

# 三聚氰胺分子在外电场中的物理特性和红外光谱特征<sup>\*</sup>

王国成, 陈宇, 邹志伟, 曹润平, 刘玉柱<sup>†</sup>

(南京信息工程大学长望学院, 南京 210044; 江苏省大气环境与装备技术协同创新中心, 南京 210044)

(2021 年 5 月 18 日收稿; 2021 年 7 月 14 日收修改稿)

Wang G C, Chen Y, Zou Z W, et al. Physical properties and infrared spectrum characteristics of melamine under external electric fields[J]. Journal of University of Chinese Academy of Sciences, 2023, 40(4): 468-473. DOI: 10.7523/j.ucas.2021.0086.

**摘 要** 三聚氰胺( $C_3H_6N_6$ )是一种工业原料,对人体危害极大,被世界卫生组织列为致癌物,研究其在外电场中的性质尤为重要。利用密度泛函理论,在 B3PW91/6-31+(d, p) 基组水平上,研究在外电场(0~0.010 a. u.)的作用下,三聚氰胺分子的键长、总能量、偶极矩(诱导偶极矩)、lowest unoccupied molecular orbital (LUMO)-highest occupied molecular orbital (HOMO) 能隙、红外光谱、解离势能面的变化。通过对不同外加电场作用下  $C_3H_6N_6$  分子基态稳定电子结构的计算,结果表明:在 N—C 键方向上加电场,随着外电场的逐渐加大, $C_3H_6N_6$  分子的总能量逐渐减小,偶极矩逐渐增大,能隙逐渐减小。电场对不同的键长影响不同,随着外电场逐渐加大,不同 N—C 键键长变化不同,其中,  $N_7—C_1$  键逐渐增大,  $N_5—C_1$  键逐渐减小, N—H 键长逐渐减小。

**关键词** 三聚氰胺; 密度泛函理论; 外电场; 红外光谱

中图分类号: O433 文献标志码: A DOI: 10.7523/j.ucas.2021.0086

## Physical properties and infrared spectrum characteristics of melamine under external electric fields

WANG Guocheng, CHEN Yu, ZOU Zhiwei, CAO Runping, LIU Yuzhu

(Changwang School of Honors, Nanjing University of Information Science and Technology, Nanjing 210044, China; Jiangsu

Collaborative Innovation Center on Atmospheric Environment and Equipment Technology (CICAET), Nanjing 210044, China)

**Abstract** Melamine ( $C_3H_6N_6$ ) is an industrial raw material that is extremely harmful to the human body. It is listed as a carcinogen by the World Health Organization. It is particularly important to study its properties under external electric field. In this paper, we have studied the changes of bond length, total energy, dipole moment (induced dipole moment), lowest unoccupied molecular orbital (LUMO)-highest occupied molecular orbital (HOMO) energy gap, Infrared spectroscopy, and dissociation potential energy of  $C_3H_6N_6$  using density functional theory (DFT) at

<sup>\*</sup> 国家自然科学基金(U1932149)和南京信息工程大学大学生创新创业训练计划项目(202110300049Z)资助

<sup>†</sup> 通信作者, E-mail: yuzhu.liu@gmail.com

the B3PW91/6-31+ (d, p) basis set level. By calculating the stable electronic structure of the  $C_3H_6N_6$  under external electric fields, the results show that when an electric field is applied in the direction of the N—C bond, the total energy of the  $C_3H_6N_6$  decreases, the dipole moment increases with the increases of the strength of external electric field gradually. On the contrary, the energy gap decreased with the increase of the strength of external field. The electric field has different effects on different bond lengths. As the external electric field gradually increases, the bond length of different N—C bonds changes differently, and the N—H bond length gradually decreases.

