

## 1.

Кристаллохимия — наука о количественных характеристиках пространственного расположения атомов в кристаллах химических веществ, своего рода синтез кристаллографии и стереохимии. Ее рождение и расцвет неразрывно связаны с открытием рентгеновской дифракции.

За более чем полувековую историю использования рентгеновского анализа выяснено строение большинства веществ и создан фундамент для теоретических построений квантовой химии, установлены структурные закономерности взаимного превращения веществ при различных внешних воздействиях и фазовых переходах, открыт молекулярный механизм наследственности и способы функционирования важнейших биополимеров. Давно уже стало аксиомой, что количественный структурный анализ — это тот ключ, с помощью которого удается понять молекулярную, микроскопическую сущность наиболее сложных процессов как в живой, так и в неживой природе.

Но у рентгеновских лучей есть один существенный недостаток — они слабо рассеиваются атомами водорода. В итоге «портреты» внутреннего строения веществ получаются неполными — на них атомы водорода, как правило, не видны. Степень неполноты может быть различной: в биологических объектах, например, водород может составлять половину и более от общего числа атомов. Но дело не только в количестве. Во многих случаях данный химический элемент играет центральную роль в проявлении таких свойств веществ, как кислотность или основность в некоторых видах катализа. Он осуществляет особый вид межмолекулярного взаимодействия — водородную связь. С его помощью получают самые высокие на земле температуры и значения удельной тяги ракетных двигателей космических аппаратов. С этим элементом специалисты связывают возможность построения универсальной энерготехнологической системы, решающей проблемы транспорта энергии, ее хранения и экологичного использования, не загрязняющего среду вредными отходами и выбросами — так называемой водородной энергетики. Ясно, что структурная химия водорода в настоящее время — крупнейшая и труднейшая из проблем кристаллохимии. И ясно и то, что она выходит за пределы часто академической науки.

### Что мы знаем и чего не знаем о водороде

Водород был открыт в 1766 г. Генри Кавендишем при пропускании паров воды над раскаленным углем. Поскольку этот химический элемент входит в состав воды, а воды на Земле много, то и водорода, соответственно, тоже. Точные подсчеты показывают, что в среднем на каждые 100 атомов 17 — водородные. Какое же было удивление ученых, обнаруживших, что этот легчайший по весу и первый по счету в системе элементов Д. И. Менделеева химический элемент — самый распространенный и в Космосе. Преимущественно из водорода состоят звезды и туманности, наше Солнце и даже планеты гиганты Юпитер, Сатурн и другие.

На Земле весь водород входит в состав химических соединений. Основным источником его получения — реакции конверсии природного газа и электролиза воды. Мировое производство водорода превышает 30 млн тонн в год.

Химические свойства водорода исключительно своеобразны. При взаимодействии с щелочными и щелочноземельными металлами он образует сообразные соединения, где его валентность — 1 и по многим свойствам пролагает себя как типичный галоген. С бором и алюминием водород дает удивительные конденсированные и полимерные соединения, называемые электронодефицитными. Поражительно, что многие переходные и платиновые металлы как бы адсорбируют водород в огромных количествах, при этом металлические свойства заметно не изменяются. Природа таких гидридов металлов до сих пор во многом неясна.

Упомянутые соединения — своего рода «экзотика» и в обычных условиях они неустойчивы. А те, в которых водород проявляет валентность +1, более стабильны. К ним относятся соединения с углеродом (метан и углеводороды), азотом (аммиак), кислородом (вода), галогенами (кислоты фтористоводородная или плавиковая, хлористоводородная или соляная и т. д.). Они изучены гораздо лучше. Вместе с тем их кристаллохимия в некоторых отношениях уникальна и не имеет аналогов. Причина кроется в следующем.

