

$$\alpha_{CH_3OH} = 0.178 - \frac{1.08}{2.5 + E_{H_2}} + 47.4 \frac{E_{CO} + 0.5}{(E_{CO} + 0.6) \cdot (E_{CO} + 57)},$$

$$\alpha_{CO(NH_2)_2} = 1.27 - \frac{1.48}{2.7 + E_{NH_3}} - \frac{0.229}{1.1 + E_{CO_2}},$$

$$\alpha_{NO} = 1.39 - \frac{2.21}{3.5 + E_{NO}} - \frac{1.51}{3.5 + E_{O_2}}$$

Аналіз рівнянь показав, що вони справедливі для широкого інтервалу варіювання параметрів і дають значну похибку (більше 10%) тільки при значеннях α_S менших 0.05 і великих 0.95. Незважаючи на обмежену кількість використовуваних параметрів (це всього лише ілюстрація підходу) від отриманих рівнянь значно простіше використовуваних в даний час неявно виражених рівнянь і поправочних таблиць, що значно спрощує технологічні розрахунки процесу.

Співставлення рівнянь вказує на їх близьку математичну форму, що робить процес дослідження більш прогнозованим, дозволяє уніфікувати процеси моделювання, аналізу та статистичної обробки експериментальних даних. Явний вигляд залежностей і простота їх отримання дозволяє по новому підійти до питань управління та оптимізації діючих виробництв, а також значно спростити процес прогнозування багатьох технологічних рішень.

Перелік використаних джерел.

- 1.Технология связанного азота.(под ред. В.И.Атрощенко)// - К.:Вища школа, 1985.
- 2.Каталитические и массообменные процессы под давлением в технологии неорганических веществ (под. ред. А.Я.Лобойко)// - Харьков:."Основа" , 1993.

Козуб С.М., Козуб П.А., Рудченко С.О., Левашова О.Л.
 Харківський національний медичний університет

СТВОРЕННЯ БІБЛІОТЕКИ ІНФРАЧЕРВОНИХ СПЕКТРІВ ПРИРОДНИХ ЖИРІВ

Проблеми здорового харчування у останні роки набули надзвичайної актуальності. Більше ніж третина населення планети має підвищену вагу, а в розвинутих країнах виготовлення продуктів харчування супроводжується додаванням різних добавок, які не існують у природних продуктах. Все це спричиняє низку захворювань.

Традиційні хімічні методи перевірки складу продуктів є досить складними і потребують відносно великих розмірів зразків. Крім того, вони є селективними, і тому не дозволяють встановлювати склад багатьох (особливо нових) продуктів.

У той же час існують такі ефективні фізичні методи як ІЧ спектrometerія, які є досить ефективними, але не мають сталих методик їх використання для подібних об'єктів. Тому створення бібліотеки основних жирів, які використовуються у технології харчових виробництв та для виробництва косметичних засобів є дуже важливим з практичної точки зору. Але крім того, така робота дає можливість проведення попередньої класифікації отриманих даних, великого кола узагальнюючих висновків та розширення їх на інші продукти харчування – білки, вуглеводні, вітаміни.

Для створення бази даних було обрано широкий клас жирів які зустрічаються у повсякденних продуктах харчування та косметологічних засобах. Вони були розділені на чотири основні групи – рослинні масла, рибні жири, жири птиці та тваринні жири.

Оскільки основним завданням роботи є створення бази даних ІЧ спектрів жирів з метою якісної оцінки продуктів харчування та виявлення можливої їх фальсифікації, то

кількість зразків повинна бути якомога більшою. Але у той же час, проведення кожного дослідження вимагає матеріальних та часових затрат, що зумовлює обмеження на кількість зразків, що можуть бути взяті для дослідження.

З точки зору подальшого використання бази даних мінімальна кількість даних повинна бути достатньою для достовірної оцінки подальших замірів, та висновків щодо можливих залежностей між властивостями еталонних жирів, зразків для аналізу та спектрами. Крім того кількість еталонних зразків повинна забезпечити можливість кількісної оцінки похибки вимірювання.

Виходячи з цього було вибрано зразки, що представляють всі основні групи масел та жирів, що є у широкому вжитку: рослинні жири (какао, пальмова, кокосова, соняшникова, кукурудзяна, оливкова, гарбузова, льняна, рицинова, олія жожоба, піхтова, камфорна олії), тваринні жири (яловичий, вершковий, баранячий, свинячий, кролячий, нутрієвий, гусячий, качиний, індокачиний, курячий, яєчний жири) та рибні жири (сьомги, пеленг аса, товстолоба, бичків, тріски, салаки, ікри салаки, мойви, ікри мойви, карася, ікри карася, карпа).

Згідно результатів попередньої обробки приведених спектрів, найбільш відмінними частинами спектрів є спектральні лінії близькі до 3400, 3100, 2850, 1740, 1470, 1280, 1100, 940, 720 cm^{-1} . Крім того було встановлено, що між деякими спектрами тваринних жирів є більша різниця ніж між спектрами рослинних та тваринних жирів, або між спектрами рослинних та риб'ячих жирів. Це вказує на те, що класифікація спектрів повинна враховувати не стільки походження жиру, скільки його склад. За такою ознакою всі жири було розподілено на чотири групи.

Для групи жирів з великою довжиною жирних кислот характерна відносна мала інтенсивність ліній поглинання в області 1450-950 cm^{-1} , та мала інтенсивність ліній поглинання в області 3470 cm^{-1} . В результаті, згідно даних ІЧ спектроскопії, середній склад тваринних жирів та оливкового та сонячного олій майже повністю співпадають між собою.

Група жирів з малою довжиною жирних кислот мають відносно більшу інтенсивність ліній поглинання в області 1450-950 cm^{-1} , та малу інтенсивність ліній поглинання в області 3470 cm^{-1} . До цієї групи жирів відносяться риб'ячі та деякі рослинні жири, які існують у вигляді тригліцеридів.

Для спектрів жирів з найменшою довжиною жирних кислот характерна найбільш більш висока інтенсивність ліній поглинання в області 1450-950 cm^{-1} , та наявність статистично значимих ліній поглинання в області 3470 cm^{-1} . До цієї групи жирів відносяться риб'ячі та пташині жири.

До групи жирів з особливим складом було віднесено жири із значними відхилення в деяких лініях поглинання за рахунок їх відмінностей складу від попередніх груп.

Так в рициновій олії є три спиртові групи (рицинолова кислота). Піхтова олія взагалі не має кисню у своєму складі, а олія жожоба відноситься до складу восків, та складається із складних ефірів. Какао-олія майже на 90 відсотків складається з кислот з довжиною у 18 атомів вуглецю.

Таким чином, отримання спектрів основних груп природних жирів дозволило виділити їх групові особливості, що підтверджує можливість перевірки складу жирової частини продуктів харчування за допомогою ІК спектрометрії.

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.