

ХИМИЧЕСКИЙ ДИЗАЙН

(ОТДЕЛЬНЫЙ ОТТИСК 7)

ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ
МЕЗАХИМИИ В ПРОПЕДЕВТИКЕ
МЕТАХИМИИ



Chem.Lab.NCD

Новосибирск, 2014

Природа квантово – флуктуационных ансамблей мезоструктуры на примере физико – органической химии

Кутолин С.А.

профессор, доктор химических наук,

академик МАН ЦНЗ и РАТ.

Новосибирск, Россия

РЕФЕРАТ: Квантово – флуктуационные ансамбли мезоструктуры на примере физико – органической химии в рамках модели КЛЮП позволяют установить и рассчитать природу действия одорантов веществ в разделе метахимии.

Введение. Молекулярная рецепция одорантов

Душистые вещества (одоранты) воспринимаются избирательными нервными клетками или системой клеток, называемых биологическими молекулярными рецепторами. В них происходит трансформация обонятельного, вкусового сигнала в нервные импульсы. И хотя природа такого преобразования не ясна, но уже сам принцип "от клетки к клетке" позволяет предположить существование и другого не менее фундаментального принципа (по аналогии и с тем, что "подобное растворяется в подобном"), принципа синэргизма, который можно формулировать так применительно к кинетике распространения одорантов и движению живых организмов, как взаимозависимой системы: "движение живых организмов осуществляется в форме импульсов, а потому и усвоение внешнего сигнала рецепторами преобразуется в нервные импульсы", т.е. "усвоение информации молекулярными рецепторами осуществляется от импульса к импульсу". Антенны молекулярных рецепторов представляют собой клеточные выросты плазматических мембран, содержащие белки для данного вида рецепции, т.е. специфичны по своему назначению, и состоят их микровилл и являются результатом дифференцировки ресничек, жгутиков и их производных., в

образования которых входят фибриллярные белки, жгутики которых построены по принципу: $9 \square 9 + 2$ или $9 \square 2 + 0$, т.е. имеют по девять пар фибрилл на периферии и одну или ноль в центре.

Восприятие импульсов от одорантов и преобразование их рецепторами в нервные импульсы не происходит, естественно, одновременно, но можно предположить, что такие импульсы в своей начальной стадии последовательны, т.е. за первым импульсом следует второй в последовательности: 1, 1. Тогда по отношению к этой паре импульсов следующая пара будет точно такой же, но предыдущая будет восприниматься рецептором как $1+1=2$. И потому каждый следующий импульс, например, равный 3 будет суммой предыдущего и последующего импульсов, т.е. $3=1+2$. Практически это означает, что импульсы воспринимаются молекулярными рецепторами по некоторому "закону", ряд импульсов которого совпадает с рядом последовательности чисел Фибоначчи, столь существенными в теории поиска². Если же молекулярные рецепторы строго избирательно настроены на восприятие и преобразование импульсов одорантов в нервные импульсы в форме ряда последовательности чисел Фибоначчи, то такой поиск позволяет говорить: о стратегии поиска (L) и результате стратегии поиска (P) биологическим объектом одоранта. Поскольку, например, у насекомых, три аспекта жизнедеятельности: питание, спаривание, кладка яиц связаны с обонятельной рецепцией молекул одорантов, то определить результат стратегии поиска (P) молекулярными рецепторами можно, если понять какова стратегия поиска (L) насекомых, которые ориентируются по "языку запаха", выделяемых ими специальными одорантами \square феромонами.

Общественные насекомые \square муравьи выделяют феромоны сигналов тревоги, пути к запасам пищи, самки тутового шелкопряда *Bombix mori* половой одорант \square аттрактант бомбикол. Высокая чувствительность молекулярных рецепторов обоняния показывает (для возбуждения самца *Bombix mori* достаточно всего 2500 молекул бомбикола, т.е. 10^{-18} г в 1см^3

² .Воробьев Н.Н.Числа Фибоначи. М.: Наука, 1978. 140с.

