

外场作用下 CO_2 分子结构及特性研究

杨 涛^{1, 3}, 吉俊懿², 邓 俊^{1, 4}, 王 俊^{1, 4}, 曾成华^{1, 3}

(1. 攀枝花学院生物与化学工程学院, 攀枝花 617000;

2. 四川大学化学工程学院, 成都 610064;

3. 四川轻化工大学材料腐蚀与防护四川省重点实验室, 自贡 643000;

4. 四川轻化工大学过程装备与控制工程四川省高校重点实验室, 自贡 643000)

摘要: 以 CC-PVDZ 为基组, 采用筛选的 B1B95 密度泛函方法研究了不同外电场对 CO_2 分子结构和特性的影响. 研究发现: CO_2 的结构参数与电场有明显的依赖关系; CO_2 分子体系的总能量、偶极矩及 HOMO 与 LUMO 能级均会受电场的影响; 基于外电场对能隙的影响, 可以发现外电场会影响 CO_2 参与化学反应的能力; 同时 CO_2 红外光谱的特征峰与光谱强度均会受到外电场的影响, 且在外电场作用下 CO_2 还会产生新的红外特征峰, 因此可通过外电场对分子红外光谱进行调控, 进而便于捕捉相关谱图信息; 最后通过考察 CO_2 分子中 1C-2O 键的解离势垒受外电场的影响情况, 发现 1C-2O 键解离势垒与外电场具有极高的相关性, 研究结果为电场降解 CO_2 提供了重要的理论依据.

关键词: 二氧化碳; 外电场; 光谱性质; 降解

中图分类号: O56

文献标识码: A

DOI: 10.19907/j.0490-6756.2021.054003

Molecular structure and properties of carbon dioxide under external electric field

YANG Tao^{1, 3}, JI Jun-Yi², DENG Jun^{1, 4}, WANG Jun^{1, 4}, ZENG Cheng-Hua^{1, 3}

(1. School of Biological and Chemical Engineering, Panzhihua University, Panzhihua 617000, China;

2. School of Chemical Engineering, Sichuan University, Chengdu 610064, China;

3. Material Corrosion and Protection Key Laboratory of Sichuan Province,
Sichuan University of Science and Engineering, Zigong 643000, China;

4. Sichuan Provincial Key Lab of Process Equipment and Control,
Sichuan University of Science and Engineering, Zigong 643000, China)

Abstract: Based on CC-PVDZ, the effects of different external electric fields on the molecular structure and properties of CO_2 were studied by using the density functional theory B1B95 method. It is found that the geometric parameters and charge distribution of CO_2 are obviously dependent on the electric field. The total energy, dipole moment, and the HOMO/LUMO energy of CO_2 are influenced by the variation of the external electric field. Based on the influence of external electric field on the energy gaps of CO_2 , it can be found that external electric field will affect the ability of CO_2 to participate in chemical reaction. The infrared spectrum can also be affected by the external electric field. Thus the electric field can be

收稿日期: 2020-12-17

基金项目: 国家自然科学基金(21776187); 四川省重点实验室开放基金(2019CL20); 四川省高校重点实验室开放基金(GK201916, GK201903)

作者简介: 杨涛(1988—), 男, 四川巴中人, 博士, 讲师, 主要研究极端条件下材料的性能. E-mail: zitianxueyu@163.com

通讯作者: 吉俊懿. E-mail: junyiji@scu.edu.cn

used to regulate the infrared spectra of molecules, and facilitate the capture of the spectral information. Moreover, the influenced of different external electric fields to the dissociation energy of 1C-2O bond in CO₂ molecular is discussed, and the dissociation energy of 1C-2O bond is highly correlated with the external electric field. The results provide an important theoretical basis for the decomposition of CO₂ by external electric field.

Keywords: CO₂; External electric field; Spectral properties; Decomposition

1 引言

随着工业社会的不断进步与人们生活水平的不断提高,大量化石燃料被使用以满足社会与人类的发展需求,从而导致 CO₂ 的持续排放,进而引起大气中 CO₂ 浓度不断增高,最终导致全球变暖等严重的气候环境问题^[1-2]. 为缓解由 CO₂ 引起的环境问题,目前世界范围提出了两种主要的解决思路:减排^[3],即在满足人类生活生产的前提下降低 CO₂ 的排放;回收,即对大气中的 CO₂ 加以捕集并封存(CCS)^[4] 和利用(CCU)^[5]. 基于此,前人针对 CO₂ 做了大量的检测方法^[6]、减排^[3]、回收^[4, 7]、解离机理^[8]与资源化利用^[5, 9]等方面的研究,这些研究为 CO₂ 的治理与资源化利用提供了丰富的理论及方法支撑.

