

увібрала в себе декілька підсистем, що в свою чергу можуть бути також розглянуті та вивчені як самостійні системи. Ознаками сфери фізичного виховання і спорту як соціальної системи є такі: невід'ємність системи від загальної соціальної системи держави та суспільства; складність всієї системи та складність завдань, які вона вирішує; спрямованість її діяльності на людину, особистість якої є об'єктом впливу всієї системи в цілому та окремих її підсистем.

Відкритість системи фізичного виховання і спорту обумовлена тим, що вона існує завдяки постійному обміну із зовнішнім середовищем. На розвиток системи мають суттєвий вплив такі фактори як: тип соціальної побудови держави, рівень соціально-економічного розвитку, склад населення, його традиції, інтереси, національні особливості. Тому систему фізичного виховання і спорту слід розглядати невід'ємно від соціальної системи суспільства, частиною якої вона є.

Сфері фізичного виховання і спорту як і окремим організаціям притаманне прагнення до досягнення цілей. Саме для цього організації, які входять до складу системи, вступають між собою у взаємодію. Загальносистемні цілі формуються на рівні суспільства, на державному рівні.

До сфери фізичного виховання і спорту входить безліч компонентів (організацій). Взаємодія в системі організацій, які здійснюють фізичне виховання, набір, відбір, попередню базову та завершальну підготовку спортсменів, а також організацій, які здійснюють матеріально-технічне, науково-методичне забезпечення полягає в тому, що кожна з них вирішує свої, властиві їй завдання. Однак сукупність результатів вирішення завдань є потужним фактором розвитку цілісної системи фізичного виховання і спорту.

Сфера фізичного виховання і спорту одночасно є відносно самостійною системою, такою, яка має свої цілі, завдання, принципи функціонування у взаємодії із середовищем, що також характеризує її як цілісну систему.

Динамічність системи фізичного виховання і спорту характеризує безперервність її змін в цілому, а також змін окремих частин. Змінюються: методика, рівень спортивних результатів, інвентар, обладнання, форми організації діяльності фахівців, матеріально-фінансове забезпечення тощо. Всі ці зміни відбивають об'єктивний процес розвитку сфери фізичного виховання і спорту, що повинно враховуватися у діяльності її організацій.

Ієрархічність системи обумовлена тим, що у ній існує підпорядкованість підсистем та об'єктів, цілей, завдань. Саме ієрархічність дозволяє виділити управлінські вертикалі в середині підсистем більшості організацій.

Розглянуті особливості є найбільш загальними та фундаментальними для фізкультурно-спортивних організацій. Вони складають їх основу для спортивного менеджменту, визначають їх структуру і зміст, а також особливості механізму управління організаціями фізкультурно-спортивної спрямованості.

#### Література

1. Бойделл Т. Как улучшить управление организации: пособие для руководителей / Т. Бойделл. М.: Ассіана, 1996. – 204с.
2. Жданова О. М. Управління сферою фізичного виховання і спорту / О. М. Жданова. Львів: Коло, 2009. – 224с.

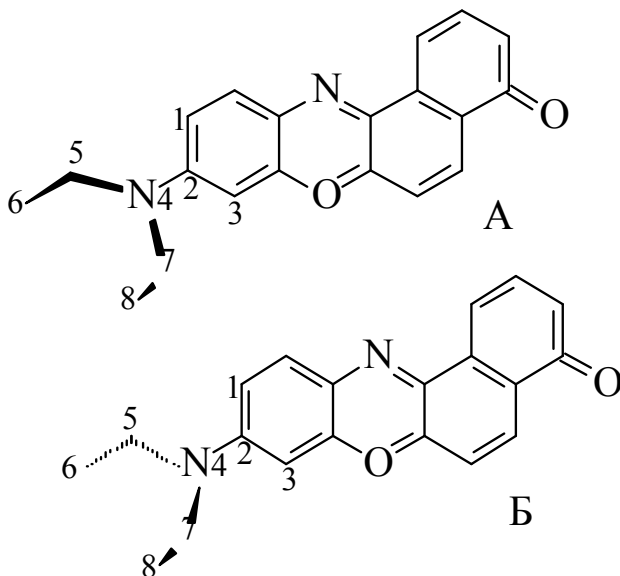
### **ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ТІСТ-СТРУКТУРЫ НА СПЕКТРАЛЬНЫЕ СВОЙСТВА МОЛЕКУЛЫ НИЛЬСКОГО КРАСНОГО**

*Ромашко Т.П. (м. Полтава)*

Оптические химические сенсорные материалы находят широкое применение в качестве детекторов малых концентраций, работающих в режиме ре-

ального времени. Большое количество работ посвящено созданию оптических хемосенсоров на основе флуорофоров, иммобилизованных на полимерных матрицах [1–5], так как из всех оптических характеристик (поглощение, преломление, отражение и проч.), флуоресценция является наиболее информативной. Высокая чувствительность многих флуорофоров к окружению позволяет создавать достаточно большое количество различных сенсоров на базе одного и того же красителя. Нильский Красный (НК) также используется в качестве люминесцентных зондов при изучении многих химических и биологических систем [6].

