

РЕАКЦИИ ГАЛОГЕНЗАМЕЩЕННЫХ УКСУСНОЙ И ПРОПИОНОВОЙ КИСЛОТ С АТОМАМИ ФТОРА

© 2023 г. И. И. Морозов^{1*}, Е. С. Васильев¹, Н. И. Бутковская¹, А. Г. Сыромятников^{1, 2}, П. С. Хомякова¹, Н. Д. Волков¹, О. С. Морозова¹, С. В. Савилов^{2, 3}

¹Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семёнова Российской академии наук, Москва, Россия

²Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Москва, Россия

³Институт нефтехимического синтеза им. А.В. Топчиева Российской академии наук, Москва, Россия

*E-mail: igormrzu@gmail.com

Поступила в редакцию 11.05.2023;

после доработки 22.05.2023;

принята в печать 20.06.2023

Галогензамещенные кислоты имеют антропогенное и природное происхождение и играют важную роль в атмосферных процессах. Глобальное распространение и высокая стабильность галогензамещенных кислот вызывают беспокойство в связи с тем, что они токсичны, накапливаются в поверхностных водах и представляют угрозу для людей и экосистемы. Знание механизма реакций галогензамещенных кислот в газовой фазе позволяет объяснить и управлять многими важными процессами, протекающими в атмосфере и при горении. В настоящей работе экспериментально исследованы реакции атомарного фтора с монохлоруксусной, дихлоруксусной, трихлоруксусной, трифторуксусной и пентафторпропионовой кислотами при давлении 1 Торр. Эксперименты проводили с помощью проточного реактора, соединенного с масс-спектрометром с модулированным пучком. Методом конкурирующих реакций с привлечением имеющихся литературных данных определены константы скорости указанных реакций при комнатной температуре. Показано, что в этом ряду наиболее быстрой является реакция $F + CH_2ClCOOH$. Кроме того, для реакций $F + CF_3COOH$ и $F + C_2F_5COOH$ получены температурные зависимости констант скорости в диапазонах 258–343 и 262–343 К соответственно.

Ключевые слова: галогензамещенные кислоты, атомарный фтор, масс-спектрометрия, проточный реактор, константа скорости реакции.

DOI: 10.31857/S0207401X23100114, EDN: PHDRSC

1. ВВЕДЕНИЕ

Галогензамещенные уксусные кислоты (ГУК) присутствуют, как правило, в атмосферном воздухе, дождевой воде, системах поверхностных и сточных вод, а также в природных водоемах. Помимо природных источников галогенсодержащих соединений, существуют антропогенные источники, к которым относятся предприятия органического синтеза, гидролизные, целлюлозно-бумажные, коксохимические, лакокрасочные и фармацевтические производства. Кроме того, эти соединения возникают и при хлорировании природных вод.

Окисление галогенсодержащих углеводородов в тропосфере приводит к образованию ряда вторичных загрязняющих веществ, в том числе галогензамещенных кислот. Некоторые продукты атмосферного разложения хлорфторуглеродов, такие как трифторуксусная (ТФУК), трихлоруксусная

(ТХУК), дифторуксусная (ДФУК), дихлоруксусная (ДХУК), монофторуксусная (МФУК) и монохлоруксусная (МХУК) кислоты являются чрезвычайно токсичными веществами. Их образование представляет угрозу для окружающей среды, поскольку генерировать эти кислоты могут все классы заменителей, включая гидрофторуглероды. Формирование вредных веществ из относительно безопасных прекурсоров протекает по достаточно сложной схеме, включающей процессы в газовой и водной фазе, а также гетерогенные процессы с участием аэрозолей [1, 2].

Галогензамещенные уксусные кислоты в основном являются продуктами атмосферного разложения C2-галогенуглеродов. В работах [3, 4] была предложена общая схема превращения галогенсодержащих растворителей, в том числе этана и этилена, в ГУК в атмосфере. Например, полихлорвинил, который является одним из наи-

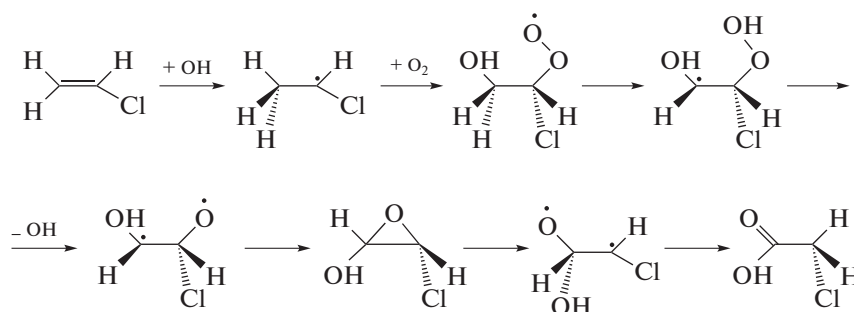


Рис. 1. Схема превращения хлорэтилена в монохлоруксусную кислоту в атмосферных условиях.

