Л.А.Грибов ВОЗМОЖНА ЛИ «СИЛИКАТНАЯ ЖИЗНЬ»?

Близкое структурное сходство некоторых органических и кремнеорганических соединений (например, парафинов и силанов) и сходство электронного строения атомов углерода и кремния, что отражается и в сходстве их АО, давно отмечено исследователями. Эти моменты порождают мысль и о возможности того, что можно назвать «силикатной жизнью».

В связи с новыми взглядами на механизм элементарного акта при химических реакциях появилась возможность рассмотреть некоторые влияющие на ход химических факторов, ранее ускользавших от внимания при простом сопоставлении геометрических форм органических и кремнеорганических молекул. Конечно, хорошо было известно и то, что для взрыва смеси метана и кислорода требуется существенное локальное повышение температуры, и аналогичная реакция окисления SiH4 в смеси с O₂ идёт уже при гораздо более низких температурах. Тем не менее, идея «силикатной жизни» снова и снова обсуждается в литературе. Обсудим эту проблему.

введение

Простейшая теория химических реакций (включая и реакции структурной изомеризации) основана на модели перевала через потенциальный барьер, разделяющий комбинирующие состояния (химические формы) молекулярных объектов. Путь реакции отвечает геодезической кривой, соединяющей минимумы энергетических «ям» двух квантовых подструктур (структурных изомеров). Энергия возбуждения (активации) реакции определяется расстоянием по шкале энергии от минимума «ямы» исходной молекулярной структуры до седловой точки потенциального барьера. Видно, что в такой модели эффект массы вообще отсутствует. Простейший способ учета этого эффекта заключается в том,

чтобы отсчитывать энергию активации не от минимума энергетической «ямы», а от энергии нулевых колебаний. Заметим теперь, что замена в молекуле хотя бы одного атома на более тяжёлый даже при полной неизменности электронного состояния приведет к тому, что частоты колебаний либо уменьшатся, либо останутся (некоторые) неизменными. В результате нулевой колебательный уровень всегда снижается при таком замещении и поэтому энергия активации реакции должна всегда увеличиваться по сравнению со случаем «легкой» модификации, а скорость реакции – уменьшаться.

В более сложной модели учитывается положение не только нулевого, но и других колебательных уровней, что приводит в теории температурных реакций к изменениям статистической суммы по состояниям. Для моделей, учитывающих и туннельные переходы, это может привести к исчезновению или появлению квантового резонанса состояний и, соответственно, также к изменению скорости реакции.

Во всех традиционных моделях принимаются во внимание лишь энергетические факторы.

Рассмотрим ещё один важнейший фактор, который ранее не обсуждался.

Будем опираться на основные положения теории химических превращений, развитой в ряде работ [5–21]. В этой теории устанавливается прямая связь между спектральными и химическими процессами. Именно единство подхода к описанию любых молекулярных трансформаций, традиционно относимых либо к оптическим (спектральным), либо к химическим, привела к ряду общих выводов, позволивших не только по-новому объяснить важнейшие химические закономерности, но и предложить единую систему кинетических уравнений, объединяющую как спектральные, так и химические изменения в сложной молекулярной системе после введения в нее внешней энергии. Важно, что развитая теория правильно описывает все наблюдаемые в эксперименте закономерности качественного характера (например, уравнение Аррениуса для температурной зависимости константы скорости химической реакции, непостоянство константы скорости во времени, эффект

проявления периода индукции реакции, характер изменения интенсивностей полос в вибронных спектрах, включая и тонкую структуру их временных зависимостей – осцилляции интенсивностей линий, периодические химические превращения) [12,15,16,19].

