміщують в собі інтеграли, які не мають аналітичного розв'язання.

Емпіричні залежності більш прості для розрахунків і мають більшу точність у порівнянні з теоретичними [2]. На практиці як правило, використовується емпіричне розкладання теплоємності в ряд за ступенями. При цьому, для зручності вводять різні уточнення, такі як поліноми з включенням негативних та дробових ступенів.

Головний недолік наближення звичайними многочленами - це дуже швидке порушення близькості при виході за межі області наближення. Це призводить до значних відхилень розрахунків від експериментальних даних безпосередньо за межами їх отримання. Саме цей недолік поліномів, є причиною того, що в багатьох довідниках при наближенні теплоємності розглядають кілька діапазонів, іноді до 10 і більше, на яких застосовуються різні поліноми. При цьому виникає ще одна проблема - стикування багаточленів для отримання плавної функції.

Нами запропоновано уніфіковану залежність яка в загальному вигляді визначається як

$$C(T) = \frac{C_1}{1 + \left(\frac{\zeta_1}{T}\right)^{v_1}} + \frac{C_2}{1 + \left(\frac{\zeta_2}{T}\right)^{v_2}} + \frac{C_3}{1 + \left(\frac{\zeta_3}{T}\right)^{v_3}} + \dots + \frac{C_i}{1 + \left(\frac{\zeta_i}{T}\right)^{v_i}}$$

де $C(T)$ – температурна залежність теплоємності; C_1, C_2, C_3, C_4 – максимальні теплоємності відповідного енергетичного стану; $\zeta_1, \zeta_2, \zeta_3, \zeta_4$ – температури збудження (виродження) відповідного енергетичного стану; v_1, v_2, v_3, v_4 - показник швидкості збудження (виродження) відповідного енергетичного стану.

Дослідження ефективності запропонованої емпіричної формули було проведено на даних з відкритого комплексу F * A * C * T (Facility for the Analysis of Chemical Thermodynamics), який було визначено за контрольний зразок (прийнято за умовно експериментальні дані), та на даних програмного комплексу HSC Chemistry (Outokumpu Research Oy), призначеного для моделювання рівноважних термодинамічних станів і процесів на комп'ютері (число речовин в базі даних, перевищує 20000).

В результаті розрахунків було визначено дуже добру узгодженість формули з довідниковими даними обох комплексів, що важно для практиків. Похибка апроксимації умовно-експериментальних даних не перевищувала 1-2%, у той час як розбіжність даних для цих баз даних (для однієї і тієї речовини) іноді досягала 12 %.

Розрахунки показали, що для апроксимації практично всіх речовин (незалежно від агрегатного стану) достатньо всього трьох членів залежності (6 параметрів). Це дає можливість отримати температурну функцію теплоємності для всіх речовин з визначених баз даних з точністю до 1% в одному температурному діапазоні від 0 до 6000 K, а при використанні 5 членів до температури 100000 K. У той же час як в базах даних ці дані апроксимуються від 3-х до 9-и поліноміальних відрізків.

Крім того, було встановлено, що температурна залежність отримана по даних для помірних температур (100-500 K) дуже добре співпадає з експериментальними даними

для низьких температур (10-40 K), які були взяті з додаткових літературних джерел [3,4], оскільки були відсутні в досліджуваних базах даних. Різниця між розрахованими та експериментальними даними становила не більше 2%.

Перелік використаних джерел.

1. Духанин Г. П. Термодинамические расчеты химических реакций: учеб, пособие/ Г. П. Духанин, В. А. Козловцев / Волг-ГТУ. - Волгоград, 2010. – 96 с.

2. Ходаковский И. Л. О новых полуэмпирических уравнениях температурной зависимости теплоемкости и объемного коэффициента термического расширения минералов / И. Л. Ходаковский; ВЕСТНИК ОНЗ РАН, ТОМ4, NZ9001, doi:10.2205/2012NZ_ASEMPG, 2012.

3. Термодинамические свойства индивидуальных веществ. Справочное издание: В 4-х т. / Гурвич Л.В., Вейц И.В., Медведев В.А. и др. – М.: Наука, 1981. – 400 с.

4. Third Millennium Ideal Gas and Condensed Phase Thermochemical Database for Combustion with Updates from Active Thermochemical Tables .A. Burcat, Israel Institute of Technology, 2005. – 400 с.

*Козуб П.А., Козуб С.М., Бердо Р.В., Печерська В.І., Романов М.Д.
Харківський національний медичний університет*

**ВИКОРИСТАННЯ ВЕКТОРІВ ДЛЯ ПРОВЕДЕННЯ ТА НАГЛЯДНОГО ПРЕДСТАВЛЕННЯ
СТЕХІОМЕТРИЧНИХ РОЗРАХУНКІВ У ХІМІЇ**

Стехіометричні розрахунки є одним із наріжних каменів сучасної хімії. Розрахунки стехіометричних коефіцієнтів та метод зрівнювання реакцій відображають саму суть хімії – закон збереження речовини.

Традиційний запис хімічної взаємодії у символічній формі дуже просто сприймається при викладанні і простих розрахунках, наглядний та швидкий у записі. Але цей метод не є ефективним при виконанні розрахунків з великою кількістю реагентів, складних послідовних взаємодій, наявності комплексних сполук, кристалогідратів та ін.

Алгебраїчні методи, засновані на використанні матричних підходів, занадто абстрактні, ненаглядні і при наявності проблем у розрахунках їх майже нереально відшукати та виправити, а результати розрахунків у вигляді матриць дуже ненаглядні і дуже важко сприймаються людьми.

Поєднання обох підходів – законів стехіометрії та векторного підходу до відображення та розрахунків призводить до нового підходу для стехіометричних розрахунків, дозволяє спростити їх розуміння, а також створити прозорий алгоритм розрахунків для будь-якої за розмірами реакційної системи, що дозволить перейти на новий рівень прогнозних розрахунків у хімії.

Згідно з формою запису хімічної реакції та реагентів, кожен реагент може бути записаний у вигляді векторів у багатовимірній системі координат. Причому координатними осями для них є кількості атомів відповідного типу, або інші структурні одиниці (іони, лігандні частини та ін.). Згідно закону кратних відношень координатні осі мають цілочисельні значення, що вказує на кінцеву чисельність векторів для кожного набору атомів.

Особливістю векторів є їх невід'ємний зв'язок з законом збереження маси – довжина векторів від однієї точки до іншої є величиною сталою і не залежить від форми векторів, які вибрані в якості шляху до цієї точки. Таким чином, складання векторів на площині (у просторі) відповідає процесу утворення суміші речовин, що наглядно ілюструє рисунок. Сума векторів – реагентів мають ту ж кінцеву точку, що і сума векторів – продуктів.