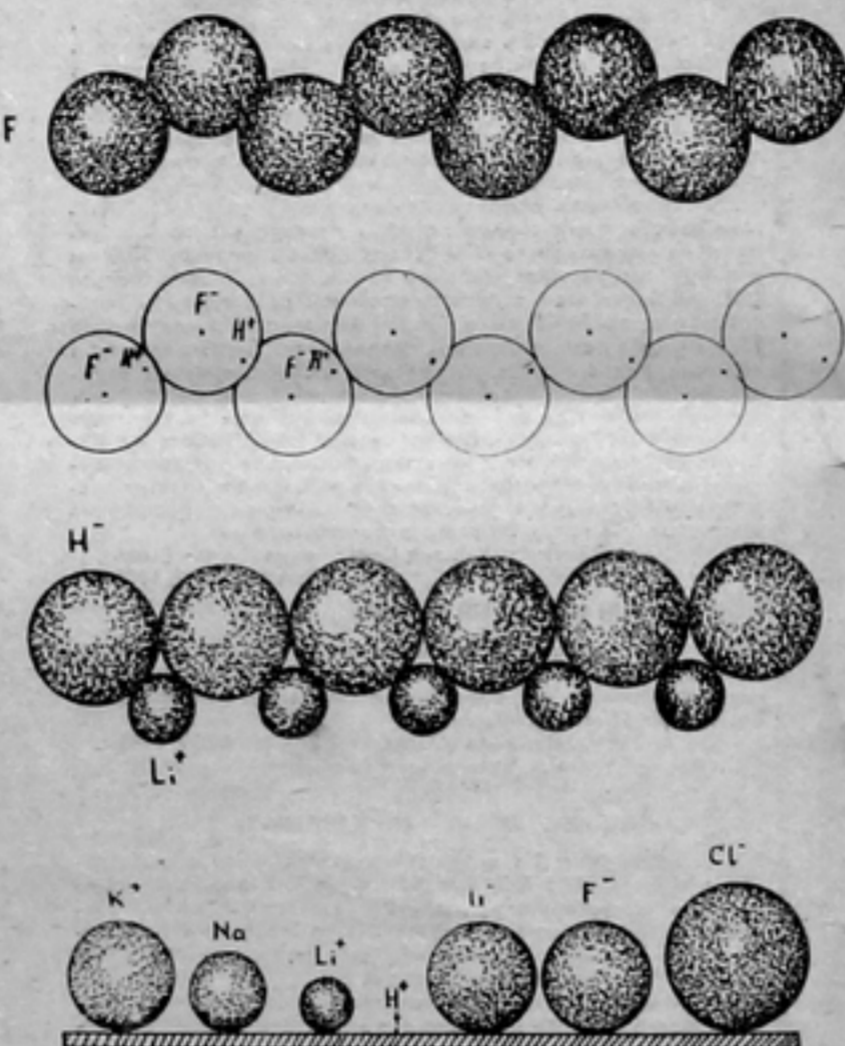
Фундаментальным для кристаллохимии является представление об атомных и ионных радиусах элементов. Любое соединение можно условно представить в виде некоторой модели, в которой шарик-атом или ионы соединяются между собой в строго определенной пространственной структуре. Это справедливо для любых атомов и ионов, за исключением водорода в состоянии окисления —1. Лишним своего единственного электрона атом водорода формально превращается в катион, но фактически это всего лишь ядро атома водорода, протон, элементарная частица. Протон не имеет кристаллохимического радиуса и не может быть представлен шариком или шариком на модели данной молекулы или кристалла. В соединениях он глубоко погружается внутрь электронной оболочки аниона фтора, хлора, кислорода и т. д., почти не нарушая их сферичность и размеры. В некоторых случаях протоны могут почти свободно путешествовать по кристаллу и в этом отношении уподобляются электронам проводимости.

Реальная картина кристаллохимии водорода усложняется тем, что в действительности связи водорода с другими частицами, конечно же, не чисто ионные, а валентные состоят +1 и —1 в большой мере представляют собой идеализацию. Это значит, что анион водорода, как правило, имеет заряд где-то в интервале между —1 и 0, а его электронная оболочка отнюдь не идентична оболочке атома гелия или катиона лития, также имеющих по два электрона в наружной оболочке. Примерно то же самое относится и к катиону водорода — его эффективный заряд фактически заключен в интервале от 0 до +1 и зависит от свойств соседних частиц. Сказанное в равной мере относится и к другим элементам с переменной валентностью.

Уникальность кристаллохимии водорода состоит в том, что относительные изменения кристаллохимических размеров янов водорода в разной степени окисления во много раз больше, чем для любых других элементов. Данный аспект проблемы, как и связанный с ним вопрос об эффективных массах ионов водорода в кристаллах, пока не получил должного освещения.

