

## IClO<sub>2</sub> 异构化反应机理及电子密度拓扑研究

周俊红<sup>1,2</sup> 曾艳丽<sup>1</sup> 张雪英<sup>1</sup> 孟令鹏<sup>1</sup> 郑世钧<sup>1,\*</sup>

<sup>1</sup> 河北师范大学化学与材料科学学院, 计算量子化学研究所, 石家庄 050016;

<sup>2</sup> 华东理工大学化学与分子工程学院, 上海 200237)

**摘要:** 利用密度泛函理论方法研究了 IClO<sub>2</sub> 异构化反应机理. 优化得到了七种异构体, 其中 OIClO 和 ICIOO 还未见报道, 对各异构体的热力学稳定性进行了比较. 找到了异构化过程的过渡态, 并通过内禀反应坐标 (IRC) 计算确认了各个异构体之间的相互转化关系. 从量子拓扑学的角度, 对典型异构化反应通道 IRC 途径上的各点进行了电子密度拓扑分析, 讨论了反应过程中化学键的断裂、生成以及化学键的变化规律, 找到了反应途径上的能量过渡态(ETS)和结构过渡态(STS).

**关键词:** IClO<sub>2</sub>; 异构化; 能量过渡态; 结构过渡态

中图分类号: O641

## Reaction Mechanisms and Topological Studies of Electron Density for IClO<sub>2</sub> Isomerization

ZHOU Jun-Hong<sup>1,2</sup> ZENG Yan-Li<sup>1</sup> ZHANG Xue-Ying<sup>1</sup> MENG Ling-Peng<sup>1</sup> ZHENG Shi-Jun<sup>1,\*</sup>

<sup>1</sup>Institute of Quantum Chemistry, College of Chemistry and Material Science, Hebei Normal University, Shijiazhuang 050016;

<sup>2</sup>School of Chemistry and Molecular Engineering, East China University of Science and Technology, Shanghai 200237)

**Abstract:** The isomerization reactions of IClO<sub>2</sub> were studied by density functional theory. Seven isomers were optimized and two new isomers (OIClO and ICIOO) were gained, IRC calculations were also been processed to validate the connection relationship of the isomers. From the view of topological analysis of the electronic density, the topological characters of the major critical points along the reaction pathway were analyzed, the changing rules of the chemical bonds were discussed, and the energy transition states (ETS) and structure transition states (STS) were found.

**Key Words:** IClO<sub>2</sub>; Isomerization; Energy transition state; Structure transition states

由于碘原子在臭氧损耗催化循环中扮演着重要的角色, 因此人们对碘以及碘化合物参与的反应进行了大量研究<sup>[1-13]</sup>. 实验测得碘氧自由基与氯氧自由基反应会产生碘原子与氯原子, 从而会造成臭氧层的破坏, 因此利用理论手段深入研究该反应的机理对认识该反应在臭氧催化循环中的重要程度具有特别重要的意义. 在碘氧自由基与氯氧自由基反应过程中会生成一类重要的中间体 IClO<sub>2</sub>, 而中间体 I-ClO<sub>2</sub> 具有多个不同的异构体. 深入研究这些异构体

的相对稳定性以及相互转化关系有助于更好地研究碘氧自由基与氯氧自由基复杂的反应机理. 本文利用密度泛函理论方法研究了 IClO<sub>2</sub> 异构体的相对稳定性以及相互转化关系, 并从量子拓扑学的角度, 对典型异构化反应通道 IRC 途径上的各点进行电子密度拓扑分析, 讨论异构化过程中化学键的断裂和生成、化学键的变化规律以及反应途径上的能量过渡态和结构过渡态的关系.

Received: January 24, 2007; Revised: April 28, 2007; Published on Web: June 14, 2007.

\*Corresponding author. Email: sjzheng@mail.hebtu.edu.cn; Tel: +86311-86268143; Fax: 0311-86269217.

国家自然科学基金(20573032)、河北省自然科学基金(B2006000137)、河北师范大学博士基金(L2005B12)资助课题

## 1 计算方法

利用 Gaussian 98 程序包的密度泛函理论 (B3LYP) 方法优化了  $\text{IClO}_2$  异构体, 其中 Cl 和 O 元素采用 6-311++G(3df) 基组, I 元素采用 SDB-AUG-CC-PVTZ 赝势基组<sup>[14]</sup>. 在此基础上, 讨论了异构体之间相互转化的过程, 优化出了各相互转化过程的过渡态, 并对异构化反应过程进行了 IRC 路径解析, 确认了异构体之间的转化关系. 对异构体和过渡态均做了振动分析, 进一步确认其结构.

