

激光与光电子学进展

外电场下 4-溴苯酚的分子结构和解离特性

安桓¹, 闫好奎², 向梅^{1*}, 布玛丽亚·阿布力米提^{1**}, 王兴晨¹, 郑敬严¹¹新疆师范大学物理与电子工程学院, 新疆 乌鲁木齐 830054;²新疆计量测试研究院, 新疆 乌鲁木齐 830011

摘要 采用密度泛函方法(DFT)和含时密度泛函方法(TDDFT)在B3LYP/6-311+G(d,p)基组水平上优化计算了在不同外电场作用下4-溴苯酚分子的物理性质,包括键长、键角、分子体系总能量、偶极矩、能隙、红外光谱、解离特性以及激发态。研究表明在外电场(0~0.03 a.u.)作用下,4-溴苯酚分子结构有明显的变化,随着外电场的增强,分子C—Br键长、O—H键长、偶极矩逐渐增大,C—O键长、分子体系总能量、能隙逐渐减小;分子红外光谱的四个吸收峰均发生红移;同时前10个激发态也发生红移;当外电场强度为0.03 a.u.时,势垒消失,分子发生解离。

关键词 原子与分子物理; 解离特性; 密度泛函理论; 4-溴苯酚; 外电场

中图分类号 O561.1

文献标志码 A

doi: 10.3788/LOP202259.0302001

Molecular Structure and Dissociation Characteristic of 4-Bromophenol Under External Electric Fields

An Huan¹, Yan Haokui², Xiang Mei^{1*}, Bumaliya Abulimiti^{1**}, Wang Xingchen¹, Zheng Jingyan¹¹College of Physics and Electronic Engineering, Xinjiang Normal University, Urumqi, Xinjiang 830054, China;²Xinjiang Institute of Metrology and Testing, Urumqi, Xinjiang 830011, China

Abstract Density functional theory (DFT) and time-dependent density functional theory (TDDFT) at the B3LYP/6-311+G(d, p) level were used to calculate and optimize the physical characteristics of 4-bromophenol under the different electric fields, including the bond length, bond angle, total energy, dipole moment, energy gap, infrared spectrum, dissociation properties, and excited state. The results revealed a significant change in the molecular structure of 4-bromophenol under an external electric field (0-0.03 a. u.). The molecular C—Br bond length, O—H bond length, and dipole moment increased gradually with increasing external electric field, while the C—O bond length, total energy, and energy gap decreased gradually. The four absorption peaks of the molecular infrared spectrum showed a red shift. Simultaneously, the first 10 excited states also showed a red shift. When the external electric field intensity was 0.03 a. u., the potential barrier disappeared, and molecular dissociation was observed.

Key words atomic and molecular physics; dissociation characteristic; density functional theory; 4-bromophenol; external electric field

收稿日期: 2021-04-28; 修回日期: 2021-05-04; 录用日期: 2021-05-08

基金项目: 国家自然科学基金(21763027)、新兴污染物与生物标志物检测天山创新团队(2021D14017)、新疆区域协同创新专项(2019E0223)、新疆天山青年计划项目(2018Q072)、新疆高校科研项目(XJEDU2020Y029)、新疆师范大学“十三五”校级重点学科招标项目(17SDKD0602)、新疆研究生教育教学改革项目(XJ2021GY25)、新疆师范大学本科教学研究与管理项目(SDJG2021-12)

通信作者: *67634550@qq.com; **maryam917@163.com

1 引言

臭氧层作为地球的“宇航服”,吸收短波紫外线和部分中波紫外线,保护地球上的生物得以生存和繁殖。1974年 Molina 等^[1]发表关于氟利昂对臭氧层具有很大的破坏性,1985年 Joe Farman 用 27 年臭氧层变化的数据证明上述结论^[2];后经长期实验研究,科学家发现不仅氟利昂会破坏臭氧层^[3],哈龙分子等含卤族的分子解离后也会破坏臭氧层^[4-5]。在加外电场作用下,分子会发生一系列物理和化学变化^[5-7],例如分子化学键断裂,分子轨道、晶体感应、激发光谱等发生变化^[8-10],因此加外电场来研究分子的物理性质成为当下理论研究的热门领域之一^[11-15]。

4-溴苯酚被广泛应用于有机合成^[16-17]、制药工业^[18]、杀虫剂等领域。由于 4-溴苯酚分子在光照及受热条件下分解出溴化氢气体与大气中的臭氧层反应生成溴自由基^[19],这些基团与臭氧循环反应^[20]会造成对臭氧层的破坏。近年来 4-溴苯酚的降解引起了科研团队的广泛关注,如 Golan 等^[21]采用好氧菌株 *Ochrobactrum* sp. HI1 降解了 4-溴苯酚;Xu 等^[22]使用 Pd-Fe/石墨烯催化阴极和一个 Ti/IrO₂/RuO₂ 阳极的分隔电池,对 4-溴苯酚进行了电化学还原和氧化;Sharma 等^[23]介绍一种基于光芬顿(Se 掺杂的 CuO NPs)的新型降解系统,对 4-溴苯酚进行降解。据我们所知,通过外电场来研究 4-溴苯酚分子的结构和解离特性的相关报道还很少。本文采用密度泛函方法(DFT)和含时密度泛函方法(TDDFT)在 B3LYP/6-311+G(d,p)水平上优化计算了不同外电场(0~0.03 a. u.)作用下 4-溴苯酚分子的基态几何结构、能隙、红外光谱以及解离特性,为 4-溴苯酚分子进行外电场降解提供重要的理论依据。