**Keywords**  $C_3H_6N_6$ ; DFT; external electric field; infrared spectrum

三聚氰胺( $C_3H_6N_6$ ),俗称密胺、蛋白精,是一种三嗪类含氮杂环有机化合物,被用作化工原料。对身体危害极大,可以致癌,不可用作食品添加剂,在 2017 年世界卫生组织癌症研究机构公布的致癌物清单初步整理参考,三聚氰胺在 2B 类致癌物清单中。三聚氰胺被一些不良商人加入牛奶制品中,冒充蛋白质,三聚氰胺在人体体内会分解出三聚氰酸,长期饮用会导致肾结石等疾病。在 2008 年的“毒奶粉”事件中,三聚氰胺“功不可没”,事件的起因是很多食用三鹿集团生产的奶粉的婴儿被发现患有肾结石<sup>[1]</sup>,随后在其奶粉中被发现化工原料三聚氰胺。

目前,对三聚氰胺的检测,常用的方法有高效液相色谱-串联质谱法<sup>[2]</sup>、反相色谱和离子交换色谱法<sup>[3]</sup>、中红外光谱联合模式法<sup>[4]</sup>等方法。研究三聚氰胺分子在外加电场中的物理特性和红外光谱特征,更有助于对三聚氰胺的检测研究。研究在外加电场中物质的特性,是一种很重要的研究方法。物质的结构直接影响物质材料的特性。当前,通过该方法研究的 Para-Xylene 分子<sup>[5]</sup>、氟化锂分子<sup>[6]</sup>、哈龙 1301 分子<sup>[7]</sup>、黄曲霉素 B1<sup>[8]</sup>和二甲苯<sup>[9]</sup>分子特性都取得了成功,关于三聚氰胺分子用此方法的研究目前尚未涉及。

本文利用密度泛函理论 (density functional theory, DFT)<sup>[10]</sup> 在 B3PW91/6-31+ (d, p) 基组水平上,研究在外电场(0~0.010 a. u.)的作用下,三聚氰胺分子的键长、总能量、偶极矩、LUMO-HOMO 能隙、红外光谱、解离势能面<sup>[11]</sup>的变化规律,并讨论外加电场对三聚氰胺分子结构特性的影响,为三聚氰胺分子的降解提供了理论参考。

1 理论

首先使用 GaussView5.0<sup>[12]</sup> 构建出三聚氰胺分子的结构模型,如图 1 所示,然后通过 Gaussian09W,利用 DFT 分别在 B3LYP/6-311+、B3LYP/6-311、B3PW91/6-311 和 B3PW91/6-31+(d, p) 基组水平上进行理论计算,得到优化后的分子结构,并得到分子的键长和总能量的计算值(calculated value, Cv),数据如表 1 所示,与实验值(experimental value, Ev)<sup>[13]</sup> 进行比较,并计算不同基组水平所得数据与实验值得误差值(error)。根据比较,很明显可以得出:在 B3PW91/6-31+(d, p) 基组水平上计算得到分子构型的键长和能量与实验值最为接近,故本文利用 DFT 在 B3PW91/6-31+(d, p) 基组水平下对三聚氰胺分子在外加电场中的性质进行了研究。

表 1 不同基组计算得到的  $C_3H_6N_6$  分子稳定构型参数

Table 1 The calculated parameters of the optimized structure of  $C_3H_6N_6$  at different levels and the experimental results

	B3LYP/6-311+	B3PW91/6-311	B3LYP/6-311	B3PW91/6-31+(d, p)	Experimental value
$Re_1(N_9-C_3)/\text{\AA}$	1.356 84	1.351 74	1.355 53	1.355 85	1.337 00
$Re_2(N_6-C_3)/\text{\AA}$	1.356 89	1.354 31	1.357 40	1.340 75	1.343 00
$Re_3(N_6-C_2)/\text{\AA}$	1.356 89	1.354 46	1.357 45	1.341 46	1.334 00
$Re_4(N_4-C_2)/\text{\AA}$	1.356 79	1.354 35	1.357 42	1.341 35	1.333 00
$Re_5(N_4-C_1)/\text{\AA}$	1.356 88	1.354 46	1.357 45	1.341 46	1.342 00
$Re_6(N_5-C_1)/\text{\AA}$	1.356 79	1.354 34	1.357 42	1.341 35	1.336 00
$Re_7(N_5-C_3)/\text{\AA}$	1.356 88	1.354 46	1.357 45	1.341 46	1.340 00
error	0.007 31	0.006 26	0.007 42	0.003 24	