В данной теории химическое превращение трактуется как резонансный безызлучательный переход между комбинирующими уровнями различных по структуре подсистем, общее состояние которых описывается волновым пакетом, для которого модуль квадрата волновой функции имеет вид [5]:

$$|\Psi(t)|^{2} = |\Psi_{1}|^{2} \cos^{2} \omega t + |\Psi_{2}|^{2} \sin^{2} \omega t.$$
(1)

В выражении (1) Ψ_1 и Ψ_2 – волновые функции стационарных резонирующих электронноколебательных состояний подсистем (с энергией E_{ev}), а ω – частота квантовых биений этих состояний в волновом пакете. Эта величина и определяет вероятность безызлучательного перехода, т.е. химического превращения. В свою очередь, $\omega = 2\hbar^{-1}E_{ev}S_{ev}$, где S_{ev} – перекрывания собственных электронно-колебательных интеграл функций этих резонирующих состояний реагирующих химических объектов. В достаточно хорошем приближении при расчете о можно ограничиться вычислением лишь колебательной составляющей S_{vv} полного интеграла S_{ev}, которая принимает герцберг-теллеровский вид [14]. Методы соответствующих расчетов разработаны [18]. Это позволило провести модельные расчеты для большого числа конкретных молекулярных структур. Во всех случаях вычислялись электронно-колебательные уровни и соответствующие им волновые функции, определялись резонирующие состояния и рассчитывались для них интегралы перекрывания и значения о, которые входят в выражения для вероятностей химических превращений (безызлучательных резонансных переходов) и в коэффициенты в соответствующих кинетических уравнениях, определяя кинетику рассматриваемых процессов.

Для наглядности и демонстрации только эффектов, связанных с изменениями масс атомов рассмотрим примеры мономолекулярных реакций изомеризации при разных дейтерозамещениях.

Результаты, иллюстрирующие изменения при изотопозамещении вероятностей безызлучательных переходов, показанных на рисунке, представлены в табл. 1. Видно, что величины о могут меняться очень сильно, иногда на порядки, причем изотопозамещение «разнонаправленные» эффекты. Так, например, для структурного может давать преобразования BU12 дейтерозамещение (BU12-D₃) приводит к уменьшению величины о на порядок, а для BU13 и BUc13 (BU13-D₆ и BUc13-D₆) – к аналогичному по значению увеличению. Отметим также, что нет прямой зависимости величины эффекта от «степени» изотопозамещения, что хорошо видно, например, для преобразования АМ, когда одно- и двукратное дейтерирование приводит к очень сильному и количественно одинаковому эффекту (~10³), а при трехкратном дейтерировании эффект практически отсутствует. Как было показано ранее методами компьютерного эксперимента, при таких изменениях молекулярных параметров кинетика химического процесса структурного величин превращения может существенно меняться, приводя к не только количественным, но и качественным изменениям - «инверсии» соотношения количеств получаемых продуктов в результате фотохимических превращений [21]. Изотопные эффекты при реакциях с дейтерозамещением H \rightarrow D, конечно, значительно большие, чем при замещении ${}^{12}C \rightarrow {}^{14}C$, но и в этом случае они достигают порядка величин по частоте квантовых биений резонирующих уровней, а соответственно и вероятностей безызлучательных переходов. Получающиеся эффекты в некоторых случаях существенно превосходят те, которые возникают при учете только факторов, связанных с изменениями положений уровней энергии.

Рассмотрим физическую природу обсуждаемых результатов.

Любое химическое превращение связано с перестановками атомов в исходной молекулярной системе. Такие перестановки могут произойти лишь в результате колебательных движений большой амплитуды, для возбуждения которых и требуется ввод в систему внешней энергии. Если рассматривать химический процесс как безызлучательный переход между двумя комбинирующими состояниями при появлении квантового резонанса уровней энергии подсистем и смешивания соответствующих волновых функций, то ясно, что вероятность такого перехода будет определяться взаимосвязью форм нормальных колебаний атомов в подсистемах. В данном случае – форм колебаний изомеров. Количественной характеристикой этой взаимосвязи является величина интеграла перекрывания S_{vv} колебательных волновых функций резонирующих вибронных состояний, участвующих в реакции изомерных структур. В свою очередь, величина интеграла S_{vv} определяется соотношением нормальных координат комбинирующих изомеров, которое имеет вид