2 理论及计算方法

在外电场作用下 4-溴苯酚分子体系哈密顿量 H 为

$$H = H_0 + H_{int}, \quad (1)$$

式中: H_0 为无外场时的哈密顿量; H_{int} 为外电场与分子体系的相互作用的哈密顿量。在偶极近似下,分子体系与外电场 F 的相互作用能为

$$H_{int} = -\mu F, \quad (2)$$

式中: μ 为分子的电偶极矩,其中 1 a. u. = 5.14225 × 10¹¹ V/m。

根据文献^[24-25]提出的模型,在外电场作用下的激发能 E_{exc} 与电场强度 F ,电偶极矩和极化率的

变化量 Δu 和 $\Delta \alpha$ 满足如下关系,

$$E_{exc}(F) \approx E_{exc}(0) - \Delta u \cdot F - \frac{1}{2} \Delta \alpha F^2, \quad (3)$$

式中: $E_{exc}(0)$ 为电场的激发能。吸收振子强度 f_{lu} 为

$$g_l f_{lu} = \frac{8\pi^2 m c a_0^2 \sigma}{3h} S = 3.03966 \times 10^{-6} \sigma S, \quad (4)$$

式中:线强度 S 为原子单位($e^2 a_0^2$); g_l 为加权因子,这里等于 1; m 为电子质量; c 为光速; h 为普朗克常数; a_0 为玻尔半径; σ 表示波数^[26]。收敛条件为 SCF 收敛和 davidson 迭代收敛,其中 SCF 收敛为最大力 ≤ 0.00045,均方根力 ≤ 0.0003,最大位移 ≤ 0.0018,均方根位移 ≤ 0.001200;davidson 迭代收敛为所要计算的 n 个态的波函数变化量小于 0.001。

本文通过不同的方法和基组模拟多种情形,对 4-溴苯酚分子进行结构优化计算,将计算得到的键长、键角与实验值做比较,选取出最合适的 DFT/B3LYP 方法 6-311+G(d,p) 基组;通过外加不同电场(0~0.03 a. u.)条件下,计算分析 4-溴苯酚分子的几何构型、偶极矩、电荷分布、振动频率、轨道能级分布、红外光谱、解离势能面以及分子前 10 个单重激发态的变化情况。本文的理论计算均在 Gaussian 09^[27]量子化学计算软件中进行。

3 结果与讨论

3.1 4-溴苯酚分子的基态稳定构型

在无外电场作用下,对 4-溴苯酚分子的 B3LYP/6-31+G、Semi-empirical/PM6、B3LYP/6-311+G(d,p)、HF/6-31+G(d,p)、HF/6-311+G(d,p)等基组进行优化计算,将优化出的平衡核间距 R 、键角 A 与实验值做比较,结果如表 1 所示。表中数据表明,计算基组 B3LYP/6-311+G(d,p) 得到的平衡核间距、键角与实验数据基本相符,因此加外电场时均选用 DFT/B3LYP 方法 6-311+G(d,p) 基组进行模拟计算。计算得到的稳定构型如图 1 所示,建立笛卡儿坐标系(Y 轴沿着 Br—C 连线)。

3.2 外加电场对 4-溴苯酚分子键长和能量的影响

在 Y 轴方向加不同外电场,采用 DFT/B3LYP 方法 6-311+G(d,p) 基组进行结构优化,得到分子稳定构型。研究了不同外电场(0~0.03 a. u.)作用下,4-溴苯酚分子键长 R 、分子体系总能量 E (1 Hartree = 2625.5 kJ·mol⁻¹)、电偶极矩 μ (1 Debye = 3.33564 × 10⁻³⁰ C·m) 的影响如表 2 所示。

不同外电场作用下 4-溴苯酚分子键长的变化如图 2 所示,分子 C—Br 键长随外电场增强而增大,

表 1 不同方法优化 4-溴苯酚分子基态的结构

Table 1 Ground state structures of 4-bromophenol molecules optimized by different methods