注:1  $\text{\AA}$ =0.1 nm。

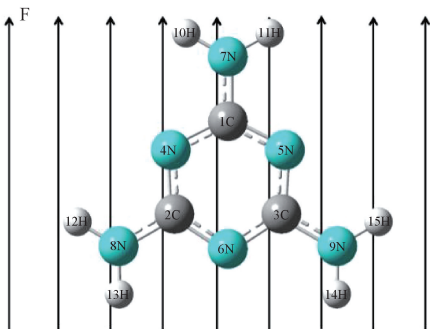


图 1 无外电场下的 C<sub>3</sub>H<sub>6</sub>N<sub>6</sub> 分子基态稳定构型

Fig. 1 The optimized geometry of ground state of C<sub>3</sub>H<sub>6</sub>N<sub>6</sub> under field-free

外电场作用下分子体系哈密顿量  $H^{[14]}$  为

$$H = H_0 + H_{\text{int}}. \tag{1}$$

其中:  $H_0$  为无外场时的哈密顿量,  $H_{\text{int}}$  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, 分子体系与电场强度  $E$  的外电场  $F$  的相互作用能为

$$H_{\text{int}} = -\mu F. \tag{2}$$

其中:  $\mu$  为分子的电偶极矩。本文选取的电场区间为  $0 \sim 0.01$  a. u., 其中  $1 \text{ a. u.} = 5.14225 \times 10^{11} \text{ V} \cdot \text{m}^{-1}$ 。

误差计算公式为

$$\text{Error} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n [Re_i(\text{Cv}) - Re_i(\text{Ev})]^2. \tag{3}$$

表 2 不同外加电场下 C<sub>3</sub>H<sub>6</sub>N<sub>6</sub> 分子基态的能量、键长和电偶极矩

Table 2 The calculated molecular total energy, bond distances and dipole moment of C<sub>3</sub>H<sub>6</sub>N<sub>6</sub> at different external electric fields

$F/\text{a. u.}$	$E/\text{Hartree}$	$Re(\text{N}_9-\text{H}_{15})/\text{\AA}$	$Re(\text{N}_7-\text{C}_1)/\text{\AA}$	$Re(\text{N}_5-\text{C}_1)/\text{\AA}$	$\mu/\text{Debye}$
0	-446.368 303 01	1.005 29	1.353 16	1.341 35	0.000 0
0.002	-446.368 532 99	1.004 81	1.356 75	1.339 75	0.608 4
0.004	-446.369 249 99	1.004 47	1.360 26	1.338 40	1.214 7
0.006	-446.370 443 23	1.004 17	1.363 82	1.337 09	1.819 7
0.008	-446.372 113 12	1.003 96	1.367 53	1.335 97	2.425 3
0.010	-446.374 258 03	1.003 77	1.371 31	1.334 78	3.030 5

注:  $1 \text{ Hartree} = 2\,625.5 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$ 。

