**Атмосферная трансформация гексана**

***Хомякова П.С.1,2, Волков Н.Д.1, Синюков К.О.1,2***

*Магистрантка, 1 год обучения*

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

*2Российский химико-технологический университет имени Д. И. Менделеева,*

*Москва, Россия*

*E-mail:khomiakova.polina@yandex.ru*

Для построения химического блока модели изменения климата необходимы знания элементарных реакций углеводородов. Особое место в атмосферных процессах занимают малые газовые примеси. К ним относятся алканы и циклоалканы. Это связано с их широким применением. Важно изучить атмосферные реакции этих веществ и реакции образующихся продуктов — радикалов с молекулярным кислородом атмосферы. В лабораторных условиях гексильные радикалы получают через реакцию гексана и радикалов ОН, но существует проблема генерации радикалов ОН. Поэтому предлагается альтернативный способ получения гексильных радикалов через реакцию атомов фтора и гексана. [1].

Основная цель исследования — получить надежный источник гексильного радикала, который играет важную роль в атмосферной трансформации гексана.

$C\_{6}H\_{14}+ F \rightarrow C\_{6}H\_{13}^{•} +HF^{∙}$ (1) $C\_{6}H\_{12}+ F \rightarrow C\_{6}H\_{11}^{•} +HF^{∙}$ (2)

В реакции (2) *k*2 определено и равно *k*2 = (2.34 ± 0.27) × 10–10 см3 молекула–1 с–1 [2]. Для нахождения *k*1 использовался метод конкурирующих реакций с применением молекулярно-пучковой масс-спектрометрии для изучения реакции атомарного фтора с гексаном.



Рис. 1. Зависимость глубины превращения гексана по отношению к глубине превращения циклогексан в реакциях с атомом фтора, полученная в эксперименте при комнатной температуре

Соответственно комбинирование значений *k*1/*k*2 = (0.87 ± 0.02) дает в результате *k*1 = (2.0 ± 0.3) × 10–10 см3 молекула–1 с–1.

*Работа выполнена в рамках Госзадания (тема 122040500060-4) и при финансовой поддержке гранта РФФИ (грант № 19-05-50076 (Микромир)).*

**Литература**

1. Atkinson, R. Kinetics of the gas-phase reactions of OH radicals with alkanes and cycloalkanes // Atmospheric Chemistry and Physics, 2003, 3(6), 2233–2307. doi:10.5194/acp-3-2233 – 2003.

2. Морозов И.И., Васильев Е.С., Хомякова П.С., Морозова О.С., Синюков К.О., Кузнецова Н.Н., Савилов С.В. Атмосферные процессы с участием токсичных трихлоруксусной и монохлоруксусной кислот //Химическая безопасность, издательство Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семенова РАН (Москва), — 2022. — том 2, No 6, с. 187-198 https://doi.org/10.25514/CHS.2022.2.23012.