

Научная статья

УДК 544.122.2

DOI: 10.18577/2307-6046-2023-0-9-32-40

СТРУКТУРНАЯ ИЗОМЕРИЗАЦИЯ СИСТЕМЫ «МЕТИЛСИЛИЛЕН–СИЛАЭТИЛЕН–СИЛИЛКАРБЕН»

Д.В. Сидоров¹, А.Д. Кирилин², А.А. Грунин¹, А.А. Шавнев¹

¹Федеральное государственное унитарное предприятие «Всероссийский научно-исследовательский институт авиационных материалов» Национального исследовательского центра «Курчатовский институт», Москва, Россия; admin@viam.ru

²Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «МИРЭА – Российский технологический университет», Институт тонких химических технологий им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия; mirea@mirea.ru

Аннотация. Представлено теоретическое исследование химической реакции структурной изомеризации метилсилилена, силаэтилена, силилкарбена. Геометрические параметры в исследуемых изомерах определены неэмпирическими методами квантовой химии по теориям функционала плотности, Меллера–Плессета второго порядка, связанных кластеров. Установлены наиболее вероятные структуры соединений переходных состояний, принимающих участие в изомеризации. Определено, что наименьшей энергией в данной системе обладает силаэтилен в синглетном состоянии.

Ключевые слова: изомеризация, квантовая химия, метилсилилен, силаэтилен, силилкарбен, термодинамические параметры

Для цитирования: Сидоров Д.В., Кирилин А.Д., Грунин А.А., Шавнев А.А. Структурная изомеризация системы «метилсилилен–силаэтилен–силилкарбен» // Труды ВИАМ. 2023. № 9 (127). Ст. 03. URL: <http://www.viam-works.ru>. DOI: 10.18577/2307-6046-2023-0-9-32-40.

Scientific article

STRUCTURE ISOMERIZATION OF SYSTEM «METHYLSILYLENE–SILAETHYLENE–SILYL CARBENE»

D. V. Sidorov¹, A. D. Kirilin², A. A. Grunin¹, A. A. Schavnev¹

¹Federal State Unitary Enterprise «All-Russian Scientific-Research Institute of Aviation Materials» of National Research Center «Kurchatov Institute», Moscow, Russia; admin@viam.ru

²MIREA – Russian Technological University, Institute of fine chemical technologies named after M.V. Lomonosov, Moscow, Russia; mirea@mirea.ru

Abstract. The article presents a theoretical study of the structure isomerization methylsilylene, silaethylene, silylcarbene. Calculation of the geometry dimensions in the researched isomers was performed non-empirical method according to theory of density functional, the second-order Meller–Plesset perturbation theory, coupled clusters. The calculation chemical reaction isomerization has shown the most likely a transitional state structure. We defined that silaethylene in singlet state has least energy.

Keywords: isomerization, quantum chemistry, methylsilylene, silaethylene, silylcarbene, thermodynamic parameters

For citation: Sidorov D.V., Kirilin A.D., Grunin A.A., Schavnev A.A. Structure isomerization of system «methylsilylene–silaethylene–silylcarbene». *Trudy VIAM*, 2023, no. 9 (127), paper no. 03. Available at: <http://www.viam-works.ru>. DOI: 10.18577/2307-6046-2023-0-9-32-40.

Введение

Изомеризация химических соединений широко распространена в природе, с ней связаны многочисленные физиологические процессы в организме человека и животных. При изомеризации одно соединение превращается в другое без изменения молекулярной массы и атомного состава. Изомеризация может сопровождаться изменением пространственного строения химического соединения или расположения функциональных групп. Изучение изомеризации и других явлений в природе способствует технологическому прогрессу во многих отраслях промышленности [1–5]. В органической химии реакции изомеризации нашли широкое применение, особенно в химической технологии топлив, синтетических каучуков, поверхностно-активных веществ, душистых соединений. Для непредельных соединений явление изомеризации более распространено по сравнению с предельными или ароматическими углеводородами.

Известно явление ядерной изомерии, которое рассмотрено в обзорной статье [6]. Ядерные изомеры можно разделить на группы: спин-изомеры, К-изомеры, изомеры формы. Наиболее распространены спин-изомеры, распад которых затруднен вследствие высокой мультипольности перехода. Примером спин-изомера является атом ^{180m}Ta со спином и четностью 9^- , тогда как для основного состояния спин имеет значение 1^+ , а для возбужденного 2^+ . В природе изомер ^{180m}Ta находится в стабильном состоянии с изотопом ^{181}Ta (99,98775 %) и отличается долгим временем жизни – по теоретической оценке 10^{15} лет [7].

