

DOI: 10.3969/j.issn.1007-5461.2023.05.003

外电场下二溴一氯甲烷分子的光谱特征和解离特性

努尔比耶·艾则孜¹, 闫好奎², 向梅^{1*},
布玛丽亚·阿布力米提^{1*}, 安桓¹

(1 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: 在 Semi-empirical 方法 AM1 基组下研究了外电场(0~0.040 arb. units)作用下二溴一氯甲烷分子的光谱特征和解离特性: 外电场对分子键长、偶极矩、总能量、能级分布规律、红外光谱等的影响; 通过计算得到解离势能曲线。结果表明, 沿着 y 轴方向加外电场, 强度从 0 arb. units 增加到 0.040 arb. units 时: 二溴一氯甲烷分子键长明显拉长, 分子偶极矩增大; 总能量先增大后减小; 能隙随着电场的增大而减小; 红外光谱随外电场的增强出现红移或蓝移现象。此外, 随着外加电场的增强, 势垒降低, 解离需要的能量逐渐减小, 当外电场达到 0.040 arb. units 时, 分子发生解离。计算结果说明分子 IC-3Cl 键在外电场下容易断裂, 这为二溴一氯甲烷的降解提供了理论依据。

关键词: 光谱学; 解离势能; 外电场; 二溴一氯甲烷

中图分类号: O433

文献标识码: A

文章编号: 1007-5461(2023)05-00644-10

Dissociation properties and spectra of dibromochloromethane under external electric field

NUERBIYE Aizezi¹, YAN Haokui², XIANG Mei^{1*}, BUMALIYA Abulimiti^{1*}, AN Huan¹

(1 College of Physics and Electronic Engineering, Xinjiang Normal University, Urumqi 830054, China;

2 Xinjiang Research Institute of Measurement & Testing, Urumqi 830011, China)

Abstract: The Semi-empirical method was used to study the spectral and dissociation characteristics of dibromochloromethane molecules under the action of external electric field (0-0.040 arb. units) on the AM1 basis set, the influences of external electric field on bond length, dipole moment, total energy, energy level distribution and infrared spectrum were calculated, and the dissociation potential energy curve was obtained. The results show that, when the external electric field increases from 0 arb. units to 0.040 arb. units along the y-axis direction, the bond length of dibromochloromethane molecule is

基金项目: 国家自然科学基金 (21763027, 22363011), 新疆维吾尔自治区自然科学基金杰出青年基金 (2022D01E12), 新疆自治区高校科研项目 (XJEDU2023J030), 新疆区域协同创新专项 (2019E0223), 新疆天山青年计划项目 (2018Q072), 新疆高校科研计划项目 (XJEDU2020Y029)

作者简介: 努尔比耶·艾则孜 (1998 -), 女, 新疆喀什人, 研究生, 主要从事原子分子动力学方面的研究。E-mail: NuerbiyeA0118@163.com

导师简介: 向梅 (1981 -), 女, 四川遂宁人, 教授, 硕士生导师, 主要从事原子分子动力学方面的研究。E-mail: mei811014@126.com

收稿日期: 2021-11-29; **修改日期:** 2022-01-17

*通信作者。E-mail: mei811014@126.com; maryam917@163.com.

obviously elongated, the molecular dipole moment increases, and the total energy first increases and then decreases. At the same time, with the increase of external electric field, the energy gap decreases, and the infrared spectrum appears red shift or blue shift. In addition, with the increase of applied electric field, the potential barrier decreases and the energy required for dissociation gradually decreases. When the external electric field reaches 0.040 arb. units, the molecule will dissociate. It is shown in this work that the C-Cl bond of dibromochloromethane molecule is easily broken under the external electric field, which provides a theoretical basis for the degradation of dibromochloromethane.