растворителя), что запах переносится молекулами. Пороговая концентрация душистых веществ, воспринимаемая человеком, составляет для скатола 4×10^{-7} , для тринитробутилтолуола 5×10^{-9} мг/л. Ориентация по запаху установлена для многих организмов млекопитающих, рыб, собак и т.д.³

Определив стратегию поиска (L), как форму движения живых организмов и поняв принцип молекулярной рецепции запаха (α), т.е. превращения импульсов феромона в нервные импульсы живого организма, можно полагать, что результат стратегии поиска (P) будет функцией этих величин $P = F(L, \alpha)$.

Резонансная, вибрационная или квантовая теория рецепции запаха потому и оказалась не состоятельной, рассматривая резонанс атомных колебаний молекул одоранта и молекулярных структур рецептора, что не обращала внимание на импульсный характер поступления одоранта к рецептору и импульсный характер трансформации молекулярным рецептором нервного сигнала. Следуя принципу, открытому еще Ж.Фабром, о том, что "насекомые это живые автоматы, заведенные на всю жизнь для механического выполнения определенного цикла операций", можно утверждать, что принцип "от клетки к клетке" α "от импульса к импульсу" и есть принцип преобразования импульса молекулярного феромона в нервный импульс рецептора. Но если такую закономерность принять в форме ряда чисел Фибоначчи, то в соответствии с теорией поиска работы "автоматов α насекомых" результат стратегии поиска (P) есть стратегия поиска (L), ограниченная условиями скорости передачи импульсов последующего к предыдущему в ряду чисел Фибоначчи: 1,1, 2,5,8,13,21,34,55..., где α приобретает смысл при числе импульсов больше 3:

$$\alpha = \frac{5}{3}, \frac{8}{5}, \frac{13}{8}, \frac{21}{13}, \frac{34}{21}, \dots$$

А по теории автоматов результат стратегии поиска есть величина (P), равная:

$$P = \frac{L}{\alpha}$$

³ Райт Н.Х. Наука о запахах. М.: Мир, 1996. 224с.

Тем самым, если величина \square есть "форма ограничения" результата стратегии поиска принципа "от импульса к импульсу", а по существу величина, равная "золотому сечению", то величина L как стратегия поиска должна описывать кинематику движения живых организмов, используя принцип "от импульса к импульсу", в рамках которого, в том числе и насекомые, как автоматы, заведенные для выполнения трех аспектов жизне-деятельности (питание, спаривание, откладка яиц). Такая кинематика должна учитывать, с одной стороны, само распространение например, аттрактанта, феромона весьма малой концентрации в единице объема пространства движения с учетом ориентации живых организмов, а с другой, саму импульсную кинематику движения живого организма, ориентация которого задается молекулярной структурой рецептора, улавливающего по принципу "от импульса к импульсу" импульсы перемещения аттрактанта в пространстве и превращения его в нервный импульс - реакцию.

Тем самым кинетика распространения феромона, кинематика движения живого организма и кинематика импульсной трансформации молекул феромона в нервный импульс представляется примером своеобразного гомеостазиса \square равновесия в системе феромон \square живой организм \square молекулярный рецептор. И этот гомеостазис есть форма синэргетики - метода, лежащего в основании метакимии⁴.

Кинематика живых организмов, мезоструктуры одорантов и механизм рецепции

Проф. МГУ Кобозев Н.И. еще в 1948г. в биологическом отделе Бюллетеня МОИП опубликовал свою работу, посвященную теории векторно - броуновских процессов и законам биологической кинематики⁵, где как раз и описал "явление векторно - броуновской стратегии поиска" живых организмов, перемещающихся по принципу "от импульса к импульсу". Любопытно отметить, что председатель Математического Ко-

⁴ .Куголин С.А. Метакимия IV. Химический дизайн «электрон – мезоструктура». В сб. «Химический Дизайн», Новосибирск: Chem. Lab. NCD, 2004. -с. 7-20.