Под действием света в жидкокристаллических полимерах с фотоактивными фрагментами индуцируются циклы структурно-химических превращений [8], в частности E-Z-изомеризация. К таким фотоактивным фрагментам относятся различные производные азобензола, коричной кислоты и кумарина, которые связаны с основной молекулой полимера при помощи метиленовых спейсеров. Облучение фотонами жидкокристаллических полимеров с азобензольными группами индуцирует E-Z-изомеризацию при определенных условиях.

Многие лекарственные синтетические препараты существуют в виде смеси стереоизомеров, при этом фармакологическую активность проявляет только один изомер. В терапевтической практике также известно использование рацемических препаратов, в которых один из стереоизомеров обладает сильным токсическим эффектом. Примером служит левовращающий изомер препарата талидомида, являющийся седативным снотворным. Присутствующий в смеси правовращающий изомер талидомида обладает тератогенным действием и приводит к появлению необратимых деформаций у новорожденных [9]. В настоящее время талидомид применяют при лечении проказы, злокачественных опухолей, миеломы [10].

Чистые изомеры в органической химии получают различными способами, в том числе в результате синтеза, кристаллизации, разрушения одного из энантиомеров в рацемате или асимметрического синтеза [11]. Асимметрическое гидрирование широко используют в синтезе активного изомера метолахлора, применяемого как гербицид [12]. В 2001 г. Нобелевскую премию по химии вручили за развитие каталитического асимметрического синтеза, который позволяет получать один из энантиомеров с высоким выходом [13].

В химии кремнийорганических соединений явление изомерии также имеет большое значение [14]. В работе [15] опубликованы результаты исследований конденсированных при температуре 10 К продуктов взаимодействия кремния и метана, которые представляют собой структурные изомеры кремнийорганических соединений: метилсилилен, силаэтилен и силлилкарбен. На рис. 1 представлены структурные формулы этих изомеров.

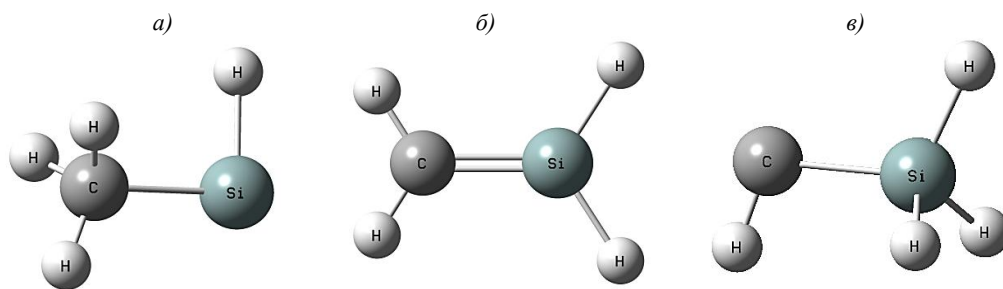


Рис. 1. Структурные формулы изомеров метилсилилена (а), силаэтилена (б) и силилкарбена (в)

Установлено, что при облучении конденсированных продуктов реакции ультрафиолетом преобладает тот или иной изомер. Облучение светом с длиной волн 185 и 253 нм приводит к образованию метилсилилена, при длинах волн >400 нм фоторавновесие сдвигается в сторону силаэтилена. Проведенный авторами работы [15] квантово-химический расчет (метод B3Lур/6-311+G^{**}) позволил определить, что, исходя из принципа минимальной энергии, синтез силаэтилена из всех изомеров более предпочтителен.

В работе [16] расчетным методом (STO-4G) установлено, что в равновесии системы «метилсилилен–силаэтилен–силилкарбен» наиболее стабильным изомером является метилсилилен. Структура силаэтилена термодинамически нестабильна в синглетном и триплетном состояниях. Силилкарбен находится в триплетном состоянии.

Авторы работы [17] изучали изомеры с молекулярной структурой CSiH₂. С использованием теории Хартри–Фока рассчитаны геометрические параметры и полная электронная энергия для изомеров: силилидена, силаэтина, винилидена. Установлено, что силилиден в синглетном состоянии обладает минимальной энергией по сравнению с другими изомерами, а молекула винилидена более устойчива в триплетном состоянии. Для образования структуры силаэтина требуется энергии на 260,2 кДж/моль больше по сравнению с силилиденом.

