В.И. Переверзев

РАССМОТРЕНИЕ ОПЫТА ГЕЙ-ЛЮССАКА

В 1806 г. Гей-Люссак ([1]), поставил опыт с целью обнаружения зависимости теплоемкости газа от объема. Он взял два баллона емкостью 12 литров каждый и соединил их свинцовой трубкой с краном. В одном из баллонов находился газ, а в другом создавался глубокий вакуум. В баллонах находились спиртовые термометры, с помощью которых примерно через две минуты после открывания крана измерялась температура. Гей-Люссак обнаружил, что температура в первом баллоне была на несколько десятых градуса ниже, а во втором примерно на столько же выше, чем первоначальная. На основе проведенных таким образом измерений температуры был сделан вывод, что при смешении масс газа, находящихся в баллонах после расширения, температура имеет первоначальное значение, т.е. при расширении в вакуум температура газа не меняется. Особая значимость данного вывода побуждает нас рассмотреть опыт Гей-Люссака подробно.

При открывании крана, из-за возникающего изменения давления (прежде всего, в слое, прилегающем к нему), газ расширяется во второй баллон. Если считать, что через площадь S самого узкого сечения соединительной трубки газ проходит со скоростью, равной среднему значению проекции скорости движения молекулы на направление нормали, и при этом его температура во всех частях сохраняется неизменной и равной T_0 , то он увеличит свой объем на ΔV за время

$$\Delta t_0 = \frac{4\Delta V}{d^2} \sqrt{\frac{\mu}{\pi R T_0}};$$

где d – диаметр соединительной трубки; μ – молярная масса газа; R – универсальная газовая постоянная. Столкновения молекул газа с молекулами стенок соединительной трубки повлекут за собой увеличение этого времени (из-за турбулентности движения газа у поверхности стенок) в 2-4 раза. Дополнительного увеличения времени расширения газа следует ожидать и в случае понижения его равновесной температуры. Поэтому время увеличения объема воздуха на величину $\Delta V = V_0$ и выравнивания давления в опыте Гей-Люссака при диаметре соединительной трубки $d = 5 * 10^{-3}$ м и температуре $T_0 = 290K$ должно было составить 10-15 секунд.

При отсутствии теплообмена с баллонами и соединительной трубкой сразу же после расширения газа во второй баллон давление в нем по всему объему примет значение $P < P_0$, где P_0 – значение давления в начальном состоянии. При этом температура будет самая низкая (меньше первоначальной) в первом баллоне, и самая высокая (больше первоначальной) во втором баллоне в самых удаленных от входов в свинцовую трубку точках. Затем через некоторое время t установится равновесное состояние с значением температуры T , определяемым по формуле

$$T = \frac{2P}{P_0} T_0;$$

где T_0 – значение температуры в начальном состоянии. При наличии же теплообмена со стенками баллонов и соединительной трубки, обладающими большими удельными теплоемкостями и высокими теплопроводностями, через некоторое время t' после открывания крана и расширения газа (существенно зависящего от площади вновь образующей поверхности) в нем установится равновесное состояние с температурой T' и давлением P' . Именно температура T' , практически рав-

ная T_0 , измерялась с помощью термометров в опыте Гей-Люссака. На основе этих измерений ни утверждать, ни отрицать, что температура T' равняется температуре T , нельзя. Поскольку исключить теплообмен невозможно, то необходимо отказаться от измерения температуры T с помощью термометра, а рассчитывать ее по указанной формуле. Для этого надо сразу же после расширения газа измерять давление P . Измерение давления с помощью манометра должно состоять в определении минимального показания. Дело в том, что после открывания крана давление в первом баллоне очень быстро убывает до некоторого минимального значения (практически без теплообмена), а затем, из-за теплообмена между газом и баллонами медленно нарастает. Минимальное показание манометра с большой степенью точности будет совпадать с ожидаемым значением давления P газа.

