

研究论文

CF<sub>3</sub>C(O)O<sub>2</sub>+HO<sub>2</sub>反应机理的理论研究

周玉芝<sup>1,2</sup>, 张绍文<sup>1</sup>, 李前树<sup>1</sup>

1. 北京理工大学物理化学研究所, 北京 100081;
2. 北京教育学院化学系, 北京 100044

收稿日期 2005-12-7 修回日期 网络版发布日期 2007-3-28 接受日期

摘要 用量子化学密度泛函方法, 在CCSD(T)/cc-pVDZ//B3LYP/6-31+G(d,p)水平上研究了氟代乙酰过氧自由基[CF<sub>3</sub>C(O)O<sub>2</sub>]和氢过氧自由基(HO<sub>2</sub>)的反应机理. 研究表明, 反应物优先生成能量低的单态反应络合物, 进而经过相对较低的反应势垒生成臭氧和氟代羧酸, 即CF<sub>3</sub>C(O)O<sub>2</sub>+HO<sub>2</sub>→CF<sub>3</sub>C(O)OH+O<sub>3</sub>为主要反应. 该结论与实验结果一致.

关键词 [氟代酰基过氧自由基](#) [氟代羧酸](#) [DFT](#) [反应机理](#)

分类号 [O641](#)

DOI:

通讯作者:

李前树 [qsli@bit.edu.cn](mailto:qsli@bit.edu.cn)

作者个人主页: 周玉芝<sup>1,2</sup>; 张绍文<sup>1</sup>; 李前树<sup>1</sup>

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF\(342KB\)](#)

▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)

▶ [参考文献\[PDF\]](#)

▶ [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](#)

▶ [引用本文](#)

▶ [Email Alert](#)

▶ [文章反馈](#)

▶ [浏览反馈信息](#)

相关信息

▶ [本刊中 包含“氟代酰基过氧自由基”的 相关文章](#)

▶ [本文作者相关文章](#)

· [周玉芝, 张绍文, 李前树](#)