

烷基环己苯异硫氰酸液晶材料太赫兹波吸收

阎昊岚 程雅青 王凯礼 王雅昕 陈洋玮 袁秋林 马恒

Terahertz wave absorption for alkylcyclohexyl-isothiocyanatobenzene liquid crystal materials

Yan Hao-Lan Cheng Ya-Qing Wang Kai-Li Wang Ya-Xin Chen Yang-Wei Yuan Qiu-Lin Ma Heng

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 68, 116102 (2019) DOI: 10.7498/aps.68.20190209

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.68.20190209>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

---

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

太赫兹液晶材料与器件研究进展

Research progress of terahertz liquid crystal materials and devices

物理学报. 2019, 68(8): 084205 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20182275>

太赫兹波段液晶分子极化率的理论研究

Theoretical study on the polarizability properties of liquid crystal in the THz range

物理学报. 2016, 65(14): 143101 <https://doi.org/10.7498/aps.65.143101>

太赫兹表面极化激元

Terahertz surface polaritons

物理学报. 2017, 66(14): 148705 <https://doi.org/10.7498/aps.66.148705>

太赫兹频率编码器

Terahertz frequency coding metasurface

物理学报. 2019, 68(10): 104203 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20190032>

太赫兹人工电磁媒质研究进展

Progress of terahertz metamaterials

物理学报. 2015, 64(22): 228701 <https://doi.org/10.7498/aps.64.228701>

工字形太赫兹超材料吸波体的传感特性研究

Study on sensing characteristics of I-shaped terahertz metamaterial absorber

物理学报. 2015, 64(11): 117801 <https://doi.org/10.7498/aps.64.117801>

## 烷基环己苯异硫氰酸液晶材料太赫兹波吸收\*

阎昊岚<sup>1)</sup> 程雅青<sup>2)</sup> 王凯礼<sup>1)</sup> 王雅昕<sup>1)</sup> 陈洋玮<sup>1)</sup> 袁秋林<sup>1)</sup> 马恒<sup>1)†</sup>

1) (河南师范大学物理与材料科学学院, 新乡 453007)

2) (河南信息工程学校计算技术系, 郑州 450000)

(2019年2月18日收到; 2019年4月2日收到修改稿)

基于密度泛函理论, 利用 Gaussian09 程序包, 通过 Opt + Freq 优化结构, 以 B3LYP/6-311g 基组对 4-(trans-4-n-alkylcyclohexyl) isothiocyanatobenzenes (CHBT) 16 种液晶分子在 0.1—5.0 THz 波段的吸收进行研究, 提出了通过考察分子转动惯量和质量重心偏移对太赫兹吸收的影响方法. 计算结果表明, 随着分子烷基链上碳原子数目增加, 分子的转动惯量和重心的偏移将对太赫兹波的吸收产生影响. 在 0.1—5.0 THz 波段, 3—7 个碳原子的分子吸收相对较强. 以此为参照, 减少和增加烷基链上的碳原子数目都会降低分子对太赫兹波的吸收. 在 0.3—3.0 THz 范围内, 将计算结果与 10 种有实验数据的分子进行了对比. 结果发现, 低频波段计算结果与实验测量相比存在差异, 其中吸收峰位置的差异可能来源于氢键. 比较吸收强度的相对大小值, 发现实验测量与计算结果较为一致, 表明吸收强度来源于偶极子振动、转动吸收, 展现了计算模拟的积极意义. 研究结果可对相关分子的设计与合成提供有用的建议.

**关键词:** 液晶, 太赫兹, 烷基链, 高斯

**PACS:** 61.30.Vx, 33.20.Ea, 32.30.Bv, 78.47.-p

**DOI:** 10.7498/aps.68.20190209

## 1 引言

液晶是既有液体的流动性, 又有晶体的各向异性物质. 大多数液晶是具有长棒状或圆盘状分子形状的有机化合物. 由于其半流体性质, 在电场作用下, 液晶分子由于偶矩的响应会按电场方向取向, 导致分子原有的排列方式发生变化, 从而使液晶的光学性质也随之发生改变, 这种电光效应通常都难免伴随着对光吸收的改变<sup>[1,2]</sup>. 因此, 根据电光器件的性能要求, 液晶物质与光的相互作用机理研究显得十分重要<sup>[3,4]</sup>.

太赫兹技术是目前光学领域最重要的新兴技术之一<sup>[5]</sup>. 在许多方面, 比如医学<sup>[6]</sup>、安全监测系统<sup>[7]</sup>、生命科学等领域都有应用<sup>[8,9]</sup>. 通常, 太赫兹波是指频率范围为 0.1—10.0 THz 之间的电磁波,

波长范围为 0.03—3.00 mm, 介于微波与远红外波段之间. 由于太赫兹的频率较高, 所以具有良好的空间分辨率和时间分辨率<sup>[10,11]</sup>.