Если, из-за малости диаметра трубки, соединяющей баллоны, расширение газа рассматривать ([2], с. 188) как процесс с изменением количества вещества в баллонах и считать, что его описывает уравнение Пуассона и, к тому же, внутренняя энергия остается постоянной, то в конечном состоянии давление $P = P_0/2$, а температура равновесного состояния в первом баллоне $T'_1 = \nu T_0 / 2(\nu - x)$, во втором баллоне $T'_2 = \nu T_0 / 2x$. Здесь ν – количество молей газа, $x = \nu(1 - 2^{-\frac{1}{\gamma}})$ – количество молей газа, перешедшего во второй баллон (γ -показатель адиабаты). На основе уравнения Менделеева-Клапейрона находим, что при условиях опыта ($P_0 = 1 \text{ атм}, T_0 = 293,15 \text{ К}$) количество молей воздуха в приборе Гей-Люссака $\nu = 4,987 * 10^{-1} \text{ моль}$. Поэтому при рассмотрении расширения воздуха в вакуум в опыте Гей-Люссака как процесса с изменением количества вещества в баллонах $x = 1,946 * 10^{-1} \text{ моль}$, $T'_1 = 240,48 \text{ К}$, $T'_2 = 375,36 \text{ К}$. Как видим, изменение температуры воздуха в первом баллоне $\Delta T_1 = -52,67 \text{ К}$, а во втором $\Delta T_2 = 82,21 \text{ К}$. Следовательно, и такое рассмотрение процесса расширения газа свидетельствует о том, что в опыте Гей-Люссака надо было измерять давление P газа, а не температуру.

Изотермы Амаза, рассчитанные по табличным данным [3, с. 548] свидетельствуют о том, что при давлениях в интервале от 1 до 20 атм и температурах в интервале от 250 до 300 К отступление свойств воздуха от свойств идеального газа незначительное. Следовательно, давление в нем после расширения во второй баллон можно рассчитывать по формуле

$$P = \frac{P_0}{2} \frac{T}{T_0}$$

Допустим, что в опыте Гей-Люссака расширение газа в вакуум описывает уравнение Пуассона $PV^\gamma = \text{const}$. В этом случае в конечном состоянии равновесная температура воздуха должна иметь значение $T = 222,15 \text{ К}$. Это значит, что понижение температуры равновесного состояния должно составить значение $\Delta T = -71 \text{ К}$. Так как в приборе Гей-Люссака масса воздуха $m = 14,45 * 10^{-3} \text{ кг}$ (количество молей $\nu = 4,987 * 10^{-1} \text{ моль}$), то для повышения температуры на 71 К ему необходимо сообщить количество тепла $Q = 738,62 \text{ Дж}$. Если такое количество тепла газу сообщит медный баллон [4, с. 70], имеющий сферическую форму и толщину стенок в 1,5 миллиметра, то температура баллона понизится на величину $\Delta T = 0,35 \text{ К}$, а если стеклянный баллон [5, с. 645] с толщиной стенок в 4 миллиметра – на

$\Delta T = 0,33K$. Поскольку теплопроводность материала баллонов значительно превосходит теплопроводность воздуха (меди в 10^4 раз, стекла в 10^2 раз), то, из-за притока тепла из атмосферного воздуха, понижение температуры баллона будет гораздо меньше (прибор следовало поместить в вакуум). В силу этого можно считать, что тепло газу передается от баллона, имеющего постоянную температуру T_0 . Если газ в сферическом баллоне рассматривать как шар с начальной температурой $T = 222,15K$, то вследствие теплообмена с баллоном он приобретет температуру примерно равную T_0 не больше чем через 120 секунд. При этом время повышения температуры газа определяется исключительно значением его коэффициента теплопроводности и градиента температуры (прежде всего, в слоях, прилегающих к внутренней поверхности баллонов). Это обстоятельство свидетельствует о том, что в опыте Гей-Люссака в течение времени расширения в вакуум (составляющего значение 10-15 секунд) температура газа, из-за наличия теплообмена с баллоном, должна успеть значительно измениться. Именно это и наблюдали [5, с. 643-648] при повторении опыта Гей-Люссака, в котором и оба баллона, и соединительная трубка с внутренним диаметром в 6,3 миллиметра были стеклянными. Оказалось, что примерно через 15 секунд (время протекания газа в соединительной трубке, установленное выше) после открывания крана разность температур $\Delta T = T_0 - T$ в каждом баллоне достигает по модулю максимального значения (для воздуха $|\Delta T|$ имеет значение в интервале $7,5 \div 8,5K$ при начальном давлении $P_0 = 1\text{атм}$ и в интервале $5 \div 6K$ при давлении $P_0 = 0,5\text{атм}$). Затем по закону, напоминающему экспоненциальный, значение $|\Delta T|$ уменьшается до значения порядка $1K$ за время $t = 90\text{с}$ (в опыте с медными баллонами это время будет меньше). Стало быть, результат измерений температуры, проводимых через две минуты после открывания крана, не может служить основанием для вывода, что при расширении в вакуум температура газа не меняется и при допущении, что это расширение описывает уравнение Пуассона. Это обстоятельство также свидетельствует о необходимости проведения измерения не температуры газа, а давления сразу же после его расширения через соединительную трубку, диаметр которой должен быть как можно больше.