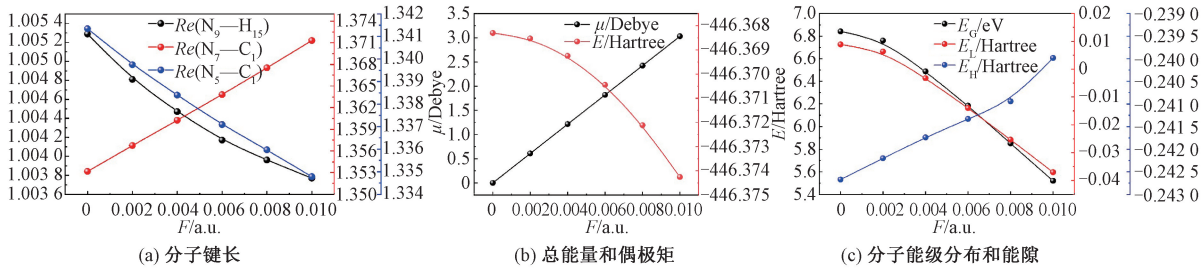


图 2 C<sub>3</sub>H<sub>6</sub>N<sub>6</sub> 分子键长 (a), 总能量和偶极矩 (b), 分子能级分布和能隙 (c) 随外电场的变化

Fig. 2 The variations of bond distances (a), energy  $E$ , and dipole moment  $\mu$  (b), energy level distribution and HOMO-LUMO energy gap (c) of C<sub>3</sub>H<sub>6</sub>N<sub>6</sub> under external fields

## 2 结果与分析

### 2.1 外加电场对 C<sub>3</sub>H<sub>6</sub>N<sub>6</sub> 分子键长和能量的影响

外加电场作用在 C<sub>3</sub>H<sub>6</sub>N<sub>6</sub> 分子的不同方向上, 对 C<sub>3</sub>H<sub>6</sub>N<sub>6</sub> 分子的物理特性和红外光谱特征所产生的影响也有所不同。本文在 1C—7N 方向上 (如图 1) 加不同强度的外加电场  $F$ , 强度范围是  $0 \sim 0.010$  a. u., 利用 DFT 在 B3PW91/6-31+(d, p) 基组上对分子进行理论计算, 得到稳定的分子结构, 在不同强度的外加电场的下, 得到分子的键长、总能量和偶极矩的数据, 如表 2 所示。分子键长随外加电场强度变化的趋势如图 2(a) 所示, 分子总能量和偶极矩的变化趋势如图 2(b) 所示。

如图 2(a), 外加电场对不同键的键长影响不同。其中,  $\text{N}_9-\text{H}_{15}$  键随外加电场强度的增大而减小, 即随着外加电场的增强,  $\text{N}_9-\text{H}_{15}$  键键长值越小, 键能越大, 键越稳定。随着外加电场强度的变化,  $\text{N}-\text{C}$  键的变化趋势不同, 其中,  $\text{N}_7-\text{C}_1$  键随着外加电场强度的增大而增大, 而  $\text{N}_5-\text{C}_1$  键键长随外加电场强度的增大而减小。在外加电场逐渐增大的过程中,  $\text{N}_7-\text{C}_1$  键逐渐延伸变长, 键长增大, 键能减少, 更易断裂, 使分子更容易发生

解离。这种变化可以用分子内电场和外电场的叠加效应解释<sup>[15]</sup>,分子在外加电场作用下,电场力和分子内应力的合力决定分子的稳定构型。随着外电场的增大,电场力逐渐大于分子内应力,从而导致分子内的电子位置发生移动。在电场从 0 a. u. 增加到 0. 010 a. u. 的过程中,由于电子位置的转移,导致 N<sub>7</sub>—C<sub>1</sub> 键的内电场增加,分子内应力小于电场力作用,从而使键长增大,N<sub>9</sub>—H<sub>15</sub> 键和 N<sub>7</sub>—C<sub>1</sub> 键正相反,因电子转移而导致 N<sub>9</sub>—H<sub>15</sub> 键的内电场减小,内应力大于电场力,故键长减小。