более распространенных полимеров, выпускается в больших количествах. В процессе его производства и утилизации небольшая часть хлорэтилена попадает в окружающую среду. Превращение хлорэтилена в МХУК в атмосферных условиях инициируется присоединением гидроксильного радикала к двойной связи $C=C$. Затем радикал $H_2(OH)C-C\cdot SiH$ взаимодействует с кислородом воздуха с образованием пероксирадикала. На следующем этапе радикал OH отщепляется от пероксирадикала после миграции атома H от углерода к концевому кислороду. Конечным продуктом является $CH_2ClCOOH$, который появляется в результате нескольких стадий внутренней перегруппировки. На рис. 1 приведена схема превращения хлорэтилена в МХУК в атмосферных условиях.

Поведение ГУК в окружающей среде изучено достаточно плохо. Механизм их разложения до сих пор не установлен. На эту тему ведутся пока только общие дискуссии. Фотолиз и фотокаталитическая диссоциация таких кислот рассматривались ранее в работе [5], а процессы с участием ГУК в водной среде – в работах [6, 7]. Знание механизма газофазных реакций необходимо для многих практических целей, таких как процессы горения, развитие химических и газодинамических лазеров и т.д.

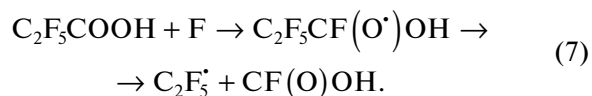
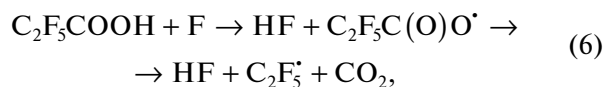
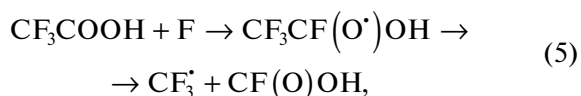
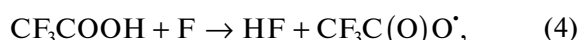
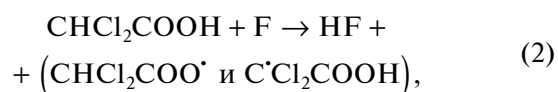
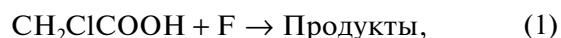
Цели данной работы – установление кинетических параметров реакций атомарного фтора с ГУК и пентафторпропионовой кислотой в газовой фазе и проведение сравнительного анализа скоростей этих реакций. Систематическое исследование реакций атомов фтора с малыми органическими кислотами ранее не проводилось. Поэтому результаты настоящего исследования могут послужить развитию теории элементарных химических реакций. Следует также отметить, что образующиеся в реакциях колебательно-возбужденные молекулы HF являются активной средой для химических лазеров [8].

2. МЕТОДИКА ЭКСПЕРИМЕНТА

Метод конкурирующих реакций

Метод конкурирующих реакций (МКР) основан на том, что одна и та же активная частица (в данном случае – это атом фтора) может одновременно участвовать в нескольких реакциях с образованием различных продуктов. Этот метод позволяет определить отношение констант скоростей исследуемой и референсной (эталонной) реакций.

В настоящей работе МКР использовался для исследования следующих реакций атомарного фтора с ГУК и пентафторпропионовой кислотой:



В качестве конкурирующих реакций выступали реакции атомарного фтора с соответствующими реагентами: $c-C_6H_{12}$ и CH_2FCH_2OH для реакции (1); $c-C_6H_{12}$, CH_2FCH_2OH и CH_3CCl_3 для реакции (2); этанолом, $c-C_6H_{12}$, CH_2FCH_2OH и CH_3CCl_3 для ре-