⁵ .Кобозев Н.И. Бюлл.МОИП,биол.отд.,т53 (1),1948.

митета, основатель Американского журнала "Математическая Биофизика" проф. Рашевский Н.П. в своих письмах дискутировал этот вопрос с проф.Кобозевым. По крайней мере такое письмо от 9.10.1958г. имеется в архиве ученого. Уже после смерти ученого З.А.Терентьева опубликовала серию работ по кинематике движения живых организмов, где рассматривала применимость теории броуновского движения живых организмов и средней длительности пробега как собственного параметра этого движения, дала аргументированный метод определения степени упорядоченности движения живых организмов (\square) и попыталась оценить количество информации, усваиваемой живыми организмами из окружающей среды⁶.

Повидимому уравнения движения таких векторно - броуновских объектов сначала было дано Марианом Смолуховским⁷. Решение такого вида уравнений для сравнительно редких явлений в общем объеме поиска движения приводит к формуле распределения Пуассона с вероятностью распределения (P), которая может быть определена как вероятность стратегии поиска:

$$P = \frac{\lambda^n \cdot e^{-\lambda}}{n!}$$

В данном случае \square - область распространения импульсов от импульса к импульсу для числа n - объектов движения.

Но, если форма движения живых объектов понята как векторно - броуновское движение во времени и пространстве, приводящее к указанной величине вероятности стратегии поиска в области распространения импульсов движения и нервной реакции живых организмов, то какова же форма броуновского движения молекул одорантов, число которых в общем объеме пространства невелико по сравнению с самим объемом этого пространства. Кинетика распространения

⁶ .Терентьева З.А. Теоретическая и экспериментальная биофизика(Межвузовский сборник). Калининград: КалГУ,1976. вып. 6. с.102 - 131.

⁷ .Smoluchwski M.V. Bull.Intern. de l'Ac.sci.de Cracovie,1906.202.

такого броуновского движения молекул, улавливаемых живыми организмами в качестве феромонов, скорее всего может быть описана достаточно сложными уравнениями Фоккера - Планка. Рассматривая физико-химические процессы как формы броуновского движения с функцией распределения вероятности P любых частиц мезоструктуры сортов i, j , общее число которых \square , уравнение Фоккера-Планка для координат \square_i, \square_j и времени t в соответствии с работами А.Н.Колмогорова:

$$\frac{\partial P_{ik}}{\partial t} = TP_i + \sum A_{ik} \frac{\partial P_{ik}}{\partial \varphi_i} + \sum_i \sum_j B^{ik}(y) \frac{\partial^2 P_{ik}}{\partial \varphi_i \partial \varphi_j}$$

где T - ивариант.

К аналогичному и независимому решению приходит и проф. С.С.Васильев Кинетический анализ реакций для концентрации n_i, n_j любых частиц сортов i, j , общее число которых равно \square для любого числа сортов частиц записывается в форме уравнения:

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} = U_i + \sum_j a_{ij} n_j + D_i \Delta n_i \quad \text{где } a_{ij} - \text{коэффициент,}$$

выражающий обобщенную константу скорости реагирования частицы сорта j , в результате чего появляется сорта i ; U_i – скорость процессов, приводящих к появлению частиц сорта i , которые не связаны с реагированием частиц сорта j ; D_i – физический коэффициент диффузии частиц сорта; \square – знак оператора Лапласа. Сравнивая эти уравнения, убеждаемся, что уравнение Фоккера-Планка представляет собой более общую запись второго уравнения в категориях функций распределения частиц P для сортов i и j . По существу уравнение Фоккера-Планка описывает такой вероятный процесс, который называется в математике марковским процессом в непрерывном времени и описывает явление диффузии (третий член уравнения). Кинетике взаимодействия частиц, второй член в уравнении – соответствует марковский процесс в дискретном времени, решением которого для уравнения вида является распределением Пуассона.