При открывании крана во второй баллон в первую очередь начинают проникать молекулы непосредственно прилегающего к нему слоя газа. В результате концентрация молекул в этом слое уменьшается. Изменение концентрации сразу влечет за собой нарушение равенства нулю суммарных импульсов частиц через любые воображаемые поверхности последовательно во все более и более удаленных от места положения крана частях газа в первом баллоне, т.е. вызывает процесс изменения в этих частях газа давления. Согласно формуле Ньютона изменение давления, обусловленное изменением концентрации (плотности) молекул, распространяется в газе от слоя к слою со скоростью звука. Поскольку размеры баллонов малы, то в каждый момент времени после открывания крана давление во всех частях газа в первом баллоне можно считать практически одинаковым. Примерно таково же оно и во всех частях газа в соединительной трубке. Это обусловлено последовательной сменой в каждом ее сечении одних молекул другими, движущимися преимущественно в направлении второго баллона, число которых лишь незначительно меньше числа предыдущих.

Направления движения молекул, проникших во второй баллон, в общем случае не параллельны оси выхода трубки. Поэтому с момента начала заполнения второго баллона газ как бы сосредоточен внутри расширяющейся оболочки, отделяющей его от незанятого еще пространства. Давление в этой части газа обусловлено столкновениями молекул, вследствие разности скоростей и направлений их движения. Концентрация молекул внутри него в направлении оси максимальна вблизи воображаемой оболочки и минимальна вблизи выхода трубки, а в направлении, нормальном оси, максимальна вблизи продолжения оси и минимальна вблизи оболочки. При этом, чем больше скорость молекулы, тем ближе она оказывается к оболочке. По этой причине в любой мо-

мент времени давление внутри газа (имеют место столкновения молекул) весьма мало вблизи расширяющейся оболочки и максимальна вблизи продолжения оси, и нет ни одной части, где бы давление было сравнимо с давлением внутри соединительной трубки (различие тем больше, чем меньше диаметр трубки). Такое распределение концентраций молекул, их скоростей и давления нарушается как только воображаемая поверхность, ограничивающая пространство занимаемое газом, приходит в соприкосновение с поверхностью второго баллона. Начиная с этого момента в разных частях газа данные величины принимают случайные переменные во времени значения. Лишь спустя некоторое время давление во всех частях газа (в обоих баллонах) принимает одинаковое значение. При этом самые медленные молекулы и наибольшей концентрации оказываются в первом баллоне в наиболее удалённых от входа трубки точках, а во втором баллоне – в самых близких к выходу трубки точках.

Величина диаметра, длины и степени гладкости поверхности соединительной трубки существенно влияют на результат расширения газа (прежде всего, на значения концентраций молекул любых фиксированных точек баллонов); с ростом диаметра, уменьшением длины и улучшением гладкости влияние уменьшается. Если, например, баллоны изготовить в виде цилиндров равного диаметра с общей осью, в месте соединения разделённых тонкой плоской перегородкой, в одном из которых находится газ, то в каждый момент времени после устранения перегородки давление по всему объёму, занимаемому расширяющимся во второй цилиндр газом, можно считать одинаковым. При этом у основания первого цилиндра сосредоточены медленные молекулы большой концентрации, а у перемещающейся воображаемой поверхности – быстрые молекулы малой концентрации. После расширения газа градиент концентрации его молекул вдоль оси будет тем меньше, чем меньше окажется величина перемещения воображаемой поверхности. Это значит, что при заданном изменении объёма газа цилиндры должны иметь большие диаметры и малые высоты. Такая геометрия цилиндров одновременно будет способствовать уменьшению вновь образующейся поверхности и, следовательно, уменьшению теплообмена между газом и цилиндрами. При очень малой высоте цилиндров можно будет говорить о изменении равновесной температуры газа.

Идеальным представляется результат расширения газа из баллона сферической формы радиуса R_1 при устранении его оболочки, играющей одновременно роль перегородки, в концентрический баллон радиуса R_2 ($R_1 < R_2$). В этом случае в центре баллонов после расширения газа находятся медленные молекулы большой концентрации, а у воображаемой расширяющейся сферической поверхности быстрые молекулы малой концентрации (по-прежнему, в каждый момент времени давление во всех частях газа можно считать одинаковым).

