

**Перелік використаних джерел.**

1. Tarnavchyk, I.; Popadyuk, A.; Popadyuk, N.; Voronov, A. ACS Sustainable Chem. Eng., 2015, 3, 1618–1622.

*Козуб С.М., Козуб П.А., Рудченко С.О., Тішакова Т.С.  
Харківський національний медичний університет*

**МЕТОДИКА ОБРОБКИ ІНФРАЧЕРВОНИХ СПЕКТРІВ ПРИРОДНИХ ЖИРІВ**

Використання ІЧ спектроскопії для аналізу органічних продуктів є одним із перспективних напрямків аналітичної хімії харчової промисловості. На відміну від традиційних хімічних методів, вона потребує менших зразки значно менших розмірів, є більш селективними та точними.

Традиційним шляхом обробки ІЧ спектрів є використання бібліотек вже відомих речовин, та оцінка відносної ефективності відповідних смуг поглинання [1,2]. Відношення інтенсивностей таких смуг є унікальним для кожної речовини, і залежить від її структури. Для складних речовин утворюються широкі смуги поглинання (сприймається як фон), які спотворюють співвідношення між смугами, в результаті чого кількісний і навіть напівкількісний аналіз ІЧ спектрів дуже ускладнюється.

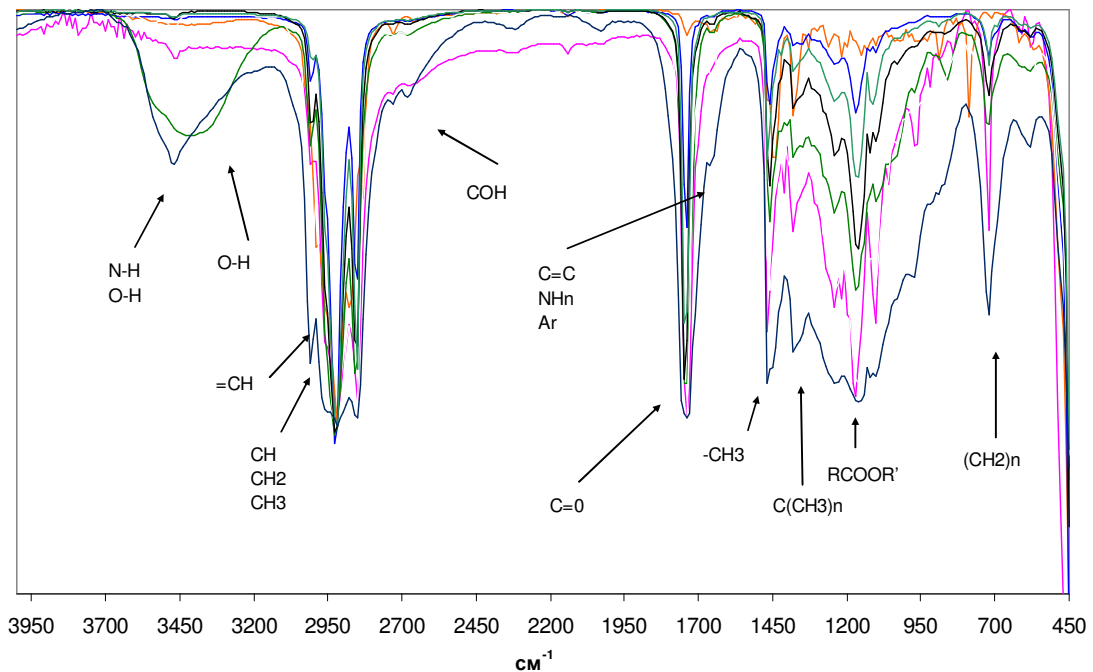
Для розробки ефективної методики оцінки ІЧ спектрів органічних речовин було проведено експериментальні дослідження з найбільш поширеними природними жирами рослинного та тваринного походження: рослинні жири (какао, пальмова, кокосова, соняшникова, кукурудзяна, оливкова, гарбузова, льняна, рицинова, олія жожоба, піктова, камфорна олії), тваринні жири (яловичий, вершковий, баранячий, свинячий, кролячий, нутрієвий, гусячий, качиний, індокачиний, курячий, яечний жири) та рибні жири (сьомги, пеленгаса, товстолоба, бичків, тріски, салаки, ікри салаки, мойви, ікри мойви, карася, ікри карася, карпа).

Для мінімізації похибки на стадії відбору проби, вони відбирались із свіжих зразків тканин. Наявність гідро затвору та екстракція при температурах не більше 323 К виключало окиснення жирів. Під час відбору зразків безпосередньо для отримання ІЧ спектрів їх кількість була приблизно однаковою для забезпечення подібності товщини шару зразків.

Для виключення впливу на вигляд спектру побічних чинників – товщини шару зразка, наявності домішок, фізичного стану (наявність мікрокристалів) та ін. - визначення та обробка ІЧ спектрів проводили у декілька етапів.

Переведення значень інтенсивностей до логарифмічної системи координат дозволило теоретично обґрунтовано видалити базову лінію, яка відповідає за наявність домішок у зразках та привести спектри до єдиного масштабу. Після цього було проведено визначення окремих піків та співставлення їх для різних речовин, що дало можливість кількісно виділити групи з найбільш подібними характеристиками, а також отримати кількісні залежності інтенсивності смуг поглинання від складу жирів.

Принципово новим підходом до обробки спектрограм стало їх масштабування відносно спектральної лінії валентних коливань С-Н, яка є пропорційною кількості атомів вуглецю у молекулі. Як видно з рисунку, після цього спектрограми жирів стали співставними і незалежними від таких факторів як товщини зразків, наявності кристалітів та ін.



**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  $\text{cm}^{-1}$ .

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  $\text{cm}^{-1}$ , та мала інтенсивність ліній поглинання в області 3470  $\text{cm}^{-1}$  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, піктова 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