Parameter	B3LYP/ 6-31+G	Semi-empirical/ PM6	B3LYP/ 6-311+G(d,p)	HF/6-31+ G(d,p)	HF/6-311+ G(d,p)	Experimental value ^[28]
$R(6,13) / \text{Å}$	1.94796	1.90910	1.91881	1.89006	1.90146	1.91378
$R(1,2) / \text{Å}$	1.39885	1.39628	1.39359	1.38598	1.38494	1.39546
$R(3,11) / \text{Å}$	1.40993	1.38825	1.38745	1.36752	1.36640	1.36660
$R(5,10) / \text{Å}$	1.08326	1.09193	1.08246	1.07364	1.07336	1.08473
$R(11,12) / \text{Å}$	0.97827	0.98203	0.96282	0.94420	0.94186	0.98972
$A(1,6,13) / (^\circ)$	119.15890	119.07557	119.43041	119.67087	119.58250	119.61728
$A(2,1,7) / (^\circ)$	120.64629	119.93268	120.33960	120.12178	120.18052	120.20896
$A(4,3,11) / (^\circ)$	119.68248	118.74810	119.89736	119.87399	119.94049	117.30265

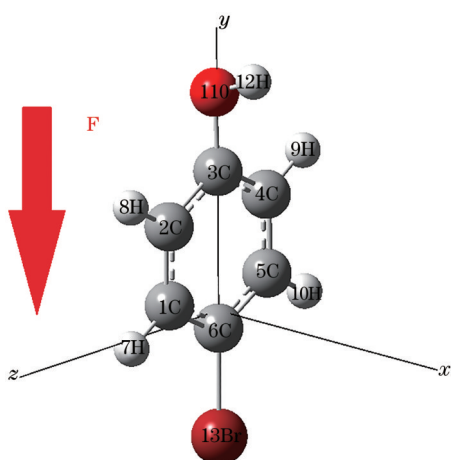


图 1 无外电场下的 4-溴苯酚分子的稳定基态构型

Fig. 1 Stable ground state configuration of 4-bromophenol molecule without external electric field

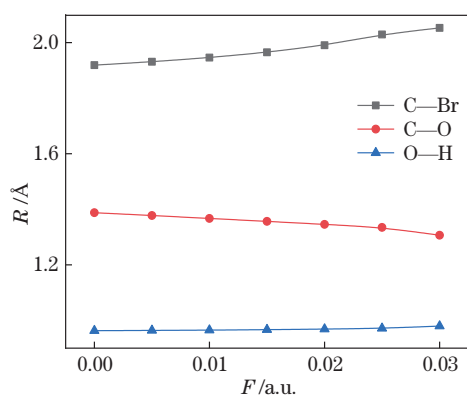


图 2 不同外电场下的 4-溴苯酚分子键长的变化图

Fig. 2 Change of 4-bromophenol molecular bond length under different external electric fields

C—O 键长随外电场增强而减小, 而 O—H 键长随外电场增强略微增大; 分子键长随外电场的变化规律可以用分子内部电场的变化来解释, 当有外电场存在时, 分子内应力和外电场力的合力决定着外电场

下分子的稳定结构^[29]; 总体来看, C—Br 键能量最高, 且外加电场越大, C—Br 键能量越高, 即 C—Br 键越容易断裂^[30]。图 3 是不同外电场下分子总能量的变化图, 总能量随外电场增强而减小。不同外电场下分子电偶极矩的变化如图 4 所示, 电偶极矩随

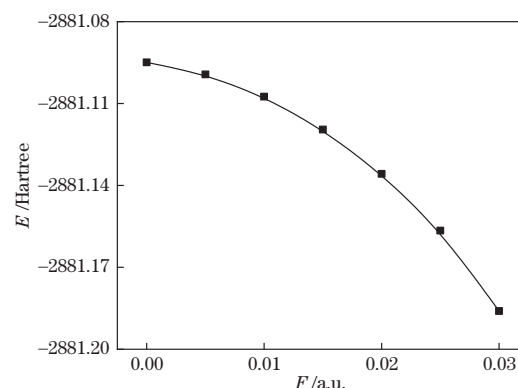


图 3 不同外电场下的 4-溴苯酚分子总能量的变化图

Fig. 3 Change of 4-bromophenol molecular total energy under different external electric fields

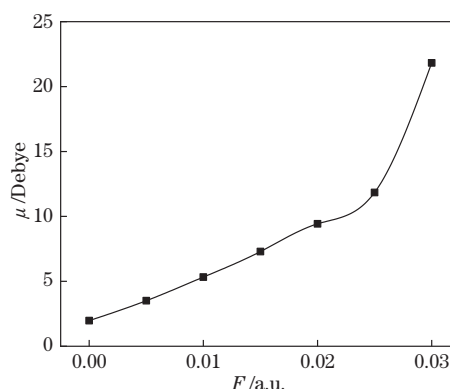


图 4 不同外电场下的 4-溴苯酚分子电偶极矩的变化图

Fig. 4 Change of 4-bromophenol molecular electric dipole moment under different external electric fields

表 2 加不同外电场下 4-溴苯酚分子的键长、总能量和电偶极矩

Table 2 Bond length, total energy, and electric dipole moment of 4-bromophenol molecules under different external electric fields