Кран в приборе Гей-Люссака играет роль воображаемой перегородки, на поверхность которой газ действует с силой

$$\vec{F}_a = -PS\vec{n},$$

где P – давление, S – площадь сечения крана, $\vec{n}$ – единичный нормальный вектор, направленный от поверхности к газу. По третьему закону Ньютона в каждый момент времени поверхность перегородки действует на газ с силой $\vec{F}$, равной по величине, но противоположной по направлению, т.е.

$$\vec{F} = -\vec{F}_a = PS\vec{n}$$

Открытие крана в момент времени t равносильно созданию условия для начала весьма быстрого убывания величины силы $\vec{F}$ с течением времени. Согласно третьему закону Ньютона с момента времени t такое же убывание должна испытывать и сила $\vec{F}_r$. В силу этого перемещение воображаемой поверхности, отделяющей газ от незанятого ещё пространства, обусловлено как бы действием силы $\vec{F}_r$. Если считать, что в каждый момент расширения давление во всех частях газа

одинаковое (в первом баллоне и соединительной трубке это практически так), то работа совершаемая им при изменении объёма на $\Delta V = V_0$

$$A = \int_0^l \vec{F}_a d\vec{l} = \int_{V_0}^{2V_0} PdV,$$

где l – перемещение воображаемой поверхности в цилиндре диаметра соединительной трубки, необходимое для такого изменения объёма. Согласно математической теореме о среднем работа

$$A = \int_{V_0}^{2V_0} PdV = P_{\text{ю}} \cdot V_0,$$

где $P_{\text{ю}}$ – промежуточное значение давления ($P < P_{\text{пр}} < P_0$). При предположении, что расширение газа в вакуум описывает уравнение Пуассона $PV^\gamma = \text{const}$, работа

$$A = \frac{P_0 V_0}{\gamma - 1} \left[1 - (0,5)^{\gamma-1} \right],$$

где γ – показатель адиабаты. Работа изменения объёма воздуха в опыте Гей-Люссака при этом предположении $A = 735,87$ Дж, а промежуточное значение давления $P_{\text{ю}} = 61322,385$ Па. В этом случае, чтобы равновесная температура газа после открывания крана вновь приняла значение T_0 , ему необходимо сообщить количество тепла Q , численное равно работе A , т.е. $Q = 735,87$ Дж.

Прибор Гей-Люссака представляет собой систему, состоящую из двух баллонов, соединительной трубки с краном и газа, находящуюся в атмосферном воздухе (окружающей среде). Согласно первому закону термодинамики

$$Q = \Delta U + A,$$

где Q – количество тепла, сообщаемое системе окружающей средой, ΔU – изменение внутренней энергии системы, A – работа, совершаемая системой над окружающей средой. При этом считается, что изменение объёма системы в опыте Гей-Люссака после открывания крана (расширение газа во второй баллон) не сопряжено с совершением работы над окружающей средой. Это значит, что работа $A = 0$. При отсутствии теплообмена между системой и средой $Q = 0$. Следовательно, в этом случае равно нулю и изменение внутренней энергии системы. Если внутреннюю энергию, как это принято, рассматривать как функцию объёма и температуры, то можно записать, что

$$\Delta U = \int_{V_1}^{V_2} \left(\frac{\partial U}{\partial V} \right)_T dV + \int_{T_0}^T \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_V dT = 0,$$

где V_1 и V_2 – начальный и конечный объём системы, T_0 и T – начальное и конечное значение температуры. Объём системы составляет та область пространства, которая занята веществом баллонов, соединительной трубки с краном и газом. Поэтому изменение объёма системы составляет изменение объёма газа после его расширения во второй баллон. При отсутствии теплообмена между газом и баллоном с соединительной трубкой последнее соотношение можно представить в виде:

$$\int_{V_0}^{2V_0} \left(\frac{\partial U}{\partial V} \right)_T dV + \int_{T_0}^T \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_V dT = 0, \text{ или } \int_{V_0}^{2V_0} \left(\frac{\partial U}{\partial V} \right)_T dV + \int_{T_0}^T C_V dT = 0,$$

где C_V – теплоёмкость газа, V_0 – его начальный объём, T_0 и T – начальное и конечное значения равновесной температуры. Здесь величины $\left(\frac{\partial U}{\partial V} \right)_T$ и $\left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_V = C_V$ – есть функции и объёма и температуры.

