

參考文獻：

- (1) A. Szabo; N. S. Ostlund, *Modern Quantum Chemistry*. 1st ed.; McGRAW-HILL: New York: **1982**.
- (2) I. N. Levine, *Quantum Chemistry*. 5th ed.; Prentice Hall: **2000**.
- (3) W. J. Hehre; L. Radom; P. v. R. Sckleyer; Pople, J. A., ab initio Molecular Orbital Theory. John Wiley & Sons: New York, **1986**.
- (4) A. E. Frisch; Foresman, J. B., *Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods*. 2nd ed.; Gaussian, Inc.: **1996**.
- (5) W. J. Hehre; J. Yu; P.E. Klunzinger; Lou, L., *A Brief Guide to Molecular Mechanics and Quantum Chemical Calculations*. Wavefunction, Inc: Irvine, **1998**.
- (6) C. J. Cramer, *Essentials of Computational Chemistry—Theories and Models*. John Wiley & Sons: New York, **2002**.
- (7) R. McWeeny; Dierksen, G., Self-Consistent Perturbation Theory. II. Extension to Open Shells. *J. Chem. Phys.* **1968**, 49, 4852.
- (8) Ø. Burrau, Kgl. Danske Videnskab. Selskab, *Mat. Fys. Medd.*, **1927**, 7, 14
- (9) W. Heitler and F. London, *Z. Physik.*, **1927**, 44, 455

- (10) P. Hohenberg; W. Kohn, Inhomogeneous Electron Gas. *Phys. Rev. B* **1964**,136,864
- (11) J. B. Foresman; A. Frisch, *Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods*. 2nd ed.; **1964**.
- (12) W. Kohn; Sham, L. J., Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects. *Phys. Rev. A* **1965**,140, 1133.
- (13) Kohn, W.; Sham, L. J. *Phys. Rev.* **1965**,140,A1133
- (14) White, J. A.; Bird, D. M. *Phys. Rev. B* **1994**,50,4954
- (15) A. D. Becke, Density-functional thermochemistry. III. The role of exact exchange. *J. Chem. Phys.* **1993**, 98, 5648.
- (16) M. A. Frisch; J. A. Pople; J. S. Binkley, Self-consistent molecular orbital methods 25. Supplementary functions for Gaussian basis sets. *J. Chem. Phys.* **1984**,80, 3265.
- (17) C. Lee; W. Yang; R. G. Parr, Development of the Colle-Salvetti correlation-energy formula into a functional of the electron density. *Phys. Rev. B* **1988**,37, 785.
- (18) C. J. Cramer, *Essentials of Computational Chemistry - Theories and Models*. John Wiley & Sons: New York, **2002**.

- (19) J. J. P. Stewart, Optimization of parameters for semiempirical methods I. Method. *J. Comput. Chem.* **1989**,10, 209.
- (20) J. J. P. Stewart, Optimization of parameters for semiempirical methods II. Applications. *J. Comput. Chem.* **1989**,10, 221.
- (21) J. J. P. Stewart, Reply to "Comments on a comparison of AM1 with the recently developed PM3 method". *J. Comput. Chem.* **1990**,11, 543.
- (22) J. J. P. Stewart, Optimization of parameters for semiempirical methods. III Extension of PM3 to Be, Mg, Zn, Ga, Ge, As, Se, Cd, In, Sn, Sb, Te, Hg, Tl, Pb, and Bi. *J. Comput. Chem.* **1991**,12, 320.
- (23) M. J. Frisch; Trucks, G. W.; H. B. Schlegel; G. E. Scuseria; M. A. Robb; J. R. Cheeseman; V. G. Zakrzewski; J. A. Montgomery, Jr., R. E. S.; J. C. Burant, S. D.; J. M. Millam; A. D. Daniels; K. N. Kudin; M. C. Strain; O. Farkas; J. Tomasi; V. Barone; M. Cossi; R. Cammi; B. Mennucci; C. Pomelli; C. Adamo; S. Clifford; J. Ochterski, G. A. P., P. Y. Ayala, Q. Cui; K. Morokuma; P. Salvador; J. J. Dannenberg; D. K. Malick; A. D. Rabuck; K. Raghavachari; J. B. Foresman; J. Cioslowski; J. V. Ortiz; A. G. Baboul, B. B. S., G. Liu, A. Liashenko; P. Piskorz; I. Komaromi; R. Gomperts; R. L. Martin; D. J. Fox; T.

Keith; M. A. Al-Laham; C. Y. Peng; A. Nanayakkara; M.

Challacombe; P. M. W. Gill; B. Johnson; W. Chen; M. W. Wong; J. L.