如图 2(b),分子总能量随外加电场强度的增大而减小,在外电场强度由 0 a. u. 增加到 0. 010 a. u. 的过程中,分子总能量呈递减趋势,具体表现为从外电场为 0 a. u. 时的-446. 368 Hartree 减小到外电场为 0. 010 a. u. 时的-446. 374 Hartree。三聚氰胺分子是非极性分子,本身不具有诱导偶极矩,但在外加电场的作用下,电子与原子核的相对位置发生改变,导致正电中心和负电中心不再重合,从而产生诱导偶极矩。由图 2(b)可知,在外加电场强度逐渐增大的过程中,偶极矩逐渐增大,此时,分子极性也逐渐增强。

2. 2 外加电场对 C<sub>3</sub>H<sub>6</sub>N<sub>6</sub> 分子轨道能级分布的影响

在对分子结构进行优化的同时,本文对分子内部电子结构也进行了研究。HOMO 表示已占有电子的能级最高的轨道,称为最高已占轨道,反映了分子失去电子的能力,即 HOMO 能级越高,分子越易失去电子。LUMO 表示未占有电子的能级最低的轨道,称为最低未占轨道,反映了分子得到电子的能力,即 LUMO 能级越低,越易得到电子。根据前线轨道理论:分子中有类似单个原子的电子,成为前线电子,在分子之间的化学反应过

程中,最先作用的轨道是前线轨道,最先起作用的电子就是前线电子,HOMO 对电子的束缚力较弱,具有电子给予体的性质,而 LUMO 对电子的亲和力较强,具有电子接受体的性质,因此在分子化学反应过程中,这两种轨道最易相互作用,有着极其重要的作用。

分子的稳定性可以用能隙反映,同时能隙也能反映电子从占据轨道跃迁到空轨道的能力,即分子进行化学反应时的化学活性。通常情况下,能隙越小,分子的化学活性越强,越容易发生化学反应。

本文用 B3PW91/6-31+(d, p) 的计算方法,得到在不同强度的外电场作用下 C<sub>3</sub>H<sub>6</sub>N<sub>6</sub> 分子的优化结构,并得到最低空轨道能量  $E_L$  和最高占据轨道能量  $E_H$  的值,如表 3 所示,并根据公式

$$E_G = (E_L - E_H) \times 27. 2 \text{ eV}, \tag{4}$$

求得分子能隙  $E_G$ <sup>[16]</sup>,数据如表 3 所示。

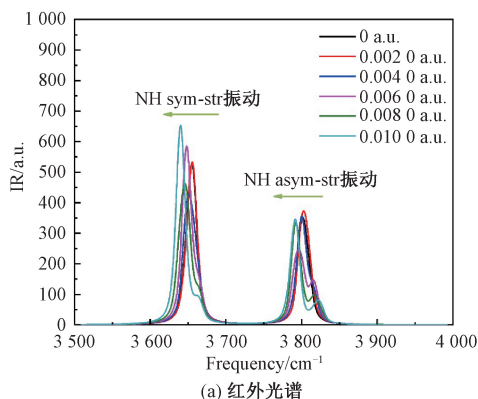
如图 2(c),外加电场对最低空轨道能量  $E_L$  和最高占据轨道能量  $E_H$  的影响不同,对最高占据轨道能量  $E_H$  影响更加显著,即数值变化更大。随着外加电场的增大,最低空轨道能量  $E_L$  逐渐减小,分子得到电子的能力逐渐增强,更易获得电子,且电场越大时,减小的速率越快。最高占据轨道能量  $E_H$  随着外加电场强度的增加而增大,因为  $E_H$  为负值, $E_L$  为正值,故  $E_G = E_L - E_H$ ,即  $E_H$  和  $E_L$  绝对值相加, $E_H$  为负值且随外电场强度的增大而增大, $E_H$  绝对值单调减小,最高占据轨道能量  $E_H$  受外加电场变化的影响更大,故  $E_G$  随外加电场强度的增大而减小,说明在外电场从 0 a. u. 到 0. 010 a. u. 的变化过程中,三聚氰胺分子的化学活性逐渐增强,电子从占据轨道跃迁到空轨道的能力越来越强,即分子越来越容易被激发到激发态发生化学反应。