Parameter	$F / \text{a. u.}$						
	0	0.005	0.010	0.015	0.020	0.025	0.030
$R(6,13) / \text{\AA}$	1.91881	1.93098	1.94575	1.96486	1.99027	2.02914	2.05280
$R(3,11) / \text{\AA}$	1.38746	1.37756	1.36683	1.35639	1.34549	1.33455	1.30656
$R(11,12) / \text{\AA}$	0.96282	0.96385	0.96480	0.96639	0.96847	0.97136	0.97962
$E / \text{Hartree}$	-2881.09492	-2881.09930	-2881.10746	-2881.11953	-2881.13576	-2881.15652	-2881.18601
μ / Debye	1.9717	3.5083	5.3254	7.2921	9.4298	11.8408	21.8223

外电场增强而增大;分子体系和外电场的相互作用能为 $H_{int} = -\mu F$, 而电偶极矩的增大, 使分子体系与外电场的相互作用能减小, 这也可以解释分子体系的总能量随外电场的增强而减小的现象^[4]。

3.3 外加电场对 4-溴苯酚分子电荷分布的影响

通过上述的方法对 4-溴苯酚分子结构进行优化,

研究了不同外电场(0~0.03 a. u.)作用下, 分子部分原子电荷布居数的变化如表 3 所示。1C—5C、2C—4C、7H—10H、8H—9H 原子带有相同电荷, 表现出较好的对称性; 由于 6C 和 13Br 周围带有异种电荷, 随外电场增强, 净电荷量均增大, 即两原子间的库仑引力增大, C—Br 的键长增大^[27], 与表 3 计算结果一致。

表 3 不同外电场下 4-溴苯酚分子的电荷分布

Table 3 Charge distribution of 4-bromophenol molecules under different external electric fields

Atom	$F / \text{a. u.}$						
	0	0.005	0.010	0.015	0.020	0.025	0.030
1C	-0.538	-0.542	-0.551	-0.563	-0.581	-0.604	-0.593
2C	0.278	0.280	0.282	0.281	0.279	0.274	0.304
3C	-0.483	-0.482	-0.481	-0.476	-0.466	-0.450	-0.507
6C	0.634	0.671	0.719	0.778	0.851	0.941	0.941
7H	0.149	0.140	0.130	0.121	0.113	0.106	0.116
8H	0.137	0.149	0.162	0.174	0.187	0.200	0.224
11O	-0.336	-0.316	-0.296	-0.278	-0.260	-0.243	-0.193
12H	0.275	0.290	0.307	0.325	0.347	0.369	0.422
13Br	-0.143	-0.216	-0.294	-0.377	-0.467	-0.570	-0.765

3.4 外加电场对 4-溴苯酚分子轨道能级和能隙的影响

不同外电场(0~0.03 a. u.)作用下, 分子的最低空轨道(LUMO)能量 E_L 和最高占据轨道(HOMO)能量 E_H 以及能隙 E_G 的影响如表 4 所示, 其中能隙 E_G 计算公式为

$$E_G = (E_L - E_H) \times 27.2 \text{ eV}, \quad (5)$$

式中: E_L 表示分子得到电子能力的强弱, E_L 越小越

容易得到电子; E_H 表示分子失去电子能力的强弱, E_H 越大越容易失去电子; E_G 表示分子参加化学反应的能力, E_G 越小分子越容易被激发到激发态而发生化学反应^[30]。从图 5 可以看出, 随着外电场的增强 E_L 先增大后减小, E_H 先增大后略微减小; 能隙的变化如图 6 所示, 随着外电场的增强 E_G 单调减小, 说明电子越容易被激发到空轨道而形成空穴, 从而发生化学反应^[5], 与上文结论一致。

表 4 不同外电场作用下 4-溴酚分子的最低空轨道能、最高占据轨道能和能隙

Table 4 Lowest empty orbital energy, highest occupied orbital energy and energy gap of 4-bromophenol molecules under different external electric fields

Parameter	$F / \text{a. u.}$						
	0	0.005	0.010	0.015	0.020	0.025	0.030
$E_L / \text{Hartree}$	-0.03655	-0.03413	-0.05751	-0.08849	-0.12361	-0.16097	-0.20128
$E_H / \text{Hartree}$	-0.24983	-0.24543	-0.23883	-0.23047	-0.22078	-0.2106	-0.22105
E_G / eV	5.80122	5.74736	4.93190	3.86186	2.64302	1.349936	0.53774

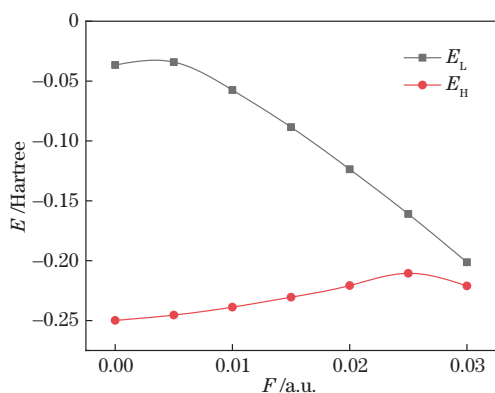


图 5 不同外电场作用下 4-溴苯酚分子的最低空轨道能和最高占据轨道能的变化图

Fig. 5 Change of 4-bromophenol molecular the lowest empty orbital energy and the highest occupied orbital energy under different external electric fields