外电场的作用会导致分子或原子产生诸多物理及化学变化,如键能的变化、新自由基的产生、新激发态的出现以及振动斯塔克效应等^[10-13],因此外电场作用导致分子特性变化的相关研究引起了一些学者的极大兴趣^[14-15]. 同时研究分子的光谱^[16]及解离特性^[17]对促进相关物质的检测手段与治理方案的发展有着极为重要的意义. 目前关于外电场作用下分子的光谱与解离特性已有大量报道^[18-20],但现有研究均未对 CO₂ 在外电场作用下的结构、光谱及解离特性进行报道. 为了从理论上更好地了解 CO₂ 在外电场中的结构及特性情况,本文使用筛选得到的 B1B95/CC-PVDZ 方法对不同外电场中的 CO₂ 优化,得出稳定的基态分子构型,以此为基础再进一步研究不同外电场对 CO₂ 分子结构、红外光谱及分子中 1C-2O 键解离的影响,最终为 CO₂ 的检测和降解提供理论依据.

2 理论与计算方法

当分子体系置于外电场中时,分子体系经外电场作用后的哈密顿量 H 为:

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

式中的 H_0 为未经电场作用的分子体系哈密顿量,而 H_{int} 为外电场与分子体系相互作用时的哈密顿量,若分子体系为偶极近似,则分子体系与外电场相互作用的哈密顿量可以表示为

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

式中的 μ 为分子体系的电偶极矩, F 为外电场.

CO₂ 分子属于 D_{∞h} 群,当对 CO₂ 的分子结构进行优化时,将 CO₂ 分子置于笛卡尔坐标系内进行计算,如图 1 所示,其中 2O-1C-3O 呈直线排列且与 z 轴重合,对 CO₂ 施加的外电场均平行于 z 轴. 以 CC-PVDZ 为基组,以 CO₂ 结构的实验数据为评价标准,筛选确定 B1B95 为本研究的计算方法,再采用 B1B95/CC-PVDZ 分别考察 CO₂ 在不同外电场 $F(0, 0.005, 0.010, 0.015, 0.020, 0.025, 0.030, 0.035, 0.040 \text{ a. u.})$ 作用下分子的结构及其特性,同时在优化的 CO₂ 基态结构的基础上进一步考察了不同外电场对 CO₂ 红外光谱及 CO₂ 中的 1C-2O 键解离的影响情况.

3 结果与讨论

3.1 优化 CO₂ 分子基态结构

首先,为筛选优化 CO₂ 基态结构的密度泛函方法,分别选用 B1B95、B3LYP、HF、BLYP 和 B3PW91 与基组 CC-PVDZ 对 CO₂ 进行构型优化计算,计算获得的键长和键角分别列于表 1. 从表 1 可以看出,采用 B1B95/CC-PVDZ 计算的键长 $R_e(1, 2)$ 与 $R_e(1, 3)$ 均为 1.161 8 nm,键角 $\angle(1, 2, 3)$ 均为 180.0°,这些几何构型参数与实验值^[21]较为吻合,并优于其他的模拟计算值^[22],因此本文确定用 B1B95/CC-PVDZ 对 CO₂ 进行计算研究.

当 CO₂ 分子的放置如图 1 所示时,沿 z 轴施加不同的电偶极场(0~0.04 a. u.),通过 B1B95/CC-PVDZ 计算 CO₂ 的分子结构及其特性,优化得到分子的构型几何参数、总能量、偶极矩及电荷布居情况分别展示于图 2、3、4 与 5 中.