采用自行编制的电子密度拓扑分析 GTA-91 程序<sup>[15]</sup>及 AIM 程序<sup>[16]</sup>, 对各异构化反应过程中关键点进行了电子密度拓扑分析.

## 2 结果与讨论

### 2.1 各异构体以及相互转化关系

本文共优化得到了  $\text{IClO}_2$  七种异构体, 分别为  $\text{ClIO}_2$ 、 $\text{ClOIO}$ 、 $\text{IOOCl}$ 、 $\text{IOClO}$ 、 $\text{IClO}_2$ 、 $\text{OIClO}$  和  $\text{IClOO}$ , 其构型见图 1. 其中  $\text{OIClO}$ 、 $\text{IClOO}$  两种异构体首次优化得到. 计算得到了它们的能量. 取 IO 和 ClO 自由基能量和为能量零点, 各驻点的相对能量分别

表 1 在 B3LYP/6-311++G(3df) 水平上各异构体以及过渡态的能量

Table 1 Energies for the isomers and transition states of  $\text{IClO}_2$  at the B3LYP/6-311++G(3df) level

Species	$E$ (a.u.)	ZPE(a.u.)	$E_{\text{con}}$ (a.u.)	$\Delta E/(\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1})$
ClO+IO	-621.95934	0.00348	-621.95586	0.00
$\text{ClIO}_2$	-622.03080	0.00643	-622.02437	-179.87
$\text{ClOIO}$	-621.98925	0.00553	-621.98372	-73.15
$\text{IOOCl}$	-621.98186	0.00610	-621.98112	-52.25
$\text{IOClO}$	-621.96772	0.00597	-621.96175	-15.46
$\text{IClO}_2$	-621.96381	0.00782	-621.95599	-0.34
$\text{OIClO}$	-621.94775	0.00527	-621.94248	17.65
$\text{IClOO}$	-621.93820	0.00653	-621.93167	63.51
TS1	-621.95430	0.00500	-621.94930	17.22
TS2	-621.94149	0.00516	-621.93633	51.28
TS3	-621.92967	0.00490	-621.92477	81.63
TS4	-621.92680	0.00645	-621.92035	93.23
TS5	-621.94347	0.00507	-621.93840	45.84
TS6	-621.91563	0.00546	-621.91017	119.96

为 -179.87、-73.15、-52.25、-15.46、-0.34、17.65 和 63.51  $\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$  (见表 1). 其中  $\text{ClIO}_2$  能量最低,  $\text{IClOO}$  能量最高. 各异构体之间的相互转化关系见图 2. 图 2 中 TS1、TS2、TS3、TS4、TS5 和 TS6 分别为