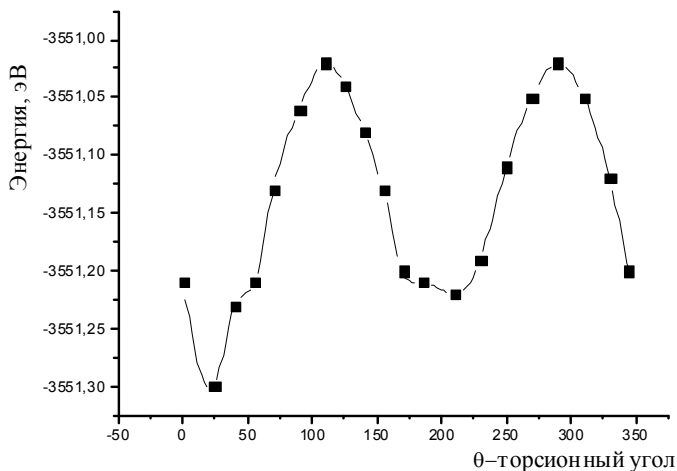
В данной работе изучались спектральные свойства красителя Нильского Красного (схема 1). На схеме представлена структурная формула соединения для двух вращающихся изомерных форм (А, Б).



Экспериментальные изучения красителя [7] показывают, что спектральные свойства могут объясняться внутримолекулярным твист состоянием с переносом заряда, (ТИСТ), которое возможно за счет электронодонорных и акцепторных групп. Диэтиламин здесь выступает в роли донора в молекуле НК, в то время, как акцептором выступает ароматическая система. Таким образом, перенос заряда происходит в возбужденном состоянии и донорная группа испытывает внутреннее вращение вокруг связи С (2) - N (4) (схема.1). В таком состоянии происходит изменение структуры от приблизительно плоской (схема. 1А) к твист геометрии (схема. 1В).

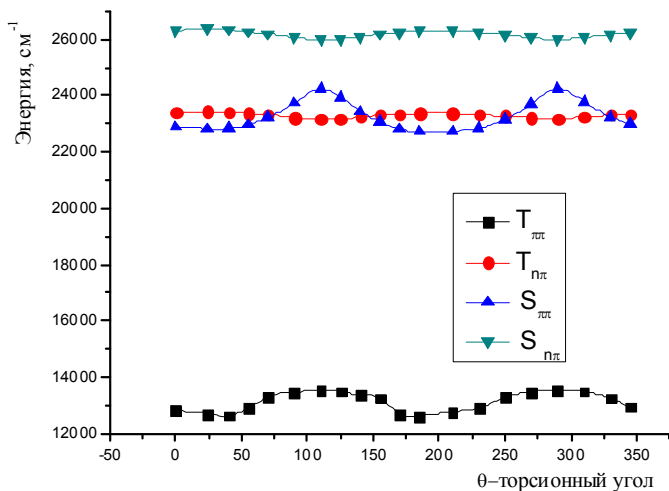
Спектральные изучения сольватации НК показывают увеличение квантового выхода с возрастанием полярности растворителя, что может оправдывать случай возникновения ТИСТ-состояния.

Расчеты проводились методом РМЗ (пакет программ Hyper Chem), конфигурационные взаимодействия включали 10 занятых и 10 вакантных орбиталей для описания  $\pi\pi^*$ - и  $\pi\pi^*$ - состояний. Вариация конформации выполнялась после оптимизации структуры молекулы. Конформационная мобильность НК моделировалась изменением величины торсионных углов ((C<sub>1</sub> (C<sub>3</sub>)- C<sub>2</sub>-N<sub>4</sub>-C<sub>5</sub>(C<sub>7</sub>)), т.е. вращением диметильной группы из плоскости ароматической системы в пределах 0-345°.