Далеко не все ясно и с возможными механизмами локализации протонов, т. е. ионов водорода с близкими и +1 зарядом. На первый взгляд кажется, что их локализация целиком определяется расположением других атомов структуры. Например, в

# Кристаллохимия водорода



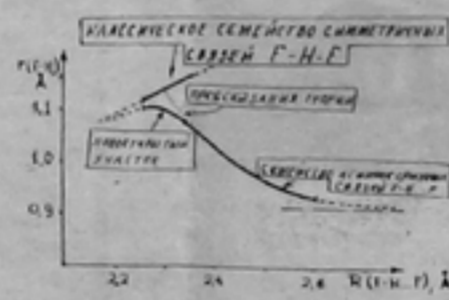
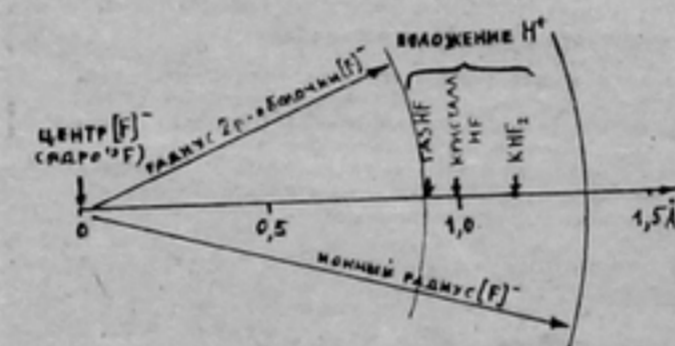
◆ Фрагмент структуры кристаллического фтористого водорода. При рентгеновском исследовании водород не был обнаружен (съемка 1954 г., Атоджи и Дилсколб, США). Координаты ядер водорода (на нижнем рисунке) в той же структуре даны по нашим данным (1970 г.).

◆ Литий гидрид (фрагмент структуры). Крупные анионы водорода занимают 2/3 пространства в кристалле.

◆ Наиболее типичные однозарядные катионы и анионы элементов, близких к водороду. Сравнение размеров ионов показывает, что катион водорода в кристаллохимическом отношении не может быть сопоставлен с калием-либо ином ионом.

◆ Уникальное свойство катиона H<sup>+</sup> заключается в том, что он погружается внутрь электронной оболочки аниона. На рисунке показаны возможные пределы погружения протона в анион фтора в трех различных соединениях.

◆ Положение атома водорода зависит не только от длины водородной связи, но и от симметрии окружения. Этот вывод основывается на новейших данных, полученных в нашей лаборатории при изучении очень коротких связей.



системе из двух атомов А и В протон должен размещаться по середине, чтобы свести до минимума отталкивание от ядер и сделать максимальным притяжение к электронным оболочкам. Но если учесть поляризующее влияние протона на электронное движение, то окажется, что более выгодно сместить протон по направлению к А или В в область большей электронной плотности. Поляризация затрагивает и положение ядер А и В — они при этом сближаются. Возникает, как говорят, водородная связь.

Особенно сложной представляется картина поляризующего влияния протона на многоатомные образования в кристаллах и растворах. Во многом это положение на полноразмерную, представляющую собой комбинацию электрона и ловушки, созданной электронами в кристалле за счет поляризации среды. Однако протон много тяжелее электрона, поэтому аналогия носит поверхностный характер.

Очевидно, необходимы экспериментальные исследования свойств самого водорода и его роли в возникновении той или иной картины его локализации с одной стороны и роли ближайшего и более дальнего окружения — с другой.

## Экспериментальные методы кристаллохимии водорода

Фундаментальное решение проблем кристаллохимии водорода связывается с освоением методов дифракции электронов и нейтронов. Здесь возникают трудности технического порядка. Электроны исключительно сильно поглощаются, поэтому возможно изучение лишь тончайших пленок либо поверхностных слоев. С нейтронами тоже есть сложности, главным образом, из-за непомерной стоимости исследований. Для того чтобы дифракционный эксперимент на нейтронах можно было про-

вести, где с его помощью были найдены качественные структурные характеристики сотен тысяч органических веществ. Решение комплекса задач структурного ЯМР требовало преодоления как технических трудностей, так и решения сложных теоретических проблем, многие из которых были нетривиальными. В итоге удалось разработать комплекс методов для получения точных значений межатоминых расстояний и других структурных параметров на основе ЯМР твердого тела, причем некоторые являются принципиально новыми методами обработки уникальной структурной ЯМР-информации.

