

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ

Полтавський державний аграрний університет
Корпорація MICRO TRACERS Inc. Сан-Франциско (USA)
Laboratory of Organic Electronics, Department of Science and
Technology, Linköping University, Norrköping, Sweden
N. Gumilyov Eurasian National University,
Chemistry Department, Nur-Sultan, Kazakhstan
Plant and Soil Sciences Department University of Delaware, (USA)



VI МІЖНАРОДНА НАУКОВО-ПРАКТИЧНА ІНТЕРНЕТ-КОНФЕРЕНЦІЯ «ХІМІЯ, БІОТЕХНОЛОГІЯ, ЕКОЛОГІЯ ТА ОСВІТА»

ЗБІРНИК МАТЕРІАЛІВ

16-17 травня 2022 року



Полтава—2022

barbituric acid. *International Conference Modern Physical Chemistry for Advanced Materials, Abstracts.* - Kharkiv <<http://www.kharkov.ua/index-e.phtml>>, Ukraine, June 26-30, 2007. **8.** Barashkov N.N., Irgibaeva I.S., Birimzhanova D., Aldongarov A., Sakhno Yu., Sakhno T. *Spectral manifestations and quantum-chemical calculations of molecular and nanosized aggregated forms of 5-(4-dimethylaminobenzylidene)barbituric acid. The Rocky Mountain Regional Meeting (August 29–September 1, 2007) Denver, CO Wednesday, August 29, 2007.* **9.** Zhang H.-J., Tian Y., Tao F., Yu W., You K.-Y., Zhou L.-R., Su X., Li T., Cui Y.-Z. (2019). *Detection of nitroaromatics based on aggregation induced emission of barbituric acid derivatives. Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 222, 117168. **10.** Shi W., Zhao S., Su Y., Hui Y., Xie Z. (2016). *Barbituric acid-triphenylamine adduct as an AIEE-type molecule and optical probe for mercury (II). New J. Chem.*, 40 (9), 7814-7820.

СИНЕРГЕТИКА І ПРОЦЕСИ САМООРГАНІЗАЦІЇ У ДВОВИМІРНИХ СИСТЕМАХ

Лобурець А.Т., Іваницька І.О., Заїка С.О. (м. Полтава)

Синергетика являє собою сучасну теорію еволюції надскладних, відкритих, термодинамічно нерівноважних, нелінійних динамічних систем, що володіють зворотним зв'язком та квазістаціонарно існують лише в умовах постійного обміну речовиною, енергією або інформацією із зовнішнім середовищем. Предметом дослідження синергетики в таких системах є процеси самоорганізації [1-3]. Ця наука носить наддисциплінарний характер.

Стани самоорганізації можуть реалізовуватися у часі і просторі, бути просторово-часовими чи функціональними, що залежить від внутрішніх властивостей систем, які зазнають структуризації. У відкритих, тобто в таких, де відбувається обмін речовиною і/або енергією з оточуючим середовищем, термодинамічно нерівноважних динамічних системах можуть виникати різноманітні структури. Синергетично усю світобудову слід розглядати як значною мірою хаотичне середовище, у якому викристалізовується порядок. Порядок і хаос співіснують як два аспекти одного цілого і є нерозривно зв'язаними. Стрижневим моментом у такому сприйнятті світу є уявлення про нерівноважність [2, 3]. Причому нерівноважність призводить не тільки до порядку чи хаосу, а й відкриває можливості для виникнення унікальних подій у

точках біфуркації. Спектр можливих способів існування об'єктів у цьому випадку значно розширюється у порівнянні з образом рівноважного світу, якщо система є нелінійною.

Відхилення системи від стану рівноваги описується за допомогою ентропії. Зміна ентропії є мірою дисипації енергії. В стані термодинамічної рівноваги ентропія будь-якої замкненої системи максимальна, оскільки в ній у нерівноважному стані процеси відбувалися таким чином, щоб ентропія зростала. Максимальному значенню ентропії відповідає найбільша неупорядкованість системи (хаос). Після досягнення цього стану система не може якимось чином змінюватися – функціонувати, розвиватися. При цьому однорідний стан системи має більше значення ентропії, ніж неоднорідний.