В связи с наличием некоторых противоречий в научно-технической литературе при изучении превращений в системе «метилсилилен–силаэтилен–силилкарбен» представляют интерес теоретическое исследование таких превращений, а также уточняющий расчет структур и термодинамических параметров кремнийорганических изомеров.

Материалы и методы

Геометрические параметры для стационарных состояний исследуемых изомеров оптимизированы неэмпирическими методами квантовой химии по теориям функционала плотности (B3Lур), Меллера–Плессета второго порядка (MP2) и связанных кластеров (CCSD). Для первых двух способов использовали базисный набор Маклина–Чандлера (6-311+G) с добавлением функций диффузии и поляризации (B3Lур/6-311+G^{**} и MP2/6-311+G^{**}). Для последнего метода применен базисный набор Даннинга (cc-pVDZ) с добавлением функций диффузии и поляризации (Aug-cc-pVDZ). Базисные наборы более высокого уровня (MP2, cc-pVDZ) использованы для уточняющего расчета геометрических параметров в изомерах [18]. Поиск структур переходного состояния с характерной мнимой частотой проводили путем обнаружения максимума при сканировании полной электронной энергии в зависимости от расположения атомов в пространстве. Энергетические характеристики рассчитывали по теории функционала плотности с базисным набором Маклина–Чандлера и включением функций диффузии и двойной поляризации [19]. Расчеты выполнены с использованием вычислительных ресурсов ИТХТ им. М.В. Ломоносова. Работа выполнена с использованием оборудования ЦКП «Климатические испытания» НИЦ «Курчатовский институт» – ВИАМ.

Результаты и обсуждение

Вычисленные и указанные в работе [15] геометрические параметры (длины связей и межатомные углы) в исследуемых структурных изомерах (силаэтилен, метилсилилен, силилкарбен) представлены в табл. 1–3.

Таблица 1

Геометрические параметры в молекуле силаэтилена для синглетного состояния при температуре 298 К

Геометрические параметры	Значения параметров, полученных методом			
	V3Lyp/6-311+G**	MP2/6-311+G**	Aug-cc-pVDZ	данные из работы [15]
Длина связи C–Si, нм	0,1702	0,1706	0,1730	0,1708
Длина связи C–H, нм	0,1081	0,1082	0,1095	0,1084
Длина связи Si–H, нм	0,1473	0,1467	0,1484	0,1496
Угол H–C–H, градус	115,5	116,2	116,1	115,5
Угол H–Si–H, градус	114,7	114,7	114,9	114,8

Таблица 2

Геометрические параметры в молекуле метилсилилена для синглетного состояния при температуре 298 К

Геометрические параметры	Значения параметров, полученных методом			
	V3Lyp/6-311+G**	MP2/6-311+G**	Aug-cc-pVDZ	данные из работы [15]
Длина связи C–Si, нм	0,1901	0,1893	0,1930	0,1910
Длина связи C–H, нм	0,1088	0,1087	0,1100	0,1092
Длина связи Si–H, нм	0,1523	0,1514	0,1538	0,1532
Угол H–C–Si, градус	113,6	113,7	113,7	113,5
Угол H–Si–C, градус	94,7	94,5	94,4	94,4

Таблица 3

Геометрические параметры в молекуле силилкарбена для триплетного состояния при температуре 298 К

Геометрические параметры	Значения параметров, полученных методом			
	V3Lyp/6-311+G**	MP2/6-311+G**	Aug-cc-pVDZ	данные из работы [15]
Длина связи C–Si, нм	0,1808	0,1820	0,1856	0,1817
Длина связи C–H, нм	0,1076	0,1075	0,1095	0,1079
Длина связи Si–H, нм	0,1484	0,1476	0,1495	0,1489
Угол H–C–Si, градус	159,3	152,2	148,8	157,4

При сравнении геометрических параметров для силаэтилена, рассчитанных авторами данной статьи методом V3Lyp/6-311+G^{**}, с результатами, полученными в работе [15], видна небольшая разница в значениях длин связей и межатомных углов. По-видимому, отклонение вызвано использованием в расчетах добавленной диффузионной функции в виде (3df, 3pd). Такое отклонение также заметно для метилсилилена (табл. 2) и силилкарбена (табл. 3). Использование в расчетах базисных наборов MP2 и cc-pVDZ приводит к изменению длины связи C–Si в структуре силаэтилена по сравнению с результатами, полученными в работе [15]. Для молекулы метилсилилена в синглетном состоянии применение базисного набора MP2 ведет к снижению длины связи. В структуре силилкарбена для триплетного состояния при расчетах с помощью базисных наборов MP2 и cc-pVDZ наблюдается увеличение длины связи C–Si на 0,2 и 2,1 % соответственно по сравнению с данными, полученными в работе [15]. При сравнении длины связей C–Si для силаэтилена и метилсилилена видна существенная разница, которая обусловлена возникновением двойной связи между этими атомами.