$$\frac{dP_{ik}(y)}{dt} = \sum A_{ik} P_{ik}(y)$$

Полученные результаты позволяют утверждать, что физико-органическая химия восприятия молекулярными рецепторами живых организмов молекулярных одорантов воспринимается от импульса к импульсу именно в силу иерархии аналогии (синэргизма) в кинематике движения живых организмов и кинетики распространения молекулярных феромонов. Именно векторно - броуновская форма движения живых организмов и аналогичная форма движения малого количества феромона в общем объеме пространства приводит к взаимно однозначной ориентации во времени пространстве системы молекулярный феромон \square молекулярный рецептор, взаимодействие (узнавание которых) происходит в пространстве "от импульса к импульсу", эффект, который можно рассматривать по аналогии с туннельным эффектом, как "эффект опережения" \square молекулярный феромон "причина" \square молекулярная рецепция "следствие".

Тем самым в кинематике живых организмов и кинетике одорантов имеет место единая векторно - броуновская форма по принципу "флюктуации" взаимодействия нервных импульсов и распространяемых одорантов. На первый взгляд кажется исключительно важным только понимание тонкой структуры взаимодействия мембран клеток обонятельного эпителия, его структур с молекулами душистых веществ. В этом смысле безусловно работы Монкриффа(1951)⁸ и Эймура(1962)⁹ заслужили самого пристального внимания со стороны структуралистического подхода к пониманию механизма рецепции запаха. В работах¹⁰ предложена оригинальная

⁸ .Moncrieff R.W. The Chemical Senses. J.W.,New York,2nd Edition,1951.

⁹ .Amoore J.E. The Stereochemical Theory of Olfaction. - Special.Suppl., N 37,pp.1-23,1962.

¹⁰ .Воронков Г.С.,Изотов В.А. Нейронная сеть для представления о обработке информации на первом синаптическом уровне обонятельной системы.//Всеросс. Научно-техн.конференция"Нейроинформатика-

компьютерная модель обонятельной луковицы (ОЛ). В этих работах осуществлена проверка адекватности нейронной модели биологическому прототипу проведенных компьютерных экспериментов.

Полученные результаты свидетельствуют, что модель способна воспроизводить "незапрограммированные" феномены, по своей сути аналогичные психофизическим феноменам, характерным для обоняния¹¹. В этом плане было интересно понять, в какой мере электронно - молекулярная структура одорантов позволяют классифицировать запахи и их интенсивность, поскольку "авторитетное мнение" ряда ученых отрицают подобного рода корреляции.

КЛОП - модель мезоструктуры, молекулярная рецепция, классификация одорантов

Структурная теория и стереохимия органических соединений показывают, что использование, например, различных структурных формул бензола (в частности Клауса, Дьюара, Ладенбурга и др.) иногда в неявном виде требует учета как коллективизации, так и локализации электронов в молекуле, что использовалось при создании новых методов синтеза. Однако для КМ (компьютерного моделирования) использование только структурных формул недостаточно. В отношении же прогнозирования физико-химических свойств душистых веществ, а также классификации последних (цветочные, фруктовые запахи) имеются лишь общие физические и химические представления. Между тем, как раз в области эмпирического поиска душистых веществ достигнуты определенные результаты, поскольку они могут рассматриваться с тех же точек зрения, что и боевые отравляющие и психотропные вещества, а также их антидоты¹², поскольку действие последних воспринимают, чаще всего и, прежде всего, как рецепторы запаха.

99".Сб.науч.трудов.ч.1.М.: МИФИ, 1999.с.155-162:Изотов В.А.,Воронков Г.С. Биофизика, 1999. т.44, вып.1,с.120-122.

¹¹ .Бронштейн А.И. Вкус и обоняние. М.:Наука,1950.-389с.