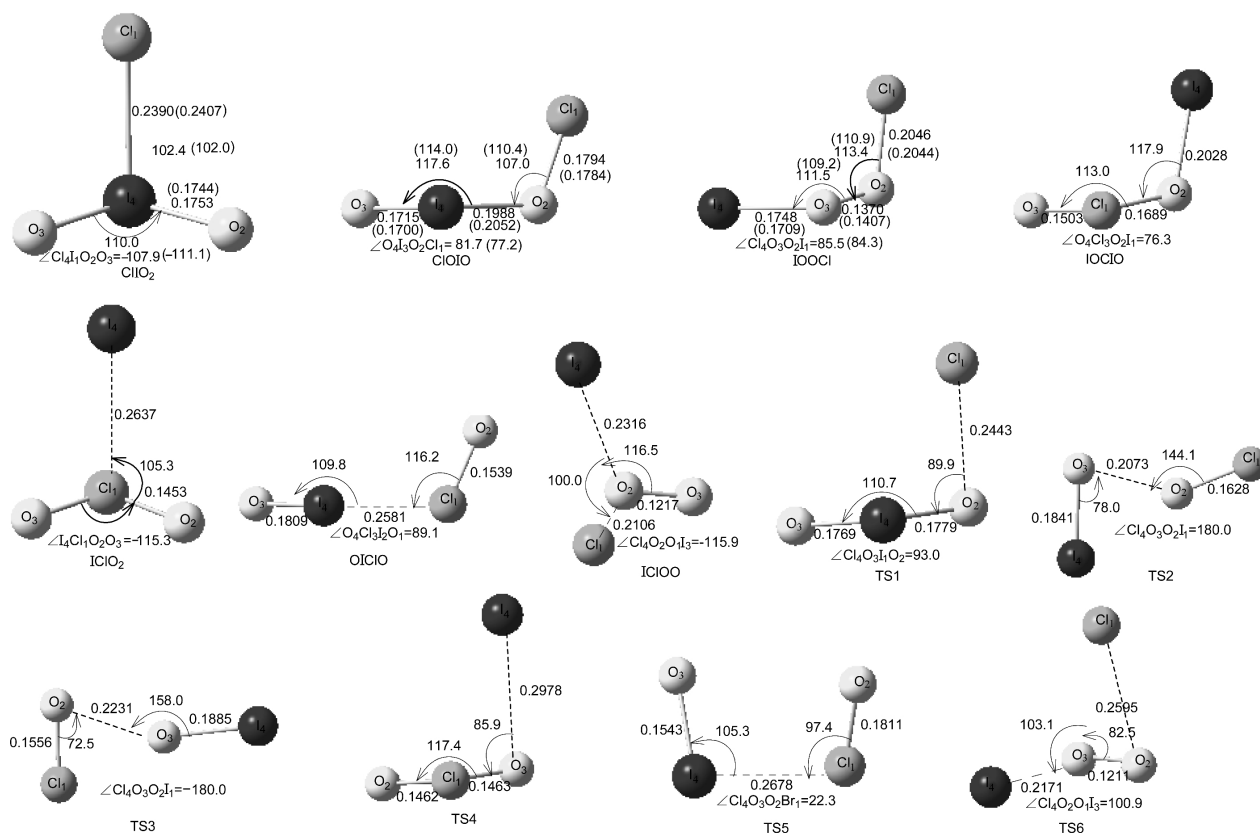
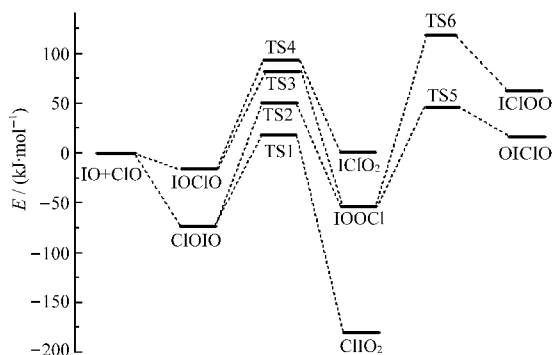


图 1  $\text{IClO}_2$  各异构体和过渡态的几何构型

Fig.1 Geometries of the isomers and transition states for  $\text{IClO}_2$

bond length in nm, bond angle and dihedral angle in degree; values of Ref.[8] in brackets, at MP2/6-311++G(3df) level.

图2 IClO<sub>2</sub>异构体相互转化的示意图Fig.2 Energy curves of the transformation between isomers of IClO<sub>2</sub>

ClOIO $\longleftrightarrow$ ClO<sub>2</sub>, ClOIO $\longleftrightarrow$ IOOCl, IOClO $\longleftrightarrow$ IOOCl, IOClO $\longleftrightarrow$ IClO<sub>2</sub>, IOOCl $\longleftrightarrow$ OIClO 和 IOOCl $\longleftrightarrow$ IClOO 异构化过程的过渡态. 由图2及表1可以得出, ClO<sub>2</sub>与IClO<sub>2</sub>可以分别经过TS1、TS4转化为ClOIO与IOClO, 势垒分别为197.09和93.57 kJ·mol<sup>-1</sup>, 由此可以推断ClO<sub>2</sub>比IClO<sub>2</sub>更加稳定; IOOCl可以经过TS2和TS3分别转化为ClOIO和IOClO, 势垒分别为103.53和133.88 kJ·mol<sup>-1</sup>, 也可以经过TS5转化为OIClO, 势垒为98.09 kJ·mol<sup>-1</sup>, 经过TS6转化为IClOO, 势垒为172.21 kJ·mol<sup>-1</sup>. 以上几个过程势垒都比较大, 异构化难以进行, 所以IOOCl比较稳定; ClOIO与IOClO可以经过TS1、TS2、TS3、TS4分别转化为ClO<sub>2</sub>, IOOCl和IClO<sub>2</sub>, 势垒分别为90.37、124.43、97.09和108.69 kJ·mol<sup>-1</sup>,

由势垒大小可以得出ClOIO和IOClO都比较稳定, 并且ClOIO比IOClO更加稳定; OIClO能量比较高, 可以经过TS5转化为IOOCl (势垒为28.19 kJ·mol<sup>-1</sup>); IClOO能量最高, 可以经过TS6转化为IOOCl, 势垒为56.45 kJ·mol<sup>-1</sup>, 因此OIClO与IClOO都不稳定.