Расчеты показали, что молекула силилкарбена в триплетном состоянии энергетически более выгодна в данной системе. Для образования силилкарбена в синглетном состоянии требуется на 82,9 кДж/моль энергии больше по сравнению с триплетным состоянием.

При рассмотрении механизма начальной химической реакции образования изомеров в работе [15] попытки обнаружить расчетным путем структуру переходного состояния оказались безуспешными. Авторами данной статьи проведено более детальное исследование для поиска структуры переходного состояния при взаимодействии кремния и метана. На рис. 2 представлены структурные формулы молекулы переходного состояния. По данным работы [15] такая структура должна быть линейного вида – атом кремния присоединяется к углероду в метане через атом водорода. Однако такая связь не может быть получена, так как атом водорода способен образовать только одну σ -связь.

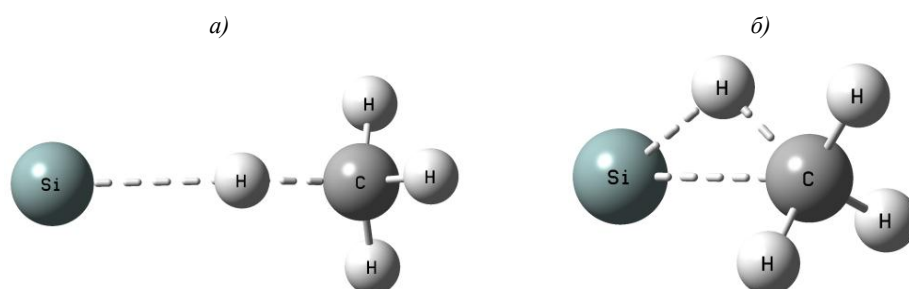


Рис. 2. Структурные формулы молекулы переходного состояния по данным работы [15] (а) и по расчету, сделанному в данной работе (б)

В предложенной авторами данной статьи структуре переходного состояния атом кремния присоединяется к метану посредством двухэлектронной трехцентровой связи. Исходя из этого предположения, методами $B3LYP/6-311+G^{**}$ и $MP2/6-311+G^{**}$ рассчитана структура переходного состояния (соединение ПС1), находящаяся в синглетном состоянии. Методом $MP2/6-311+G^{**}$ определено, что в структуре переходного состояния длина связи Si–H составляет 0,1663 нм, длина связи C–H: 0,1253 нм, угол Si–H–C: 104,7 градуса.

Энергетические характеристики изомеров и структур переходного состояния рассчитаны по теории функционала плотности с базисным набором Маклина–Чандлера ($B3LYP/6-311+G^{**}$). В табл. 4 представлены энергетические характеристики изомеров: полная электронная энергия, энтальпия, энергия Гиббса, энтропия.

Таблица 4

Энергетические характеристики изомеров и структур переходного состояния при температуре 298 К

Соединение	Состояние	Полная электронная энергия, кДж/моль	Энтальпия, кДж/моль	Энергия Гиббса, кДж/моль	Энтропия, Дж/(моль·К)
Метилсилилен	Синглетное	-866247,56	-866245,1	-866322,5	259,7
Метилсилилен	Триплетное	-866165,10	-866162,6	-866243,1	270,1
Силилкарбен	Триплетное	-866086,04	-866083,6	-866166,2	277,3
Силаэтилен	Синглетное	-866280,39	-866277,9	-866352,7	250,7
ПС1	Синглетное	-866008,79	-866006,3	-866081,8	253,3
ПС2	Синглетное	-866127,95	-866125,5	-866199,1	246,9
ПС3	Синглетное	-866003,12	-866000,6	-866075,7	251,6

