

Full Papers

**Li<sup>+</sup> 粘帖 CH<sub>n</sub>Cl<sub>3-n</sub>O<sub>2</sub> 和 CF<sub>n</sub>Cl<sub>3-n</sub>O<sub>2</sub> (n = 1~3) 自由基: Li<sup>+</sup>-CH<sub>n</sub>Cl<sub>3-n</sub>O<sub>2</sub> 和 Li<sup>+</sup>-CF<sub>n</sub>Cl<sub>3-n</sub>O<sub>2</sub> 的结构与性质的研究**

程爽<sup>1,2</sup>, 李海洋<sup>\*2</sup>, 刘颖<sup>1</sup>

<sup>1</sup>中国科学院环境光学与技术重点实验室, 中国科学院安徽光学精密机械研究所, 安徽合肥, 230031

<sup>2</sup>中国科学院大连物理化学研究所, 辽宁大连, 116023

收稿日期 2005-11-25 修回日期 2006-3-31 网络版发布日期 接受日期

摘要 采用了从头算分子轨道理论和密度泛函理论 (B3LYP), 分别在6-311G

(d, p), 6-311+G (d, p), 6-311+G (2d, p) 和 6-311+G (2df, 2p) 基组上优化CH<sub>n</sub>Cl<sub>3-n</sub>O<sub>2</sub>-Li<sup>+</sup>和CF<sub>n</sub>Cl<sub>3-n</sub>O<sub>2</sub>-Li<sup>+</sup> (n = 1 ~ 3)的几何结构, 并对这些优化出的稳定结构进行了化学键和NBO分析。理论计算出的锂离子对CH<sub>n</sub>Cl<sub>3-n</sub>O<sub>2</sub>和CF<sub>n</sub>Cl<sub>3-n</sub>O<sub>2</sub>的亲能和都超过10 kcal/mol, 这表明络合物CH<sub>n</sub>Cl<sub>3-n</sub>O<sub>2</sub>-Li<sup>+</sup>

和 CF<sub>n</sub>Cl<sub>3-n</sub>O<sub>2</sub>-Li<sup>+</sup>在气态下是稳定的, CH<sub>n</sub>Cl<sub>3-n</sub>O<sub>2</sub>和 CF<sub>n</sub>Cl<sub>3-n</sub>O<sub>2</sub>自由基可以用Li<sup>+</sup>离子粘帖质谱技术来检测。

关键词 [氯氟甲基过氧自由基, 氯甲基过氧自由基, 离子吸附质谱](#)

分类号

**>Li<sup>+</sup> Ion Attachment to Chloromethyl and Chlorofluoromethyl Peroxyl Radicals: Structures and Properties of CH<sub>n</sub>Cl<sub>3-n</sub>O<sub>2</sub>-Li<sup>+</sup> and CF<sub>n</sub>Cl<sub>3-n</sub>O<sub>2</sub>-Li<sup>+</sup>**

CHENG Shuang<sup>1,2</sup>, LI Hai-Yang<sup>\*2</sup>, LIU Ying<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Key Laboratory of Environmental Optics and Technology, Anhui Institute of Optics and Fine Mechanics, Chinese Academy of Sciences, Hefei, Anhui 230031, China

<sup>2</sup> Dalian Institute of Chemical Physics, Chinese Academy of Sciences, Dalian, Liaoning 116023, China

**Abstract** The structures and stabilities of these still experimentally unknown CH<sub>n</sub>Cl<sub>3-n</sub>O<sub>2</sub>-Li<sup>+</sup> and CF<sub>n</sub>Cl<sub>3-n</sub>O<sub>2</sub>-Li<sup>+</sup> ions have been theoretically investigated by *ab initio* molecular orbital theory and density functional theory (DFT) in conjunction with the 6-311G(d,p), 6-311+G(d,p), 6-311+G(2d,p) and 6-311+G(2df,2p) basis sets. The optimized geometries, chemical bonding and NBO analysis indicate that these complexes of CH<sub>n</sub>Cl<sub>3-n</sub>O<sub>2</sub>-Li<sup>+</sup> and CF<sub>n</sub>Cl<sub>3-n</sub>O<sub>2</sub>-Li<sup>+</sup> exist as ion-dipole molecules. The calculated affinity energies of these species exceed 41.9 kJ/mol, which are large enough to suggest the possibility that these title complexes could be detected as stable species in gas phase by Li<sup>+</sup> ion attachment mass spectrometry.

**Key words** [chloromethyl](#) [chlorofluoromethyl peroxy](#) [ion attachment mass spectrometry](#)

DOI:

通讯作者 李海洋 [hli@dicp.ac.cn](mailto:hli@dicp.ac.cn)

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF\(0KB\)](#)

▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)

▶ [参考文献](#)

服务与反馈

▶ [把本文推荐给朋友](#)

▶ [加入我的书架](#)

▶ [加入引用管理器](#)

▶ [复制索引](#)

▶ [Email Alert](#)

▶ [文章反馈](#)

▶ [浏览反馈信息](#)

相关信息

▶ [本刊中 包含](#)

[“氯氟甲基过氧自由基, 氯甲基过氧自由基, 离子吸附质谱” 的相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

· [程爽](#)

· [李海洋](#)

· [刘颖](#)