

МОЛЕКУЛЫ – ПЕРЕСТРОЕНИЯ

Ермолин И. К.

ООО "РИМ", 172008, Торжок, Тверской обл., Россия, E-mail: ttiz@mail.ru

Найдена общая фундаментальная закономерность взаимосвязи "строение молекул – свойства веществ" в многоатомных цепных молекулах на примере изомеров предельных углеводов, основанная на конкретных физических параметрах, выраженных законом Кулона (через заряды цепообразующих атомов, или групп атомов, и расстояния между условными центрами этих групп) [1].

Найденная закономерность отражает общую фундаментальную зависимость энергетических свойств веществ от состояния внешних условий. Показано, что **силы притяжения и отталкивания** отражают два энергетических взаимосвязанных **параметра** внешних условий, противоположных по направлению действия (температура и давление), при которых вещества существуют, реагируя на изменения этих условий изменением параметров своего строения.

Найденная закономерность позволяет отказаться от не имеющих физического смысла топологических индексов (Винера, Рандича, Шульца, показателя полярности и др.) и толковать энергетические свойства веществ (Тнк, ДНисп, Ткр, Ркр) непосредственно из структуры, как результат энергетического взаимодействия между близкими атомами и группами атомов) в цепи с учётом ослабления влияния последующими окружениями атомов, групп атомов.

Открытие общей закономерности взаимосвязи между структурой молекул и свойствами веществ позволяет расшифровать термин скрытая теплота парообразования или конденсации, объясняемый ранее лишь изменением внутренней энергии. Это позволило открыть явление при испарении (конденсации) – скачкообразную перегруппировку зарядов с изменением расстояний между атомами [2].

Подобные перегруппировки, известные для многих переходов твёрдого тела из одной модификации в другую, и вновь найденные для переходов с изменением агрегатного состояния (жидкость-пар), теперь справедливы для всех типов переходов, составляющих фазовые превращения первого рода.

Найденные закономерности изучались с помощью специальных программ, определяющих по матрице смежности параметры структуры всех изомеров любого гомологического ряда и отыскивающих наиболее высокую корреляцию параметров структуры изомеров с каким-либо свойством.

В качестве аппроксимирующей функции использована наиболее простая зависимость $Y = kx + b$, демонстрирующая, что основная закономерность находится в самом уравнении и теснейшим образом отражает связь между строением молекул и физическими свойствами веществ.

Предлагаемое направление позволяет надеяться на создание единого универсального подхода (метода) для расчёта других свойств веществ в зависимости от их строения, основанного на физическом взаимодействии атомов, описываемом законом Кулона.

Эти закономерности позволяют выдвинуть гипотезу о том, что подобное перестроение осуществляется не только в рамках имеющейся структуры, а также может осуществляться и в рамках изменения самой структуры – порядка соединения, например, в мобильных генах, чувствительных к ещё более тонким воздействиям, чем температура и давление (структурные перестроения управляющих энергий) [3].

Такой подход позволяет понять, что процессы перестроения в биологии (происхождение видов, изменение как повседневное, так и эволюционное) базируются на тех же физических принципах, на которых перестраиваются химические вещества при изменении внешних условий (плавно и при фазовых переходах). Это может расцениваться, как перенос структурных химических подходов в биологию.

MOLECULES-RECONSTRUCTION

Ermolin, I.K.

"RIM" Ltd., 172008, Torzhok, Tver Region, Russia, E-MAIL: ttiz@mail.ru

The general regularity is found in the multinuclear chain molecules, based on the concrete physical parameters expressed by the Coulomb's law [1]. The maintenance of the hidden warmth of steam formation, a regrouping of charges in molecules is deciphered at their evaporation (the phenomenon is open) [2]. Reconstruction processes in biology are based on the same physical laws on which chemicals are reconstructed at change of external conditions.

Литература.

1. Ермолин И. К. Общая закономерность взаимодействия атомов в молекулярных цепях. <http://ttizm.narod.ru/gizn/ssv-oz.pdf>, <http://omdp.narod.ru/gip/ssv-oz.pdf>
2. Ермолин И. К. Теплота испарения – работа по перегруппировке зарядов. <http://ttizm.narod.ru/gizn/ssv-ti.pdf>, <http://omdp.narod.ru/gip/ssv-ti.pdf>
3. Ермолин И. К. Модель связи живого с управляющей энергией. <http://ttizm.narod.ru/gizn/modsv.htm>, <http://omdp.narod.ru/gip/modsv.htm>, <http://ttizm.narod.ru/gizn/modsv.pdf>