Key words: spectroscopy; dissociation potential energy; external electric field; dibromochloromethane

0 引言

在外电场作用下,分子会发生一系列的物理化学变化^[1,2]。因外电场下对分子电子结构的研究可以提供分子键解离数据,因而广受科研人员关注。近年来,刘玉柱^[3-7]、伍冬兰^[8,9]、吴永刚^[10]等团队对外电场下分子动力学特征开展了研究,证明在外电场下存在化学键断裂、新自由基的产生等现象,外电场还会对分子能级分布和光谱特性^[11]等产生影响。分子在外电场下的特性研究成果逐步被应用于健康和环境等诸多领域^[12,13]。

二溴一氯甲烷是医药制备等工艺环节的中间体,是重要的毒性较强的有机化工产品。黄君礼等^[14,15]对饮用水中有机卤代物进行了研究,结果表明二溴一氯甲烷具有较强的致突变作用。兰红军等^[16]对水中挥发性卤代烃进行了研究,结果表明采样区域二溴一氯甲烷等卤代烃可能具有潜在致癌风险。毒理研究的大量试验证明二溴一氯甲烷分子摄入量超标会引起染色体突变,对中枢神经系统、肝脏和肾脏都有不利影响^[17,18]。因此消除二溴一氯甲烷等危害已经成为环保的重要问题,多方政策纷纷出台限制水中二溴一氯甲烷等卤素的含量和浓度,并积极支持其相关研究。员建等^[19]用紫外光/H₂O₂方法去除二溴一氯甲烷分子,结果显示去除率随着紫外光功率的增加而增加。此外,对二溴一氯甲烷常用的降解方法还有光催化处理^[20]、真空紫外光降解^[21]等。分子在外电场下的特性研究可以更全面地理解外电场对分子结构的影响,是分子研究的一种重要方法。而目前国内外对二溴一氯甲烷分子在外电场下的特性还鲜有报道,因此开展此方面的研究有助于了解分子解离过程中的物理化学变化,为降解该分子提供重要的理论参考。

本文采用密度泛函理论,研究了二溴一氯甲烷分子在外加电场作用下的光谱特征和解离特性。在Semi-empirical方法AM1基组下对二溴一氯甲烷分子基态结构进行优化,利用相同的基组沿y轴方向施加外电场(0~0.040 arb. units),研究外电场对分子键长、偶极矩、总能量、能级分布以及红外光谱的影响;同样的基组下得到了沿C-Cl键的扫描势能曲线。

1 理论及计算方法

分子在外电场下的哈密顿量设为 $H^{[22]}$,则

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

式中: H_0 为无外电场下分子体系的哈密顿量, H_{int} 为分子体系与外电场相互作用产生的哈密顿量。在偶极近似下,采用半经典的静电磁场理论,分子体系与外电场的相互作用哈密顿量为

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

式中: F 为电荷或者有限场下的电场强度矢量, μ 为分子的电偶极矩。其中 $\mu = Rq$, R 表示等效正负电荷之间的距离, q 为电荷量。 R 、 q 变化导致偶极矩的变化, 对分子的极性产生影响。外加电场强度范围设置为 0~0.040 arb. units (1 arb.units = 5.14225×10^{11} V/m)。

二溴一氯甲烷(CHClBr_2)分子模型如图 1 所示, 利用 Gaussian09 软件建立参考坐标系。采用不同基组对 CHClBr_2 分子基态结构进行优化, 将得到的数值与文献作比较, 发现用 Semi-empirical 方法 AM1 基组优化与文献值接近, 1C-Cl 键长误差 1.5%, 在可接受范围内说明方法选取合理。因此, 采用 Semi-empirical 方法 AM1 基组加外电场(0~0.040 arb. units), 计算 CHClBr_2 键长、偶极矩、总能量、电荷分布、能级分布以及红外光谱的影响。所有的计算在 Gaussian09 软件中完成。

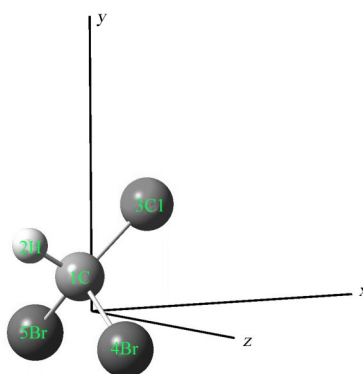


图 1 无外电场下的 CHClBr_2 分子基态稳定构型

Fig. 1 Stable ground configuration of CHClBr_2 molecule without external electric field