С использованием результатов расчета полной электронной энергии для изомеров и переходных состояний построена схема превращений соединений относительно структуры 3 силэтилена (рис. 3). Наименьшей энергией в данной системе обладает силэтилен в синглетном состоянии. Это коррелирует с выводами, представленными в работе [15]. Синглетное состояние силэтилена также подтверждено в расчетах, представленных в работе [20]. Основываясь на полученных данных, можно предположить, что в начальный момент времени при взаимодействии кремния и метана образуется структура переходного состояния ПС1. Далее возможны превращения структуры ПС1 до метилсилана в синглетном состоянии 1 с выделением энергии в количестве 238,8 кДж/моль или до метилсилана в триплетном состоянии 2 с выделением 156,3 кДж/моль. Такое превращение осуществляется за счет перехода атома водорода от углерода к кремнию. Следующее превращение связано с образованием силэтилена 3 через переходное состояние структуры ПС2. Структура ПС2 может быть образована из структур 1 или 2 путем стягивания к кремнию атома водорода от углерода за счет поглощения энергии из внешней среды. Превращение ПС2→3 является экзотермическим, выделение энергии составляет 152,4 кДж/моль. Такое значение по изменению энергии коррелирует с результатами (151,7 кДж/моль), полученными в работе [15]. Возможно также образование из силэтилена 3 структуры переходного состояния ПС3 в синглетном состоянии за счет стягивания очередного атома водорода от углерода. Однако для этого требуются значительные затраты энергии (277,3 кДж/моль), что превышает уровень начальной структуры ПС1. Последним превращением можно считать образование силилкарбена 4 в триплетном состоянии из структуры ПС3 за счет перехода атома водорода к кремнию. Превращение ПС3→4 сопровождается выделением энергии ~83 кДж/моль.

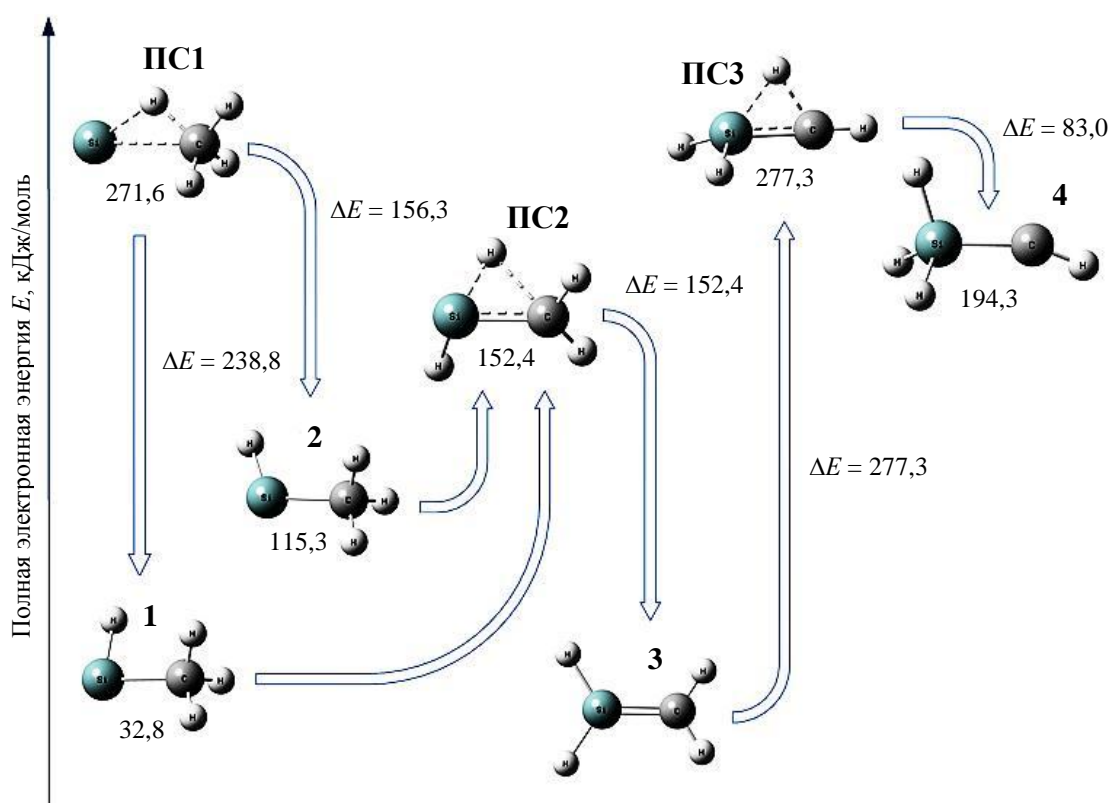


Рис. 3. Схема превращений изомеров и переходных состояний (ПС) относительно энергии силэтилена

Таким образом, по результатам проведенных расчетов исследуемые изомеры можно расположить в последовательности по принципу снижения термодинамической вероятности образования: силаэтилен (синглет), метилсилилен (синглет), метилсилилен (триплет), силилкарбен (триплет).