表 1 不同方法优化 CO₂ 分子的基态结构参数
Tab. 1 Optimized molecular structures of CO₂ by the different methods

方法	B1B95	B3LYP	HF	BLYP	B3PW91	文献值 ^[22]	实验值 ^[21]
$R_e(1, 2)/\text{nm}$	1.161 8	1.167 4	1.140 6	1.181 5	1.165 5	1.167 3	1.162 1
$R_e(1, 3)/\text{nm}$	1.161 8	1.167 4	1.140 6	1.181 5	1.165 5	1.167 3	1.162 1
$A3-1-2/(^{\circ})$	180.0	180.0	180.0	180.0	180.0	180.0	180.0

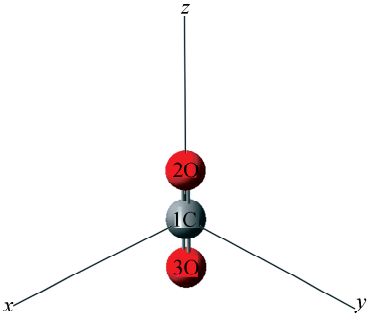


图 1 无外电场时 CO₂ 分子基态结构
Fig. 1 The molecule structure of CO₂ without external e-
lectric field

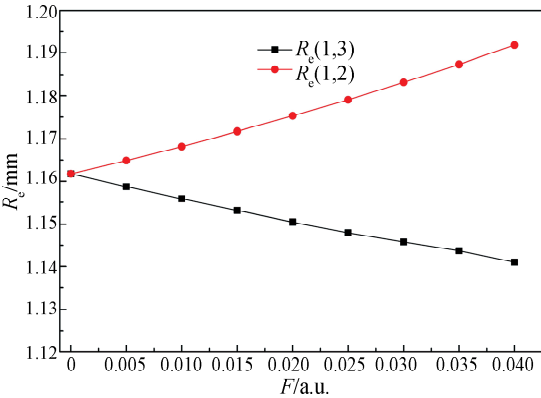


图 2 键长 R_e 随外电场的变化
Fig. 2 The bond lengths of CO₂ in different ex-
ternal electric field

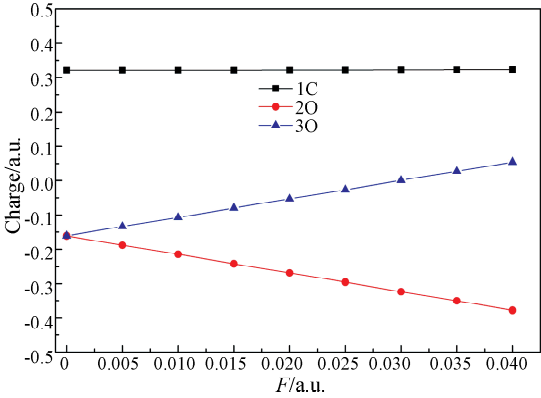


图 3 电荷量随外电场的变化
Fig. 3 The charge distribution of CO₂ in different
external electric field

的强度大小有着明显依赖关系,可以发现:当电场从 0 变化至 0.04 a. u. 时,键长 $R_e(1, 2)$ 呈增加的趋势,键长 $R_e(1, 3)$ 呈减小的趋势. 由图 3 可以发现:当电场由 0 变化至 0.04 a. u. 时,CO₂ 中 1C 上的正电荷为增加的趋势;CO₂ 中 2O 上的负电荷量为增加的趋势;CO₂ 中 3O 上的负电荷量为减少的趋势,并在电场强度由 0.025 a. u. 增长至 0.03 a. u. 时 CO₂ 中 3O 从呈电负性转化为呈电正性,出现该现象的原因是当电场从 0 变化至 0.04 a. u. 时,CO₂ 上的电子云由 2O 沿 1C 偏向 3O 所致. 而结合图 2 和图 3 可以发现,CO₂ 几何构型参数的变化是外电场与分子内部电荷分布产生的内电场共同作用的结果^[23].

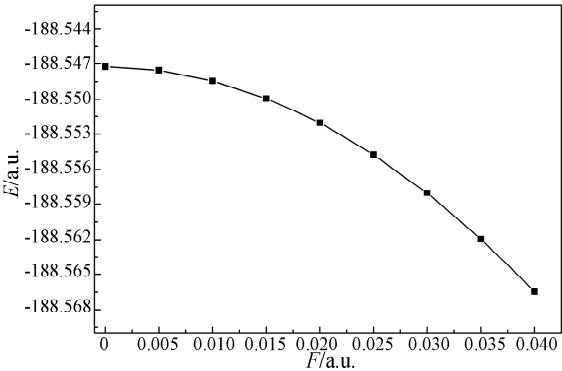


图 4 不同外电场作用下分子总能量随外电场的变化
Fig. 4 The total energy of CO₂ in different external
electric field