Температуру и производные, входящие в подынтегральные выражения, в каждый момент времени после открывания крана необходимо считать имеющими одинаковые значения во всех частях газа, так как согласно представлениям термодинамики изменение состояния любой системы состоит в постепенном переходе от одного равновесного состояния к другому. Поскольку, однако, с момента t открывания крана температура газа во всех частях объёма, им занимаемого, становится разной и переменной во времени, то применять к нему последнее соотношение нельзя. Тем не менее при отсутствии теплообмена с баллонами и соединительной трубкой после установления равновесного состояния с температурой T будут справедливы (согласно математической теореме о среднем) следующие равенства:

$$\int_{V_0}^{2V_0} \left(\frac{\partial U}{\partial V} \right)_T dV = \left(\frac{\partial U}{\partial V} \right)_{T_{\text{пр}}} V_0 \text{ и } \int_{T_0}^T C_V dT = C_{V_{\text{пр}}} \Delta T,$$

где $\left(\frac{\partial U}{\partial V} \right)_{T_{\text{пр}}}$ – промежуточное значение производной, $C_{V_{\text{пр}}}$ – промежуточное значение теплоёмкости газа, $\Delta T = T - T_0$ – изменение равновесной температуры. На основе этих равенств находим, что

$$\left(\frac{\partial U}{\partial V} \right)_{T_{\text{пр}}} = -C_{V_{\text{пр}}} \frac{\Delta T}{V_0}.$$

Экспериментальные данные [6] свидетельствуют о том, что теплоёмкость воздуха при температурах $T = 200 \div 350 \text{ K}$ и давлениях $P = 0,5 \div 3$ атм имеет практически постоянное значение. В опыте Гей-Люссака теплоёмкость газа имела постоянное значение, равное $10,37 \frac{\text{Дж}}{\text{К}}$. При предположении, что расширение газа в вакуум описывает уравнение Пуассона

($\Delta T = -71 \text{ K}$) промежуточное значение производной $\left(\frac{\partial U}{\partial V} \right)_{T_{\text{пр}}} = 61338,55 \text{ Па}$, т.е. оказывается равным промежуточному значению давления $P_{\text{пр}}$. Это обстоятельство свидетельствует

о том, что слагаемое $\int_{V_0}^{2V_0} \left(\frac{\partial U}{\partial V} \right)_T dV$ определяет собой не что иное, как работу A изменения объёма газа. Следовательно, по крайней мере, у идеальных газов

$$\left(\frac{\partial U}{\partial V}\right)_T = P \text{ и } \left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_V = C_V.$$

Если окажется, что это так, то от понятия – внешняя работа – придётся отказаться. Смысл работы изменения объёма газа будет иметь слагаемое $\int_{V_1}^{V_2} \left(\frac{\partial U}{\partial V}\right)_T dV$ изменения внутренней энергии. Тогда закон сохранения энергии примет вид:

$$dQ = dU.$$

Словами он станет формулироваться так: количество тепла, сообщаемое исследуемой системе идёт на изменение её внутренней энергии. В качестве исследуемой системы может быть любое вещество. Само количество тепла, сообщаемое системе, может быть не чем иным, как изменением внутренней энергии окружающей среды. Справедливость такой формулировки закона сохранения энергии требует специальной опытной проверки.

При рассмотрении температуры независимой переменной [7] изменение объёма и температуры идеального газа при постоянной внутренней энергии связаны соотношением

$$\frac{dT}{\nu RT} = -\frac{dV}{C_V V}.$$

Поскольку теплоёмкость C_V воздуха в процессе расширения имеет практически постоянное значение, то разность температур конечного и начального состояния

$$\Delta T = T_0 \left[e^{-\frac{\nu R}{C_V} \ln 2} - 1 \right].$$

Если $T_0 = 290 \text{ K}$, то разность $\Delta T = -52,26 \text{ K}$. Следовательно, после расширения воздуха без теплообмена с окружающей средой его давление должно принять значение $P = 0,41 P_0$. Если давление $P_0 = 1 \text{ атм}$, то сразу же после расширения воздуха смещение границ ртути в манометре относительно нулевого уровня должно составить 228 мм.

Итак, рассмотрение опыта Гей-Люссака позволило установить, что сразу же после расширения газа в вакуум необходимо измерять его давление, а не температуру. Измерение давления должно состоять в определении минимального показания манометра. Вывод о неизменности температуры газа можно будет признать справедливым, если окажется, что сразу же после расширения в вакуум его давление вдвое меньше первоначального. Безупречности результата опыта можно достичь путём сведения к минимуму:

- а) времени расширения газа в вакуум;
- б) площади вновь образующейся поверхности стенок;
- в) теплоёмкости и теплопроводности материала стенок сосудов.