Заключения

Методом квантовой химии исследованы структурные превращения соединений системы «метилсилилен–силаэтилен–силилкарбен». Исходя из принципа минимальной энергии установлено, что наиболее стабильным изомером является силаэтилен в синглетном состоянии. Следующим по стабильности среди изомеров является метилсилилен в том же состоянии. Разница полной электронной энергии относительно силаэтилена составляет 32,8 кДж/моль. Наименее стабильным изомером определен силилкарбен в триплетном состоянии с разницей полной электронной энергии 194,3 кДж/моль относительно силаэтилена.

Установлено, что метилсилилен и силилкарбен образуются из силаэтилена с преодолением энергетических барьеров при формировании структур переходного состояния. С термодинамической точки зрения наибольшая вероятность характерна для структурной изомеризации «силаэтилен–метилсилилен». В результате расчета выявлена наиболее вероятная начальная структура переходного состояния, которая образуется при взаимодействии кремния и метана.

Список источников

1. Каблов Е.Н., Щетанов Б.В., Большакова А.Н., Ефимочкин И.Ю., Щербаков Е.М. Ниобий, армированный волокнами α -Al₂O₃. Часть 1. Двухкомпонентные композиции // *Авиационные материалы и технологии*. 2021. № 3 (64). Ст. 06. URL: <http://www.journal.viam.ru> (дата обращения: 12.04.2023). DOI: 10.18577/2713-0193-2021-0-3-58-77.
2. Каблов Е.Н., Лаптев А.Б., Прокопенко А.Н., Гуляев А.И. Релаксация полимерных композиционных материалов под длительным действием статической нагрузки и климата (обзор). Часть 1. Связующие // *Авиационные материалы и технологии*. 2021. № 4 (65). Ст. 08. URL: <http://www.journal.viam.ru> (дата обращения: 12.04.2023). DOI: 10.18577/2713-0193-2021-0-4-70-80.
3. Каблов Е.Н., Ечин А.Б., Бондаренко Ю.А. История развития технологии направленной кристаллизации и оборудования для литья лопаток газотурбинных двигателей // *Труды ВИАМ*. 2020. № 3 (87). Ст. 01. URL: <http://www.viam-works.ru> (дата обращения: 12.04.2023). DOI: 10.18577/2307-6046-2020-0-3-3-12.
4. Eliel E.L., Wilen S.H. *Stereochemistry of organic compounds*. NY: John Wiley and Sons Inc., 1994. 1296 p.
5. Сидоров Д.В., Шавнев А.А., Солодкин П.В., Кирилин А.Д. Квантово-химический расчет межмолекулярного взаимодействия метилсилана в процессе пиролиза // *Труды ВИАМ*. 2019. № 11 (83). Ст. 05. URL: <http://www.viam-works.ru> (дата обращения: 10.04.2023). DOI: 10.18577/2307-6046-2019-0-11-44-52.
6. Мартынова Н.С., Елисеев С.А., Новиков Ю.Н., Филянин П.Е. Низкоэнергетичная ядерная изомерия // *Вестник СПбГУ. Физика и химия*. 2017. Т. 4 (62). Вып. 3. С. 236–248.
7. Audi G., Bersillon O., Blachot J., Wapstra A. The NUBASE evaluation of nuclear and decay properties // *Nuclear Physics A*. 2003. Vol. 729. P. 3–128.
8. Шибает В.П., Бобровский А.Ю. Жидкокристаллические полимеры: тенденции развития и фотоуправляемые материалы // *Успехи химии*. 2017. Т. 86 (11). С. 1024–1072.
9. Смирнова И.Г., Гильдеева Г.Н., Кулес В.Г. Оптическая изомерия и биологическая активность лекарственных средств // *Вестник московского университета. Серия 2. Химия*. 2012. Т. 53. С. 147–156.

