

можна зробити висновок про те, що жоден із досліджених нами зразків неможна рекомендувати для вживання дітьми.

Список використаної літератури

1. ДСТУ40-84-2001 Консерви фруктові пюреподібні для дитячого харчування.
2. ДСТУ 4518:2008 «Продукти харчові. Маркування для споживачів».
3. Набиванець Б.Й. Аналітична хімія природного середовища / Б.Й. Набиванець, В.В. Сухан, Л.В. Карабіна. – К.: Либідь, 1996. – С.291-292.
4. Николаева, М.А., Лычников, Д.С., Неверов, А.Н. Идентификация и фальсификация пищевых продуктов. – М.: Экономика, 2005. – 197 с.

ВИВЧЕННЯ ЕКСТРАТЕРМОДИНАМІЧНИХ КОМПЕНСАЦІЙ

Ромашко Т. П.

Полтавський державний аграрний університет

На сьогодні в термодинаміці існує ряд явищ, які мають вочевидь спільну, але дискусійну на загаль, природу. Це – явище лінійності вільної енергії, ізокінетичний ефект, ізорівноважний ефект та ефект компенсації ентальпія-ентропія. Дані явища мають місце для широкого кола фізичних, хімічних і біологічних процесів, як це, мабуть, найбільш ґрунтовно було показано в роботах [1-7]. Вони являють собою закономірності, що стосуються не окремої системи, а охоплюють різноманітні серії споріднених систем. Згадані закономірності не знаходять пояснення в рамках звичайної термодинаміки й тому часто визначаються як екстратермодинамічні явища.

З наведеного переліку екстратермодинамічних явищ, ефект компенсації ентальпія-ентропія (ЕЕК), як видається, є ключовим для розуміння їх природи. Вперше такого штибу закономірність було виявлено майже сторіччя тому й потім це явище досліджувалося й досліджується дотепер [1-7]. Даний ефект є одним з найбільш дискусійних проблемних моментів сучасної термодинаміки і зараз існують різні, навіть діаметрально протилежні, точки зору на його походження. Спектр думок варіюється від сприйняття ЕЕК за статистичний артефакт до визнання її дійсною й важливою, хоча й не зрозумілою, екстратермодинамічною закономірністю.

Сутність ЕЕК можна виразити лінійною регресією

$$H(j) = T_{\alpha}S(j) + \alpha, \quad (1)$$

де $H(j)$ і $S(j)$ – ентальпія і ентропія системи j , відповідно;

T_{α} – температура компенсації;

α – константа.

В даному виразі, $H(j)$ і $S(j)$ – перемінні величини для серії систем, що характеризують системи j ; T_{α} і α – сталі параметри серії, що включає в себе системи j , які були відібрані для експериментів.

Але є підстави вважати, що автори різних робіт намагаються застосувати рівняння (1) до геть різних закономірностей, пов'язаних не з компенсацією ентальпія-ентропія, а радше з кореляцією цих величин.

На підставі аналізу даних щодо $H(j)$ і $S(j)$ в різноманітних серіях систем, авторами [1] була зроблена спроба надати класифікацію лінійним залежностям між $H(j)$ і $S(j)$. До однієї категорії було віднесено залежності з узгодженим зростанням величин $H(j)$ і $S(j)$, яке

пояснюється самим визначенням величин ентальпії й ентропії в термодинаміці: $c_p = \frac{\partial H}{\partial T} = T \frac{\partial S}{\partial T}$. Тут c_p – теплоємність речовини при сталому тиску.

До іншої категорії компенсацій H - S , що була виокремлена авторами [1], включено серії систем, що мають спільне джерело адитивності. Тобто, енергія Гіббса різних систем відрізняється на величину, пропорційну її певному значенню, пов'язаному з центром адитивності.

Ще одна категорія компенсацій за версією авторами [1] – це коли величина зміни енергії Гіббса (ΔG) в різних системах серії є незначною. Тоді походження компенсації між H і S стає видно з виразу: $H(j) - TS(j) = G(j) \cong \text{const}$.

До ще однієї категорії компенсації між H і S авторами [4] віднесені залежності, що мають так звану слабку форму компенсації. Вочевидь, така компенсація не є точною, бо вона має пояснення те, що, при варіюванні параметрів термодинамічної системи, зміни в ній спричиняють зміни в значеннях величин H і S одного знаку, тобто, зміни H і S є тотожними лише якісно.

Екстратермодинаміка не суперечить термодинаміці, а лише доповнює останню низкою величин статистичної природи. Формалізм методу є в тому, що макростани характеризуються лише величинами, властивими суто термодинаміці та статистичній фізиці: ентальпія, температури компенсації, статистичні параметри, які поєднують серії систем лінійними залежностями.