由表1列出的能量值可见, 在IClO<sub>2</sub>七种异构体中, ClO<sub>2</sub>、ClOIO、IOOCl、IOClO、IClO<sub>2</sub>五种异构体能量比较低, 比较稳定; OIClO和IClOO能量高, 不稳定, 因此实验上尚未得到这两个异构体. 综上所述, IClO<sub>2</sub>七种异构体的热力学相对稳定性顺序为ClO<sub>2</sub>>ClOIO>IOOCl>IOClO>IClO<sub>2</sub>>OIClO>IClOO, 该结论与文献[13]用MP2方法计算的稳定性顺序(IOOCl>ClO<sub>2</sub>>ClOIO和ClO<sub>2</sub>>IOOCl>ClOIO)有所不同, 有待实验与理论的进一步验证.

## 2.2 反应途径电子密度拓扑分析

根据Bader等人提出的“分子中的原子”理论<sup>[17]</sup>, 一个分子中其电子密度分布的拓扑性质取决于电荷密度的梯度矢量场 $\nabla\rho(\mathbf{r})$ 和Laplacian量 $\nabla^2\rho(\mathbf{r})$ , 并且有 $\nabla^2\rho(\nabla)=\lambda_1+\lambda_2+\lambda_3$ , 此处 $\lambda_i$ 为键鞍点处电荷密度的Hessian矩阵本征值. 如果Hessian矩阵三个本征值为一正两负, 记作(3, -1)关键点, 称为键鞍点(BCP), 表明两原子间成键. 如果相邻的两个原子之间存在着成键作用, 那么一定有一条从键鞍点出发连接两原子的键径存在. 如果三个本征值为两正一负, 记作(3, +1)关键点, 称为环鞍点(RCP), 它的存在有利于形成环状结构. 本文对典型反应通道IRC路径上的

表2 异构化过程中关键点的拓扑性质

Table 2 Topological properties of the critical points for the isomerization

(a) IOClO $\rightarrow$ TS3 $\rightarrow$ IOOCl

S <sub>3</sub>	-0.40	0.00(ETS)	+0.40	+0.50(STS)	+0.60	+0.90	+1.20	+1.60
RCP								
$\rho$	0.0373	0.0386	0.0399	0.0401	0.0402	0.0404	0.0406	0.0405
$\lambda_1$	-0.0407	-0.0419	-0.0432	-0.0433	-0.0434	-0.0435	-0.0435	-0.0430
$\lambda_2$	0.0038	0.0249	0.0314	0.0315	0.0311	0.0286	0.0234	0.0077
$\lambda_3$	0.2581	0.2498	0.2487	0.2489	0.2491	0.2497	0.2514	0.2557
O <sub>3</sub> -Cl <sub>1</sub>								
$\rho$	0.0507	0.0493	0.0483	0.0465	0.0455	0.0443	0.0430	0.0420
$\lambda_1$	-0.0545	-0.0525	-0.0511	-0.0488	-0.0474	-0.0457	-0.0440	-0.0428
$\lambda_2$	-0.0491	-0.0455	-0.0420	-0.0375	-0.0338	-0.0286	-0.0206	-0.0020
$\lambda_3$	0.3041	0.2986	0.2951	0.2887	0.2848	0.2802	0.2752	0.2689
O <sub>3</sub> -O <sub>2</sub>								
$\rho$	0.0393	0.0406	0.0418	0.0444	0.0462	0.0487	0.0524	0.0548
$\lambda_1$	-0.0420	-0.0446	-0.0469	-0.0513	-0.0546	-0.0590	-0.0656	-0.0699
$\lambda_2$	-0.0023	-0.0192	-0.0260	-0.0361	-0.0420	-0.0493	-0.0590	-0.0650
$\lambda_3$	0.2732	0.2878	0.2978	0.3162	0.3288	0.3460	0.3702	0.3855