$$Q_1 = AQ_2 + b, \tag{2}$$

где Q_1 и Q_2 – отвечающие изомерным структурам нормальные координаты, нормированные на амплитуды нулевых колебаний, A – квадратная матрица поворота осей и изменения масштабов для нормальных координат при переходе от второго изомера к первому, а b – вектор сдвига начала систем координат, т.е. положения минимума «ям» для изомеров, геометрия которых описывается в системе нормальных координат и характеризуется точкой в соответствующем многомерном пространстве.

Вектор сдвига b, определяемый выражением [23-25]

$$b = Q_0^{-1} \tilde{L}_p \Delta s \tag{3}$$

 $(\Delta s$ – вектор изменений геометрии в естественных координатах (изменения расстояний между атомами, валентных углов и т.д.), а Q_0 , L_p – матрицы амплитуд нулевых колебаний и сопряженных импульсов первого изомера), характеризует степень различия геометрических

конфигураций комбинирующих молекулярных структур и является главным параметром, определяющим величину интеграла перекрывания S_{vv} , особенно при значительных деформациях молекул [14,18]. Существенное значение имеет не только норма (длина) вектора b (||b||), служащая количественной характеристикой степени различия геометрий комбинирующих молекулярных структур, но и распределение величин по его компонентам b_i , т.е. его структура, так как именно это распределение характеризует степень локализации (делокализации) пространственной деформации молекулы при структурном превращении. Заметим, что локальность структурных преобразований, затрагивающих, в основном, относительно небольшую атомную группировку молекулы (ее фрагмент), является одним из ключевых факторов, определяющих возможность данного межизомерного перехода и введения самого понятия реакционного центра, как одного из базовых в химии [26].

Для иллюстрации влияния вектора b на значение искомого матричного элемента S_{vv} , а следовательно и величины ω , приведем данные конкретных расчетов (табл. 2). Так, например, при переходе от изомерного превращения BU12 к BU13 структура вектора b, которую будем характеризовать количествами его элементов b_i , имеющих величины в заданных интервалах значений, меняется очень мало, но существенно изменяется длина вектора $\|b\|$ (за счет увеличения значений b_i для координат, отвечающих большим деформациям; $b_i^{\text{тах}}$ изменяется от 7 до 14). Это приводит к уменьшению величин S_{vv} и, соответственно, ω на порядок. Сравнивая структурные переходы BU12 и HE12, видим, что длина вектора b в этом случае не меняется, но существенно изменяются его составляющие (деформация для перехода HE12 значительно менее локализована, чем для BU12; число значимых по величине для данного процесса элементов b_i увеличивается с 15 до 20), что в результате также приводит к изменению S_{vv} более чем на порядок величины. Возможно одновременное изменение и нормы и компонент вектора b, как это имеет место, например, при сопоставлении переходов BU12 и BU12 и BU13. Видно, что относительная делокализация

деформации в BUc13 по сравнению с BU12 столь велика, что даже уменьшение длины вектора b не может скомпенсировать это влияние и вероятность преобразования BUc13 по сравнению с BU12 уменьшается на два порядка.

Причины отличий векторов сдвига b для разных изомерных превращений вполне ясны из выражения (3) – это различие либо величин изменений геометрии Δs , либо форм колебаний, характеризуемых матрицей L_p , либо и тех и других одновременно. В случае изотопозамещения, при котором вектор Δs вообще не меняется, вторая причина изменения вектора b и, как следствие, вероятности перехода является единственной.

Хорошо известно, что при изотопозамещении формы нормальных колебаний (особенно при замещении H \rightarrow D) могут сильно меняться [27]. Это и приводит к тому, что меняется вектор *b* и, следовательно, величины интеграла наложения колебательных функций S_{vv} , частоты квантовых биений ω и вероятности структурных преобразований (в частности, для приведенных в табл. 1 примеров).