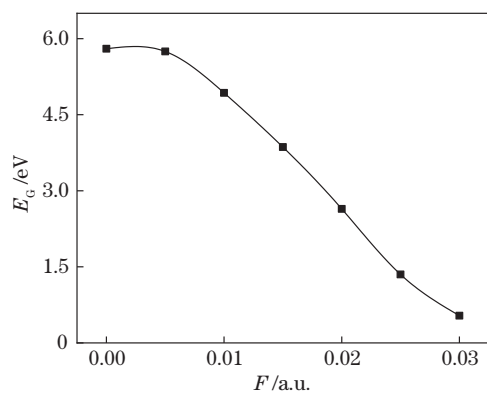


图 6 不同外电场作用下 4-溴酚分子能隙的变化图

Fig. 6 Change of 4-bromophenol molecular energy gap under different external electric fields

3.5 外加电场对 4-溴苯酚分子振动频率及红外光谱的影响

采用 DFT/B3LYP 方法 6-311+G(d,p) 基组对 4-溴苯酚分子结构进行优化, 研究了不同外电场

表 5 不同外电场作用下 4-溴苯酚分子的频率变化

Table 5 Frequency changes of 4-bromophenol molecules under different external electric fields

$F / \text{a. u.}$	0	0.005	0.010	0.015	0.020	0.025	0.030
745.48 cm^{-1}	826.81	823.10	815.79	803.84	785.85	757.16	745.48
847.12 cm^{-1}	947.93	945.51	941.47	935.36	926.94	914.40	847.12
1552.53 cm^{-1}	1626.30	1623.98	1618.88	1611.04	1600.96	1590.96	1552.53
3606.77 cm^{-1}	3825.33	3816.79	3808.78	3790.85	3765.33	3728.17	3606.77

3.6 外加电场对 4-溴苯酚分子解离能的影响

在无外电场和施加不同外电场(0~0.03 a.u.)作用下, 扫描 4-溴苯酚的基态分子, 得到 C—Br 键束缚势能曲线, 其变化如图 8 所示。沿着图 1 所示方向

(0~0.03 a.u.)作用下, 对分子振动频率和红外光谱的影响。红外光谱的变化如图 7 所示, 红外光谱主要有四个较强吸收峰, 分别位于 745.48 cm^{-1} , 847.12 cm^{-1} , 1552.53 cm^{-1} , 3606.77 cm^{-1} 。11O—12H 伸缩振动产生 3606.77 cm^{-1} 处的最强吸收峰。由于 11O—12H、1C—7H、5C—10H、2C—8H、4C—9H 摇摆振动产生次最强峰 745.48 cm^{-1} , 其中 11O—12H、1C—7H、5C—10H 摇摆振动幅度较大, 2C—8H、4C—9H 摇摆振动幅度较小(在 847.12 cm^{-1} 附近的振动模式与此一致, 但幅度减小约 1/3)。在 1552.53 cm^{-1} 附近, 是由 1C—2C、4C—5C、3C—11O 伸缩振动和 2C—8H、4C—9H、11O—12H 摇摆振动产生。为深入研究上述四个较强吸收峰在外加电场作用下的变化情况, 我们计算了四个吸收峰在不同外电场下的频率变化, 如表 5 所示, 这四个吸收峰均随外电场的增强而发生红移。

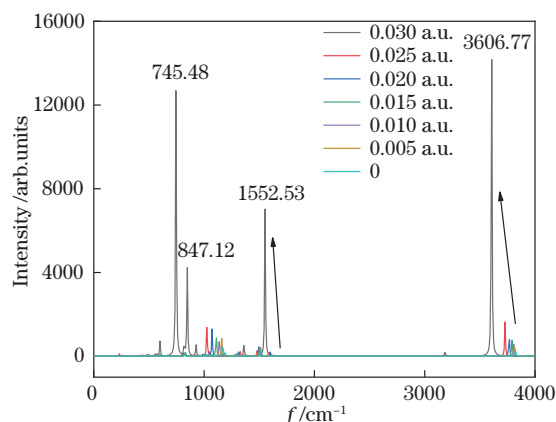


图 7 不同外电场作用下 4-溴酚分子振动频率和红外光谱的变化图

Fig. 7 Changes of 4-bromophenol molecular vibration frequency and infrared spectrum under different external electric fields

加外电场时, 随着外电场的增强, 4-溴苯酚分子的势能面逐渐降低; 即电场越强 4-溴苯酚分子的 C—Br 键越容易断裂, 分子越容易解离; 当外电场强度为 0.03 a.u. 时, 势垒消失, 分子发生解离。