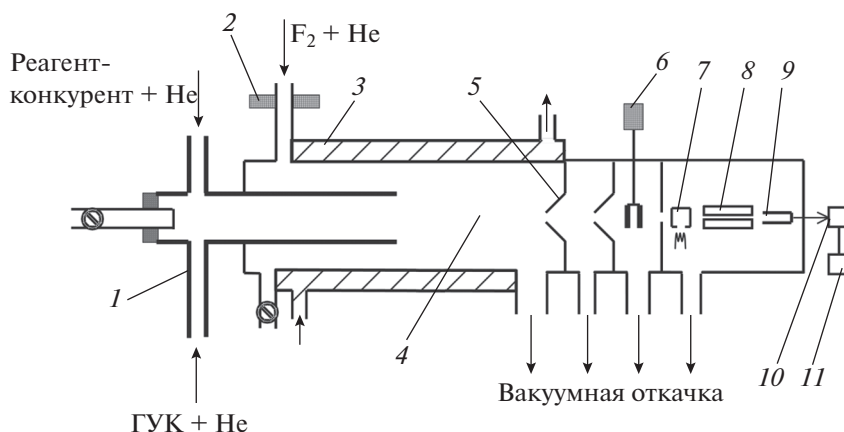


Рис. 2. Схема проточного реактора с масс-спектрометром: 1 — инжектор; 2 — высокочастотный разряд; 3 — охлаждающая жидкость; 4 — зона смешивания реагентов; 5 — напускной конус; 6 — модулятор; 7 — ионный источник; 8 — масс-спектрометр; 9 — электронный умножитель; 10, 11 — система регистрации ионного тока.

акции (3); CHCl_3 , CH_3CCl_3 и HNO_3 для реакций (4) и (5); HNO_3 для реакций (6) и (7).

Экспериментальная установка

Методы проведения кинетических измерений были подробно описаны в наших предыдущих работах [9, 10], поэтому здесь мы ограничимся кратким описанием методик с небольшими изменениями и дополнениями. Эксперименты были выполнены с использованием масс-спектрометра с модулированным молекулярным пучком. В работе использовался проточный реактор, соединенный с масс-спектрометром, схема которого представлена на рис. 2. В качестве газа-носителя использовался гелий. Типичная скорость газового потока в реакторе составляла 1–5 м/с. Общее давление в реакторе поддерживалось на уровне 0.8–1.3 Торр. Атомы фтора получали при пропускании 5%-ной смеси молекулярного фтора в гелий через высокочастотный разряд. Степень диссоциации молекулярного фтора находилась в диапазоне 98–100%.

По тонкому инжектору, расположенному на оси реактора, добавляли одну из ГУК и реагент конкурирующей реакции, сильно разбавленные гелием. Проводили измерение концентраций ГУК и реагента-конкурента в присутствии атомов фтора и в их отсутствие на соответствующих масс-спектральных линиях. Таким образом определяли глубины превращения ГУК и реагента-конкурента. По изменению в реакционной смеси концентрации реагента-конкурента определяли соответствующие изменения глубин превращения. Отношение констант скоростей исследуемой и референсной реакций $(k/k_{\text{ref}})_{\text{exp}}$ определяли

из тангенса угла наклона прямой линии, полученной в результате линейного регрессионного анализа измерений глубины превращения ГУК по отношению к глубине превращения реагента-конкурента.

Регулировку и стабилизацию потока газа-носителя проводили с помощью расходомера Mass Flow Controller 1100 Series (Type 1160 B). Давление в реакторе измеряли мембранным манометром MKS Baratron (Type 122A). Отбор проб из реакционной зоны в масс-спектрометр осуществлялся в виде модулированного молекулярного пучка. Система формирования молекулярного пучка состояла из сопла и сепаратора. Пучок модулировался с частотой 33 Гц в камере между сепаратором и входной диафрагмой ионного источника масс-спектрометра.

Реактивы

В настоящей работе были использованы следующие реактивы: монохлоруксусная кислота производства компании Sigma-Aldrich (USA) чистотой >97%, дихлоруксусная кислота (Sigma-Aldrich, >98%), трихлоруксусная кислота (Sigma-Aldrich, >97%), гелий (Югра-ПГС, >99.99%), фторэтанол (Sigma-Aldrich, 98.7%), F_2 (ОАО «КЧХК», 98%, 5%-ная концентрация в He), циклогексан (ЗАО Экос-1, ЧДА), 1,1,1-трихлорэтан (Sigma-Aldrich, 99%), трифторуксусная кислота (Fluka, 99.5%), хлороформ (Sigma-Aldrich, 99.9%), пентафторпропионовая кислота (Fluka, 97%). Все реактивы использовали после очистки и обезгаживания.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Определение констант скоростей реакций (1)–(7) по экспериментальным данным проводили по одной методике, поэтому рассмотрим этот алгоритм более подробно на примере реакции атома фтора с МХУК. Для остальных реакций исследования выполнялись аналогичным образом.

Реакция F + CH₂ClCOOH

Планируемые реагенты-конкуренты в МКР должны удовлетворять следующим необходимым условиям:

1) константы скоростей реакций атома фтора с изучаемым реагентом и веществом-конкурентом должны различаться не сильно;

2. масс-спектры исследуемого вещества и конкурента не должны перекрываться.

Этим двум требованиям отвечают 2-фторэтанол и циклогексан.