Действительно (см. табл. 2), для структурного молекулярного превращения BU12 дейтерозамещение (BU12-D₃) приводит к таким изменениям форм колебаний, что реализуется первый из отмеченных выше механизмов – изменяется длина вектора b, что и приводит к уменьшению со на порядок. Для молекулярного превращения BUc13 при дейтерировании (BUc13-D₆) характерно разнонаправленное действие одновременно обоих механизмов: хотя норма вектора b существенно увеличивается, что должно приводить к уменьшению интеграла перекрывания, изменение компонент вектора b из-за изменения форм колебаний столь значительно, что в итоге S_{vv} и ω увеличиваются на порядок. Это нормальных колебаний сложное влияние изменений форм на количественные характеристики, определяющие вероятность процесса структурного превращения молекул, и приводит к тому, что изменение характеристик процесса может иметь разный знак, а кинетический изотопный эффект может быть «разнонаправленным». Заметим, что по тем же причинам изменение вероятности может быть и пренебрежимо малым даже при

значительных изотопных изменениях в молекуле, как, например, это имеет место для изомерного перехода AM при замещении трех атомов H на D (см. табл. 1).

Разумеется, эффект, в целом, уменьшается при изотопозамещении с незначительными изменениями масс атомов из-за меньших изменений форм колебаний, например, ${}^{12}C \rightarrow {}^{14}C$ по сравнению с H \rightarrow D, хотя и в этом случае он может быть значительным (см. выше).

Проведенный анализ показывает, что в теории структурных превращений молекул при исследовании даже простейшего изотопного эффекта необходимо учитывать не только влияющий на него энергетический фактор, но и вероятностный, обусловленный изменениями вероятностей безызлучательных переходов из-за изменений форм нормальных колебаний. Второй фактор может приводить к весьма значительным по величине эффектам, поскольку вероятность переходов может изменяться на порядки величин, что, в свою очередь, может приводить к существенным, не только количественным, но и качественным, изменениям кинетики процесса структурного превращения.

Вернёмся теперь к вопросу, поставленному в самом начале статьи. Сравним формы колебаний молекулы C_4H_{10} и модельной структуры Si_4H_{10} , отличающейся от C_4H_{10} только заменой масс атомов C на Si при полной неизменности геометрического и электронного строения первой (сохранены все колебательные координаты и силовые постоянные).

Табл. 3 показывает, что при простом замещении как С на Si уже радикально меняются формы нормальных колебаний, а значит и волновые функции.

Аb initio расчёты ИК спектров молекул C₄H₁₀ и Si₄H₁₀ демонстрируют различия и в распределении электронной плотности, что и находит своё отражение в значениях силовых постоянных и смещениях частот X – H и H – X – H колебаний.

Если теперь учесть всё сказанное выше о вероятностях химических реакций и их зависимости от форм колебаний, преобразующихся при реакциях структур, и тот факт, что