В незамкнених (відкритих) системах процеси можуть відбуватися зі зменшенням ентропії, тобто зі збільшенням порядку зарахунок енергії взятої від зовнішнього середовища. Синергетика трактує, що нерівноважні стани є більш високоорганізованими станами, ніж рівноважні. Максимальне продукування ентропії на початку процесу зменшується при наближенні системи до рівноважного стану і дорівнює нулю в стані рівноваги.

Самоорганізацією вважають самочинне виникнення і самопідтримка упорядкованих часових і просторових структур у відкритих нелінійних системах різної природи. Виникаючі структури формуються в активному середовищі і являють прояв одного з потенційно властивих йому станів. Утворення таких структур відбувається стрибкоподібно при досягненні певного значення відхилень параметрів системи від їх рівноважних значень.

Стрибкоподібний характер переходу в новий стан нагадує фазовий перехід у випадку термодинамічної рівноваги. Фізичними прикладами термодинамічних фазових переходів є перехід з кристалічного стану в рідкий, з рідкого в газоподібний, з феромагнітного в парамагнітний тощо.

Процес самоорганізації є переходом від безладного руху або хаотичного

стану через наростання збурень (флуктуацій) до нового порядку. Це не статичний порядок рівноваги, а динамічний стан, що підтримується припливом енергії ззовні, через границі системи. Найважливішою відмінністю самоорганізованих структур від статичного порядку є властиві їм колективні ефекти. Динамічний порядок утворюється при переході через критичне значення параметру порядку, яке відповідає точці біфуркації.

Флуктуації, або незначні, випадкові збурення, відіграють в еволюції систем потрібну роль. Вони можуть виступати як нейтральне тло, стабільне взаємно урівноважене мерехтіння всієї маси зовнішніх збурень і внутрішніх шумів системи, яке не вносить у систему помітних відхилень. Навіть велика флуктуація, якщо вона не перевищила деякого граничного значення, гаситься всією іншою масою «спокійних» складових. Але флуктуації можуть відігравати роль зародка нового стану. При сприятливих умовах окрема флуктуація здатна викликати розростання острівця неоднорідності і наростаюче, кумулятивне посилення збурення, наслідком чого може стати закріплення такого збурення усередині системи і готовність до зміни стану всієї системи. Якщо перевищити поріг чутливості системи, то вплив окремої флуктуації робиться відчутним і здатним за сприятливих обставин розгойдати систему і «скинути» її на явний стан [2]. Флуктуація може відігравати роль спускового механізму чи «останньої краплі», коли в системі, що вже досягла високого ступеня нерівноважності і нестабільності, потенційно готової до стрибка, він миттєво ініціюється виниклим збуренням. Це явище називають феноменом самоорганізованої критичності.

У дифузійних процесах спостерігаються яскраві явища самоорганізації, зокрема у формуванні концентраційних профілів адсорбованих атомів. Наприклад, у випадку адсорбції атомів літію на молібдені в зоні дифузії можна спостерігати окрему концентраційну область, яка з часом зміщується, але зберігає свою форму. Поверхнева дифузія в природі є високо кооперованим