Для определения масс-спектральных пиков, пригодных для мониторинга концентраций реагентов, были проанализированы спектры МХУК и CH₂FCH₂OH. На рис. 3а представлены масс-спектры в диапазоне масс 30–100 а.е.м., каждый из которых нормирован на 100% по наиболее интенсивному пику спектра с $m/z = 50$ и 31 для МХУК и CH₂FCH₂OH соответственно. Видно, что молекулярный пик каждого реагента (кислоты с $m/z = 94$ и спирта с $m/z = 64$) имеет достаточную интенсивность (высота пика $m/z = 94$ составляет 5.9%, а пика с $m/z = 64$ – 14.2%) и не имеет пересечения с осколочными пиками спектра другого реагента. Аналогично на рис. 3б представлены спектры МХУК и циклогексана в диапазоне масс 30–100 а.е.м. В этом случае молекулярный пик каждого реагента также имеет достаточную интенсивность (интенсивность пика кислоты с $m/z = 94$ – 5.9%, а циклогексана с $m/z = 84$ – 82.1%) и не имеет пересечения с осколочными пиками спектра другого реагента. Это позволило контролировать концентрации реагентов по их молекулярным пикам.

Результат измерений глубины превращения МХУК по отношению к глубинам превращения 2-фторэтанола и циклогексана представлен на рисунках 4а и б соответственно. Данные были получены в работе [11] при изменении в реакционной смеси концентрации вещества-реагента конкурирующей реакции. Отношение констант определялось из тангенса угла наклона прямой

линии, полученной в результате линейной регрессии, при подгонке согласно уравнению

$$\ln([MXUK]_0/[MXUK])/ \ln([REF]_0/[REF]) = (k_1/k_{ref})_{exp}, \quad (8)$$

где [MXUK], [REF] и [MXUK]₀, [REF]₀ – концентрации исследуемого вещества и вещества-реагента конкурирующей реакции соответственно в присутствии атомарного фтора и в его отсутствие, а $(k_1/k_{ref})_{exp}$ – экспериментально определенное отношение констант скоростей реакций МХУК и конкурирующего вещества с атомарным фтором.

В результате проведенных экспериментов для реакции (1) была получена усредненная величина [11]:

$$k_1(293\text{ K}) = (10 \pm 4) \cdot 10^{-11} \text{ см}^3 \cdot \text{молекула}^{-1} \cdot \text{с}^{-1}. \quad (9)$$

При этом для вычисления константы скорости k_1 в выражении (9) использовались данные как прямых, так и непрямых измерений констант скоростей конкурирующих реакций: F + CH₂FCH₂OH [11, 14] и F + с-C₆H₁₂ [8, 11, 15].

Реакция F + CHCl₂COOH

Реакция атома фтора с ДХУК подробно рассматривалась в работах [11, 13]. В качестве конкурирующих реагентов использовались с-C₆H₁₂, CH₂FCH₂OH, CH₃CCl₃. В результате экспериментов для реакции (2) при комнатной температуре была получена усредненная величина константы скорости:

$$k_2(293\text{ K}) = (8 \pm 4) \cdot 10^{-11} \text{ см}^3 \cdot \text{молекула}^{-1} \cdot \text{с}^{-1}. \quad (10)$$

Для вычисления k_2 в (10) использовались константы скорости конкурирующих реакций: F + CH₂FCH₂OH [11, 14], F + с-C₆H₁₂ [8, 11, 15] и F + CH₃CCl₃ [16].

Реакция F + CCl₃COOH

Реакция атома фтора с ТХУК исследовалась в работе [17]. В качестве конкурирующих реагентов здесь выбирались CH₃CCl₃, C₂H₅OH, CH₂FCH₂OH и с-C₆H₁₂. В итоге усредненная величина константы скорости для реакции (3) при комнатной температуре составила

$$k_3(293\text{ K}) = (4.3 \pm 0.8) \cdot 10^{-11} \text{ см}^3 \cdot \text{молекула}^{-1} \cdot \text{с}^{-1}. \quad (11)$$

Константа скорости в выражении (11) вычислялась с использованием доступных литературных данных о константах скорости конкурирую-