表 3 不同外加电场下 C<sub>3</sub>H<sub>6</sub>N<sub>6</sub> 分子最高占据轨道能量、最低空轨道能量和能隙  
Table 3 The calculated energies of LUMO  $E_L$ , HOMO  $E_H$ , and energy gap ( $E_G$ ) of LUMO-HOMO for C<sub>3</sub>H<sub>6</sub>N<sub>6</sub> at different external fields

$F/(a.u.)$	$E_L/\text{Hartree}$	$E_H/\text{Hartree}$	$E_G/\text{Hartree}$	$E_G/\text{eV}$
0	0. 008 89	-0. 242 67	0. 251 56	6. 842 432
0. 002	0. 006 35	-0. 242 20	0. 248 55	6. 760 560
0. 004	-0. 003 20	-0. 241 74	0. 238 54	6. 488 288
0. 006	-0. 013 95	-0. 241 33	0. 227 38	6. 1847 36
0. 008	-0. 025 29	-0. 240 94	0. 215 11	5. 850 992
0. 010	-0. 037 01	-0. 239 98	0. 202 97	5. 520 784

## 2.3 外加电场对 $C_3H_6N_6$ 分子红外光谱的影响

红外光谱是分子能选择性吸收某些波长的红外线,而引起分子中振动能级和转动能级的跃迁,检测红外线被吸收的情况可得到物质的红外吸收光谱,又称分子振动光谱或振转光谱。本文在 B3PW91/6-31+(d, p) 基组水平上对三聚氰胺分子的结构进行优化,并进行红外光谱计算。在 1C—7N 正方向上加不同强度的外加电场,计算得到不同强度外加电场下的三聚氰胺分子的红外光谱,并置于一图中,如图 3(a)



所示。

如图 3(a),  $C_3H_6N_6$  分子的红外光谱受外加电场影响很大(如图中箭头方向所示),外加电场对不同振动模式的影响不同。以 NH sym-str 振动和 NH asym-str 振动为例分析, NH sym-str 振动在外加电场从 0 a. u. 增加到 0.010 a. u. 的过程中,振动频率逐渐减小,IR 光谱呈现明显的红移现象<sup>[17]</sup>。随着外加电场强度的逐渐增大, NH asym-str 振动的振动频率也逐渐减小,IR 光谱呈现红移现象,红外振动强度基本不变,同时也反映了 N—C 键断裂的难易程度。

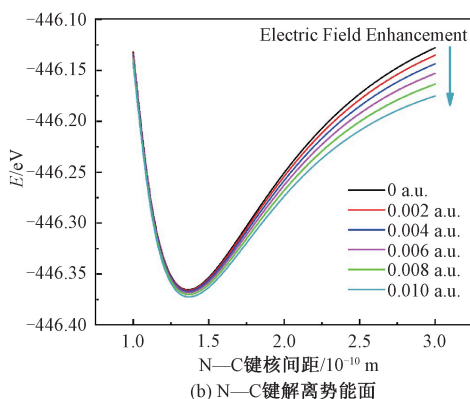


图 3  $C_3H_6N_6$  分子红外光谱(a)和 N—C 键解离势能面(b)随外加电场的变化趋势

Fig. 3 The variations of IR spectra (a) and dissociation PES (potential energy surface) along C—N bond (b) of  $C_3H_6N_6$  under external fields

## 2.4 外加电场对 $C_3H_6N_6$ 分子解离势能面的影响

分子中化学键的断裂有均裂和异裂 2 种方式,这 2 种化学键断裂的过程中所需要的能量是不同的,一般将分子化学键均裂所需的能量称为解离能,解离能是一种反映化学键强度的物理量。对于双原子分子,其解离能等于键能。对于多原子分子,一个化学键断裂的解离能,不代表化学键的键能,当分子分解成组成它的全部原子时所需的解离能,则等于分子中所有化学键的总和。分子一个化学键的解离能越小,分子的化学键越容易发生断裂,即分子越容易发生解离。