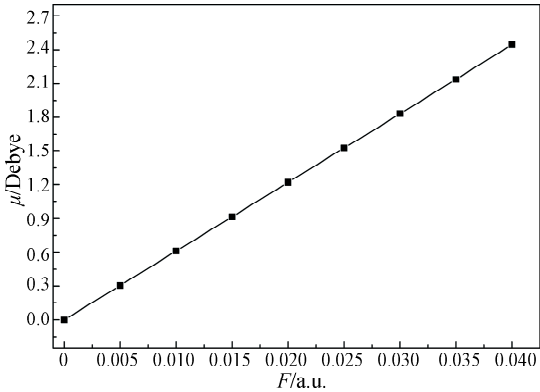


图 5 不同外电场作用下分子偶极矩随外电场的变化
Fig. 5 The dipole moment of CO₂ in different ex-
ternal electric field

由图 2 可以看出,CO₂ 的构型几何参数与电场

CO₂的总能量 E 与偶极矩 μ 随外电场的变化情况如图 4 与图 5 所示. 由图 4 及图 5 可以发现: 当电场从 0 变化至 0.04 a. u. 时, CO₂ 的总能量呈下降的趋势; 而 CO₂ 体系的偶极矩从 0 开始呈上升趋势. 分子的偶极矩越小则分子的对称性越高, 所以 CO₂ 的对称性在电场从 0 变化至 0.04 a. u. 时呈下降趋势, 因此由图 4 与图 5 可以得出在外电场作用下 CO₂ 分子的对称性越高则体系的能量也越高的结论, 该结论符合分子体系的对称性与体系能量的规律^[24].

3.2 外电场作用对 CO₂ 能级及能隙的影响

优化得到 CO₂ 稳定基态构型后, 本文还研究了外电场对 CO₂ 的最高占据轨道(HOMO)能级 E_H 、最低空轨道(LUMO)能级 E_L 及能隙 E_G 的影响情况, 结果如图 6 所示.

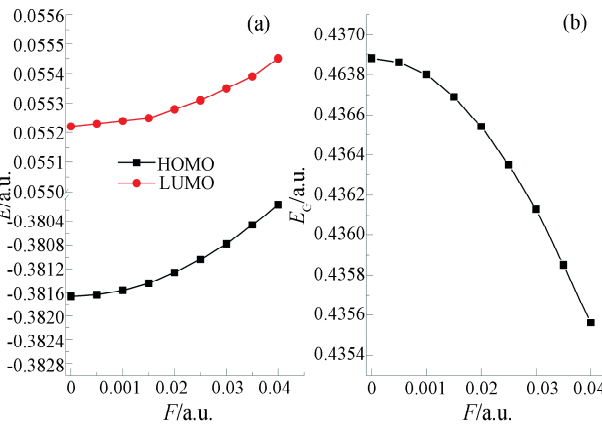


图 6 (a) HOMO 能级和 LUMO 能级随电场的变化; (b) 能隙随电场的变化
Fig. 6 (a) The HOMO and LUMO energy levels of CO₂ in different external electric field; (b) the energy gaps of CO₂ in different external electric field

分子的 E_H 可以反映体系失去电子的能力强弱. E_H 越高分子体系越容易失去电子, 即分子体系的还原性越强. E_L 的大小与分子体系的电子亲和势相当, E_L 越低分子体系越容易得到电子, 即分子体系的氧化性越强. 而能隙 E_G 由 E_H 和 E_L 共同决定, 其大小反映了电子从占据轨道向空轨道发生跃迁所需能量的大小, 在一定程度上反映了分子体系参与化学反应的能力^[25]. 由图 6 可以看出, 电场从 0 变化至 0.04 a. u. 时, E_L 与 E_H 均呈升高的趋势, 在 0.04 a. u. 时, E_L 有最大值 0.055 45 a. u., E_H 有最大值 -0.380 11 a. u.. 在 0~0.04 a. u. 时, E_G 呈减小的趋势, 即随着电场的变化占据轨道的电子更易被激发至空轨道形成空穴, 使得 CO₂ 更易被激发, 同时也说明外电场可以影响 CO₂ 参与化学反应

的能力.