Нам здається, що сприйняття різних систем в серіях за різні макростани однієї й тієї ж термодинамічної системи є найбільш правильним поглядом на об'єкти екстратермодинамічних досліджень. Звісно, на практиці ніхто не переводить систему з одного її макростану в інший. Зазвичай досліджують серії зразків, приготованих незалежно. Сприймати таку серію зразків за різні макростани однієї й тієї ж термодинамічної системи є умовністю.

Екстратермодинамічний метод аналізу може бути корисним в плані систематизації термодинамічних даних, отриманих за результатами експериментів. Але, як видається, більше значення має обґрунтування в рамках екстратермодинаміки погляду на фазовий простір як на енергетичну субстанцію.

Справді, в термодинаміці ентропію можна тільки визначити і неможливо безпосередньо виміряти. Не дивлячись на це, ентропія є такою ж реалією термодинаміки, як і будь-яка інша фізична величина, що піддається вимірюванням. Пов'язання фазового простору термодинамічної системи з енергією може пояснити деякі неясні та парадоксальні місця в термодинаміці.

Список використаної літератури:

1. Pan A., Kar T., Rakshit A.K., Moulik S.P. Enthalpy-entropy compensation (EEC) effect: decisive role of free energy, J. Phys. Chem. B 120. 2016. P. 10531–10539.
2. Fox J. M., Zhao M., Fink M. J., Kang K., Whitesides G. M. The Molecular Origin of Enthalpy/Entropy Compensation in Biomolecular Recognition, Annu. Rev. Biophys. 47. 2018. P. 223–250.
3. Khrapunov S. The enthalpy-entropy compensation phenomenon. Limitations for the use of some basic thermodynamic equations. Curr. Protein Pept. Sci. 19. 2018. P. 1088–1091.

4. Breiten B., Lockett M. R., Sherman W., Fujita Sh, Al-Sayah M. H., Lange H., Bowers C. M., Heroux A., Krilov G., Whitesides G. M, Water Networks Contribute to Enthalpy/Entropy Compensation in Protein-Ligand Binding, J. Am. Chem. Soc. 109. 2013. P. 3790–3792.

ДОСЛІДЖЕННЯ АНТИОКСИДАНТНИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ МЕЛАТОНІНУ

¹Соловійов В.В., ²Кузнецова Т.Ю., ³Соловійова Н.В., ³Міщенко А.В., ³Костенко В.О.

¹Національний університет «Полтавська політехніка імені Юрія Кондратюка».

²Полтавський національний педагогічний університет імені В. Г. Короленка.

³Полтавський державний медичний університет.

Всі форми життя зберігають в середині своїх клітин відновне середовище. Порушення цього стану призводить до збільшення рівня вільних радикалів, що в свою чергу призводить до окислення білків, ліпідів та ДНК і, як наслідок, вони не можуть виконувати свої функції в організмі, що призводить до великого переліку хвороб. Стан організму коли утворення активних форм кисню (АФК), які перетворюються на вільні радикали переважає над їх знешкодженням – оксидативний стрес.

У наш складний час проблеми, які виникають внаслідок оксидативного стресу знову актуальні, адже сучасна людина постійно знаходиться у постійному нервовому напруженні і уникнути його їй дуже важко. Дослідження показують, що надмірна напруга призводить до виникнення оксидативного стресу, котрий, в свою чергу, ще більше посилює прояви тривожності та інші проблеми з психікою. Забруднення води та повітря, різні токсини, радіація, бактеріальні, грибові та вірусні інфекції – це фактори навколишнього середовища, які теж призводять до збільшення вільних радикалів в організмі людини. У людей, які хворіли на COVID-19 погіршувалося здоров'я через інтоксикацію продуктами розпаду клітин, які при розпаді утворювали велику кількість вільних радикалів, що починали атакувати мембрани інших клітин, руйнуючи їх при цьому.

Для зменшення кількості вільних радикалів в організмі людини застосовуються антиоксиданти. Одним із них є мелатонін. В наших попередніх роботах [1] було розглянута взаємодія вільних радикалів із мелатоніном і доведена його антирадикальна активність за допомогою квантовохімічних розрахунків і вірність наших досліджень підтверджується включенням його в протокол лікування COVID-19. Нами була продовжена робота по дослідженню антиоксидантної активності мелатоніну за рахунок моделювання процесу електровідновлення активних форм кисню в присутності гормону.

Електрохімічні дослідження взаємодії мелатоніну з АФК проводили з використанням методу, запропонованого в Інституті біоорганічної хімії та нафтохімії **НАН України**. Диференціальні вольтамперні криві відновлення активних форм кисню, які характеризують реакції (1-3), аналогічні тим, що протікають в біосистемах в процесі дихання, обміну речовин, оксидативного стресу (рис. 1):