(b) IOClO $\rightarrow$ TS4 $\rightarrow$ IClO<sub>2</sub>

$S_4$	-1.05	-0.80	-0.60	-0.40	-0.28(STS)	0.00(ETS)	+0.10	+0.24
RCP								
$\rho$	0.0137	0.0140	0.0141	0.0141	0.0143	0.0139	0.0136	0.0133
$\lambda_1$	-0.0091	-0.0093	-0.0094	-0.0094	-0.0094	-0.0087	-0.0084	-0.0081
$\lambda_2$	0.0009	0.0063	0.0079	0.0078	0.0097	0.0069	0.0049	0.0002
$\lambda_3$	0.0668	0.0627	0.0610	0.0610	0.0582	0.0585	0.0588	0.0598
I <sub>4</sub> -Cl <sub>1</sub>								
$\rho$	0.0137	0.0144	0.0149	0.0148	0.0163	0.0176	0.0181	0.0185
$\lambda_1$	-0.0091	-0.0096	-0.0100	-0.0100	-0.0112	-0.0123	-0.0127	-0.0133
$\lambda_2$	-0.0009	-0.0054	-0.0068	-0.0068	-0.0096	-0.0118	-0.0125	-0.0130
$\lambda_3$	0.0679	0.0712	0.0728	0.0734	0.0746	0.0745	0.0744	0.0742
I <sub>4</sub> -O <sub>3</sub>								
$\rho$	0.0188	0.0178	0.0171	0.0168	0.0158	0.0143	0.0138	0.0133
$\lambda_1$	-0.0138	-0.0127	-0.0120	-0.0117	-0.0106	-0.0089	-0.0085	-0.0081
$\lambda_2$	-0.0131	-0.0120	-0.0112	-0.0108	-0.0090	-0.0061	-0.0045	-0.0004
$\lambda_3$	0.0650	0.0636	0.0621	0.0615	0.0616	0.0625	0.0616	0.0600

(c) IOOCl $\rightarrow$ TS5 $\rightarrow$ OIClO

$S_5$	-15.20	-7.80(STS)	-1.90	-8.50	-11.50	-6.50	-5.50	0.00(ETS)
RCP								
$\rho$	0.0173	0.0229	0.0102	0.0233	0.0213	0.0210	0.0189	
$\lambda_1$	-0.0113	-0.0180	-0.0076	-0.0182	-0.0155	-0.0165	-0.0146	
$\lambda_2$	0.0015	0.0368	0.0020	0.0359	0.0198	0.0340	0.0288	
$\lambda_3$	0.0729	0.0874	0.0392	0.0890	0.0829	0.0807	0.0729	
I <sub>4</sub> -Cl <sub>1</sub>								
$\rho$	0.0173	0.0384	0.0558	0.2423	0.0235	0.0438	0.0474	0.0658
$\lambda_1$	-0.0113	-0.0339	-0.0568	-0.5366	-0.0161	-0.0409	-0.0456	-0.0698
$\lambda_2$	-0.0015	-0.0289	-0.0450	-0.5197	-0.0144	-0.0339	-0.0372	-0.0541
$\lambda_3$	0.0735	0.1344	0.1602	4.0280	0.0970	0.1439	0.1493	0.1787
O <sub>3</sub> -O <sub>2</sub>								
$\rho$	0.2892	0.0637	0.0102	0.0814	0.2233	0.0405	0.0289	
$\lambda_1$	-0.6990	-0.0949	-0.0077	-0.1330	-0.5170	-0.0503	-0.0308	
$\lambda_2$	-0.6706	-0.0848	-0.0019	-0.1190	-0.4700	-0.0453	-0.0284	
$\lambda_3$	1.4025	0.4164	0.0392	0.5311	1.1727	0.2472	0.1580	

关键点进行了电子密度拓扑分析, 计算结果列于表 2(a)–2(c). 绘制了 IRC 途径上一些重要点的电子密度梯度径图(图 3(a)–3(c)), 取三元环、四元环所在平面为  $xy$  平面. 表 2(a)–(c) 以及图 3(a)–(c) 中,  $S_3$  表示 IOClO $\rightarrow$ TS3 $\rightarrow$ IOOCl 过程中的反应坐标,  $S_4$  表示 IOClO $\rightarrow$ TS4 $\rightarrow$ IClO<sub>2</sub> 过程中的反应坐标,  $S_5$  表示 IOOCl $\rightarrow$ TS5 $\rightarrow$ OIClO 过程中的反应坐标.