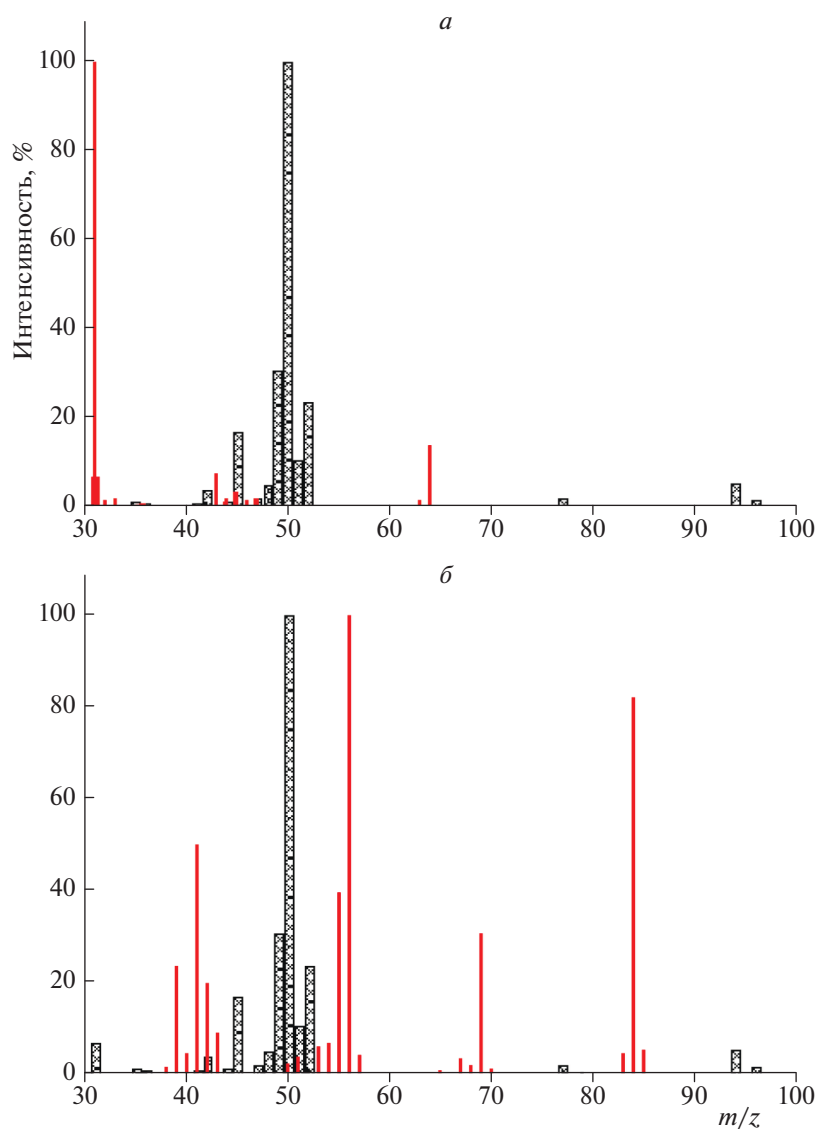


Рис. 3. Масс-спектры в диапазоне масс 30–100 а.е.м., нормированные на 100% по наиболее интенсивным пикам спектров: *a* – для МХУК (штрихованные прямоугольники) и $\text{CH}_2\text{FCH}_2\text{OH}$ (сплошные тонкие линии), нормированы по $m/z = 50$ и 31 соответственно; *б* – для МХУК (штрихованные прямоугольники) и циклогексана (сплошные тонкие линии), нормированы соответственно по $m/z = 50$ и 56. Данные по масс-спектрам: МХУК – [11], $\text{CH}_2\text{FCH}_2\text{OH}$ – [12], циклогексан – [13].

щих реакций: $\text{F} + \text{CH}_3\text{CCl}_3$ [16], $\text{F} + \text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$ [17], $\text{F} + \text{CH}_2\text{FCH}_2\text{OH}$ [11, 14] и $\text{F} + \text{c-C}_6\text{H}_{12}$ [8, 11, 15].

Реакция $\text{F} + \text{CF}_3\text{COOH}$

Реакция атома фтора с ТФУК рассматривалась в работах [9, 17, 18]. В качестве конкурирующих реагентов использовались CHCl_3 , CH_3CCl_3 , HNO_3 , CH_4 и CD_4 . В итоге усредненная величина константы скорости для реакций (4) и (5) при комнатной температуре составила

$$k_{4,5}(293\text{ K}) = (5 \pm 1) \cdot 10^{-11} \text{ см}^3 \cdot \text{молекула}^{-1} \cdot \text{с}^{-1}. \quad (12)$$

Для вычисления констант скорости реакций (4) и (5) были заимствованы данные о конкурирующих реакциях: $\text{F} + \text{CHCl}_3$ [19], $\text{F} + \text{CH}_3\text{CCl}_3$ [16], $\text{F} + \text{HNO}_3$ [20], $\text{F} + \text{CH}_4$ и $\text{F} + \text{CD}_4$ [18]. Кроме того, в работе [9] была рассчитана температурная зависимость константы скорости:

$$k_{4,5}(T) = (1.1 \pm 0.4) \cdot 10^{-12} \times \exp[(1000 \pm 100 \text{ K})/T], \text{ см}^3 \cdot \text{молекула}^{-1} \cdot \text{с}^{-1}, \quad (13)$$

которая справедлива в диапазоне температур $T = 258\text{--}343\text{ K}$.