¹² .Оксенгендлер Г.И. Яды и противоядия. -Л.:Наука,1982.-191с.

Воспользуемся представлениями о КЛОП, КРЭП моделях квантово – флуктуационных ансамблей мезоструктуры теперь уже в физико – органической химии. Эти исследования показали, что коллективизированные (N_k) и локализованные (N_l) состояния электронов определяют взаимодействия между атомами, а энергию связи E_0 , число N_k и характер связи между атомами приближенно определяется соотношением:

$$E_0 = \frac{2.21}{r^2} N_k^{5/3} - \frac{0.916}{r} N_k^{1/3} + 0.62 \cdot N_k^{4/3} \ln r$$

где $r = L/2a_0$ (L - длина связи между атомами в Å; $a_0 = 0,528$ Å - радиус бортовой орбиты). При этом число локализованных электронов дается как число валентных электронов минус число коллективизированных. Для одинарной, двойной и тройной углерод-углеродных связей числа коллективизированных электронов равны: 2,2; 2,6 и 2,8, а число локализованных 0; 1,4 и 3,2.

В качестве банка исходных данных для КМ свойств душистых веществ воспользуемся данными работ по физико-химическим свойствам веществ и их принадлежности по запаху. Ниже приняты индексы для веществ с цветочным запахом - 1, а с фруктовым - 2. В качестве искомым функций: молекулярного веса M , плотности D взяты значения из табл. I. Классификаторы запаха 1 и 2 принимались, исходя из строения молекулы. аргументы с x_1 по x_{12} с учетом аргументов x_{16} - x_{19} , соответствующих числу коллективизированных электронов в углеродной цепи $N_k^c \sim (x_{16})$, электронов, локализованных в углеродной цепи N_k^l , коллективизированных в функциональных группах N_k^f и локализованных в функциональных группах N_l^f для соединений алифатического, карбоциклического и ароматического ряда, причем значения соответствующих типов электронов в углеродной цепи и функциональных группах суммировались. Примеры результата такой классификации аргументов приведены в табл. I.

Для молекул душистого вещества в целом были получены компьютерные модели в форме линейной регрессии, позволяющие распознавать с коэффициентом корреляции модели (ккм) не менее 55% (а для отдельных классов веществ - до 100%) вещества, обладающие фру-

ктовыми (2) или цветочными (I) запахами. При этом функциональная величина классификации запаха Y при $Y \square 1,45$ рассматривается как классифицирующая запах по принадлежности к фруктовым. т.е. $Y=2$, а при $Y \square 1.41$ - как принадлежность к веществам с цветочным запахом. Область $Y=1,412 \square 1,45$ классифицируется как промежуточная со смешанными ароматами, принадлежащими к классификаций Эймура. В табл. 2 даны значения коэффициентов a_i , для соответствующих аргументов x_i , используемых для вычисления значения классификатора запаха:

$$Y = \sum_i a_i \cdot x_i + b$$

Оказалось, что вклад входящих аргументов, рассчитанный методом исключения, приходится в основном на следующие: x_3 - число атомов кислорода - 14,4%; x_{18} - количестве коллективизированных электронов в функциональных группах -52.7%; x_{19} - количество локализованных электронов в функциональных группах(в ряду алифатических, карбоциклических и ароматических соединений) - 10,2%.

Результаты КМ молекулярного веса душистых веществ алифатического, $M_{ал}$, карбоциклического, $M_{кбц}$, ароматического, $M_{ар}$ рядов позволили представить соответствующие величины как функцию необходимых и достаточных аргументов уравнениями вида:

$$M_{ал} = 13.87 \cdot x_1 + 14.61 \cdot x_3 - 2.30 \cdot x_{12} + 0.87 \cdot x_4 + 0.14 \cdot x_9^2 - 0.75 \cdot x_5 + 3.03$$

$$M_{кбц} = 14.02 \cdot x_1 + 4.91 \cdot x_{18} - 0.57 \cdot x_{12}^2 + 0.05x_6 + 0.14 \cdot x_9^1 - 1.66$$

$$M_{ар} = 12.04 \cdot x_1 + 15.99 \cdot x_3 + 0.04 \cdot x_2^2 - 0.72x_5 + 5.62$$