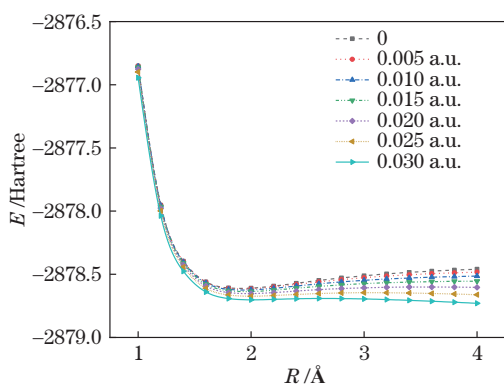


图 8 在不同外电场作用下 4-溴苯酚分子 C-Br 键解离的势能面变化图

Fig. 8 Change of potential energy surface of C-Br bond dissociation of 4-bromophenol molecules under different external electric fields

3.7 外加电场对 4-溴苯酚分子激发态的影响

为进一步研究 4-溴苯酚分子的性质,考虑跃迁选择定则 $\Delta S=0$, 采用 TDDFT/B3LYP 方法 6-311+G(d,p) 基组计算了不同外电场(0~0.03 a. u.)作用下,分子前 10 个单重激发态的波长(λ)和振子强度(f)如表 6 所示。可以看出,在第 2 激发态中,除了 $F=0.005$ a. u. 外,其余振子强度均为 0,属于禁阻跃迁;第 1、4、9、10 激发态中,所有振子强度均

不为 0,属于允许跃迁^[21]。随着外电场的增强,各激发态均发生了红移。

4 结 论

为优化 4-溴苯酚分子的稳定构型,本文采用密度泛函理论和含时密度泛函理论在 B3LYP/6-311+G(d,p) 水平上加不同外电场,研究 4-溴苯酚分子物理性质的变化规律。研究表明,在外电场作用下分子结构变化比较明显,沿图 1 所示方向加外电场(0~0.03 a. u.)时,分子 C-Br 键长、O-H 键长随外电场的增强而逐渐增大,C-O 键长随外电场的增强而减小;分子体系的总能量随外电场的增强而减小,偶极矩随外电场的增强而增大。根据原子的电荷布局数可以发现 4-溴苯酚分子具有较好的对称性,且 C-Br 原子间库伦引力增大;能隙 E_G 随外电场的增强而减小,同时分子红外光谱的四个较强峰均发生红移。随着外电场增强,分子的势能面逐渐降低,即分子越容易发生解离,当外电场强度为 0.03 a. u. 时,分子的势垒消失,分子发生解离;前 10 个激发态也发生红移,通过振子强度变化表明部分跃迁属于禁阻跃迁。综上所述,可以对 4-溴苯酚分子进行外电场降解、收集,这将为 4-溴苯酚分子进一步研究及臭氧层的保护提供理论依据。

表 6 不同外电场作用下 4-溴苯酚分子的单重激发态的波长和振子强度变化

Table 6 Wavelength and oscillator intensity of singlet excited state of 4-bromophenol molecule under different external electric fields

State	F / a. u.													
	0		0.005		0.010		0.015		0.020		0.025		0.030	
	λ /nm	f	λ /nm	f	λ /nm	f	λ /nm	f	λ /nm	f	λ /nm	f	λ /nm	f
$n=1$	248.57	0.0111	259.97	0.0004	299.69	0.0012	384.84	0.0014	593.34	0.0011	1470.97	0.0007	4145.03	0.0280
$n=2$	239.79	0	244.90	0.0098	254.60	0	321.97	0	437.80	0	880.99	0	1499.15	0
$n=3$	223.54	0.1415	223.21	0	244.58	0.0059	289.24	0.0001	422.16	0	700.06	0	1039.51	0.0004
$n=4$	211.78	0.0120	220.25	0.1367	243.40	0.0088	278.93	0.0030	324.65	0.002	449.03	0.0002	559.56	0.0913
$n=5$	204.45	0.0003	218.50	0.0150	223.00	0.1447	255.12	0	323.47	0	394.07	0.0032	432.88	0.0563
$n=6$	200.83	0.0081	199.18	0.0004	222.64	0.0001	243.77	0.0069	288.44	0.0393	374.21	0	420.25	0.0537
$n=7$	198.93	0.0003	196.95	0.0043	214.96	0	242.36	0.0866	272.30	0.0001	366.23	0.0219	401.93	0.0343
$n=8$	196.23	0.0252	196.19	0.0034	214.34	0.0001	240.55	0.0005	271.77	0	347.09	0.0071	380.67	0.0003
$n=9$	196.10	0.0479	193.34	0.0025	208.28	0.0051	228.05	0.0161	270.94	0.0083	336.09	0.0007	367.04	0.0133
$n=10$	194.38	0.0570	192.68	0.0017	207.22	0.0013	227.18	0.0091	265.42	0.0011	323.03	0.0001	351.79	0.0004

参 考 文 献

[1] Molina M J, Rowland F S. Stratospheric sink for chlorofluoromethanes: chlorine atom-catalysed destruction of ozone[J]. Nature, 1974, 249(5460): 810-812.