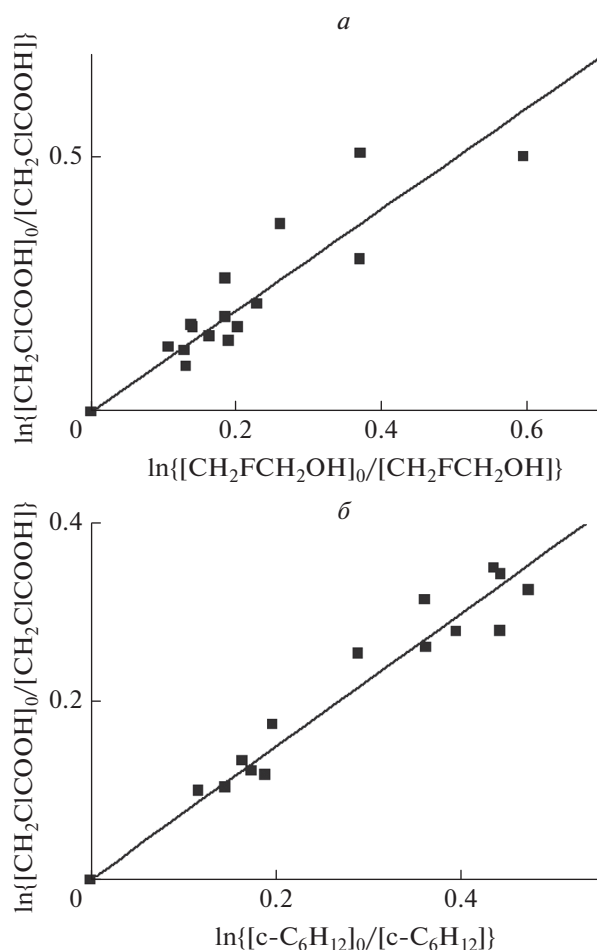


Рис. 4. Зависимость отношения глубин превращения МХУК и конкурирующих реагентов в реакциях с атомом фтора при $T = 293$ К: а – 2-фторэтанол, б – циклогексан.

Реакция $F + C_2F_5COOH$

Реакция атома фтора с пентафторпропионовой кислотой была подробно исследована в работе [10]. В качестве конкурирующего реагента здесь бралась азотная кислота. В итоге усредненная величина константы скорости для реакций (6) и (7) при комнатной температуре составила

$$k_{6,7}(293 \text{ К}) = (3.1 \pm 0.8) \cdot 10^{-11} \text{ см}^3 \cdot \text{молекула}^{-1} \cdot \text{с}^{-1}. \quad (14)$$

Для вычисления $k_{6,7}$ использовались также данные работы [20]. Температурная зависимость константы скорости для реакций (6) и (7) имеет вид [10]

$$k_{6,7}(T) = (6 \pm 5) \cdot 10^{-13} \times \exp[(1200 \pm 200)/T], \text{ см}^3 \cdot \text{молекула}^{-1} \cdot \text{с}^{-1}. \quad (15)$$

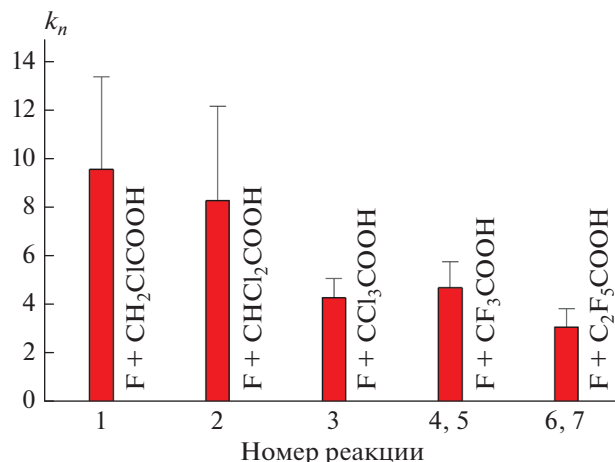


Рис. 5. Значения констант скорости реакций (1)–(7) при температуре $T = 293$ К.

Зависимость (15) рекомендована к использованию в диапазоне температур $T = 262–343$ К.

В сводной табл. 1 приведены значения констант скоростей реакций атомов фтора с ГУК и пентафторпропионовой кислотой при комнатной температуре, полученные методом конкурирующих реакций в экспериментах с применением проточного реактора с детектированием реагентов и продуктов реакции молекулярно-пучковым масс-спектрометром.