базовый для всего феномена жизни процесс редупликации является многостадийным и в высокой степени самосогласованным [...], то вывод о том, что появление «силикатной жизни» является крайне мало вероятной, становится неизбежным.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- Кондратьев В.Н., Никитин Е.Е. Кинетика и механизм газофазных реакций. М.: Наука, 1974. – 558 с.
- 2. Белл Р. Протон в химии. М.: Мир, 1977. 381 с.
- 3. Миландер Л., Сондерс У. Скорости реакций изотопных молекул. М.: Мир, 1983. 344с.
- Cole D.R., Chakraborty S. Rates and mechanisms of isotopic exchange. // Stable Isotope Geochemistry (eds J.W.Valley and D.R.Cole). Reviews in mineralogy and geochemistry. – Washington: Mineralogical Society of America. 2001. V. 43. P. 83–224.
- Грибов Л. А. От теории спектров к теории химических превращений. М.: Эдиториал УРСС, 2001. – 365 с.
- 6. Грибов Л. А. // Журн. физич. химии. 2001. 75, № 1. С. 83–88.
- 7. Грибов Л. А. // Журн. физич. химии. 2001. 75, № 2. С. 290–293.
- 8. Грибов Л. А. // Журн. физич. химии. 2001. 75, № 3. С. 573–576.
- 9. Грибов Л. А. // Журн. физич. химии. 2001. 75, № 8. С. 1403–1408.
- 10. Грибов Л. А. // Журн. физич. химии. 2001. 75, № 9. С. 1638–1641.
- 11. Грибов Л. А. // Журн. физич. химии. 2001. 75, № 10. С. 1775–1781.
- 12. Баранов В. И., Грибов Л. А. // Изв. АН, Сер. хим. 2003. № 4. С. 763–770.
- 13. Баранов В. И., Завалий М. В., Грибов Л. А. // Журн. прикл. спектроск. 2003. 70, № 5. –
 С. 628–634.
- 14. Баранов В. И., Грибов Л. А. // Журн. прикл. спектроск. 2003. 70, № 6. С. 735–743.
- 15. Баранов В. И., Грибов Л. А. // Журн. физич. химии. 2004. 78, № 12. С. 2180–2187.

- 16. Баранов В. И., Грибов Л. А. // Журн. прикл. спектроск. 2004. 71, № 4. С. 421–428.
- 17. Баранов В. И., Завалий М. В., Грибов Л. А. // Журн. прикл. спектроск. 2004. 71, № 3. С. 295–301.
- 18. Баранов В. И., Грибов Л. А. // Журн. физич. химии. 2005. 79, № 7. С. 1265–1273.
- 19. Грибов Л. А., Баранов В. И. // Журн. прикл. спектроск. 2005. 72, № 3. С. 325–329.
- 20. Грибов Л. А. // Доклады академии наук. 2005. **404**, № 1. С. 54–56.
- 21. Gribov L. A., Baranov V. I., Zavalii M. V. // Russian Journal of Physical Chemistry. 2005. 79.
 P. S154–S160.
- 22. Степанов Б. И. // Вестник Академии наук Белорусской ССР. 1972. № 3. С. 67–73.
- 23. Грибов Л. А., Баранов В. И., Зеленцов Д. Ю. Электронно-колебательные спектры многоатомных молекул. Теория и методы расчета. М.: Наука, 1997. 475 с.
- 24. Грибов Л. А. // Доклады АН СССР. 1987. **292**, № 5. С. 1161–1165.
- 25. Грибов Л. А., Прокофьева Н. И. // Журн. прикл. спектроск. 1987. 46, № 4. С. 603–608.
- 26. Дьюар М., Догерти Р. Теория возмущений молекулярных орбиталей в органической химии. М.: Мир, 1977. 696 с.
- 27. Волькенштейн М. В., Грибов Л. А., Ельяшевич М. А., Степанов Б. И. Колебания молекул.
 М.: Глав. ред. физ.-мат. лит. изд-ва Наука, 1972. 700 с.

Изомерные пе	ω _A			
A	В	$\omega_{\rm B}$		
BU12	BU12-D ₃	10		
BU13	BU13-D ₆	10-1		
BUc13	BUc13-D ₆	10-1		
AM	$AM-D_1$	10-3		
AM	AM-D ₂	10-3		
AM	AM-D ₃	1		
AM	AM- ¹⁴ C	10-1		

Таблица 1. Влияние изотопозамещения на величины частот квантовых биений ω, определяющих вероятности изомерных превращений молекул.

* Обозначения см. на рисунке.

Таблица 2. Соотношения норм вектора b (||b||), его структуры (N – количество элементов b_i заданной величины), интегралов наложения колебательных волновых функций S_{vv} и частот квантовых биений ω для разных изомерных превращений молекул.