[2] Zhang Z M. Who discovered the ozone hole? [J]. Friend of Chemical Industry, 1999, 18(2): 45.

张忠民. 谁发现了臭氧层空洞?[J]. 化工之友, 1999, 18(2): 45.

[3] Guan Y, Qin Y S, Liu B H. Physical properties of

- Freon F-22 in external electric field[J]. Journal of Jishou University (Natural Sciences Edition), 2018, 39(2): 26-32.
- 管跃, 秦玉霜, 刘博涵. 氟利昂 F-22 在外电场下的物理特性[J]. 吉首大学学报(自然科学版), 2018, 39(2): 26-32.
- [4] Liu Y Z, Li X H, Wang J F, et al. Study on dissociation properties and spectra of Halon 1301 in external electric field[J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2017, 37(3): 679-684.
- 刘玉柱, 李相鸿, 王俊锋, 等. 哈龙 1301 分子在外电场中的光谱特征和解离特性[J]. 光谱学与光谱分析, 2017, 37(3): 679-684.
- [5] Li J, Liu Y Z, Cheng Q Y, et al. Study on the physical characteristics of the Halon-1211 under the electrical fields[J]. Journal of Atomic and Molecular Physics, 2017, 34(6): 1017-1024.
- 李静, 刘玉柱, 程启源, 等. 哈龙 1211 分子在外电场中的物理特性研究[J]. 原子与分子物理学报, 2017, 34(6): 1017-1024.
- [6] Wu H Y. Analysis of Halon substitute agent environment affection and study on extinguishing system of Halon substitutes[D]. Tianjin: Tianjin University, 2006.
- 吴洪有. 哈龙替代灭火剂环境影响分析及其灭火系统的研究[D]. 天津: 天津大学, 2006.
- [7] Li X H, Liu Y Z, Chen Y Y, et al. Investigation on molecular properties of Freon 13 in external electric field [J]. Journal of Molecular Science, 2018, 34(2): 139-143.
- 李相鸿, 刘玉柱, 陈云云, 等. 氟利昂 F13 在外电场中的分子特性研究[J]. 分子科学学报, 2018, 34(2): 139-143.
- [8] Xu H P, Yin Y H. The molecular structure and properties of AgCl under external electric field[J]. Journal of Atomic and Molecular Physics, 2016, 33(1): 1-7.
- 徐红萍, 尹跃洪. 外电场下 AgCl 分子的结构与性质[J]. 原子与分子物理学报, 2016, 33(1): 1-7.
- [9] Zhou Z Y, Liu Y Z, Li J, et al. Influence of external electric field on the molecular structure and electronic spectrum of formaldehyde molecule[J]. Journal of Molecular Science, 2017, 33(3): 217-224.
- 周志媛, 刘玉柱, 李静, 等. 外电场对甲醛分子的结构与电子光谱的影响[J]. 分子科学学报, 2017, 33(3): 217-224.
- [10] Wang J P, Zhai D D, Ma P, et al. Theoretical insight into the effects of external electric field on cocrystal HMX/DMI[J]. Chinese Journal of Explosives & Propellants, 2020, 43(2): 133-138.
- 王金鹏, 翟颠颠, 马鹏, 等. 外电场对 HMX/DMI 共晶感度影响的理论研究[J]. 火炸药学报, 2020, 43(2): 133-138.
- [11] Wu X K, Zhang S, Liang D M. Influence of external electric field on the molecular structure and electronic spectrum of 2-fluoro-5-bromopyridine molecule[J]. Journal of Atomic and Molecular Physics, 2015, 32(4): 579-585.
- 吴学科, 张颂, 梁冬梅. 外电场对 2-氟-5-溴吡啶分子结构与电子光谱影响的研究[J]. 原子与分子物理学报, 2015, 32(4): 579-585.
- [12] Duan Y Q, Liu Y Z, Li J, et al. Study on physical and spectra properties of CF_3I under external electrical fields[J]. Journal of Atomic and Molecular Physics, 2018, 35(5): 719-724.
- 段逸群, 刘玉柱, 李静, 等. CF_3I 分子在外电场中的物理和光谱性质研究[J]. 原子与分子物理学报, 2018, 35(5): 719-724.
- [13] Wang X Q, Liu Y Z, Li X H, et al. Spectra and dissociation characteristics of methyl chloride under external electric field[J]. Journal of Atmospheric and Environmental Optics, 2017, 12(3): 195-201.
- 王啸卿, 刘玉柱, 李相鸿, 等. 外电场下氯甲烷的光谱和解离特性[J]. 大气与环境光学学报, 2017, 12(3): 195-201.
- [14] Zhang X Y, Liu Y Z, Ma X Y, et al. Dissociation and physical properties of methyl iodide in external electric field[J]. Journal of University of Chinese Academy of Sciences, 2018, 35(6): 839-844.
- [15] Li Y S, Sun L X, Mei Y M, et al. Structure and properties of perfluorocyclobutane under external electric field based on density functional theory[J]. Journal of Molecular Science, 2020, 36(2): 131-137.
- 李亚莎, 孙林翔, 梅益明, 等. 基于密度泛函理论的外电场下 $c-C_4F_8$ 的结构及其特性[J]. 分子科学学报, 2020, 36(2): 131-137.
- [16] Peng X W, Liu K M, Ouyang W, et al. Synthesis of 2,5-Bis{ β -[p-(6-hydroxyhexyloxy)phenyl]ethynyl}pyridine [J]. Chinese Journal of Synthetic Chemistry, 2010, 18(6): 747-749, 753.
- 彭信文, 刘昆明, 欧阳文, 等. 2,5-双{ β -[对-(6-羟基己氧基)苯基]乙炔基}吡啶的合成[J]. 合成化学, 2010, 18(6): 747-749, 753.
- [17] Peng J J, Jia H G, Wang J J, et al. Synthesis of substituted polyphenylacetylene cyclic trimer[J]. Guangdong Chemical Industry, 2014, 41(19): 1-2, 5.
- 彭继军, 贾宏葛, 王建军, 等. 取代聚苯乙炔环状三聚体的合成[J]. 广东化工, 2014, 41(19): 1-2, 5.