Andres; C. Gonzalez; M. Head-Gordon; J. A. Pople; Replogle, E. S.

Gaussian03, C2; Gaussian, Inc: Pittsburgh, **2004**.

(24) Yung Y. L., Allen M., Pinto J. P; *Astrophys. J. Suppl.[J]*, **1984**, 55:

465-506

(25) Yung Y. L.; *Lcarus[J]*, **1987**, 72: 468-472

(26) Bernheim, R. A.; Kempf, R. J.; Humer, P. W.; Skell, P. S. J.

Chem.Phys. **1964**, 41, 1156.

(27) Wasserman, E.; Yager, W. A.; Kuck, V. J. *Chem. Phys. Lett.* **1970**, 7,

409.

(28) Dendramis, A.; Leroi, G. E. *J. Chem. Phys.* **1977**, 66, 4334.

(29) Saito, S.; Endo, Y.; Hirota, E. *J. Chem. Phys.* **1984**, 80, 1427.

(30) Brown, F. X.; Saito, S.; Yamamoto, S. *J. Mol. Spectrosc.* **1990**, 143,

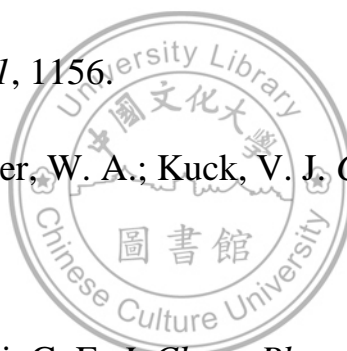
203.

(31) Morter, C. L.; Farhat, S. K.; Curl, R. F. *Chem. Phys. Lett.* **1993**, 207,

153.

(32) McCarthy, M. C.; Gottlieb, C. A.; Cooksy, A. L.; Thaddeus, P. J.

Chem. Phys. **1995**, 103, 7779.



- (33)Sun, F.; Kosterev, A.; Scott, G.; Litosh, V.; Curl, R. F. *J. Chem. Phys.* **1998**, *109*, 8851.
- (34)Han, J.-X.; Hung, P. Y.; DeSain, J.; Jones, W. E.; Curl, R. F. *J. Mol. Spectrosc.* **1999**, *198*, 421.
- (35)Allen, M. D.; Evenson, K. M.; Brown, J. M. *J. Mol. Spectrosc.* **2001**, *209*, 143.
- (36)Hung, P. Y.; Sun, F.; Hunt, N. T.; Burns, L. A.; Curl, R. F. *J. Chem. Phys.* **2001**, *115*, 9331.
- (37)Nimlos, M. R.; Davico, G.; Geise, C. M.; Wenthold, P. G.;
Lineberger, W. C.; Blanksby, S. J.; Hadad, C. M.; Petersson, G. A.;
Ellison, G. B. *J. Chem. Phys.* **2002**, *117*, 4323.
- (38)Zandler, M. E.; Goddard, J. D.; Schaefer, H. F., III. *J. Am. Chem. Soc.* **1979**, *101*, 1072.
- (39)Kim, K. S.; Schaefer, H. F., III; Radom, L.; Pople, J. A.; Binkley, J.
S. J. Am. Chem. Soc. **1983**, *105*, 4148.
- (40)Rice, J. E.; Schaefer, H. F., III. *J. Chem. Phys.* **1987**, *86*, 7051.
- (41)Seidl, E. T.; Schaefer, H. F., III. *J. Chem. Phys.* **1992**, *96*, 4449.
- (42)Aoki, K.; Ikuta, S.; Nomura, O. *J. Chem. Phys.* **1993**, *99*, 3809.

- (43) Kellogg, C. B.; Galbraith, J. M.; Fowler, J. E.; Schaefer, H. F., III. *J. Chem. Phys.* **1994**, *101*, 430.
- (44) Francisco, J. S. *Chem. Phys. Lett.* **1994**, *230*, 372.
- (45) Goldberg, N.; Fiedler, A.; Schwarz, H. *J. Phys. Chem.* **1995**, *99*, 15327.
- (46) Nimlos, M.; Davico, G.; Wenthold, P.; Lineberger, W.; Blanksby, S.; Hadad, C.; Peterson, G.; Ellison, G. *J. Chem. Phys.* **2002**, *117*, 4323.
- (47) Poutsma, J. C.; Upshaw, S. D.; Squires, R. R.; Wenthold, P. G. *J. Phys. Chem. A* **2002**, *106*, 1067.
- (48) Koput, J. *J. Phys. Chem. A* **2002**, *106*, 6183.
- (49) Koput, J. *J. Phys. Chem. A* **2003**, *107*, 4717.
- (50) Kalcher, J. *Chem. Phys. Lett.* **2005**, *403*, 146.
- (51)(a) IPCC Intergovernmental Panel on Climate Change, Climate Change 2001: The Scientific Basis, Technical Summary. UNEP, WMO, **2001**. (b) Inglezaks, V. J.; Pouloupoulos, S. G. *Adsorption, Ion Exchange and catalysis Design of Operations and Environmental Applications*, First ed.; Elsevier: Amsterdam, The Netherlands; **2006**; Ch 1, pp 1-30.