**Рис 1. Значения общей энергии для НК при различных торсионных углах.**

На рис.1 представлены значения общей энергии при различных торсионных углах (0-345°). Результаты данных расчетов представляют несколько локальных минимумов для различных конформаций молекулы. Полная оптимизация энергии структуры предполагает неплоскую конфигурацию с величиной торсионного угла равной примерно 24°. С рисунка возможно предположить отсутствие свободного вращения торсионного угла ((C<sub>1</sub>(C<sub>3</sub>)-C<sub>2</sub>-N<sub>4</sub>-C<sub>5</sub>(C<sub>7</sub>)) при нормальной температуре. Стабилизация конформаций молекулы может обеспечиваться действием растворителей различной полярности.



**Рис. 2. Энергии низших электронно-возбужденных состояний молекулы НК при различных значениях угла**

На рис.1 представлены энергии низших электронно-возбужденных состояний для оптимальной и твист структуры с использованием метода РМЗ. С

рисунок видно, що різниця величина торсионного кута сприяє зміні положення відносних рівнів енергії різної мультиплетності, а відповідно, і зміні спектральних властивостей молекули. В роботі проведено розрахунки дипольних моментів різних конформацій. Збільшення дипольних моментів свідчить про зникнення структури з переносом заряду, що обумовлює динамічне зниження енергії  $S_{np}$ -рівня. Таким процесом, швидше за все, можна пояснити появу флуоресценції.

Як випливає з розрахунків, природа нижнього триплетного енергетичного рівня НК не залежить від фактора середовища і в усіх випадках визначається  $T_{np}$ -станом. Виходячи з цього, властивості фосфоресценції НК можна пояснити утворенням в нижньому  $T_{np}$ -стані молекули декількох порівняно неполярних структур, які можуть відрізнятися в спектральному відношенні.

Таким чином, спектральні властивості НК можна визначити виникненням в збудженому стані структур з переносом заряду, в основному в полярних середовищах, що може призводити до виникнення флуоресценції. Можливість виникнення твіст-стану не є гарантованим умовою виникнення структури з переносом заряду і ТІСТ-стану. Тому необхідно дослідження в кожному конкретному випадку.

#### Література

1. Colette McDonagh, Conor S. Burke, and Brian D. MacCraith, "Optical Chemical Sensors", Chem. Rev., 2008, 2, 400-422.
2. Radislav A. Potyrailo, and Vladimir M. Mirsky, "Combinatorial and High-Throughput Development of Sensing Materials: The First 10 Years", Chem. Rev. 2008, 108, 770-813
3. Maggioni G., Carturan S., Quaranta A., Vomiero A., Tonezzer M., Della Mea G. "Production and characterization of thin film materials for indoor optical gas sensing applications" Journal of Physics: Conference Series 41 (2006) 531-534
4. Igor Levitsky and Sergei G. Krivoslykov. "Rational Design of a Nile Red/Polymer Composite Film for Fluorescence Sensing of Organophosphonate Vapors Using Hydrogen Bond Acidic Polymers" Anal. Chem. 2001, 73, 3441-3448
5. Christopher N. LaFratta and David R. Walt. "Very High Density Sensing Arrays". Chem. Rev. 2008, 108, 614-637
6. T.A. YURCHUK, N.A. CHERNOBAY, G.A. BOZHOK, I.F. KOVALENKO, T.P. BONDARENKO, L.F. ROZANOV "Effect of Incubation in NaCl Hypertonic Solutions on Changes of Adrenocorticotrophic Hormone Volume and Arrangement of Lipid Droplets" problems of cryobiology Vol. 20, 2010, №3, 282-287
7. L. Camargo Dias Jr. et. al "Theoretical studies Nile Red by ab initio and semiempirical methods". Chemical Physics Letters 302(1999), 505-510

## ЦЕНТРАЛЬНИЙ ПАРК СЕЛИЩА РЕШЕТИЛІВКА ЯК ОБ'ЄКТ РЕКРЕАЦІЙНОЇ ТА ОСВІТНЬОЇ ДІЯЛЬНОСТІ

*Савченко О.Б. (с.м. Решетилівка)*

Процес антропогенного впливу на природне середовище набуває з кожним роком дедалі ширших масштабів. Бурхливий розвиток промислового і сільськогосподарського виробництва, будівництва міст, селищ, розширення мережі залізничних та автомобільних шляхів, ліній електропередач і газопроводів, осушення боліт, зрошення посушливих земель – все це призвело до значних змін ландшафтів, вплинуло на екологічну рівновагу, видовий і кількісний склад флори і фауни. У зв'язку з цим, необхідно впроваджувати заходи щодо збереження унікальних ландшафтів, рідкісних і зникаючих видів рослин і тварин,