2 结果与讨论

2.1 外电场下二溴一氯甲烷分子基态构型

首先对 CHClBr_2 采用不同方法和基组进行优化计算, 计算数据如表 1。通过比较发现在 Semi-empirical 方法 AM1 基组上优化分子键长符合文献值^[23], 同时还可以观察到分子与外电场具有依赖性。根据优化结果, CHClBr_2 分子关于 y 轴对称, 因此, 在 y 方向施加外电场可使 C-Cl 键变长, 并研究分子键长、偶极矩、总能量、电荷分布、能级分布、红外光谱以及解离势能的变化。

表 1 不同基组计算 CHClBr_2 分子优化构型

Table 1 The calculated parameters of the optimized structure of CHClBr_2 molecules at different level

Method	Basis set	1C-3Cl	1C-4Br	1C-5Br	1C-2H
Hartree-Fock	3-21G	1.85766	1.96143	1.96140	1.06825
Semi-empirical	PDDG	1.76000	1.91000	1.91000	1.07000
Semi-empirical	PM3	1.66919	1.90385	1.90385	1.10393
Semi-empirical	AM1	1.73441	1.91992	1.91992	1.11359
Semi-empirical	PM3MM	1.66919	1.90385	1.90385	1.10393
DFT-B3LYP	3-21G	1.88631	1.97330	1.97330	1.08178
DFT-B3LYP	6-311G	1.86285	1.97655	1.97655	1.07711
DFT-BPV86	6-311	1.87002	1.98346	1.98346	1.08698
MP2	3-21	1.89739	1.98405	1.98409	1.08194
Reference[23]	-	1.749	1.930	1.930	1.115

2.2 外电场下二溴一氯甲烷分子键长、偶极矩、总能量的变化

在 Semi-empirical 方法 AM1 基组下对 CHClBr_2 分子进行优化计算, 在外电场下得到优化的几何结构参数如图 2-4。根据图 1 沿 y 方向加外电场, 结果表明 4Br 和 5Br 的电荷转移到 3Cl 原子上。1C 原子和 3Cl 原子受到库仑力的作用, 原子之间的距离变长。由图 2 观察到随着外电场增强, 1C-3Cl 键长明显增加, 说明外电场增强使化学键越来越脆弱; 1C-4Br 和 1C-5Br 键长逐渐减小, 说明外电场增强使化学键越来越稳固。出现这些变化的原因是分子受外界电场的影响, 分子内部电场与外加电场相互作用导致分子内部电荷发生定向移动, 并出现极化现象。由图 3 可知, 随着外电场增强分子偶极矩增大, 分子极性增强对称性下降, 这说明分子的偶极矩与外电场密切相关^[24]。分子内部电场与外加电场共同决定了分子的总能量, 由图 4 可知, 随外电场的增强, 分子总能量先略增大后减小。以上结论说明分子随外加电场的增强越来越不稳定。

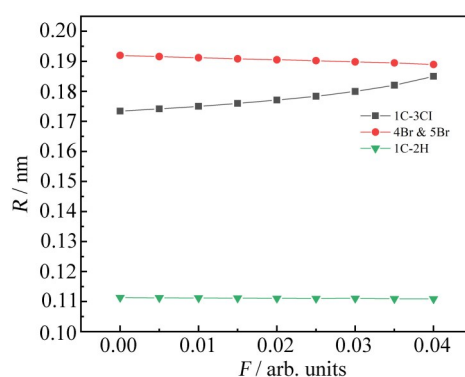


图 2 CHClBr_2 分子键长随外电场的变化

Fig. 2 The Bond length of CHClBr_2 molecules versus external electric fields

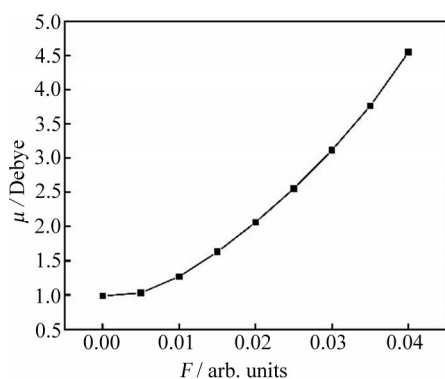


图 3 CHClBr_2 分子偶极矩随外电场的变化

Fig. 3 The electric dipole moment of CHClBr_2 molecules versus external electric fields