нерівноважним і нелінійним процесом. Початково сформована адсорбована плівка також є нерівноважною. Швидкому досягненню її рівноваги перешкоджає потенціальний рельєф підкладки і латеральна взаємодія адатомів між собою та з підкладкою [4]. Якщо досягненню системою стану рівноваги заважають зовнішні умови, то швидкість росту ентропії стає мінімальною і створюються умови для самоорганізації різних динамічних структур. Утворення структур відбувається стрибкоподібно при досягненні певної величини відхилень параметрів системи від їх рівноважних значень. Стрибкоподібний характер переходу до нового стану нагадує фазовий перехід першого роду в термодинамічно рівноважній системі. Тому стрибкоподібну зміну стану в нерівноважній системі називають кінетичним або нерівноважним фазовим переходом. Одним із параметрів порядку є ступінь покриття. Процес самоорганізації є переходом від хаотичного стану адсорбованої плівки до нового порядку через наростання збурень (флуктуацій) при переході через критичне значення параметру порядку, яке відповідає точці біфуркації. Іншими словами, хаос породжує порядок. Причому порядок виражається ще й у тому, що виникають не які завгодно структури, а лише специфічний для кожної адсорбційної системи набір. Набір можливих структур задається власними функціями активного середовища. При досягненні локального значення ступеня покриття, критичного для адсорбційної системи $\text{Li}-\text{Mo}(112)$, розпочинається процес самоорганізації адсорбованих атомів літію у деяку двовимірну структуру-атрактор. Тут можна говорити про двовимірну реакцію літію на поверхні молібдену (реактивна дифузія). Подібні ефекти виникають існують і у плівках міді на вольфрамі і молібдені [5]. Спектр можливих структур-атракторів не є суцільним. Дискретність спектру можливих станів означає, що у процесі еволюції система може перейти в той чи інший стан, але не у щось середнє між ними, що відповідає виникненню стійких динамічних структур [6]. У синергетиці вважають, що, знаючи механізми самоорганізації,

можна свідомо ввести в активне середовище відповідну флуктуацію і тим самим направити хід його еволюції. Але у будь-якому випадку система еволюціонуватиме відповідно до потенційних можливостей самого середовища. Іншими словами, свобода вибору є, але сам вибір обмежений можливостями об'єкта, оскільки він має власну, детерміновану властивостями адсорбційної системи «свободу».

Найважливішою відмінністю самоорганізованих структур від статичних утворень є властиві їм колективні ефекти. Якщо забезпечити достатній рівень нерівноважності процесу утворення плівки шляхом постійного адсорбування атомів літію крізь вузьку щілину, структура Li_4Mo_5 буде поширюватися в напрямку $[\bar{1}\bar{1}1]$ на грані (112)Mo на макроскопічні віддалі, причому практично безградієнтно.

Список використаних джерел:

1. Николис Г., Пригожин И. Самоорганизация в неравновесных системах: От диссипативных структур к упорядоченности через флуктуации. - М. : Мир, 1979. - 512 с.
2. Пригожин И., Кондепуди Д. Современная термодинамика. От тепловых двигателей до диссипативных структур. - М. : Мир, 2002. - 464 с.
3. Хакен Г. Синергетика: Иерархии неустойчивостей в самоорганизующихся системах и устройствах. - М. : Мир, 1985. - 424 с.
4. Loburets A.T. Influence of coadsorbed strontium atoms on surface diffusion in lithium submonolayer films on tungsten (112) face / A.T. Loburets, S.A Zaika, A.G. Naumovets // Ukr. J. Phys. – 2012. – Vol. 57, № 6. – P. 661–669.
5. Loburets A.T. Surface diffusion and phase transitions in copper overlayers on the (112) surfaces of molybdenum and tungsten / A.T. Loburets // Metallofizika i Novejshie Tekhnologii. – 1999. – Vol. 21, № 2. – P. 47-51.
6. Loburets A.T. Surface diffusion of lithium on (011) face of tungsten / A.T. Loburets, A.G. Naumovets, Y.S. Vedula // Surface Science. – 1982. - Vol. 120, № 2. – P. 347-366.

ОЦІНКА ЕФЕКТИВНОСТІ ІНКАПСУЛЬОВАНИХ ФОРМ ФАРМПРЕПАРАТУ GS

Берест В.П., Січевська Л.В., Забєліна І.А., Жигалова Н.М., Дягелєва О.А.,

Берест П.В. (м. Харків)

Дослідження останніх десятиліть свідчать, що антимікробні пептиди, зокрема граміцидин S (GS), мають протиракові властивості [1]. GS потенційно