Для этого прибор Гей-Люссака должен представлять собой систему двух равных цилиндров большого диаметра, малой высоты, разделённых легко устранимой перегородкой, которые изготовлены из стекла или оргстекла и имеют общую ось. Оптимальное значение диаметра и высоты реальных цилиндров следует устанавливать исходя из технических соображений. С помощью такого прибора можно будет одновременно проводить измерение и давления, и равновесной температуры.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Mach E. Die Prinzipien der Wärmelehre, Leipzig, 1900. С. 461-471.
2. Матвеев А.Н. Молекулярная физика, Высшая школа, М., 1987. С. 360.
3. Варгафтик Н.Б. Справочник по теплофизическим свойствам газов и жидкостей. ГИФМЛ. М., 1963. С. 708.
4. Сивухин Д.В. Общий курс физики. Термодинамика и молекулярная физика. ФМЛ. М., 1979. С. 551.
5. Potter J. The Gay-Lussac Free Expansion Experiment Journal Am. Soc. Naval Eng. 1959. v. 71. P. 643
6. Варгафтик Н.Б. Справочник по теплофизическим свойствам газов и жидкостей. ФМЛ. М., 1972. С. 720.
7. Переверзев В.И. Описание равновесных процессов и циклов при рассмотрении температуры в уравнении состояния вещества независимой переменной // материалы Междунар. науч.-техн. конф. Таганрог, 2008. С. 201-208.

Д.В. Пивоваров, П.П. Исаев

**КОЛИЧЕСТВЕННЫЕ СООТНОШЕНИЯ «СТРУКТУРА – СВОЙСТВО»
ЗАМЕЩЕННЫХ АДАМАНТАНОВ**

Во многих областях науки математическое описание некоторых свойств, зависимостей давно и прочно заняло свое место. Сейчас этот процесс развивается не менее стремительно, так как по мере возникновения физической теории, описывающей исследуемый процесс, возникает потребность связать исследуемое явление с конкретными физическими характеристиками соединения: объемом молекулы, геометрическими характеристиками, распределением электронной плотности и т.д. Не стал исключением из этого и раздел, посвященный изучению зависимостей свойств, таких, к примеру, как биологическая активность препаратов фармакологии или же токсичность подобных веществ, от вариаций в структуре, составе радикалов и заместителей (QSAR – Quantitative Structure Property Relationships). Будучи основанным на описании структуры химического соединения с помощью набора числовых характеристик – дескрипторов [5] и построении корреляций между величиной свойства (активности) и значениями дескрипторов, зависит от выбора дескрипторов, отражающих все особенности молекулярной структуры, определяющие соответствующее свойство.

Нашему вниманию подвергся ряд аминокристаллов, которые ранее уже были синтезированы и изучены [8] на некоторых биологических моделях, таких как трифтазиновая модель катаlepsии на параллельных пластинках для мышей. В результате проведенных исследований были установлены и опубликованы материалы, содержащие данные по биологической активности (lgA) и токсичности препаратов данной группы. Уже давно замечено рядом специалистов, как отечественных [6], так и зарубежных, что при внесении некоторых функциональных группировок в состав молекулы, та наделяется предсказуемыми свойствами. Введение алкильных радикалов в положение 1 и 3 уменьшает длительность действия соединений и наделяет их возбуждающим действием. На основании опубликованных данных и нашего модельного изучения установлена интересная зависимость, заключающаяся в том, что при добавлении функциональной группы $C=O$ [9], на порядок изменяется уровень энергии нижней заполненной молекулярной орбитали, соответствующий глобальному минимуму свободной энергии наиболее вероятно существующей конформации изучаемой молекулы. Структурная формула, традиционно записываемая в соответствии с номенклатурными правилами в химии, отражает атомный состав и взаимное расположение атомов в молекуле. Однако реально вещество представляет собой смесь компонент различного характера: молекулы и ионы в разных конформационных и электронных состояниях, таутомеры, комплексы молекул разного вида и степени устойчивости, и т.д. Эта смесь находится в динамическом квазиравновесии и ее состав существенно зависит от внешних условий. Структурная же формула характеризует лишь одну компоненту, условно принимаемую за основную. Но, с другой стороны, все состояния молекулы однозначно связаны между собой, хотя эти зависимости могут быть и довольно сложными. Поэтому, в принципе, любое состояние молекулы может быть использовано