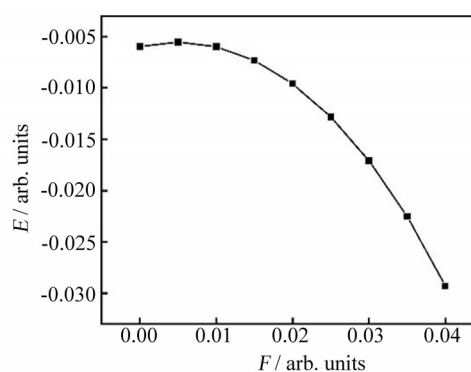


图 4 CHClBr_2 分子总能量随外电场的变化

Fig. 4 The total energy of CHClBr_2 molecules versus external electric fields

2.3 外电场对二溴一氯甲烷分子电荷分布的影响

利用相同的方法对 CHClBr_2 分子结构进行优化计算, 研究不同外电场对分子电荷分布的影响, 如图 5。原子得到电荷越多, 易于亲电试剂发生反应; 原子失去电子越多, 周围正电荷密度增大, 易于亲核试剂发生反应。由图 5 可知, 随着电场强度的增强, 3Cl 原子得到电子, 电负性增强; 4Br 和 5Br 原子失去电子, 溴原子的正电荷密度增大, 电负性减弱; 氢原子周围正电荷密度减小。1C 原子和 3Cl 原子之间的库仑力使得原子之间

的键长增大。由于二溴一氯甲烷分子是中性分子,随着外电场的增强,氢原子周围正电荷密度减小,使得电荷始终守恒。

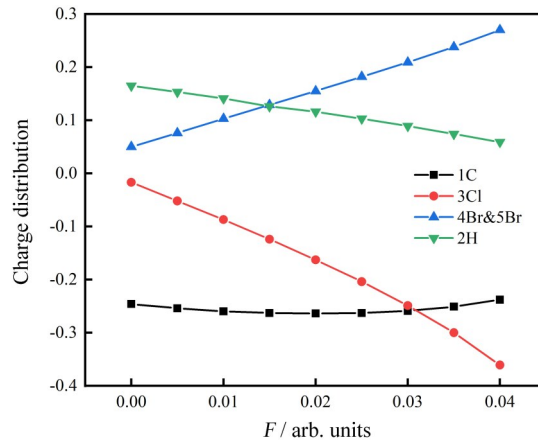


图5 外电场下CHClBr₂分子的电荷分布

Fig. 5 The Charge distribution of CHClBr₂ molecules under external electric fields

2.4 外电场对二溴一氯甲烷分子轨道能级和能隙的影响

利用相同的方法和基组,对CHClBr₂分子结构进行优化计算,研究不同外电场下分子最低空轨道能量 E_L 和最高占据轨道能量 E_H 以及能隙 E_G 的情况,如图6-7。计算公式为

$$E_G = (E_L - E_H) \times 27.2 \text{ eV}, \quad (3)$$

式中: E_L 反映分子得到电子的能力; E_H 反映分子失去电子的能力^[25]。能隙大小可用于衡量分子稳定性,它表明电子从占据轨道跃迁到空轨道能力的强弱,还可以说明分子参与化学反应的活跃度^[26]。由图6可以观察到, E_L 随着正向外电场的增强而逐渐减小; E_H 随外加电场的增强而逐渐增大。由图7可以观察到,无外电场时CHClBr₂分子能隙最大,C-Cl键稳定。随着外电场的增强能隙减小,这说明分子活性增强,C-Cl键越来越不稳定,有利于发生脱氯反应。通过能隙的变化趋势,能够预测该分子红外电子光谱的最强吸收峰会随着外电场的增大而发生红移。