Изомернь	ие переходы*		$N_{\rm A} \leftrightarrow N_{\rm B}$		$(S_{\rm vv})_{\rm A}$	ω _A
А	В	$\left\ \mathcal{O} \right\ _{\mathrm{A}} \leftrightarrow \left\ \mathcal{O} \right\ _{\mathrm{B}}$	$1 \le b_i < 5$	$b_i \ge 5$	$\overline{(S_{vv})_{B}}$	$\overline{\omega_{B}}$
BU12	BU13	$20 \leftrightarrow 22$	$8 \leftrightarrow 7$	$7 \leftrightarrow 7$	104	104
BU12	HE12	$20 \leftrightarrow 20$	$8 \leftrightarrow 15$	$7 \leftrightarrow 5$	10	10
BU12	BUc13	$20 \leftrightarrow 18$	$8 \leftrightarrow 12$	$7 \leftrightarrow 6$	10 ²	10 ²
BU12	BU12-D ₃	$20 \leftrightarrow 23$	$8 \leftrightarrow 8$	$7 \leftrightarrow 6$	10	10
BUc13	BUc13-D ₆	$18 \leftrightarrow 21$	$12 \leftrightarrow 10$	$6 \leftrightarrow 6$	10-1	10-1

* Обозначения см. на рисунке.



Таблица 3.

C_4H_{10}			Si_4H_{10}		
Частота	Форма колебания	Частота	Форма колебания		
	1-ый б.	пок			
252.79	0.162 (Ci–Ci–Co)	188.82	0.122 (Si _i -Si _i -Si _o)		
	0.057 (C _i –C _i –H _i)		0.041 (Si _i –Si _i –H _i)		
980.21	$0.493 (C_i - C_o - H^*)$	920.46	$0.490 (Si_i - Si_o - H^*)$		
	0.248 (C _i –C _o –H _o)		0.225 (Si _i -Si _o -H _o)		
	$0.200 (C_i - C_i - H_i)$				
	0.193 (H _o -C _o -H _o)		0.225 (Ho-Sio-Ho)		
	$0.162 (C_{o}-C_{i}-H_{i})$				
997.84	0.27 (C _i –C _o)	676.96	0.193 (Si _i -Si _o)		
	$0.107 (C_i - C_o - H^*)$				
1291.12	0.470 (Co–Ci–Hi)	1185.90	0.430 (Si _o -Si _i -H _i)		
	$0.407 (C_i - C_i - H_i)$		0.432 (Si _i –Si _i –H _i)		
	$0.253 (C_i - C_o - H^*)$		0.179 (Si _i -Si _o -H [*])		
	0.203 (H _o –C _o –H _o)		0.178 (H _o -Si _o -H _o)		
1379.23	$0.456 (H_0 - C_0 - H^*)$	1315.92	$0.430 (H_0 - Si_0 - H^*)$		
	0.455 (C _i –C _o –H _o)		0.426 (Si _i -Si _o -H _o)		
	$0.450 (C_i - C_o - H^*)$		0.418 (Si _i -Si _o -H*)		
	0.447 (H _o -C _o -H _o)		0.410 (H _o -Si _o -H _o)		
1454.45	0.781 (H _o –C _o –H _o)	1445.09	0.890 (H _o -Si _o -H _o)		
	0.553 (H _i –C _i –H _i)				
	$0.385 (H_0 - C_0 - H^*)$		$0.439 (H_0 - Si_0 - H^*)$		
			0.302 (Si _i -Si _o -H [*])		
1470.78	$0.892 (H_i - C_i - H_i)$	1422.1	1.009 (H _i -Si _i -H _i)		
	0.470 (H _o -C _o -H _o)				
2850.99	0.512 (C _i –H _i)	2816.55	0.503 (Si _i -H _i)		
2894.09	0.415 (C _o –H _o)	2872.03	0.411 (Si _o -H _o)		
	0.411 (C _o –H [*])		0.410 (Si _o -H [*])		
2968.85	$0.610 (C_{o}-H^{*})$	2887.8	0.591 (Si _o –H [*])		
	0.304 (Co-Ho)		0.295 (Si _o -H _o)		
	2-ой бл	юк			
402.32	$0.194 (C_i - C_i - C_o)$	288.85	0.139 (Si _i -Si _i -Si _o)		