3.3 外电场对 CO₂ 红外光谱特性的影响

在优化得到稳定分子基态构型的基础上, 本文还对 CO₂ 的红外光谱进行了计算及图像处理^[26]. 为进行计算与实验数据的有效对比, 本文还对计算得到的光谱数据进行了校正. 根据本文使用的密度泛函 B1B95/CC-PVDZ 方法及基组可以查得校正因子为 0.961^[27]. 表 2 列出了无外电场作用时直接计算得到的、计算结果经校正的及实验获得的红外特征峰位置. 经对比可以发现计算结果经校正后的数据与实验值匹配度更好, 说明利用密度泛函 B1B95/CC-PVDZ 方法获得的红外光谱具有极高的准确性, 也从另一个角度说明本文选用的 B1B95/CC-PVDZ 较为合理.

表 2 计算与实验得到的 CO₂ 红外数据
Tab. 2 The infrared spectra of CO₂ obtained from calculation and experiment

类别	红外值/cm ⁻¹	特征峰位置/cm ⁻¹
计算值	668.22	2 472.82
校正计算值	642.16	2 376.38
实验值 ^[28]	650	2 358

为考察沿 z 轴施加不同电场 (0~0.04 a. u.) 对 CO₂ 红外光谱的影响, 图 7(a) 展示了 CO₂ 在无电场情况下实验获得的及在不同外电场下计算获得的红外光谱. 由图 7(a) 可以发现实验获得的与计算得到的 CO₂ 红外光谱极为相似, 但随着电场的增加计算获得的红外光谱在波数为 1 336.75 cm⁻¹ 附近出现了新的特征峰, 该特征峰由 CO₂ 的对称伸缩振动产生. 无电场作用时, CO₂ 的对称伸缩振动具有极高的对称性, 所以该波数位置没有红外峰; 而外电场作用下 CO₂ 的对称伸缩振动的对称性被破坏, 故该波数位置出现了红外峰.

为进一步对比与分析, 图 7(b~d) 分别展示了不同特征峰在不同电场下的局部放大图. 图 7(b) 为 CO₂ 弯曲振动产生的特征峰, 可以发现随着电场强度的增加该峰的波数与强度均未受到电场的影响, 因为外电场的作用并未破坏 CO₂ 几何构型的直线特性; 图 7(c) 为 CO₂ 对称伸缩振动产生的特征峰, 可以发现随着电场强度的增加该峰发生了蓝移且红外峰的强度也呈增强趋势, 因为当电场从 0 到 0.04 a. u. 时 CO₂ 的对称性呈下降趋势; 图 7(d) 为 CO₂ 反对称伸缩产生的红外峰, 可以发现随着电场强度的增加该峰的发生蓝移且红外峰的强度也

呈减弱的趋势, 因为当电场从 0 到 0. 04 a. u. 时 CO₂ 的键长 $R_e(1, 2)$ 呈增加趋势且键长 $R_e(1, 3)$ 呈减小趋势. 经分析可以发现, 外电场作用会使分

子的构型及偶极矩发生变化, 进而会影响分子的红外光谱特性, 所以可以利用外电场对分子的红外光谱进行调控, 从而便于对相关谱图信息的捕捉.