- [18] Zhang Y. Synthesis of pharmaceutical intermediate p-hydroxyphenethyl alcohol with p-bromophenol as raw material[D]. Nanjing: Nanjing University of Science and Technology, 2004.
张勇. 对溴苯酚为原料合成医药中间体对羟基苯乙醇[D]. 南京: 南京理工大学, 2004.
- [19] Jin Y R, Liu Y Z, Duan Y Q, et al. Dissociation characteristics of bromoethane under external electric fields[J]. Journal of University of Chinese Academy of Sciences, 2019, 36(6): 839-843.
靳亚茹, 刘玉柱, 段逸群, 等. 溴乙烷在外电场下的光谱和解离特性[J]. 中国科学院大学学报, 2019, 36(6): 839-843.
- [20] Yin Y H, Wang L. Structure and properties of AgBr under an external electric field[J]. Journal of Atomic and Molecular Physics, 2017, 34(1): 9-15.
尹跃洪, 王莉. 外电场下 AgBr 分子的结构及性质[J]. 原子与分子物理学报, 2017, 34(1): 9-15.
- [21] Golan R, Gelman F, Kuder T, et al. Degradation of 4-bromophenol by Ochrobactrum sp. HI₁ isolated from desert soil: Pathway and isotope effects[J]. Biodegradation, 2019, 30(1): 37-46.
- [22] Xu D D, Song X Z, Qi W Z, et al. Degradation mechanism, kinetics, and toxicity investigation of 4-bromophenol by electrochemical reduction and oxidation with Pd-Fe/graphene catalytic cathodes[J]. Chemical Engineering Journal, 2018, 333: 477-485.
- [23] Sharma A, Dutta R K. Se-doped CuO NPs/H₂O₂/UV as a highly efficient and sustainable photo-Fenton catalytic system for enhanced degradation of 4-bromophenol[J]. Journal of Cleaner Production, 2018, 185: 464-475.
- [24] Grozema F C, Telesca R, Jonkman H T, et al. Excited state polarizabilities of conjugated molecules calculated using time dependent density functional theory[J]. The Journal of Chemical Physics, 2001, 115(21): 10014-10021.
- [25] Kjellberg P, He Z, Pullerits T. Bacteriochlorophyll in electric field[J]. The Journal of Physical Chemistry B, 2003, 107(49): 13737-13742.
- [26] Li T, Tang Y L, Ling Z G, et al. Influence of external electric field on the molecular structure and electronic spectrum of paranitrochlorobenzene[J]. Acta Physica Sinica, 2013, 62(10): 103103.
李涛, 唐延林, 凌智钢, 等. 外电场对对硝基氯苯分子结构与电子光谱影响的研究[J]. 物理学报, 2013, 62(10): 103103.
- [27] Frish M J, Trucks G W, Schlegel H B, et al. Gaussian 09, Rev. C. 01 [CP]. Wallingford: Gaussian, Inc. 2010.
- [28] Schilf W, Szady-Chelminiecka A, Grech E, et al. Spectroscopic studies of new Schiff and Schiff-Mannich bases of ortho-derivatives of 4-bromophenol[J]. Journal of Molecular Structure, 2002, 643(1/2/3): 115-121.
- [29] Zhu Z H. Atomic and molecular reaction statics[M]. Beijing: Science Press, 1996.
朱正和. 原子分子反应静力学[M]. 北京: 科学出版社, 1996.
- [30] Zhang X Y, Liu Y Z, Yin W Y, et al. Physical properties and spectra of BrCl molecule under external electric field[J]. Chinese Journal of Computational Physics, 2018, 35(2): 230-234.
张翔云, 刘玉柱, 尹文怡, 等. 外电场作用下 BrCl 分子的物理特性与光谱[J]. 计算物理, 2018, 35(2): 230-234.