**Сосулин, Илья Сергеевич.**

## Радиационно-химические превращения изолированных молекул и комплексов фтороформа и дифторметана в низкотемпературных матрицах : диссертация ... кандидата химических наук : 02.00.09 / Сосулин Илья Сергеевич; [Место защиты: ФГБОУ ВО «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова»]. - Москва, 2021. - 207 с. : ил.

## Оглавление диссертациикандидат наук Сосулин Илья Сергеевич

Введение

Глава 1. Обзор литературы

1.1 Радиационная химия и фотохимия фторметанов

1.1.1 Действие электронного удара на фторметаны в газовой фазе

1.1.2 УФ-фотолиз фторметанов в газовой и конденсированной фазах

1.1.3 Фотоионизация фторметанов в газовой фазе

1.1.4 Радиолиз газообразных фторалканов

1.2 Строение и свойства вероятных интермедиатов радиационно-химических превращений фторметанов

1.2.1 Трифторметильный радикал

1.2.2 Дифторкарбен

1.2.3 Фторметильный радикал

1.2.4 Дифторметильный радикал

1.2.5 Фторкарбен

1.2.6 Фторметилидин

1.2.7 Ионные продукты

1.3 Межмолекулярные комплексы фторметанов

1.3.1 Общие особенности комплексообразования фторметанов

1.3.2 Фторметан

1.3.3 Дифторметан

1.3.4 Трифторметан

1.3.5 Тетрафторметан

Глава 2. Методика эксперимента и квантово-химических расчётов

2.1 Исходные вещества и их подготовка

2.2 Используемое оборудование

2.3 Методика проведения эксперимента

2.3.1 Приготовление газовой смеси

2.3.2 Осаждение газовой смеси

2.3.3 Радиолиз образца

2.3.4 Отжиг и фотолиз образцов

2.4 Методика квантово-химических расчётов

Глава 3. Радиационно-индуцированные превращения фтороформа и

дифторметана в матрицах твердых благородных газов

3.1 Радиолиз СИГ3 в матрицах благородных газов

3.1.1 Комплекс СГ2- ■ ■ ИГ

3.2 Радиолиз СИ2Г2 в матрицах благородных газов

3.2.1 Комплекс СИЕ- ■ ■ ИГ

3.3 Механизм радиационно-химических превращений фтороформа и

дифторметана в матрицах благородных газов

3.3.1 Нейтральный канал радиолиза фтороформа и дифторметана

3.3.2 Ионный канал радиолиза фтороформа и дифторметана

Глава 4. Термические реакции в облученных системах

фтороформ/благородный газ и дифторметан/благородный газ,

образование ЕКгСЕ и ЕХеСЕ

4.1 Общая характеристика пострадиационных термических реакций

4.2 Новые соединения благородные газов: ЕКгСЕ и ЕХеСЕ

Глава 5. Радиационно-индуцированные превращения комплексов

фтороформа и дифторметана в матрицах благородных газов

5.1 Радиационная химия комплексов с монооксидом углерода

5.1.1 Идентификация комплексов СИЕ3- ■ ■ СО

5.1.2 Идентификация комплексов СИ2Е2- ■ ■ СО

5.1.3 Радиационная химия комплексов фтороформа и дифторметана с монооксидом углерода

5.1.3.1 Идентификация комплексов СЕ3■ ■ ■ СО

5.1.3.2 Идентификация продуктов радиолиза комплекса СИ2Е2••• СО

5.2 Радиационная химия комплексов фторметанов с водой

5.2.1 Идентификация комплексов СИЕ3- ■ ■ И2О

5.2.2 Идентификация комплексов СИ2Е2- ■ ■ И2О

5.2.3 Радиационная химия комплексов фтороформа и дифторметана с водой 153 5.2.3.1 Идентификация комплекса СЕ2- ■ ■ И2О

Заключение

Основные результаты и выводы

Список сокращений и условных обозначений

Список литературы

Приложение А. Структурные, энергетические и ИК-спектроскопические

характерстики молекул и комплексов

А.1 Структурные характерстики Е-... СИЕ2 и ИЕ... СЕ2-, расчитанные на уровне

теории СС8Б(Т)/Ь2а\_3

А.2 Структурные, энергетические и ИК-спектроскопические характерстики

СИЕ...ИЕ...СО, расчитанные на уровне теории МР2/Ь2а\_3

А.3 Структурные, энергетические и ИК-спектроскопические характерстики

СИЕСО...ИЕ, расчитанные на уровне теории МР2/Ь2а\_3

А.4 Структурные характерстики СИ2Г2...И2О, расчитанные на уровне теории

СС8Б(Т)/Ь2а\_3

А.5 Структурные характерстики СГ2...И2О, расчитанные на уровне теории

СС8Б(Т)/Ь2а\_3

А.6 Структурные, энергетические и ИК-спектроскопические характерстики

СИГ...И2О, расчитанные на уровне теории МР2/Ь2а\_3