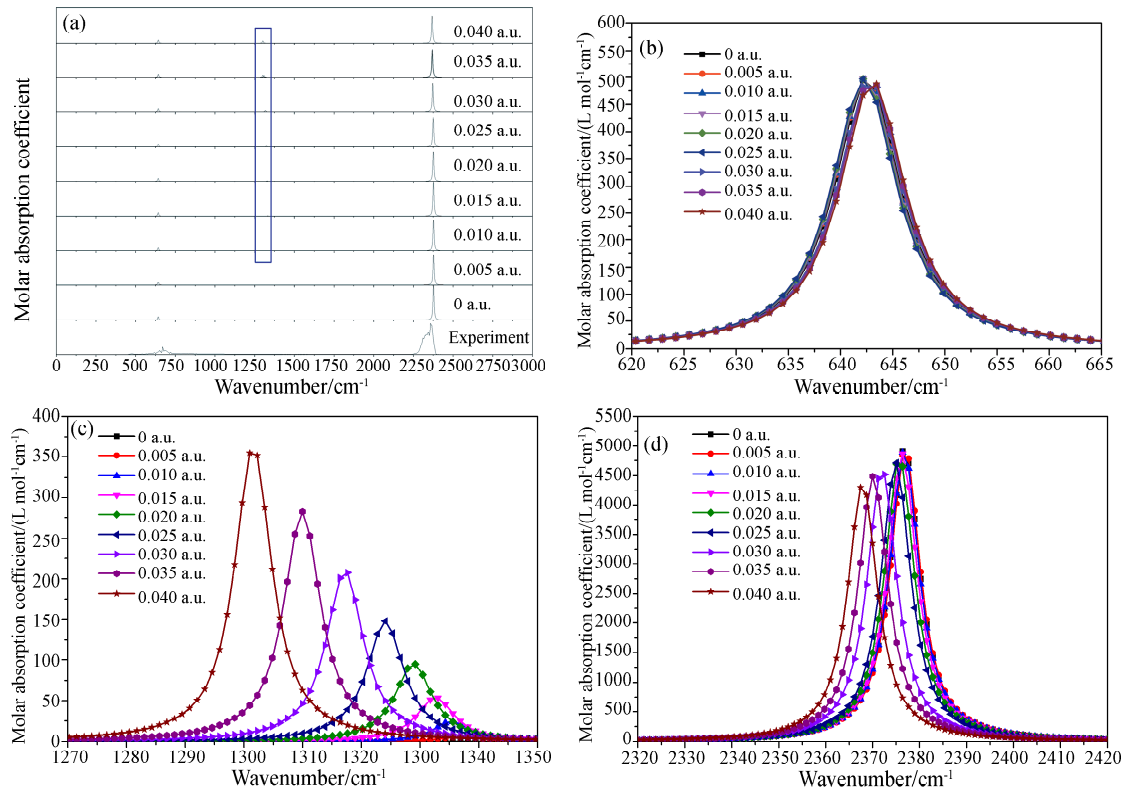


图 7 不同外电场作用下 CO₂ 红外光谱随外电场的变化
Fig. 7 The infrared spectrum of CO₂ in different external electric field

3. 4 外电场对 CO₂ 分子解离特性的影响

在沿 z 轴方向施加不同的电场 (0 ~ 0. 04 a. u.), 采用密度泛函 B1B95/CC-PVDZ 对 CO₂ 分子的 1C-2O 键进行势能扫描, 得到的键势能曲线如图 8 所示.

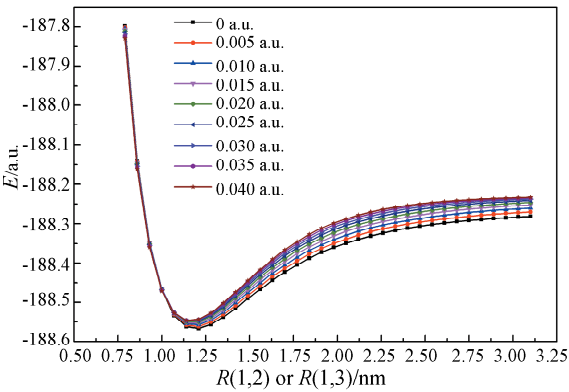


图 8 CO₂ 分子 1C-2O 键势能曲线随外电场的变化
Fig. 8 The potential energy curve of CO₂ in different external electric field

由图 8 可以发现在势能曲线的势阱最低位置

处, 不同外电场下的势能与外电场的关系与图 4 所示趋势一致; 外加电场由 0. 04 a. u. 减小至 0 a. u 时 1C-2O 键的势能曲线的势能垒逐渐减小, 1C-2O 键的束缚力逐渐减弱, 即 1C-2O 键越来越容易断裂, 可以预见当外电场反方向增加到一定大小时, 1C-2O 键会发生解离情况. 为进一步探索 1C-2O 键的键解离势垒与外加电场的关系情况, 本文将 1C-2O 键解离势垒与电场相互关系绘制于图 9.

根据图像特征对其进行线性拟合, 拟合结果的线性相关系数 R^2 为 0. 990 3, 由此可以判定 1C-2O 键解离势垒与电场具有极高的线性相关性, 所以可以利用拟合得到的公式 $y = 1. 689 2x + 0. 269 7$ 对 1C-2O 键的键解离进行预测, 经计算发现当电场为 -0. 159 7 a. u. 时 CO₂ 的 1C-2O 键会解离. 综上所述, CO₂ 分子中的 1C-2O 键在适当的外电场作用下会发生断裂, 且 1C-2O 键解离势垒与电场具有极高的线性相关性, 该结果为外电场降解 CO₂ 提供了重要的理论依据.