本文基于 DFT 在 B3PW91/6-31+(d, p) 基组水平上,探究三聚氰胺分子其中一个 N—C 键的解离能在不同强度的外加电场下的变化趋势。在无外电场作用下得到的 N—C 键的势能曲线,称为束缚的势能曲线。在不同强度外加电场下,对三聚氰胺分子基态进行 N—C 键方向上的能量

扫描,得到三聚氰胺分子的势能曲线,并把不同外加电场下所得到的势能曲线置于坐标系中,如图 3(b)所示。

如图 3(b),外加电场在从 0 a. u. 到 0.010 a. u. 的增大过程中,分子的势能曲线束缚形态逐渐被解开(如图中箭头方向所示),解离的势垒逐渐减小, N—C 键越来越容易发生断裂,为研究三聚氰胺分子在外电场作用下的解离提供了参考。

## 3 结论

计算了  $C_3H_6N_6$  分子在外电场作用下的物理特性、红外光谱特性和解离特性。本文首先在不同基组水平上进行计算,将得到的分子稳定构型数据与实验值进行比较,得出在 B3PW91/6-31+(d, p) 基组水平上计算得到的数据与实验值最为接近,因此本文采用 DFT 在 B3PW91/6-31+(d, p) 基组水平上,对不同强度外加电场下的分子进

行优化计算,得到分子的稳定构型,进而研究外加电场对分子物理特性、红外光谱特性和解离特性的影响。

研究表明:在不同强度外加电场作用下,分子的物理特性和红外光谱特征有着较大变化。随着外加电场的增强,3 种键有着不同的变化, $N_9-H_{15}$  键和  $N_5-C_1$  键键长均随外加电场强度的增大而减小, $N_7-C_1$  键键长随着外加电场强度的增大而增大,在外加电场逐渐增大的过程中, $N_7-C_1$  键逐渐延伸变长,越来越容易发生断裂。另一方面,分子总能量随外加电场强度的增大而减小,偶极矩随外加电场的增加而单调增加,分子极性越来越强。外加电场对最低空轨道能量  $E_L$  和最高占据轨道能量  $E_H$  的影响各不相同,随着外加电场的增大,最低空轨道能量  $E_L$  逐渐减小,分子得到电子的能力逐渐增强,且电场越大时,减小的速率越快,而最高占据轨道能量  $E_H$  随着外加电场强度的增加而增大, $E_G$  随外加电场强度的增大而减小,分子越来越容易被激发到激发态发生化学反应。外电场对三聚氰胺分子的红外振动光谱的位置和强度也有影响,以  $NH$  sym-str 振动和  $NH$  asym-str 振动为例分析,表现为两种振动的振动频率均随着外加电场强度的增大而减小,IR 光谱均呈现明显的红移现象。因为  $N_7-C_1$  键键长随着外加电场强度的增大而增大,在外加电场逐渐增大的过程中, $N_7-C_1$  键逐渐延伸变长,故分子的势能曲线束缚形态逐渐被解开,解离的势垒逐渐减小, $N_7-C_1$  键越来越容易发生断裂,使分子更容易发生解离。

参考文献

[ 1 ] 祝海珍. 乳制品中三聚氰胺检测方法的现状及研究进展 [J]. 食品安全质量检测学报, 2021, 12(3): 1009-1014. DOI: 10.19812/j.cnki.jfsq11-5956/ts. 2021. 03. 036.

[ 2 ] 常晨阳, 单娇, 宫小明, 等. 高效液相色谱-串联质谱法测定儿童奶酪中的三聚氰胺 [J]. 食品工程, 2021(1): 54-57. DOI: 10.3969/j.issn.1673-6044. 2021. 01. 015.