对于 IOClO $\rightarrow$ IOOCl 过程(表 2(a) 及图 3(a)), 当  $S_3=-0.40$  时 ( $S$  表示反应坐标), 新键 O<sub>3</sub>-O<sub>2</sub> 开始形成, 出现了一个环鞍点, 即出现了一个  $\Delta$  型结构过渡区, 此时环鞍点与 O<sub>3</sub>-O<sub>2</sub> 键鞍点重合. 随着反应的进行, 新键 O<sub>3</sub>-O<sub>2</sub> 不断变短, 旧键 O<sub>3</sub>-Cl<sub>1</sub> 不断变长, 环鞍点逐渐向旧键 O<sub>3</sub>-Cl<sub>1</sub> 靠近, 当  $S_3=+1.60$  时, 环鞍点与旧键 O<sub>3</sub>-Cl<sub>1</sub> 键鞍点重合, 旧键 O<sub>3</sub>-Cl<sub>1</sub> 开始断裂, 环鞍点消失, 我们将  $S_3=-0.40$  到  $S_3=$

+1.60 定义为该反应的结构过渡区. 在  $S_3=+0.50$  时, 环鞍点 RCP 处  $\lambda_2$  值达到最大, 将该点定义为该反应的“结构过渡态”(STS)<sup>[18]</sup>. 为了区别于结构过渡态, 我们定义传统意义上的过渡态为“能量过渡态”(ETS). 结构过渡态一般不与能量过渡态重合. 该反应过程是放热过程, 结构过渡态出现在能量过渡态 TS3 之后, 与我们提出的“放热反应结构过渡态出现在能量过渡态之后”的结论<sup>[18,19]</sup>一致. 在结构过渡区内, O<sub>3</sub>-O<sub>2</sub> 键鞍点处的  $\rho$  值由 0.0393 增加到 0.0548, 进一步表明该键逐渐增强, O<sub>3</sub>-Cl<sub>1</sub> 键鞍点处的  $\rho$  值由 0.0507 减小到 0.0420, 进一步表明该键逐渐减弱.

对于 IOClO $\rightarrow$ IClO<sub>2</sub> 过程(表 2(b) 及图 3(b)), 结构过渡区出现在  $S_4=-1.05$  到  $S_4=+0.24$  之间, 结构过渡态出现在  $S_4=-0.28$  处. 在该过渡区内, I<sub>4</sub>-Cl<sub>1</sub> 键鞍点处的  $\rho$  值由 0.0137 增加到 0.0185, 表明该键逐