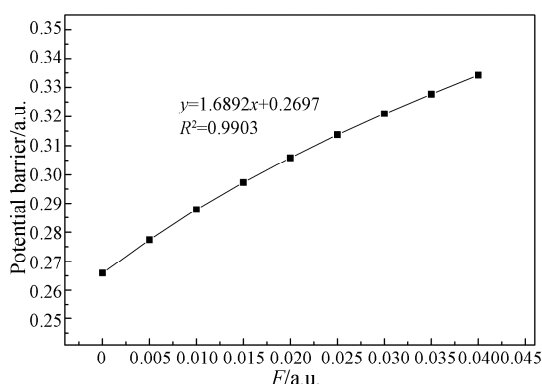


图 9 CO_2 分子 1C-2O 键解离能随外电场的变化

Fig. 9 The dissociation energy of 1C-2O bond in CO_2 under different external electric field

4 结 论

(1) 采用密度泛函 B1B95/CC-PVDZ 对外场作用下 CO_2 基态进行研究, 结果表明, CO_2 的构型、电荷布局、总能量、偶极矩与外电场均有较强的依赖关系. 电场由 0 变化至 0.04 a. u. 时, 键长 $R_e(1, 2)$ 呈增加趋势, 键长 $R_e(1, 3)$ 呈减小趋势; 1C 上的正电荷呈增加趋势, 2O 上的负电荷量呈增加趋势, 3O 上的负电荷量呈减小趋势; 总能量呈下降趋势; 偶极矩呈增加趋势; CO_2 的 HOMO 能级 LUMO 能级均一直增加, 能隙呈减小趋势, 即外电场可以对 CO_2 参与化学反应的能力产生影响.

(2) 本文计算的无电场时 CO_2 的红外数据与实验值吻合较好, 电场在考察范围内使 CO_2 的红外光谱出现了蓝移且还会影响红外光谱的强度, 同时外电场还会使 CO_2 的红外光谱产生新的特征峰, 因此可利用外电场对分子的红外光谱进行调控, 从而便于对相关谱图信息的捕捉.

(3) 通过对不同外电场下 CO_2 分子中 1C-2O 键进行势能的扫描, 发现不同电场会影响 CO_2 分子中 1C-2O 键的束缚情况, 且 1C-2O 键解离势垒与电场具有极高的线性相关性, 因此本文为外电场降解 CO_2 提供了重要的理论参考.

致谢: 本文计算采用的 Gaussian 09 软件包由四川大学朱权教授提供, 作者在此表示由衷的感谢.

参考文献:

[1] Rogelj J, Den Elzen M, Höhne N, *et al.* Paris Agreement climate proposals need a boost to keep warming well below 2 °C [J]. *Nature*, 2016,

534: 631.