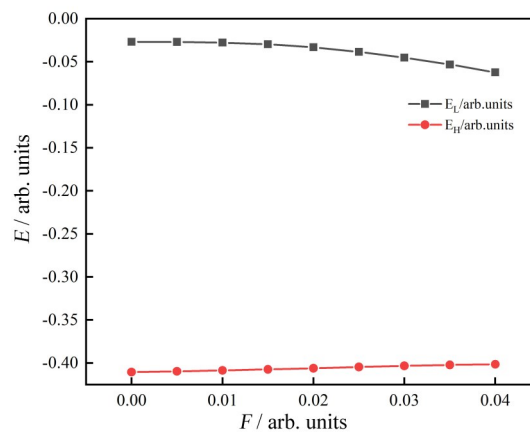
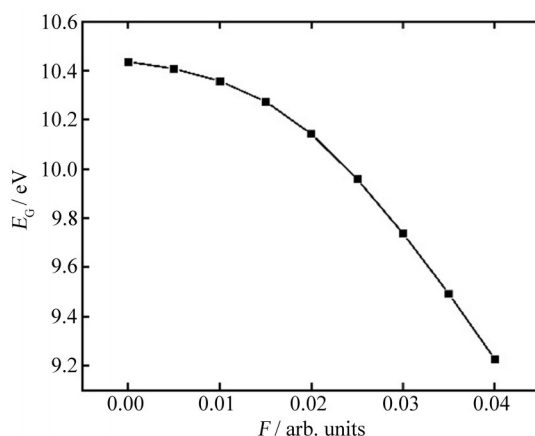


图6 外电场下CHClBr₂最低空轨道能量、最高占据轨道能量

Fig. 6 The lowest empty orbital energy, highest occupied orbital energy of CHClBr₂ molecules under external electric fields

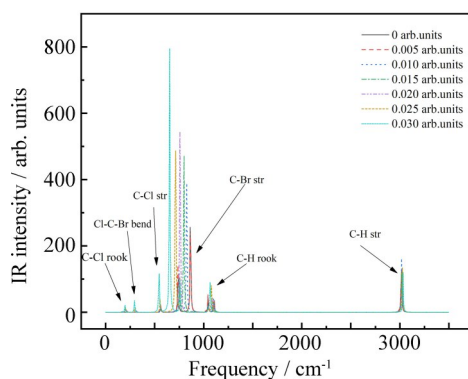
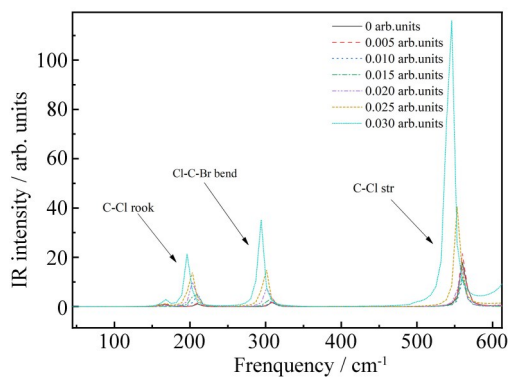
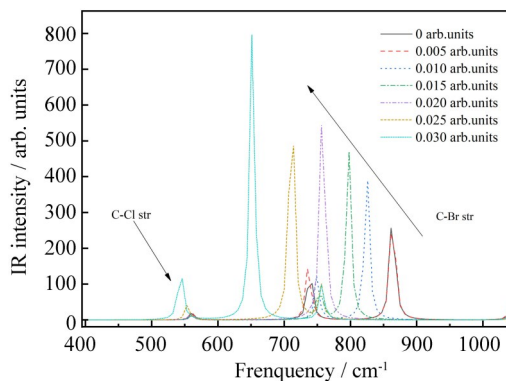
图 7 外电场下CHClBr₂分子的能隙Fig. 7 The energy gap of CHClBr₂ molecules under external electric fields