- (52)(a) Hurst, B. E. *Stud. Environ. Sci.* **1982**, *21*, 725. (b) Dean, A. M. et al. U. S. Patent 4, 507, 269, **1985**. (c) Miller, J. A.; Kee, R. J.; Westbrook, C. K. *Annu. Rev. Phys. Chem.* **1990**, *41*, 345. (d) Medhurst, L. J.; Garland, N. L.; Nelson, H. H. *J. Phys. Chem.* **1993**, *97*, 12275. (e) Corma, A.; García, H. *Chem. Rev.* **2002**, *102*, 3837.
- (53) Adamson, J. D.; DeSain, J. D.; Curl, R. F.; Glass, G. P. *J. Phys. Chem. A* **1997**, *101*, 864.
- (54) Zhu, R. S.; Lin, M. C. *J. Phys. Chem. A* **2000**, *104*, 10807.
- (55)(a) Rim, K. T.; Hershberger, J. F. *J. Phys. Chem. A* **1998**, *102*, 4592.
(b) Rim, K. T.; Hershberger, J. F. *J. Phys. Chem. A* **1998**, *102*, 5898.
(c) Baren, R. E.; Hershberger, J. F. *J. Phys. Chem. A* **2002**, *106*, 11093. (d) Thweatt, W. D.; Erickson, M. A.; Hershberger, J. F. *J. Phys. Chem. A* **2004**, *108*, 74. (e) Meyer, J. P.; Hershberger, J. F. *J. Phys. Chem. A* **2005**, *109*, 4772.
- (56) Liu, P. J.; Pan, X. M.; Zhao, M.; Sun, H.; Wu, Z. M.; Wang, R. S. *Chem. J. Chin. Univ.* **2004**, *25*, 685.
- (57) Chen, H.-T.; Ho, J.-J. *J. Phys. Chem. A* **2005**, *109*, 2564.
- (58) Huang, C. L.; Tseng, S. Y.; Wang, T. Y.; Wang, N. S.; Xu, Z. F.; Lin, M. C. *J. Chem. Phys.* **2005**, *122*, 184321.

- (59)(a) Wei, Z. G.; Huang, X. R.; Sun, Y. B.; Sun, C. C. *Chem. J. Chin. Univ.* **2004**, *25*, 2112. (b) Wei, Z. G.; Li, Q. S.; Zhang, S. W.; Sun, Y. B.; Sun, C. C. *J. Mol. Struct. (Theochem)* **2005**, *722*, 139.
- (60) Jin, L.; Ding, Y. H.; Wang, J.; Sun, C. C. *J. Comput. Chem.* **2006**, *27*, 883.
- (61)(a) Chen, H.-L.; Ho, J.-J. *J. Mol. Struct. (Theochem)* **2006**, *772*, 93. (b) Chen, H.-L.; Wu, C.-W.; Ho, J.-J. *J. Phys. Chem. A* **2006**, *110*, 8893. (c) Chen, H.-L.; Li, H.-J.; Ho, J.-J. *Chem. Phys. Lett.* **2007**, *442*, 35. (d) Chen, H.-L.; Zhu, R. S.; Chen, H.-T.; Li, H.-J.; Ju, S.-P. *J. Phys. Chem. A* **2008**, *112*, 5495. (e) Jian, R.-C.; Tsai, C.; Hsu, L.-C.; Chen, H.-L. *J. Phys. Chem. A* **2010**, *114*, 4655. (f) Li, H.-J.; Chen, H.-L.; Chang, J.-G.; Chen, H.-T.; Wu, S.-Y.; Ju, S.-P. *J. Phys. Chem. A* **2010**, *114*, 5894. (g) Chen, H.-L.; Jian, R.-C.; Tsai, C. *Chem. Phys. Lett.* **2010**, *497*, 153.
- (62) Frisch, M. J.; Trucks, G. W.; Schlegel, H. B.; Scuseria, G. E.; Robb, M. A.; Cheeseman, J. R.; Montgomery, J. A., Jr.; Vreven, T.; Kudin, K. N.; Burant, J. C.; Millam, J. M.; Iyengar, S. S.; Tomasi, J.; Barone, V.; Mennucci, B.; Cossi, M.; Scalmani, G.; Rega, N.; Petersson, G. A.; Nakatsuji, H.; Hada, M.; Ehara, M.; Toyota, K.; Fukuda, R.;