На рис. 5 представлены значения k_1 , k_2 , k_3 , $k_{4,5}$ и $k_{6,7}$ при комнатной температуре. Видно, что константы k_3 и $k_{4,5}$ мало отличаются друг от друга. Это объясняется тем, что в обоих случаях происходит отрыв водорода только от группы $COOH$, так как энергии связи $COO-H$ для этих молекул достаточно близки: 472 кДж/моль для CF_3COOH и 466 кДж/моль для CCl_3COOH . Молекула C_2F_5COOH , принимающая участие в реакциях (6) и (7), имеет более сложную структуру по сравнению с CF_3COOH , и атака атома водорода затруднена из-за стерического фактора.

Реакция (1) является самой быстрой, поскольку существуют три термодинамически выгодных канала реакции: отрыв двух атомов водорода от группы CH_2 и одного – от группы $COOH$. Энергия связи $C-H$ в группе CH_2Cl составляет 397 кДж/моль, а для связи $COO-H$ – 463 кДж/моль. По сравнению с (1) реакция (2) является более медленной, так как в ней могут участвовать только два атома водорода. При этом энергия связи $C-H$ составляет 379 кДж/моль, а в группе $COO-H$ – 466 кДж/моль.

Таблица 1. Константы скоростей реакций атомов фтора с галогензамещенными уксусной и пропионовой кислотами при комнатной температуре ($T = 293$ К), полученные в экспериментах с рядом конкурирующих реакций

Реагент	Реагент конкурирующей реакции	k/k_{ref}	k , $10^{-11} \text{ см}^3 \cdot \text{молекула}^{-1} \cdot \text{с}^{-1}$
CH_2ClCOOH	$\text{CH}_2\text{FCH}_2\text{OH}$	1.0 ± 0.1	11 ± 5 [11]
	$\text{с-}\text{C}_6\text{H}_{12}$	0.75 ± 0.04	10 ± 3 [11] 8 ± 4 [11]
	10 ± 4 [11]		
CHCl_2COOH	$\text{CH}_2\text{FCH}_2\text{OH}$	0.7 ± 0.1	8 ± 4 [11]
	$\text{с-}\text{C}_6\text{H}_{12}$	0.6 ± 0.1	8 ± 3 [11, 13] 6 ± 3 [11, 13]
	CH_3CCl_3	12 ± 2	8 ± 2 [11] 8 ± 4 [11]
CCl_3COOH	CH_3CCl_3	7 ± 1	5 ± 1 [17]
	$\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$	0.24 ± 0.02	4 ± 2 [17]
	$\text{CH}_2\text{FCH}_2\text{OH}$	0.34 ± 0.04	5 ± 2 [17]
	$\text{с-}\text{C}_6\text{H}_{12}$	0.28 ± 0.02	4 ± 1 [17] 5 ± 3 [17]
	4.3 ± 0.8 [17]		
CF_3COOH	CHCl_3	14 ± 2	3.9 ± 0.8 [17]
	CH_3CCl_3	8.4 ± 0.6	6 ± 2 [17]
	HNO_3	1.6 ± 0.2	3.7 ± 0.9 [17]
	CH_4, CD_4		5.6 ± 0.4 [18]
	5 ± 1 [17]		
$\text{C}_2\text{F}_5\text{COOH}$	HNO_3	1.3 ± 0.1	3.1 ± 0.8 [10, 17]

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Настоящее исследование является продолжением цикла работ [6, 7, 9–11, 13, 17, 21, 22] по применению масс-спектрометрии к исследованию атмосферных процессов. В данной работе экспериментально исследованы реакции атомарного фтора с монохлоруксусной, дихлоруксусной, трихлоруксусной, трифторуксусной и пентафторпропионовой кислотами при давлении 1 Торр. Эксперименты проводили с помощью проточного реактора, соединенного с масс-спектрометром с модулированным пучком. Методом конкурирующих реакций с привлечением имеющихся литературных данных определены константы скоростей указанных реакций при комнатной температуре. Показано, что в этом ряду наиболее быстрой является реак-

ция $\text{F} + \text{CH}_2\text{ClCOOH}$. Кроме того, для реакций $\text{F} + \text{CF}_3\text{COOH}$ и $\text{F} + \text{C}_2\text{F}_5\text{COOH}$ получены температурные зависимости констант скоростей в диапазонах 258–343 и 262–343 К соответственно.

В 2023 году исполняется 100 лет со дня рождения выдающегося ученого академика В.И. Гольданского. Ряд работ [7, 11, 21, 22] возник в результате обсуждения с Виталием Иосифовичем вопросов взаимосвязи структуры и реакционной способности молекул, близких по строению. Гольданского интересовали проблемы сохранения и охраны среды нашего обитания, включая механизмы природной трансформации относительно “безопасных” веществ в разного рода токсиканты. Авторы работы с благодарностью вспоминают работу с Виталием Иосифовичем.