Если результат классификации душистого вещества по характеру его аромата определяется строением молекулы в целом (величиной Y), то

молекулярный вес душистых веществ является функцией фрагментарного ее строения, что с несомненностью следует из уравнений (2.2 □ 2.4). При этом вклад числа углеродных атомов в молекулярный вес душистого вещества оказывается преимущественным и составляет (по данным метода исключения) в ряду: ал - кбц - ар, соответственно: 95.1□,88.8□, 78.2□, Таким образом, вкусовая рецепция есть функция молекулярно - структурных факторов вещества! Результаты моделирования плотности одоранта как функции необходимых и достаточных аргументов описывается следующими уравнениями:

$$D_{ал} = -0.28 \cdot x_7 + 0.03 \cdot x_{19} - 0.14 \cdot x_{12}^2 + 0.42x_{12} - 0.0003 \cdot x_2^2 + 0.001 \cdot x_{10}^2 - 0.13 \cdot x_{11}^2 + 0.19x_{11} + 0.737g \cdot cm - 3$$

$$D_{кбц} = -0.29 \cdot x_6 + 0.41 \cdot x_9 - 0.03 \cdot x_{19}^1 - 0.03x_9^2 - 0.0003 \cdot x_2^2 + 0.131g \cdot cm - 3$$

$$D_{ар} = 0.21 \cdot x_8 - 0.07 \cdot x_{16} + 0.04 \cdot x_2^2 - 0.33x_7 - 0.27 \cdot x_6 + 1.980g \cdot cm - 3$$

В ряду прогнозирования плотности душистых веществ: ал-кбц-ар, коэффициент корреляции модели весьма высок и равен, соответственно: 96.9%, 98.8%, 74.3%. В зависимости от принадлежности молекулы к алифатическому, карбоцикли-ческому или ароматическому ряду плотность душистых веществ определяется фрагментарным строением молекулы, в ряду ал-кбц-ар соединений более информативными, то есть вносящими больший вклад в определение свойства, являются: x_{12} - число двойных связей в ряду алифатических соединений (61,8%); x_9 - число групп CH_3 в соединениях карбоциклического ряда (95,0%); x_{16} - число коллективизированных электронов в углеродной цепи соединений ароматического ряда (27,6%). Высокие значения ккм и сравнительно малые относительные ошибки в определении физико-химических свойств и классификация душистых веществ по У (табл.) указывают на функциональную зависимость между силой аромата F, насыщенностью запаха (оттенком аромата) r_{23} и физико-химическими свойствами

душистых веществ (величиной Y , определяемой аргументами x_{16}, x_{19} , то есть числом коллективизированных и локализованных электронов, а также величинами M и D). Для количественной трактовки представим величину F в виде:

$$F = \frac{x_{16} \cdot x_{19}}{r_3^2}$$

Тогда, рассматривая парообразное душистое вещество как подчиняющееся, с одной стороны, газовому закону вида: $PV=nRT$, а с другой стороны - закону диффузии: $D = RT/6 \cdot \bar{v}^3$, что справедливо при низких температурах, а также учитывая, что $n = m / M$, а $D = m / V$, получаем закон проникновения душистого вещества через полупроницаемую перегородку (аналог закона осмоса) для душистого вещества в виде:

$$P = \frac{D}{M} \cdot RT$$

Далее, заменяя величину P для одного моля газа (2.9) через RT/V , полагая $V = 4/3 \cdot \bar{v}^3$, и $RT = 6 \cdot r^3 \cdot D$, где r, \bar{v}, D размер молекулы, вязкость и коэффициент диффузии душистого вещества через полупроницаемую мембрану, находим:

$$r_3^2 = \frac{3\eta M(2D_e + D_i)}{2DRT} \text{ где } 3D=2D_e+D_i \text{ -т.е. утроенное значение коэффициента}$$

душистого вещества внутри и из полупроницаемой перегородки рецептора, т.е. условие диффузии, при котором происходит восприятие оттенка аромата рецептором.