За последние 10—15 лет применением методики структурного ЯМР получены количественные данные по кристаллохимии водорода в сотнях объектов самой различной природы — твердых кислотах и основаниях, кристаллогидратах и цеолитах, водородсодержащих сегнетоэлектриках, глинистых минералах и цеолитах, а также в некоторых важнейших биологических полимерах — белках, полисахаридах, ДНК. В основном, это новые сведения по объектам, для которых координаты водорода ранее были не известны. Но в отдельных случаях — для гидросодалита, сегнетовой соли и некоторых кислот фторидов полученные данные с несомненностью показали ошибочность более ранних нейтрондифракционных расшифровок. Экспериментатору особенно приятно отметить, когда спустя определенное время приходит подтверждение справедливости предлагаемых исправлений более ранних расшифровок — ведь ЯМР и дифракционные методы исходят из совершенно различных принципов, совершенно независимы, и совпадение результатов, несомненно, свидетельствует об истинности.

Одним из возможных дальнейших шагов может быть некоторое объединение методов ЯМР и нейтрондифракции в усилении по определению протонной структуры наиболее сложных объектов, ведь они могут оказаться и взаимодополняющими. Совместно с представителями ИЛЛ в качестве первого опыта намечено исследование протонной структуры сложнейших минералов — широкопористых цеолитов. Первые итоги подтверждают перспективность и исключительную конструктивность таких подходов. В перспективе — изучение более сложных неорганических и других объектов.

В любом варианте эксперименты по точной локализации протонов с использованием дифракции нейтронов останутся уникальными до тех пор, пока в качестве источника будет ядерный реактор. Принципиальным решением проблемы могла бы стать разработка «нейтронной трубы», аналога рентгеновской. Созданная на базе современных мощных и компактных ускорителей «нейтронная трубка» была бы несравнимо дешевле специализированного реактора и немаломо способнее в обращении, чем обычный рентгеновский аппарат.

## Водородная СВЯЗЬ

Это явление открыто более 100 лет назад и давно уже получены несомненные доказательства его огромной роли в химическом и физическом поведении веществ. Интерес к водородной связи обострился после открытия Уотсона и Криком структуры ДНК и того факта, что водородная связь имеет ключевое значение для формирования строения и способа функционирования.

Центральным вопросом здесь является локализация протона. До проведения структурных исследований удавалось ответить лишь на вопрос о симметрии

связи. Были обнаружены кристаллы со строго симметричными водородными связями, как бы фториды, а с явным асимметричным, как лед и многие другие. Дифракция нейтронов дала точные данные о положении протона более чем в 100 объектах, в которых имеются связи между атомами кислорода O—H...O. Эти сведения были получены несколькими десятками исследователей за 15—20 лет. В нашей лаборатории есть параллельные данные — для связей между ионами фтора (около 15—20 объектов), причем, достигнутая точность локализации водорода на основе ЯМР не уступает точности нейтрондифракционного исследования. Полученные для двух семейств данные являются предметом пристального внимания и изучения, в том числе в монографической литературе. Предварительные итоги заключаются в следующем.

При изменении расстояния А—В положение протона из связи А—H...В может оставаться симметричным относительно А и В в довольно широких пределах вариации расстояния. Наряду с этим при тех же значении расстояния протон может находиться в асимметричном положении. В этом случае положение протона является сложной функцией расстояния: для самых коротких оно близко к центральному, но с увеличением расстояния А—В расстояние А—H...В достигает некоторого предела, начинает сокращаться, асимптотически приближаясь к значению для свободной молекулы (в газовой фазе). Новым результатом здесь является то, что два семейства связей не переходят друг в друга, а явные для симметричных и асимметричных водородных связей не «сшиваются», а лишь асимптотически приближаются друг к другу.

Такой характер зависимости положения водорода от длины связи представляется странным и неолоданным. Очень трудно понять причину неоднозначности положения протона для очень коротких связей А—H...В — ведь симметричное и асимметричное положение в этом случае непосредственно примыкают друг к другу. Это может означать, что два варианта получаются как решения разного типа для уравнения Шредингера трехцентровой системы А—H...В. Но возможно и другое объяснение, связанное с влиянием окружения, или, как говорят, «внешней сферы». Мы исследовали эту возможность экспериментально и обнаружили, что связь остается симметричной, несмотря на искажение ближайшего окружения, но при условии, что кристалл в целом сохраняет высокую симметрию (это легко осуществляется в разупорядоченных системах). Следовательно, для положения атома водорода на связи А—H...В важно не только расстояние между А и В, но и симметрия колебательных мод кристалла. Вот наглядно демонстрируется тонкая игра эффектов физической и химической природы в столь важном явлении, как водородная связь.