10. Singhal S., Mehta J., Desikan R. Antitumor activity of thalidomide in refractory multiple myeloma // *The new England journal of medicine*. 1999. Vol. 341 (21). P. 1565–1571.
11. Быков А.В., Матвеева В.Г., Сульман Э.М. Некоторые подходы к асимметрическому каталитическому гидрированию // *Химическая технология*. 2006. Т. 49. С. 64–68.
12. Busacca A., Fandrick R., Song J. The growing impact of catalysis in the pharmaceutical industry // *Advanced synthesis catalysis*. 2011. Vol. 353. P. 1825–1864.
13. Adam D. Chemistry prize tailor-made reactions // *Nature*. 2001. Vol. 413. P. 661.
14. Сафонов В.В. Структура, свойства и применение кремнийорганических соединений. М.: РГУ им. А.Н. Косыгина, 2018. 160 с.
15. Maier G., Reisenauer H., Glatthaar J. Reactions of silicon atoms with methane and silane in solid argon: a matrix-spectroscopic study // *Chemistry – A European Journal*. 2002. Vol. 8. P. 4383–4391.
16. Gordon M. The methylsilylene-silaethylene-silylcarbene isomerization // *Chemical physics letters*. 1978. Vol. 54. P. 9–13.
17. Hopkinson A., Lien M., Csizmadia I. Ab initio calculation on the singlet and triplet energy surface for CSiH_2 // *Chemical physics letters*. 1983. Vol. 95. P. 232–234.
18. Wiberg B. Basis set effect on calculated geometries: 6-311++G** vs. aug-cc-pVDZ // *Journal of computational chemistry*. 2004. Vol. 25. P. 1342–1346.
19. Frisch M.J., Trucks G.W., Schlegel H.B. et al. Gaussian-09: revision A.02. Wallingford–Wallington CT: Gaussian Inc., 2009. 12 p.
20. Сидоров Д.В., Кирилин А.Д., Шавнев А.А., Мелентьев А.А., Флотский А.А., Грунин А.А. Переходное состояние в химической реакции образования силэтилена из метилсилана // *Труды ВИАМ*. 2022. № 9 (115). Ст. 09. URL: <http://www.viam-works.ru> (дата обращения: 11.04.2023). DOI: 10.18577/2307-6046-2022-0-9-111-120.

References

1. Kablov E.N., Shchetanov B.V., Bolshakova A.N., Efimochkin I.Yu., Shcherbakov E.M. Niobium reinforced by $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ fibers. Part 1. Two-Component Compositions. *Aviation materials and technologies*, 2021, no. 3 (64), paper no. 06. Available at: <http://www.journal.viam.ru> (accessed: April 12, 2023). DOI: 10.18577/2071-9140-2021-0-3-58-77.
2. Kablov E.N., Laptev A.B., Prokopenko A.N., Gulyaev A.I. Relaxation of polymeric composite materials under the prolonged action of static load and climate (review). Part 1. Binders. *Aviation materials and technologies*, 2021, no. 4 (65), paper no. 08. Available at: <http://www.journal.viam.ru> (accessed: April 12, 2023). DOI: 10.18577/2071-9140-2021-0-4-70-80.
3. Kablov E.N., Echin A.B., Bondarenko Yu.A. History of development of directional crystallization technology and equipment for casting blades of gas turbine engines. *Trudy VIAM*, 2020, no. 3 (87), paper no. 01. Available at: <http://www.viam-works.ru> (accessed: April 12, 2023). DOI: 10.18577/2307-6046-2020-0-3-3-12.
4. Eliel E.L., Wilen S.H. *Stereochemistry of organic compounds*. NY: John Wiley and Sons Inc., 1994, 1296 p.
5. Sidorov D.V., Schavnev A.A., Solodkin P.V., Kirilin A.D. Quantum chemical calculation of intermolecular interaction methylsilane molecules during the pyrolysis process. *Trudy VIAM*, 2019, no. 11 (83), paper no. 5. Available at: <http://www.viam-works.ru> (accessed: April 10, 2023). DOI: 10.18577/2307-6046-2019-0-11-44-52.
6. Martynova N.S., Eliseev S.A., Novikov Y.N., Filyanin P.E. Low-energy nuclear isomerism. *Vestnik SPbGU. Fizika i khimiya*, 2017, vol. 4 (62), is. 3, pp. 236–248.
7. Audi G., Bersillon O., Blachot J., Wapstra A. The NUBASE evaluation of nuclear and decay properties. *Nuclear Physics A*, 2003, vol. 729, pp. 3–128.
8. Shibaev V.P., Bobrovsky A.Yu. Liquid crystalline polymers: development trends and photo - controlled materials. *Uspekhi khimii*, 2017, vol. 86 (11), pp. 1024–1072.
9. Smirnova I.G., Gildeeva G.N., Kukes V.G. Optical isomeria and biological activity of drugs. *Vestnik moskovskogo universiteta. Seriya 2. Khimiya*, 2012, vol. 53, pp. 147–156.