- [2] Koukoulas N, Tyrologou P, Koutsovitis P. Special issue “climate change, carbon capture, storage and CO_2 mineralisation technologies” [J]. *Appl Sci Basel*, 2020, 10: 7463.
- [3] Zhang F, Zhang H, Liu Z. Recent advances in electrochemical reduction of CO_2 [J]. *Curr Opin Green Sustain Chem*, 2019, 16: 77.
- [4] Li H, Qin Q. Optimal selection of different CCS technologies under CO_2 reduction targets [J]. *Nat Hazards*, 2017, 88: 1197.
- [5] Zimmermann A W, Wunderlich J, Müller L, *et al.* Techno-economic assessment guidelines for CO_2 utilization [J]. *Front Energy Res*, 2020, 8: 5.
- [6] Ciobota C F, Piticescu R M, Neagoe C, *et al.* Nanostructured cobalt doped barium strontium titanate thin films with potential in CO_2 detection [J]. *Materials*, 2020, 13: 4797.
- [7] Mukhtar A, Saqib S, Mellon N B, *et al.* A review on CO_2 capture via nitrogen-doped porous polymers and catalytic conversion as a feedstock for fuels [J]. *J Clean Prod*, 2020, 277: 123999.
- [8] Morillo-Candas A S, Silva T, Klarenaar B L M, *et al.* Electron impact dissociation of CO_2 [J]. *Plasma Sources Sci T*, 2020, 29: 01LT01.
- [9] Snoeckx R, Bogaerts A. Plasma technology – a novel solution for CO_2 conversion? [J]. *Chem Soc Rev*, 2017, 46: 5805.
- [10] 李肇东, 李孟, 唐建伟. 光电耦合技术处理 3,4-二甲基苯胺废水的协同效应 [J]. *环境工程学报*, 2019, 13: 1875.
- [11] Pietanza L D, Colonna G, D’Ammando G, *et al.* Electron energy distribution functions and fractional power transfer in “cold” and excited CO_2 discharge and post discharge conditions [J]. *Phys Plasmas*, 2016, 23: 013515.
- [12] Nucara L, Greco F, Mattoli V. Electrically responsive photonic crystals: a review [J]. *J Mater Chem C*, 2015, 3: 8449.
- [13] 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 [J]. *物理学报*, 2019, 68: 063102.
- [14] Rhee H, Eom I, Ahn S H, *et al.* Coherent electric field characterization of molecular chirality in the time domain [J]. *Chem Soc Rev*, 2012, 41: 4457.
- [15] Dhont G, Fontanari D, Bray C, *et al.* Characterization of the observed electric field and molecular relaxation times for millimeter-wave chirped pulse in-

- strumentation [J]. J Infrared Millim Te, 2020, 41: 1009.
- [16] Hori M. High-precision molecular measurement [J]. Science, 2020, 369: 1160.
- [17] Zhang B, Li C, Xiong J, *et al.* Decomposition characteristics of C₄F₇N/CO₂ mixture under AC discharge breakdown [J]. AIP Advances, 2019, 9: 115212.
- [18] 王啸卿, 刘玉柱, 尹文怡, 等. 电场作用下溴甲烷的光谱和解离特性[J]. 计算物理, 2018, 35: 619.
- [19] 张翔云, 刘玉柱, 马馨宇, 等. 碘甲烷在外电场下的光谱和解离特性[J]. 中国科学院大学学报, 2018, 35: 839.
- [20] 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: 679.
- [21] Herzberg G. Molecular spectra and molecular structure III: electronic spectra and electronic structure of polyatomic molecules [M]. New York: Van Nostrand Reinhold, 1966: 598.
- [22] Rustad J R, Nelmes S L, Jackson V E, *et al.* Quantum-chemical calculations of carbon-isotope fractionation in CO₂ (g), aqueous carbonate species, and carbonate minerals [J]. J Phys Chem A, 2008, 112: 542.
- [23] 曹欣伟, 任杨, 刘慧, 等. 强外电场作用下 BN 分子的结构与激发特性 [J]. 物理学报, 2014, 63: 043101.
- [24] 李昌勇, 张临杰, 赵建明, 等. 铯原子里德堡态 Stark 能量及电偶极矩的测量和理论计算[J]. 物理学报, 2012, 61: 163202.
- [25] Huang Y, Rong C, Zhang R, *et al.* Evaluating frontier orbital energy and HOMO/LUMO gap with descriptors from density functional reactivity theory [J]. J Mol Model, 2017, 23: 3.
- [26] Lu T, Chen F. Multiwfn: a multifunctional wavefunction analyzer [J]. J Comput Chem, 2012, 33: 580.
- [27] National Institute of Standards and Technology. Computational chemistry comparison and benchmark dataBase [EB/OL]. (2019-08-01)[2020-11-18]. <https://cccbdb.nist.gov/vsfx.asp>.
- [28] National Institute of Standards and Technology. Carbon dioxide infrared spectrum [EB/OL]. (2018-07-01)[2020-11-18]. <https://webbook.nist.gov/cgi/cbook.cgi?Spec=C124389&Index=0&Type=IR&Large=on>.

引用本文格式:

中 文: 杨涛, 吉俊懿, 邓俊, 等. 外场作用下 CO₂ 分子结构及特性研究[J]. 四川大学学报: 自然科学版, 2021, 58: 054003.

英 文: Yang T, Ji J Y, Deng J, *et al.* Molecular structure and properties of carbon dioxide under external electric field [J]. J Sichuan Univ: Nat Sci Ed, 2021, 58: 054003.