Hasegawa, J.; Ishida, M.; Nakajima, T.; Honda, Y.; Kitao, O.; Nakai, H.; Klene, M.; Li, X.; Knox, J. E.; Hratchian, H. P.; Cross, J. B.; Adamo, C.; Jaramillo, J.; Gomperts, R.; Stratmann, R. E.; Yazyev, O.; Austin, A. J.; Cammi, R.; Pomelli, C.; Ochterski, J. W.; Ayala, P. Y.; Morokuma, K.; Voth, G. A.; Salvador, P.; Dannenberg, J. J.; Zakrzewski, V. G.; Dapprich, S.; Daniels, A. D.; Strain, M. C.; Farkas, O.; Malick, D. K.; Rabuck, A. D.; Raghavachari, K.; Foresman, J. B.; Ortiz, J. V.; Cui, Q.; Baboul, A. G.; Clifford, S.; Cioslowski, J.; Stefanov, B. B.; Liu, G.; Liashenko, A.; Piskorz, P.; Komaromi, I.; Martin, R. L.; Fox, D. J.; Keith, T.; Al-Laham, M. A.; Peng, C. Y.; Nanayakkara, A.; Gill, P. M. W.; Challacombe, M.; Johnson, B.; Chen, W.; Wong, M. W.; Gonzalez, C.; Pople, J. A.

Gaussian 03, revision D.02; Gaussian: Wallingford CT, **2004**.

(63)(a) Becke, A. D. *J. Chem. Phys.* **1992**, *96*, 2155. (b) Becke, A. D. *J. Chem. Phys.* **1992**, *97*, 9173. (c) Becke, A. D. *J. Chem. Phys.* **1993**, *98*, 5648.

(64) Lee, C.; Yang, W.; Parr, R. G. *Phys. Rev.* **1988**, *B37*, 785.

(65) Gonzalez, C.; Schlegel, H. B. *J. Phys. Chem.* **1989**, *90*, 2154.

- (66) Lee, T. J.; Scuseria, G. In *Quantum-mechanical Electronic Structure Calculations with Chemical Accuracy*; Langhoff, S. F., Ed.; Kluwer: Dordrecht, Netherlands, **1995**.
- (67) Knowles, P. J.; Hampel, C.; Werner, H.-J. *J. Chem. Phys.* **1993**, *99*, 5219.
- (68)(a) Klippenstein, S. J.; Marcus, R. A. *J. Chem. Phys.* **1987**, *87*, 3410.
(b) Klippenstein, S. J. *Chem. Phys. Letts.* **1990**, *170*, 71. (c) Klippenstein, S. J. *J. Chem. Phys.* **1992**, *96*, 367. (d) Klippenstein, S. J. *J. Phys. Chem.* **1994**, *98*, 11459.
- (69)(a) Wardlaw, D. M.; Marcus, R. A. *Chem. Phys. Lett.* **1984**, *110*, 230.
(b) Wardlaw, D. M.; Marcus, R. A. *J. Chem. Phys.* **1985**, *83*, 3462.
- (70) Klippenstein, S. J.; Wagner, A. F.; Dunbar, R. C.; Wardlaw, D. M. Robertson, S. H. *VARIFLEX*, Version 1.00, Argonne National Laboratory, Argonne, IL, **1999**.
- (71) Kuo, S. C.; Zhang, Z.; Ross, S. K.; Klemm, R. B. *J. Phys. Chem. A* **1997**, *101*, 4035.
- (72) Lide, R. D. *CRC Handbook of Chemistry and Physics*, 76th edn., CRC Press, Boca Raton, FL, USA, **1995**.