Главный вывод проведенных исследований заключается в том, что положение атома водорода в кристаллических решетках чувствительно к ближайшему и дальнему порядку в структуре вещества. Это открывает путь к пониманию механизмов удерживания водорода и управления его перемещением.

В следующей статье будут представлены работы лаборатории в области кристаллохимии водорода при изучении явлений протонизации, кооперативных процессов и транспорта в биомембранах.

С. ГАБУДА,  
заведующий лабораторией  
радиоспектроскопии Института неорганической химии  
СО АН СССР, доктор физико-математических наук,  
г. НОВОСИБИРСК

ФУНДАМЕНТАЛЬНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ

2.

# Кристаллохимия водорода

## НОВЫЕ НЕОРГАНИЧЕСКИЕ МАТЕРИАЛЫ И ВОДОРОДНАЯ СВЯЗЬ

Мы живем в век синтетических материалов, причем на их производство тратим до одной трети энергетических ресурсов. С ростом стоимости нефти все большее внимание привлекают также материалы, на производство которых не требуются высокие температуры и дефицитное сырье. Эти новые материалы родственны классическим неорганическим полимерам — цементу и керамике.

В чем же их секрет и преимущество перед органическими? Дело в том, что это прежде всего силикаты. Скелет их образован чередующимися атомами кремния и кислорода. Полимеризация иногда протекает уже при комнатной температуре (цемент). Для получения керамики применяют обжиг. Но используемые температуры — 600°С — много ниже необходимых для плавления компонентов. В итоге энергия расходуется в 5—10 раз меньше, чем при производстве пластмасс, и в 30 раз меньше, чем при производстве стали. При этом не нужны дорогостоящие катализаторы — для неорганической полимеризации необходима только вода, и, что важно — нет вредных отходов.

Естественно, что кристаллохимия сосредоточила свое внимание на силикатах. Исследования цементных материалов в Институте кристаллографии АН СССР возглавлял академик Н. В. Белов. Они привели к важным открытиям, имеющим как теоретическое, так и практическое значение.