10. Singhal S., Mehta J., Desikan R. Antitumor activity of thalidomide in refractory multiple myeloma. *The New England Journal of Medicine*, 1999, vol. 341 (21), pp. 1565–1571.
11. Bykov A.V., Matveeva V.G., Sulman E.M. Some approaches to asymmetric catalytic hydration. *Khimicheskaya tekhnologiya*, 2006, vol. 49, pp. 64–68.
12. Busacca A., Fandrick R., Song J. The growing impact of catalysis in the pharmaceutical industry. *Advanced synthesis catalysis*, 2011, vol. 353, pp. 1825–1864.
13. Adam D. Chemistry prize tailor-made reactions. *Nature*, 2001, vol. 413, p. 661.
14. Safonov V.V. *The structure, properties and use of silicon compounds*. Moscow: RGU im. A.N. Kosygina, 2018, 160 p.
15. Maier G., Reisenauer H., Glatthaar J. Reactions of silicon atoms with methane and silane in solid argon: a matrix-spectroscopic study. *Chemistry – A European Journal*, 2002, vol. 8, pp. 4383–4391.
16. Gordon M. The methylsilylene-silaethylene-silylcarbene isomerization. *Chemical Physics Letters*, 1978, vol. 54, pp. 9–13.
17. Hopkinson A., Lien M., Csizmadia I. Ab initio calculation on the singlet and triplet energy surface for CSiH₂. *Chemical Physics Letters*, 1983, vol. 95, pp. 232–234.
18. Wiberg B. Basis set effect on calculated geometries: 6-311++G** vs. aug-cc-pVDZ. *Journal of computational chemistry*, 2004, vol. 25, pp. 1342–1346.
19. Frisch M.J., Trucks G.W., Schlegel H.B. et al. *Gaussian-09: revision A.02*. Wallingford–Wallington CT: Gaussian Inc., 2009, 12 p.
20. Sidorov D.V., Kirilin A.D., Schavnev A.A., Melentev A.A., Flotskiy A.A., Grunin A.A. Transition state chemical reaction producing silaethylene from methylsilane. *Trudy VIAM*, 2022, no. 9 (115), paper no. 09. Available at: <http://www.viam-works.ru> (accessed: April 11, 2023). DOI: 10.18577/2307-6046-2022-0-9-111-120.

Информация об авторах

Сидоров Денис Викторович, ведущий научный сотрудник, к.т.н., НИЦ «Курчатовский институт» – ВИАМ, admin@viam.ru

Кирилин Алексей Дмитриевич, профессор, д.х.н., РТУ МИРЭА, ИТХТ им. М.В. Ломоносова, mirea@mirea.ru

Грунин Алексей Александрович, инженер, НИЦ «Курчатовский институт» – ВИАМ, admin@viam.ru

Шавнев Андрей Александрович, заместитель начальника Научно-исследовательского отделения, к.т.н., НИЦ «Курчатовский институт» – ВИАМ, admin@viam.ru

Information about the authors

Denis V. Sidorov, Leading Researcher, Candidate of Sciences (Tech.), NRC «Kurchatov Institute» – VIAM, admin@viam.ru

Alexey D. Kirilin, Professor, Doctor of Sciences (Chem.), MIREA – Russian Technological University, IFCT named after M.V. Lomonosov, mirea@mirea.ru

Alexey A. Grunin, Engineer, NRC «Kurchatov Institute» – VIAM, admin@viam.ru

Andrey A. Schavnev, Deputy Head of Research and Development Department, Candidate of Sciences (Tech.), NRC «Kurchatov Institute» – VIAM, admin@viam.ru

Статья поступила в редакцию 30.05.2023; получена после доработки 03.07.2023; одобрена и принята к публикации после рецензирования 03.07.2023.
The article was submitted 30.05.2023; received in revised form 03.07.2023; approved and accepted for publication after reviewing 03.07.2023.