2.5 外电场对二溴一氯甲烷分子红外光谱的影响

利用相同的方法和基组,对CHClBr₂分子结构进行优化计算,结果见表2。研究不同外电场下振动频率和红外光谱的情况,如图8所示,频率从小到大分别在210.65 cm⁻¹对应C-Cl键rock振动,309.66 cm⁻¹对应Cl-C-Br键bend振动,738.81 cm⁻¹对应C-Br键str振动,863.60 cm⁻¹对应C-Cl键str振动,1105.75 cm⁻¹对应C-H键rock振动,3014.45 cm⁻¹对应C-H键str振动。如图9所示,C-Cl键rock振动中振动频率减小,发生红移;在Cl-C-Br键bend振动中,随着外电场的增强,分子振动频率减小,呈现出红移现象,同时振动强度增强。这说明随着外电场的增强,C-Cl和C-Br键变的不稳定,容易断裂;C-Cl键str振动频率减小,红外强度增大,发生红移。如图10所示,C-Br键str振动发生蓝移,振动频率增强。在C-H键rock振动(1105.75cm⁻¹)和C-H键str振动(3014.45 cm⁻¹)中,随着外电场的增强,分别出现先蓝移再红移和先红移再蓝移的现象。这些特征峰排列紧密,外电场对红外强度的影响比较复杂。外电场下红外光谱振动频率和振动模式等数据的获取,实现了对分子谱线信息的捕捉。

表 2 外电场下CHClBr₂分子的振动频率Table 2 Vibration of CHClBr₂ molecules under external electric fields

Vibration	Frequency / cm ⁻¹
C-Cl rocking vibration	210.65
Cl-C-Br bending vibration	309.66
C-Br stretching vibration	738.81
C-Cl stretching vibration	863.60
C-H rocking vibration	1105.75
C-H stretching vibration	3014.45

图 8 外电场下 CHClBr_2 的红外光谱Fig. 8 The IR spectra of CHClBr_2 molecules under external electric fields图 9 外电场下 CHClBr_2 的 C-Cl rock 振动和 Cl-C-Br bend 振动对应的红外光谱Fig. 9 The IR spectra for C-Cl rock vibration and Cl-C-Br bend vibration of CHClBr_2 molecules under external electric fields图 10 外电场下 CHClBr_2 分子的 C-Br str 振动和 C-Cl str 振动对应的红外光谱Fig. 10 The IR spectra for C-Br str vibration and C-Cl str vibration of CHClBr_2 molecules under external electric fields

2.6 外电场对二溴一氯甲烷分子解离势能的影响

利用相同的方法和基组,对 CHClBr_2 分子结构进行优化计算,研究不同外电场下 C-Cl 的势能曲线,如图 11 所示。如图 1 沿着 y 方向加外电场,计算 1C-3Cl 键扫描范围从键长 0.12 nm 至 0.26 nm,步长为 0.02 nm。在无外电场作用时,势垒较高;随着外电场的增强,势垒逐渐下降,解离变得容易。当外电场 $F = 0.040$ arb. units

时, 势能下降, 势垒消失, 分子对 C-Cl 键的束缚力度减弱。这说明 CHClBr_2 分子中 C-Cl 的键长与外电场密切相关, 随着外电场逐渐增强, 解离所需的能量减小, C-Cl 键发生断裂, 分子发生解离。数据显示, 分子在电场作用下势能有显著变化。因此, 可以采用外加电场的方式对 CHClBr_2 分子进行解离, 该结果为降解水体中的 CHClBr_2 分子提供了理论依据。

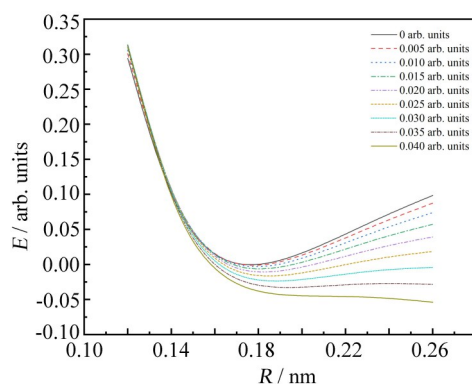


图 11 外电场下 CHClBr_2 分子 C-Cl 键势能面

Fig. 11 The dissociation potential energy surfaces along C-Cl bond of CHClBr_2 molecules under external electric fields