	0.075 (Co-Ci-Hi)		0.047 (Si _o –Si _i –H _i)
	$0.067 (Si_i - Si_o - H^*)$		
822.79	$0.307 (C_{i}-C_{o}-H^{*})$	614.17	$0.105 (Si_i - Si_o - H^*)$
	0.218 (C _i –C _i)		0.192 (Si _i –Si _i)
	0.154 (C _i –C _o –H _o)		0.075 (Si _i -Si _o -H _o)
	$0.140 (C_i - C_i - C_o)$		0.172 (Si _i -Si _i -Si _o)
	0.096 (H _o –C _o –H _o)		
	$0.094 (C_0 - C_i - H_i)$		0.073 (Si _o –Si _i –H _i)
	$0.094 (C_i - C_o)$		0.080 (Si _i -Si _o)
			$0.074 (H_i - Si_i - H_i)$
1052.67	0.213 (C _i –C _o)	745.40	0.170 (Si _i -Si _o)
	0.174 (C _i –C _i)		0.170 (Si _i -Si _i)
	$0.123 (C_0 - C_i - H_i)$		
	$0.121 (C_i - C_i - C_o)$		$0.080 (Si_i - Si_i - Si_o)$
	$0.104 (C_i - C_o - H^*)$		$0.062 (Si_i - Si_o - H^*)$
	$0.076 (C_i - C_i - H_i)$		$0.052 (Si_i - Si_i - H_i)$
1152.67	$0.439 (C_i - C_o - H^*)$	962.83	$0.498 (Si_i - Si_o - H^*)$
	$0.259 (C_i - C_i - C_o)$		(,
	$0.239 (H_0 - C_0 - H_0)$		$0.251 (H_0 - Si_0 - H_0)$
	0.229 (C _i -C _i)		
	$0.221 (C_i - C_o - H_o)$		$0.248 (Si_i - Si_o - H_o)$
1373.74	0.475 (C _i -C _i -H _i)	1250.76	0.443 (Si _i -Si _i -H _i)
	$0.416 (C_0 - C_i - H_i)$		$0.455 (Si_0 - Si_i - H_i)$
	$0.376 (H_0 - C_0 - H_0)$		$0.156 (H_0 - Si_0 - H_0)$
	$0.198 (C_i - C_o - H^*)$		
	$0.179 (C_i - C_i)$		
1379.71	$0.473 (H_0 - C_0 - H^*)$	1315.84	$0.430 (H_0 - Si_0 - H^*)$
	$0.441 (C_i - C_o - H_o)$		0.424 (Si _i -Si _o -H _o)
	$0.415 (C_i - C_o - H^*)$		$0.417 (Si_i - Si_0 - H^*)$
	$0.352 (H_0 - C_0 - H_0)$		$0.405 (H_0 - Si_0 - H_0)$
	0.152 (C _i -C _i -H _i)		
1449.42	$0.909 (H_i - C_i - H_i)$	1426.71	$1.005 (H_i - Si_i - H_i)$
	$0.436 (H_0 - C_0 - H_0)$		
	$0.286 (C_0 - C_i - H_i)$		
1469.45	$0.767 (H_0 - C_0 - H_0)$	1445.61	$0.890 (H_0 - Si_0 - H_0)$
	$0.520 (H_i - C_i - H_i)$		
	$0.385 (H_0 - C_0 - H^*)$		$0.440 (H_0 - Si_0 - H^*)$
	$0.283 (C_i - C_o - H^*)$		$0.305 (Si_i - Si_o - H^*)$
2845.44	0.512 (C _i –H _i)	2813.42	0.503 (Si _i -H _i)
2894.02	0.414 (Co-Ho)	2872.03	0.411 (Si _o -H _o)
	$0.413 (C_0 - H^*)$		0.410 (Si _o -H [*])
2968.85	$0.610 (C_{o}-H^{*})$	2887.80	$0.591 (Si_0 - H^*)$
	0.305 (C _o –H _o)		0.295 (Si _o -H _o)
	3-ий б	лок	
691.27	0.276 (C _i -C _i -H _i)	670.16	0.273 (Si _i –Si _i –H _i)
	0.219 (Co-Ci-Hi)		0.219 (Si _o -Si _i -H _i)
	0.151 (Ci–Co–Ho)		0.123 (Si _i -Si _o -H _o)
960.74	0.377 (C _i -C _o -H _o)	913.05	0.399 (Si _i -Si _o -H _o)
	0.327 (C _i -C _i -H _i)		0.242 (Si _i –Si _i –H _i)
	0.150 (C _o –C _i –H _i)		
	$0.148 (H_0 - C_0 - H^*)$		0.182 (Ho-Sio-H*)
1258.79	0.473 (Co-Ci-Hi)	1184.42	0.459 (Si _o -Si _i -H _i)