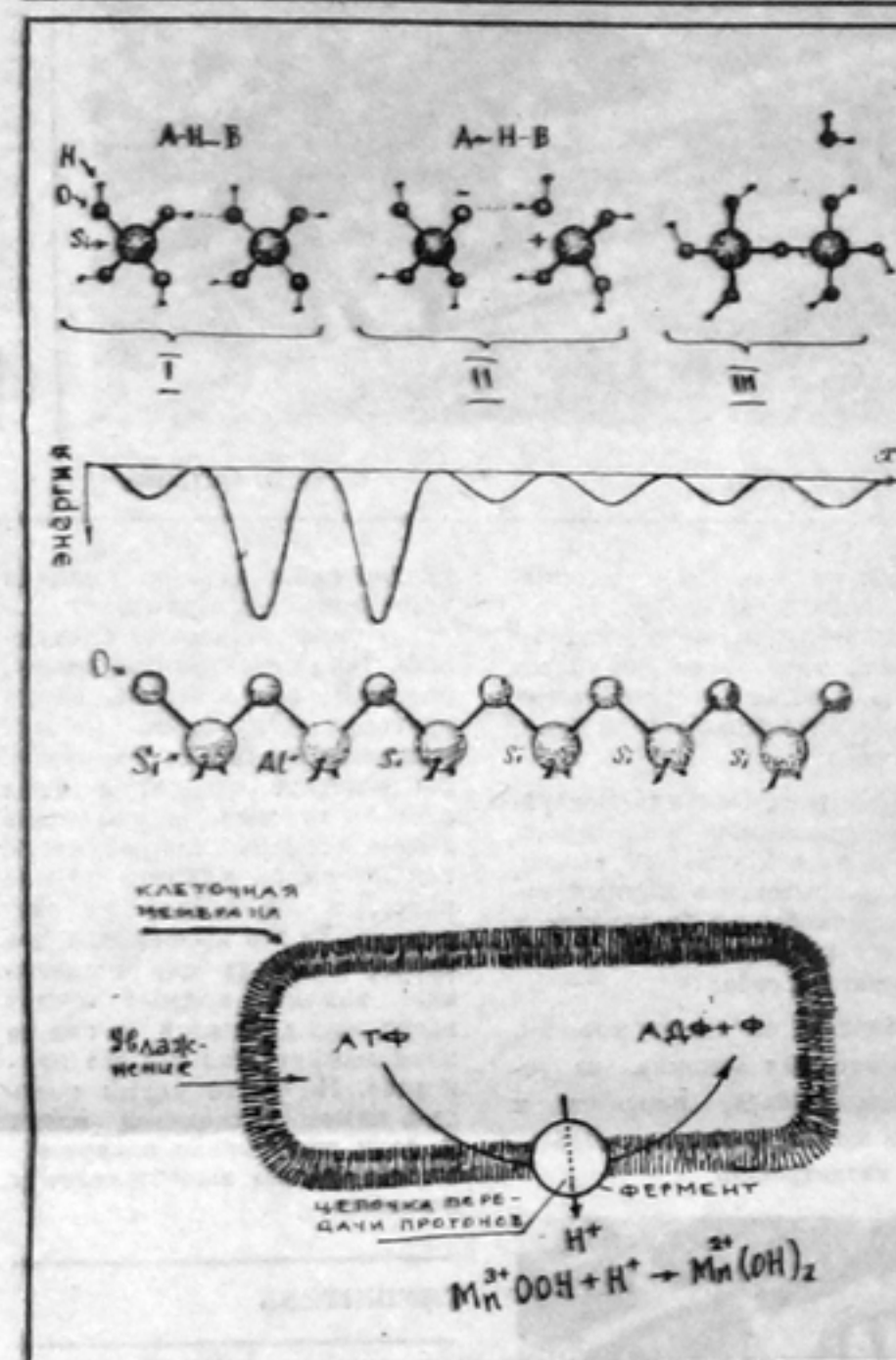
Хотя нужно заметить, что до сих пор остаются неясными характер и механизмы реакций, приводящих к образованию гидросиликатов кальция — основы цемента. И дело тут не только в трудности локализации водорода, но и в сложной его динамике, уследить за которой традиционными средствами не удается. Все это явилось стимулом к формулировке программы изучения роли водородной связи в неорганической полимеризации различными методами, прежде всего ЯМР.

Ниже излагаются некоторые результаты, полученные в нашей лаборатории в рамках этой программы.

### ПРОБЛЕМА ПРОТОЛИЗА

Полимеризация силикатов кальция и образование цемента или керамики включает несколько различных процессов, главным из которых является протолитиз или разложение молекулы воды на поверхности силикатных кристалликов. В итоге окислы превращаются в гидроксиды кальция и кремния, взаимодействие между которыми и перегруппировка атомов водорода приводит в конечном итоге к полимеризации. Протолитиз — одно из самых таинственных звеньев в рассматриваемом процессе.

Для исследования элементарного акта передачи атома водорода от молекулы воды к другим частицам мы исследовали возможности магнитного резонанса протонов и дейтронов. Изучались процессы диссоциации воды в тонких мономолекулярных пленках на поверхности кристаллов алюмосиликатов. Было установлено, что скорость протонного обмена в стационарных равновесных условиях в тонкой пленке такая же, как и в обычной воде. При повышении температуры скорость обмена увеличивается во много раз как в чистой воде, так и в тонкопленочной



фазе, однако в монослое она во много раз больше, чем в обычной воде, и достигает максимальных значений в тонких пленках с высоким содержанием алюминия в подложке. Чисто внешне это проявляется в увеличении скорости неорганической полимеризации силикатов, содержащих окислы алюминия.

Увеличение скорости протонного обмена имеет тенденцию к снижению, если образец выдерживается при заданной температуре. Это значит, что здесь важна неравновесность системы. Измерив с помощью специальных методов коэффициенты теплового расширения в пленке воды и в твердой подложке, мы обнаружили, что межмолекулярные расстояния в пленке воды при повышении температуры увеличиваются быстрее, чем в поверхностном слое кристалла. Это значит, что нагрев ведет обязательно к нарушению согласованности между пленкой и подложкой, что и приводит, вероятно всего, к увеличению степени диссоциации воды.