3 结 论

利用 Semi-empirical 方法 AM1 基组优化计算 CHClBr_2 分子, 在外电场(0~0.04 arb. units)作用下的光谱特征和解离特性。利用该方法加不同大小的外电场, 优化计算 CHClBr_2 分子的键长、偶极矩、总能量、电荷分布及能级分布等。不同外电场对 CHClBr_2 分子的红外光谱和解离势能有明显的变化。随着 y 轴方向外电场增强, 1C-3Cl 键长明显增加; 1C-4Br 和 1C-5Br 的键长逐渐减小。随外电场增强, 分子偶极矩增大, 总能量先增大后减小; 随着外电场增强分子能隙减小, 这说明分子在外电场作用下容易激发。红外光谱振动频率 863.60 cm^{-1} 对应 C-Cl 键 str 振动, 随外电场增强, 此特征峰振动频率减小, 振动强度增大, 呈现出红移现象。 CHClBr_2 分子势能曲线随着外电场的增大, 所需的能量减小; 外电场达到 0.040 arb. units 时, 势能曲线下降, 势垒消失, C-Cl 键在电场作用下发生断裂。本文为降解 CHClBr_2 分子提供了一定的理论依据。

参考文献:

- [1] Yang T, Liu D J, Chen J J. Molecular structure and properties of sulfur dioxide under the external electric field [J]. *Acta Physica Sinica*, 2016, 65(5): 053101.
杨涛, 刘代俊, 陈建钧. 外电场下二氧化硫的分子结构及其特性 [J]. *物理学报*, 2016, 65(5): 053101.
- [2] 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.
- [3] 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.

- [4] Liu Y Z, Thomas G, Gregor K. Optical control of the vibrational excitation of the polyatomic ions via strong field multi-photon ionization [J]. *Acta Physica Sinica*, 2014, 63(24): 244208.
刘玉柱, Thomas G, Gregor K. 利用强场多光子电离技术实现对多原子分子离子振动量子态的光学操控 [J]. *物理学报*, 2014, 63(24): 244208.
- [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] 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.
- [7] Chen Y, Liu Y Z, Wang X C, *et al.* Effect of external electric field on the spectral characteristics of Bromobenzene [J]. *Spectroscopy and Spectral Analysis*, 2020, 40(12): 3732-3735.
陈宇, 刘玉柱, 王兴晨, 等. 外电场对溴苯分子光谱特征影响的研究 [J]. *光谱学与光谱分析*, 2020, 40(12): 3732-3735.
- [8] Wu D L, Tu J, Wan H J, *et al.* Molecular structure and potential energy function of CH molecule under external electric field [J]. *Journal of Atomic and Molecular Physics*, 2014, 31(2): 197-201.
伍冬兰, 涂娟, 万慧军, 等. CH自由基在外电场中的分子结构和势能函数 [J]. *原子与分子物理学报*, 2014, 31(2): 197-201.
- [9] Wu D L, Tan B, Wan H J, *et al.* The analytical potential energy function of NH radical molecule in external electric field [J]. *Chinese Physics Letters*, 2015, 32(7): 073101.
- [10] Wu Y G, Liu J X, Liu H L, *et al.* Spectrum and dissociation properties of fluoro trichloro methane molecule in radiational field [J]. *Acta Physica Sinica*, 2019, 68(6): 063102.
吴永刚, 刘家兴, 刘红玲, 等. 三氯一氟甲烷分子在辐射场中的光谱性质与解离特性研究, *物理学报*, 2019, 68(6): 063102.
- [11] Qu Y F, Liu Y Z, Yin W Y, *et al.* Study on the physical and dissociation properties of disulfur dichloride under electric fields [J]. *Chinese Journal Structural Chemistry*, 2019, 38(8): 1241-1250.
- [12] Yang T, Ji J Y, Deng J, *et al.* Study of spectra and dissociation properties of the formaldehyde under external electric field [J]. *Journal of Atomic and Molecular Physics*, 2021, 38(5): 051001.
杨涛, 吉俊懿, 邓俊, 等. 外电场下甲醛的分子光谱与解离特性研究 [J]. *原子与分子物理学报*, 2021, 38(5): 051001.
- [13] Lin H, Liu Y Z, Yin W Y, *et al.* The studies on the physical and dissociation properties of chlorobenzene under external electric fields [J]. *Journal of Theoretical and Computational Chemistry*, 2018, 17(4): 1850029.
- [14] Huang J L, Li H B, Gan H F, *et al.* Mutagenicity of typical organo-halogenated compounds from drinking water [J]. *Environmental Science*, 1998, 19(1): 54-57.
黄君礼, 李海波, 甘卉芳, 等. 饮用水中典型有机卤代物体外致突变性研究 [J]. *环境科学*, 1998, 19(1): 54-57.
- [15] Huang J L, Fan Q X, Kou G Z, *et al.* Survey of haloforms in the main drinking water plants of our country [J]. *Environmental Chemistry*, 1987, 6(4): 80-86.
黄君礼, 范启祥, 寇广中, 等. 国内主要水厂卤仿的调查 [J]. *环境化学*, 1987, 6(4): 80-86.
- [16] Lan H J, Wu X M, Ma Y J, *et al.* Determination of eight volatile halogenated hydrocarbons in drinking water and their carcinogenic risk assessment [J]. *Modern Preventive Medicine*, 2019, 46(22): 4203-4207.
兰红军, 吴雪梅, 冯耀基, 等. 生活饮用水中8种挥发性卤代烃的测定及其致癌风险评估 [J]. *现代预防医学*, 2019, 46(22): 4203-4207.
- [17] Kampioti A A, Stephanou E G. The impact of bromide on the formation of neutral and acidic disinfection by-products (DBPs) in Mediterranean chlorinated drinking water [J]. *Water Research*, 2002, 36(10): 2596-2606.
- [18] Wang G S, Deng Y C, Lin T F. Cancer risk assessment from trihalomethanes in drinking water [J]. *Science of the Total Environment*, 2007, 387(1-3): 86-95.
- [19] Yuan J, Xia B Q, Luo X P, *et al.* Removal effect of UV/H₂O₂ on chlorination disinfection by-products tribromomethane and dibromochloromethane [J]. *Environmental Pollution & Control*, 2018, 40(9): 965-969.
员建, 夏佰钦, 罗小平, 等. 紫外光/H₂O₂对氯化消毒副产物三溴甲烷、二溴一氯甲烷的去除效果 [J]. *环境污染与防治*, 2018, 40(9): 965-969.