[ 3 ] 叶明立, 卢滨乐, Nesterenko Pavel N, 等. 反相色谱和离子交换色谱测定三聚氰胺氰尿酸中三聚氰胺与硫脲的对比研究 [J]. 分析仪器, 2020(6): 162-166. DOI: 10.3969/j.issn.1001-232x. 2020. 06. 033.

[ 4 ] 庞佳烽, 汤湛, 李艳坤, 等. 中红外光谱联合模式识别鉴别奶粉中三聚氰胺 [J]. 光谱学与光谱分析, 2020, 40(10): 3235-3240. DOI: 10.3964/j.issn.1000-0593(2020)10-3235-06.

[ 5 ] 杜建宾, 张倩, 李奇峰, 等. Para-Xylene 分子结构和光谱的外场效应研究 [J]. 光谱学与光谱分析, 2018, 38(12): 3659-3662. DOI: 10.3964/j.issn.1000-0593(2018)12-3659-04.

[ 6 ] 徐梅, 令狐荣锋, 李应发, 等. LiF 分子在外电场中的物理性质研究 [J]. 物理学报, 2012, 61(9): 102-107. DOI: CNKI;SUN;WLXB. 0. 2012-09-018.

[ 7 ] 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. DOI: CNKI;SUN;GUAN. 0. 2017-03-004.

[ 8 ] 何君博, 刘玉柱, 林华, 等. 外电场作用下黄曲霉素  $B_1$  的分子结构和光谱 [J]. 计算物理, 2018, 35(3): 335-342. DOI: 10.19596/j.cnki.1001-246x. 7644.

[ 9 ] 林华, 刘玉柱, 何君博, 等. 不同外电场下对二甲苯结构和光谱特性研究 [J]. 原子与分子物理学报, 2018, 35(3): 407-414. DOI: 10.3969/j.issn.1000-0364. 2018. 03. 008.

[ 10 ] Yin W Y, Liu Y Z, Zhou F B, et al. Molecular spectra and dissociation dynamics of oxalyl chloride: effect of external electrical fields [J]. Chinese Journal of Structural Chemistry, 2019, 38(4): 499-508. DOI: 10.14102/j.cnki.0254-5861. 2011-2141.

[ 11 ] Zhang Q H, Liu Y Z, Yin W Y, et al. Physical properties and stepwise dissociation of Halon 2402 under external electric field [J]. Chemical Physics Letters, 2019, 724: 18-23. DOI: 10.1016/j.cplett. 2019. 03. 037.

[ 12 ] 游利琴, 买文鹏, 袁金伟, 等. Gaussian 系列软件在有机化学教学中的应用与探索 [J]. 广东化工, 2014, 41(14): 232-233, 228. DOI: CNKI;SUN;GDHG. 0. 2014-14-122.

[ 13 ] Larson A C, Cromer D T. Crystal structure refinements with generalized scattering factors. II. Melamine, 2, 4, 6-triamino-s-triazine [J]. The Journal of Chemical Physics, 1974, 60(1): 185-192.

[ 14 ] 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 of Structural Chemistry, 2019, 38(8): 1241-1250. DOI: 10.14102/j.cnki.0254-5861. 2011-2269.

[ 15 ] 王藩侯, 黄多辉, 杨俊升. SnSe 分子外场下的基态性质和激发态性质 [J]. 物理学报, 2013, 62(7): 148-155. DOI: CNKI;SUN;WLXB. 0. 2013-07-022.

[ 16 ] Zhang X Y, Liu Y Z, Ma X Y, et al. Tuning the spectrum properties of fullerene  $C_{60}$ : using a strong external electric field [J]. Journal of Cluster Science, 2019, 30(2): 319-328. DOI: 10.1007/s10876-018-01486-4.

[ 17 ] Xiang Q J, Liu Y Z, Zhang X Y, et al. Spectrum and physical properties of  $C70$  under the external electric field [J]. Journal of Cluster Science, 2020, 31(5): 951-960. DOI: 10.1007/s10876-019-01700-x.