Точные измерения положения атомов водорода на связях O—H...O показали, что небольшое увеличение расстояний O—O за счет теплового расширения сопровождается лишь незначительным (на пределе чувствительности) смещением протонов.

Отсюда следует, что только внешне по отношению к водородной связи факторы — электростатические поля ионов поверхности алюмосиликатного кристалла, переводят водородную связь из состояния A...H...B в состояние A...H—B, причем A — атом кислорода воды, а B — атом кислорода либо другой молекулы воды, либо окислов кальция, кремния или алюминия. Здесь заканчивается первый и самый важный этап процесса. Дальнейшие стадии — это формирование кристалликов гидроксидов кальция, распад кремниевой кислоты с выпадением полимерного силиката и присоединение к силикатным (кремнийкислород-

ным) тетраэдрам алюмоокислородных радикалов с образованием алюмокремнекислородного полимерного (трехмерного) каркаса, пронизанного каналами и слоями с кристаллизационной водой.

### ПРОТОННАЯ И МОЛЕКУЛЯРНАЯ ПОДВИЖНОСТЬ В СИЛИКАТАХ

Вода в глинах, цемента, цеолитах привлекает внимание как низкомолекулярная (одно-, двух-, а иногда и нульмерная) жидкость в очень узких каналах, слоях или полостях. Свойства ее противоположны — высокий уровень подвижности и замерзание при очень низких температурах как будто указывают на слабую ее связь. Но высокие температуры дегидратации (300—450°С) свидетельствуют об обратном. Подвижность молекул может быть предположительно сегментально упорядоченная при низких температурах, что сулит новые возможности практического применения неорганических материалов в современной технике.

Исследования перемещений атомов водорода обнаружило много неожиданного. Оказалось, что вода в силикатах при нагревании ведет себя не как инертная жидкость. При температурах 80°—100°С наряду с частичной дегидратацией в структуре протекают сложные реакции гидролиза поверхности силикатных кристаллов. Химические превращения продолжают и при дальнейшем росте температуры, вплоть до 400—450°С, когда под действием высоких температур начинается обратное явление — увеличение гидроксильных групп. Все эти процессы и растягивают упомянутое на очень широкий интервал температур, что создает иллюзию сильной связи молекул воды с поверхностью.

Механизм низкотемпературной подвижности воды в алюмосиликатах оказался связанным с разницей величин зарядов и разной акцептирующей

способностью двух сортов атомов кислорода, соединенных с алюминием и с кремнием. Были получены доказательства сильного различия связей молекул воды с двумя типами атомов кислорода как по длинам связей, так и по величинам тепловых факторов водорода. Но самым неожиданным оказалось обнаружение того факта, что молекула воды способна вокруг более прочной связи почти свободно вращаться, подобно балерине в фуэте. Но лишь при относительно высокой температуре. С понижением ее возникают упорядоченные и диалектрические аномалии, характерные для фазовых переходов второго рода или близких к ним.

Фазовые переходы с упорядочением атомов водорода молекул воды были впервые предсказаны в 1932 г. И. В. Курчатовым. Структурное исследование большинства известных сегментально упорядоченных механизмов переходов, а обнаруженные различия в механизмах перемещения атомов водорода, как правильно, всегда совпадали с направлением водородной связи A—H...B. Полная расшифровка структуры некоторых алюмосиликатов (с использованием рентгеновской и нейтронной дифракции и ЯМР) показала, что в данном случае имеет место водородное упорядочение, но атомы H перемещаются не вдоль, а поперек связи, как это предположил И. В. Курчатов.

Нагляден эксперимент по замещению водорода на дейтерий — в два раза более тяжелый изотоп. Оказалось, что амплитуда перемещений дейтронов поперек связей почти в три раза меньше, чем протонов. Такой результат полностью согласуется с предположением о формировании потенциального «желоба» для движения поперек связи.

Нагляден эксперимент по замещению водорода на дейтерий — в два раза более тяжелый изотоп. Оказалось, что амплитуда перемещений дейтронов поперек связей почти в три раза меньше, чем протонов. Такой результат полностью согласуется с предположением о формировании потенциального «желоба» для движения поперек связи.

Нагляден эксперимент по замещению водорода на дейтерий — в два раза более тяжелый изотоп. Оказалось, что амплитуда перемещений дейтронов поперек связей почти в три раза меньше, чем протонов. Такой результат полностью согласуется с предположением о формировании потенциального «желоба» для движения поперек связи.