- [20] Lei J Y, Xue W X, Huang L T, *et al.* Studies on photocatalytic treatment of several disinfection by-products in tap water [J]. *Guangdong Chemical Industry*, 2019, 46(19): 31-33.
雷佳瑶, 薛文兴, 黄丽婷, 等. 几种自来水中消毒副产物的光催化处理研究 [J]. 广东化工, 2019, 46(19): 31-33.
- [21] Fang J Y, Wu B L, Liu H L, *et al.* Kinetics and mechanism of chloroform degradation due to vacuum ultraviolet photolysis [J]. *Journal of Natural Science of Heilongjiang University*, 2014, 31(1): 93-98.
- [22] Liang D M, Jing T, Huang Y, *et al.* Molecular structure and spectrum properties of CHF=CHF under the external electric field [J]. *Journal of Quantum Optics*, 2019, 25(1): 40-47.
梁冬梅, 荆涛, 黄意, 等. 外电场下 CHF=CHF 分子结构和光谱性质的研究 [J]. 量子光学学报, 2019, 25(1): 40-47.
- [23] Konaka S, Kiyoto K, Yamamoto K, *et al.* Molecular structures of CH₂BrCl, CHBrCl₂ and CHBr₂Cl as determined by gas electron diffraction [J]. *Journal of Molecular Structure*, 1984, 125(1-2): 143-153.
- [24] An H, Xiang M, Bumaliya A, *et al.* Molecular structure and dissociation characteristics of cesium bromide in external electric field [J]. *Chinese Journal of Quantum Electronics*, 2022, 39(3): 316-323.
安桓, 向梅, 布玛丽亚·阿布力米提, 等. 外电场下溴化铯的分子结构和解离特性 [J]. 量子电子学报, 2022, 39(3): 316-323.
- [25] Guan Y, Qin Y S, Liu B H. Physical properties of freon F-22 in external electric field [J]. *Journal of Jishou University (Natural Science 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.
- [26] 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.