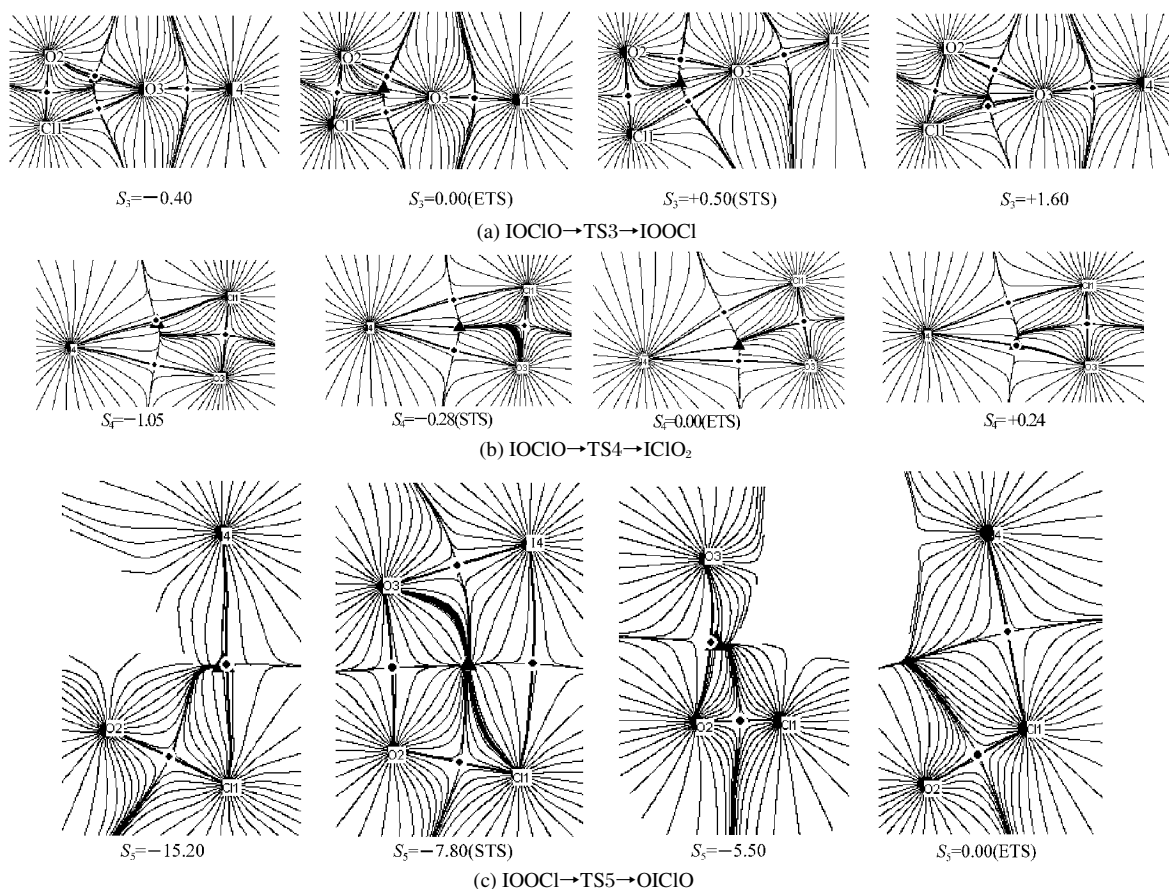


图3 异构化过程 IRC 途径上一些重要点的电子密度梯度径图

Fig.3 Gradient paths of the electronic density on the IRC path of the isomerization processes

渐增强, I<sub>1</sub>—O<sub>3</sub> 键鞍点处  $\rho$  由 0.0188 减小到 0.0133, 表明该键逐渐减弱. 该反应过程是吸热过程, 结构过渡态出现在能量过渡态 TS4 之前, 与我们提出的“吸热反应结构过渡态出现在能量过渡态之前”的结论<sup>[18,19]</sup>一致.

对于 IOOCl → OIClO 过程(表 2(c)及图 3(c))结构过渡区出现在  $S_5 = -15.20$  到  $S_5 = -5.50$  之间, 结构过渡态出现在  $S_5 = -7.80$  处. 该反应过程是吸热过程, 结构过渡态出现在能量过渡态 TS5 之前, 与我们提出的“吸热反应结构过渡态出现在能量过渡态之前”的结论<sup>[18,19]</sup>一致. 在该过渡区内, I<sub>1</sub>—Cl<sub>1</sub> 键鞍点处的  $\rho$  值由 0.0173 增加到 0.0474, 表明该键逐渐增强, O<sub>3</sub>—O<sub>2</sub> 键鞍点处的  $\rho$  值由 0.2892 减小到 0.0289, 即该键逐渐减弱.

IOClO → IOOCl 与 IOClO → IClO<sub>2</sub> 分别形成三元环结构过渡态, IOOCl → OIClO 形成四元环结构过渡态. IOClO → IOOCl 过程为放热反应, 结构过渡态出现在能量过渡态之后, IOClO → IClO<sub>2</sub> 与 IOOCl → OIClO 过程为吸热反应, 结构过渡态均出

现在能量过渡态之前, 与我们提出的“吸热反应结构过渡态出现在能量过渡态之前, 放热反应出现在能量过渡态之后”结论<sup>[18,19]</sup>一致.

IOClO → IOOCl 过程放热 36.79 kJ·mol<sup>-1</sup>, 对应的结构过渡区为  $S_3 = -0.40 \rightarrow +1.60$ ; IOClO → IClO<sub>2</sub> 过程和 IOOCl → OIClO 过程分别吸热 15.12 kJ·mol<sup>-1</sup> 和 69.90 kJ·mol<sup>-1</sup>, 对应的结构过渡区分别为  $S_4 = -1.05 \rightarrow +0.24$  和  $S_5 = -15.20 \rightarrow -5.50$ . 进一步验证了我们以前提出的“吸热或放热程度越大, 对应的结构过渡区越长”的结论<sup>[20]</sup>.

### 3 结论

(1) 优化得到了 IClO<sub>2</sub> 的七种异构体的构型, 其中 OIClO 和 IClOO 构型为首次报道, 振动分析确认了该两种构型为稳定构型. 七种异构体的热力学相对稳定顺序为 ClIO<sub>2</sub> > ClOIO > IOOCl > IOClO > IClO<sub>2</sub> > OIClO > IClOO.

(2) 找到了各异构化过程的过渡态, 并通过内禀反应坐标(IRC)计算确认了各个异构体之间的相互

转化关系.