	0.270 (Ci–Co–Ho)		$0.154 (Si_i - Si_o - H_o)$
	0.257 (Ci–Ci–Hi)		0.337 (Si _i –Si _i –H _i)
	$0.182 (H_0 - C_0 - H^*)$		$0.162 (H_0 - Si_0 - H^*)$
1458.75	$0.789 (H_o - C_o - H^*)$	1446.32	$0.766 (H_o - Si_o - H^*)$
	0.243 (C _i –C _o –H _o)		0.270 (Si _i -Si _o -H _o)
2913.70	0.519 (C _i –H _i)	2840.73	0.508 (Si _i -H _i)
2970.52	0.520 (Co-Ho)	2888.30	0.508 (Si _o -H _o)
	4-ый б	лок	
810.62	0.316 (C _i –C _o –H _o)	771.33	0.265 (Si _i -Si _o -H _o)
	$0.292 (C_0 - C_i - H_i)$		0.288 (Si _o –Si _i –H _i)
	$0.108 (H_o - C_o - H^*)$		$0.097 (H_o - Si_o - H^*)$
	$0.102 (C_i - C_i - H_i)$		0.140 (Si _i -Si _i -H _i)
1198.91	0.368 (Ci–Co–Ho)	1015.45	0.355 (Si _i -Si _o -H _o)
	0.332 (Co-Ci-Hi)		0.189 (Si _o -Si _i -H _i)
	$0.224 (C_i - C_i - H_i)$		0.229 (Si _i -Si _i -H _i)
	$0.218 (H_0 - C_0 - H^*)$		$0.202 (H_o - Si_o - H^*)$
1295.52	$0.530 (C_i - C_i - H_i)$	1265.83	0.467 (Si _i -Si _i -H _i)
	0.318 (Co-Ci-Hi)		0.385 (Si _o –Si _i –H _i)
1459.71	$0.788 (H_0 - C_0 - H^*)$	1446.01	0.767 (H _o -Si _o -H [*])
	0.246 (Ci–Co–Ho)		0.269 (Si _i -Si _o -H _o)
2885.12	0.523 (C _i –H _i)	2826.85	0.509 (Si _i -H _i)
2969.87	0.525 (C _o –H _o)	2888.14	0.510 (Si _o -H _o)

Подпись к рисунку

Изомерные превращения ряда молекул: аллен↔метилацетилен (AM), бутен-1↔бутен-2 (BU12), гексен-1↔гексен-2 (HE12), бутен-1↔бутен-3 для «линейной» (BU13) и «изогнутой» (BUc13) форм и их изотопозамещенных (BU12-D₃, BU13-D₆, BUc13-D₆, AM-D₁, AM-D₂, AM-D₃, AM-¹⁴C)