Нагляден эксперимент по замещению водорода на дейтерий — в два раза более тяжелый изотоп. Оказалось, что амплитуда перемещений дейтронов поперек связей почти в три раза меньше, чем протонов. Такой результат полностью согласуется с предположением о формировании потенциального «желоба» для движения поперек связи.

Нагляден эксперимент по замещению водорода на дейтерий — в два раза более тяжелый изотоп. Оказалось, что амплитуда перемещений дейтронов поперек связей почти в три раза меньше, чем протонов. Такой результат полностью согласуется с предположением о формировании потенциального «желоба» для движения поперек связи.

Нагляден эксперимент по замещению водорода на дейтерий — в два раза более тяжелый изотоп. Оказалось, что амплитуда перемещений дейтронов поперек связей почти в три раза меньше, чем протонов. Такой результат полностью согласуется с предположением о формировании потенциального «желоба» для движения поперек связи.

Нагляден эксперимент по замещению водорода на дейтерий — в два раза более тяжелый изотоп. Оказалось, что амплитуда перемещений дейтронов поперек связей почти в три раза меньше, чем протонов. Такой результат полностью согласуется с предположением о формировании потенциального «желоба» для движения поперек связи.

### ТРАНСПОРТ ВОДОРОДА ЧЕРЕЗ КЛЕТОЧНУЮ МЕМБРАНУ

Полученные выводы о роли движения протонов поперек

водородных связей неожиданным образом проливают свет на природу токсичности тяжелой воды. Хорошо известно, что уже примерно стакан тяжелой воды смертелен для большинства живых существ. Этот факт не имеет до сих пор объяснения — ведь по химическим и физическим свойствам тяжелая вода почти не отличается от обычной.

Можно предположить, что «критическим» местом, где существенен вес атома водорода, является перенос его через клеточную мембрану. По общепринятой гипотезе П. Митчелла, выдвинутой более 20 лет назад, каждый акт распада молекул АТФ с выделением неорганического фосфата сопровождается выбросом протонов из клетки и освобождением энергии, запасенной в форме АТФ, что лежит в основе любых проявлений биологической активности.

В настоящее время самым трудным во всей проблеме биоэнергетики является по общему признанию структурный механизм транспорта водорода через клеточную мембрану. Мы попытались сравнить процессы движения атомов водорода в разных системах по влиянию магнетонического эффекта на это движение. В качестве модели были взяты семена пшеницы и методами ЯМР фосфора-31 и ЭПР на ионах марганца исследовалось накопление протонного насоса при прорастании. В полном соответствии с существующими представлениями при этом повышалась концентрация водорода во внеклеточной среде (увеличивалась ее кислотность). Если же для увлажнения зерен использовали тяжелую воду, то кислотность внеклеточной среды оказывалась намного меньше, хотя и не сводилась к нулю, как в убитых нагретом семенах.

Отсюда можно сделать вывод, что действительно, токсичность тяжелой воды в значительной степени может быть связана с угнетением протонных насосов. Кроме того, резкая зависимость от массы изотопа показывает, что атом водорода (протон) движется через мембрану сам по себе, то есть не в составе какой-либо молекулы. Наконец, поскольку цепочка переноса водорода была непрерывной, необходимо, чтобы транспорт осуществлялся поперек связей. Пока единственным примером такого рода перемещения являются наученные нами гидратированные алюмосиликаты, где подобное движение обеспечено особым характером распределения заряда вблизи слабого акцептора водородной связи — атома кислорода на мостиках (кремний — кислород — кремний) Si—O—Si. В биологических системах из полного спектра возможных связей O—O—O. Такие аномальные ситуации широко распространены в биомембранах — ведь липиды примерно наполовину представлены сложными эфирами, и их роль в транспорте водорода через мембрану может быть существенной.

Рассмотренные примеры иллюстрируют проблематику динамической кристаллохимии водорода, преследуемой целью дать «синтез» не только перед стартом и после финиша, но и, по возможности, восстановить картину движения. Для водорода по уже известным нам причинам это особенно важно, здесь предостережения теории менаджей, а практическая и теоретическая ценность результатов может быть большой для самых разных направлений, включая и энергетику, и биоэнергетику.

С. ГАБУДА,  
доктор физико-математических наук,  
НОВОСИБИРСК.