- (73)(a) Chase, M. W., Jr. *NIST-JANAF Thermochemical Tables*, 4th ed.; American Chemical Society: Washington, D.C.; American Institute of Physics for the National Institute of Standards and Technology: Woodbury: New York, **1998**. (b) Clifford, E. P.; Wenthold, P. G.; Lineberger, W. C.; Petersson, G. A.; Broadus, K. M.; Kass, S. R.; Kato, S.; DePuy, C. H.; Bierbaum, V. M.; Ellison, G. B. *J. Phys. Chem. A* **1998**, *102*, 7100. (c) Cyr, D. R.; Continetti, R. E.; Metz, R. B.; Osborn, D. L.; Neumark, D. M. *J. Chem. Phys.* **1992**, *97*, 4937. (d) Huang, Y. H.; Barts, S. A.; Halpern, J. B. *J. Phys. Chem.* **1992**, *96*, 425. (e) Mordaunt, D. H.; Osborn, D. L.; Choi, H.; Bise, R. T.; Neumark, D. M. *J. Chem. Phys.* **1996**, *105*, 6078. (f) Schuurman, M. S.; Muir, S. R.; Allen, W. D.; Schaefer, H. F. *J. Chem. Phys.* **2004**, *120*, 11586.
- (74) Klippenstein, S.J.; Wagner, A.F.; Dunbar, R.C.; Wardlaw, D.M.; Robertson, S.H. *VARIFLEX*, Version 1.00, Argonne National Laboratory, Argonne, IL, **1999**.
- (75) Bise, R.T.; Hoops, A.A.; Choi, H.; Neumark, D.M. *J. Chem. Phys.* **2000**, *113*, 4179.
- (76) Chase, M.W.; Jr. *NIST-JANAF Thermochemical Tables* (4th ed.). *J. Phys. Chem.* **1998**, *Ref. Data Suppl.* 1, Mono. 9.

- (77)Brown, S.S.; Berghout, H.L.; Crim, F.F. *J. Chem. Phys.* **1996**, 105, 8103.
- (78)Schuurman, M.S.; Muir, S.R.; Allen, W.D.; Schaefer, H.F. *J. Chem. Phys.* **2004**, 120, 11586.
- (79)Hippler, H.; Troe, J.; Wendelken, H.J. *J. Chem. Phys.* **1983**, 78, 6709.
- (80)Wardlaw, D.M.; Marcus, R.A. *J. Chem. Phys.* **1985**, 83, 3462.
- (81)Klippenstein, S.J. *J. Chem. Phys. Letts.* **1990**, 170, 71.
- (82)Gilbert, R.G.; Smith, S.C. *Theory of Unimolecular and Recombination Reactions*; Blackwell Scientific: Oxford, **1990**.
- (83)Zhu, R.S.; Hsu, C.C.; Lin, M.C. *J. Chem. Phys.* **2001**, 115, 195.
- (84)*Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **1985**, 82
- (85)Parr, R. G.; Yang, W. *J. Am. Chem. Soc.* **1984**, 106, 4049.
- (86)Yang, W.; Mortier, W. J. *J. Am. Chem. Soc.* **1986**, 108, 5708.
- (87)Nguyen, M. T.; Chandra, A. K.; Sakai, S.; Morokuma, K. *J. Org. Chem.* **1999**, 64, 65.
- (88)Nguyen, L. T.; Proft, F. D.; Chandra, A. K.; Uchimaru, T.; Nguyen, M. T.; Geerlings, P. *J. Org. Chem.* **2001**, 66, 6096.
- (89)López, P.; Méndez, F. *Org. Lett.* **2004**, 6, 1781.
- (90)Lin, Y.-l.; Lee, Y.-m.; Lim, C. *J. Am. Chem. Soc.* **2005**, 127, 11336.

- (91) Melin, J.; Ayers, P. W.; Ortiz, J. V. *J. Phys. Chem. A* **2007**, *111*, 10017.
- (92) Sato, T.; Tokunaga, K.; Tanaka, K. *J. Phys. Chem. A* **2008**, *112*, 758.
- (93) Estrada-Salas, R. E.; Valladares, A. A. *J. Phys. Chem. A* **2009**, *113*, 10299.
- (94) Gázquez, J. L.; Méndez, F. *J. Phys. Chem.* **1994**, *98*, 4591.
- (95) Hippler, H.; Troe, J.; Wendelken, H. J. *J. Chem. Phys.* **1983**, *78*, 6709.
- (96) Gilbert, R. G.; Smith, S. C. *Theory of Unimolecular and Recombination Reactions*; Blackwell Scientific: Oxford, **1990**.
- (97) Fulle, D.; Hamann, H. F.; Hippler, H. and Troe, J. *J. Chem. Phys.* **1996**, *105*, 983.
- (98) Zhu, R. S.; Diau, E. G. W.; Lin, M. C. Mebel, A. M. *J. Phys. Chem. A* **2001**, *105*, 11249.
- (99) Yang, T. J.; Wang, N. S.; Lee, L. C.; Xu, Z. F.; Lin, M. C. *J. Phys. Chem. A* **2008**, *112*, 10185.