Работа выполнена в рамках госзадания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (тема № 122040500060—4).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Asplund G., Grimvall A., Jonsson S.* // *Chemosphere*. 1994. V. 28. № 8. P. 1467; [https://doi.org/10.1016/0045-6535\(94\)90241-0](https://doi.org/10.1016/0045-6535(94)90241-0)
2. *Hoekstra E.J.* // *Ibid.* 2003. V. 52. № 2. P. 355; [https://doi.org/10.1016/S0045-6535\(03\)00213-3](https://doi.org/10.1016/S0045-6535(03)00213-3)
3. *Sidebottom H., Franklin J.* // *Pure Appl. Chem.* 1996. V. 68. № 9. P. 1757; <https://doi.org/10.1351/pac199668091757>
4. *Folberth G., Pfister G., Baumgartner D. et al.* // *Environ. Pollut.* 2003. V. 124. № 3. P. 389; [https://doi.org/10.1016/S0269-7491\(03\)00048-4](https://doi.org/10.1016/S0269-7491(03)00048-4)
5. *Lifongo L.L., Bowden D.J., Brimblecombe P.* // *Intern. J. Phys. Sci.* 2010. V. 5. № 6. P. 738.
6. *Karpov G.V., Vasiliev E.S., Volkov N.D. et al.* // *Chem. Phys. Lett.* 2020. V. 760. 138001; <https://doi.org/10.1016/j.cplett.2020.138001>
7. *Васильев Е.С., Карпов Г.В., Волков Н.Д. и др.* // *Хим. физика*. 2021. Т. 40. № 3. С. 17; <https://doi.org/10.31857/S0207401X20120171>
8. *Pearson R., Cowles J., Hermann G. et al.* // *IEEE J. Quant. Electr.* 1973. V. 9. № 9. P. 879; <https://doi.org/10.1109/JQE.1973.1077761>
9. *Vasiliev E.S., Knyazev V.D., Savelieva E.S. et al.* // *Chem. Phys. Lett.* 2011. V. 512. № 4—6. P. 172; <https://doi.org/10.1016/j.cplett.2011.07.023>
10. *Vasiliev E.S., Knyazev V.D., Karpov G.V. et al.* // *J. Phys. Chem. A*. 2014. V. 118. № 23. P. 4013; <https://doi.org/10.1021/jp5029382>
11. *Васильев Е.С., Карпов Г.В., Шартава Д.К. и др.* // *Хим. физика*. 2022. Т. 41. № 5. С. 10; <https://doi.org/10.31857/S0207401X22050119>
12. NIST Standard Reference Database. Number 69 / Eds. Linstrom P.J., Mallard W.G. Gaithersburg: National Institute of Standards and Technology, 2018.
13. *Васильев Е.С., Сыромятников А.Г., Шартава Д.К. и др.* // *Хим. безопасность*. 2018. Т. 2. № 1. С. 206; <https://doi.org/10.25514/CHS.2018.1.12894>
14. *Васильев Е.С., Морозов И.И., Хак В. и др.* // *Кинетика и катализ*. 2006. Т. 47. № 6. С. 859.
15. *Heinemann-Fiedler P., Hoyer mann K., Rohde G.* // *Ber. Bunsenges. Phys. Chem.* 1990. V. 94. № 11. P. 1400; <https://doi.org/10.1002/bbpc.199000042>
16. *Platz J., Nielsen O.J., Sehested J. et al.* // *J. Phys. Chem.* 1995. V. 99. № 17. P. 6570; <https://doi.org/10.1021/j100017a044>
17. *Vasiliev E.S., Morozov I.I., Karpov G.V.* // *Intern. J. Chem. Kinet.* 2019. V. 51. № 12. P. 909; <https://doi.org/10.1002/kin.21319>
18. *Wallington T.J., Hurley M.D.* // *Ibid.* 1995. V. 27. № 2. P. 189; <https://doi.org/10.1002/kin.550270209>
19. *Catoire V., Lesclaux R., Schneider W.F. et al.* // *J. Phys. Chem.* 1996. V. 100. № 34. P. 14356; <https://doi.org/10.1021/jp960572z>
20. *Wine P.H., Wells J.R., Nicovich J.M.* // *Ibid.* 1988. V. 92. № 8. P. 2223; <https://doi.org/10.1021/j100319a028>
21. *Морозов И.И., Васильев Е.С., Волков Н.Д. и др.* // *Хим. физика*. 2022. Т. 41. № 10. С. 16; <https://doi.org/10.31857/S0207401X22100089>
22. *Васильев Е.С., Волков Н.Д., Карпов Г.В. и др.* // *Хим. физика*. 2021. Т. 40. № 10. С. 30; <https://doi.org/10.31857/S0207401X21100125>