(3) IOClO $\rightarrow$ IOOCl 与 IOClO $\rightarrow$ IClO<sub>2</sub> 分别经历三元环结构过渡态, IOOCl $\rightarrow$ OIClO 经历四元环结构过渡态, 以上结构过渡态与能量过渡态的相对位置都与本课题组提出的“吸热反应结构过渡态出现在能量过渡态之前, 放热反应出现在能量过渡态之后”的结论一致.

(4) IOClO $\rightarrow$ IOOCl 过程放热 36.79 kJ $\cdot$ mol<sup>-1</sup>, IOClO $\rightarrow$ IClO<sub>2</sub> 过程和 IOOCl $\rightarrow$ OIClO 过程分别吸热 15.12 kJ $\cdot$ mol<sup>-1</sup> 和 69.90 kJ $\cdot$ mol<sup>-1</sup>, 对应的结构过渡区分别为  $S_3=-0.40\rightarrow+1.60$ ,  $S_4=-1.05\rightarrow+0.24$  和  $S_5=-15.20\rightarrow-5.50$ . 进一步验证了我们以前提出的“吸热或放热程度越大, 对应的结构过渡区越长”的结论.

## References

- Solomon, S.; Garcia, R. R.; Ravishankara, A. R. *J. Geophys. Res.*, **1994**, **99**: 491
- Turnipseed, A. A.; Gilles, M. K.; Burkholder, J. B.; Ravishankara, A. R. *Chem. Phys. Lett.*, **1995**, **242**: 427
- Bedjanian, Y.; Le Bras, G.; Poulet, G. *Chem. Phys. Lett.*, **1997**, **266**: 233
- Gilles, M. K.; Turnipseed, A. A.; Burkholder, J. B.; Ravishankara, A. R. *Chem. Phys. Lett.*, **1997**, **272**: 75
- Laszlo, B.; Kurylo, M. J.; Huie, R. E. *J. Phys. Chem.*, **1995**, **99**: 11701
- Harwood, M. H.; Burkholder, J. B.; Hunter, M.; Fox, R. W.; Ravishankara, A. R. *J. Phys. Chem. A*, **1997**, **101**: 853
- Bedjanian, Y.; Le Bras, G.; Poulet, G. *J. Phys. Chem. A*, **1997**, **101**: 4088
- Turnipseed, A. A.; Gilles, M. K.; Burkholder, J. B.; Ravishankara, A. R. *J. Phys. Chem. A*, **1997**, **101**: 5517
- Gilles, M. K.; Turnipseed, A. A.; Burkholder, J. B.; Ravishankara, A. R.; Solomon, S. *J. Phys. Chem. A*, **1997**, **101**: 5526
- Laszlo, B.; Huie, R. E.; Kurylo, M. J.; Miziolek, A. W. *J. Geophys. Res.*, **1997**, **102**: 1523.
- De More, W. B.; Sander, S. P.; Golden, D. M.; Hampson, R. F.; Kurylo, M. J.; Howard, C. J.; Ravishankara, A. R.; Kolb, C. E.; Molina, M. J. Chemical kinetics and photochemical data for use in stratospheric modeling. NASA, JPL, California Institute of Technology: Pasadena, CA: 1994
- Atkinson, D. B.; Hudgens, J. W.; Orr-Ewing, A. J. *J. Phys. Chem. A*, **1999**, **103**: 6173
- Papayannis, D. K.; Melissas, V. S.; Kosmas, A. M. *Chem. Phys. Lett.*, **2001**, **349**: 299
- Martin, J. M. L.; Sundermann, A. *J. Chem. Phys.*, **2001**, **114**(8): 3408
- Zheng, S. J.; Cai, X. H.; Meng, L. P. *QCPE Bull.*, **1995**, **15**(2): 25
- Biegler-König, F. AIM2000, Version 1.0. University of Applied Science, Bielefeld, Germany
- Bader, R. F. W. *Chem. Rev.*, **1991**, **91**(5): 893
- Zeng, Y. L.; Zheng, S. J.; Meng, L. P. *Inorg. Chem.*, **2004**, **43**: 5311
- Zheng, S. J.; Meng, L. P.; Cai, X. H.; Xu, Z. F.; Fu, X. Y. *J. Comput. Chem.*, **1997**, **18**: 1167
- Sun, C. H.; Zeng, Y. L.; Meng, L. P.; Zheng, S. J. *Acta Chim. Sin.*, **2005**, **63**: 295 [孙翠红, 曾艳丽, 孟令鹏, 郑世钧. 化学学报, **2005**, **63**: 295]