Ограничиваясь только физико-химической моделью душистых веществ, смысл которых следует из формул, Н.П.Рашевский¹³ получил для иннервируемой клетки пресинаптической мембраны выражение аналогичное, хотя и отличающееся от последнего на величину порядка инварианта. Так как в предыдущее уравнение входят неуточненные параметры: \bar{v}, D_e, D_i , то прямое определение оттенка аромата возможно лишь при дополнительных опытных исследованиях. Все же, полагая, что величина r_3^2 может быть определена хотя бы с ошибкой

¹³ .Rashevsky N. Mathematical Biophysics. Univer.of Chicago Press, 1948.p.233.

до постоянной (что может быть неточным), как отношение М/Д, то находим, что для душистых веществ величина F может быть рассчитана, и во всяком случае методом компьютерного моделирования можно найти У как линейную функцию, которая имеет простой вид:

$$У_{кбц} = 0.00615 \text{ М/Д} - 4,2584 \text{ F} + 1,0026$$

Коэффициент корреляции модели такой функции для расчета принадлежности соединений карбоциклического ряда к душистым веществам, обладающим цветочным запахом I или фруктовым 2, оказывается равным 99,85%, а относительная ошибка в оценке величины 2 - порядка $\square 1.4\%$ отн., что позволяет рассматривать физико-химические критерии (2.8), (2.10) как необходимые и достаточные для определения силы и насыщенности запаха.

Значения коэффициентов a_i в классификаторе запаха Y в зависимости от x_i (Табл.):

x_i	a_i	x_i	a_i
1	0,22382	9	0,27564
2	-0,14012	10	0,19018
3	-2,2195	11	0,13846
4	-0,42116	12	-0,20548
5	1,46014	16	-0,07497
6	1,10843	17	-0,00818
7	-1,29366	18	1,24577
8	0,32249	19	-0,70011

Таблица. Сопоставление результатов расчета физико-химических свойств (М,Д) и классификатора запаха (У) для душистых веществ с литературными данными

Соединение	М	Д	У
1. Этилформиат	74/74	0,92/0,90	2/2
2. Бутилацетат	П6/П6	0,882/0,854	2/2
3. Изоамилацетат	130/131	0,88/0,89	2/2
4.Изоамилпропионат	144/145	0,879/0,874	2/2
5. Диналилформиат	182/182	0,918/0,932	1/1
6. Терпениол	154/154	0,947/0,991	1/1
7. Ирон	206/206	0,940/0,971	1/1
8. Бензальдегид	106/107	1,046/1,081	1/1
9. Коричный альдегид	132/132	1,052/1,012	1/1

В числителе - данные литературных работ; в знаменателе - результаты расчета.

Такие авторитеты в биофизике как М.В.Волькенштейн считают, что квантово-химическая и вибрационная теория запахов просто неосновательны. Приведенные исследования показывают, что суть вопроса много сложнее применимости или неприменимости тех или иных элементов теории квантовых расчетов, поскольку классификация запаха и его интенсивность включает в себя как структурные элементы организации химического вещества, так и формы локали-зации электронов в молекуле мезоструктуры. Примечательно и то, что физико-химические свойства вещества такие как молекулярный вес и плотность оказываются сложной функцией вклада электронно - структурных параметров одо-ранта. С другой стороны как показано тем же Р.Х.Райтом существует внутренняя глубокая аналогия (синэргизм) в подобии запахов между фононными спектрами и поляронными состояниями различных веществ с подобными запахами.