在安全检查和医学检查方面, 由于 X 光的光子能量高, 对人体伤害大, 而低频率的红外光能量过低, 穿透力差, 不易被探测器接收, 同时, 红外探测器还易受环境的干扰<sup>[12]</sup>. 处于高频区域的太赫兹波克服了两者的缺点, 光子能量相比 X 光较低, 只有毫电子伏特, 不易破坏被检测物质<sup>[13]</sup>. 因此, 太赫兹波是安全检查和医学影像技术的理想波谱. 上述器件中, 液晶材料作为调制光波的必备材料, 其与太赫兹光的相互作用是关键因素<sup>[14,15]</sup>. 液晶分子的电光效应是建立在分子极性基础之上, 极性越强, 对 THz 波的响应与吸收都十分敏感. 如果对 THz 波吸收太强, 波能量的损失就越大. 另外, 液晶分子的振动和旋转也对波吸收有较大的贡献. 所

\* 国家自然科学基金 (批准号: 61540016) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: hengma@henannu.edu.cn

以,选择一种对 THz 波具有较小的吸收且敏感的电光响应材料是较为困难的事情. 红外光谱是材料分子吸收某些波长的红外光的谱线. 该波长的光能够引起分子振动能级和转动能级的跃迁,根据分子内部原子间的相对振动和分子转动等信息可以确定物质的分子结构. 因此,红外吸收光谱又称分子振动光谱或振转光谱<sup>[16]</sup>.

通常将红外光谱按波长分为三个区域:近红外区(0.75—2.50  $\mu\text{m}$ )、中红外区(2.5—25.0  $\mu\text{m}$ )和远红外区(25—300  $\mu\text{m}$ ). 中红外光谱属于分子的基频振动光谱;远红外光谱则属于分子的转动光谱和某些基团的振动光谱. 太赫兹波谱是位于红外光谱上的中、远红外区的光波. 因此,研究太赫兹波的问题,事实上是研究中、远红外波的工作. 根据相关光谱文献<sup>[16]</sup>,关于物质对红外光谱吸收的原因基本上都有较为详细的结论. 例如,有机化合物分子中的官能团特征吸收峰表现在中红外光的较高频段,而在远红外波段,产生吸收峰的主要原因是分子的振动与转动对波的吸收. 通常,有机分子内低能电子跃迁、含氢原子团伸缩振动的倍频吸收位于近红外(大于 120 THz)波段,绝大多数有机化合物和无机离子的基频吸收带,即分子内与单个化学键相关的伸缩和弯曲等振动模式出现在中红外区(6—120 THz),而各种有机分子之间的氢键弱相互作用、偶极子的振动和转动跃迁以及晶体中声子的低频骨架振动所对应的吸收频率均位于远红外区(小于 6 THz)的太赫兹波段<sup>[10]</sup>.

由于 THz 波的产生对波源有较高的要求,而实验研究有较多的不可控制因素,因此,关于液晶在 THz 波段的实验测量数据并不多,关于 THz 吸收方面的物理和化学机理分析也较少.

由于理论模拟方法简单便利,能够有效了解和研究物质分子的 THz 吸收特性,工作效率高、成本低,近些年在液晶 THz 吸收方面也有一些计算模拟工作<sup>[17,18]</sup>. 这些工作能够对液晶分子的性质进行设计与预测,对材料的合成具有指导意义.

本研究参考了具有 THz 实验测量数据的液晶 *n*CHBT(4-(trans-4-*n*-alkylcyclohexyl) isothiocyanatobenzenes) ( $n = 0—15$ ) 系列分子<sup>[19]</sup>,通过计算得到分子的中远红外吸收光谱,分析分子在 0.1—5.0 THz 范围内的波吸收状况,讨论烷基链的碳原子数目与 THz 吸收的关联性.

## 2 计算

本研究利用基于密度泛函理论的 Gaussian09 程序包<sup>[20]</sup>对分子进行模拟,特别是对分子进行红外光谱方面的计算,为分子合成与实验测量进行了有效的理论预测<sup>[21—26]</sup>. 关于液晶分子 THz 波吸收方面的模拟计算工作也有一定的研究.

图 1(a) 和图 1(b) 展示了液晶分子 5CB<sup>[18]</sup> 和 MBBA(N-(4-methoxybenzylidene)-4-butylaniline)<sup>[17]</sup> 在 THz 波段的实验以及计算结果. 由于实验测量中液晶分子的吸收是由于氢键弱相互作用、偶极子的振动和转动跃迁引起的,有些振动频率简并或十分接近不易分辨,还有一些简正振动无红外活性,使分子不产生红外吸收,所以吸收谱难以观察到吸收峰. 另一方面,由于实验误差和噪音的影响,低频率附近的测量结果总是难以表征. 而理论模拟采

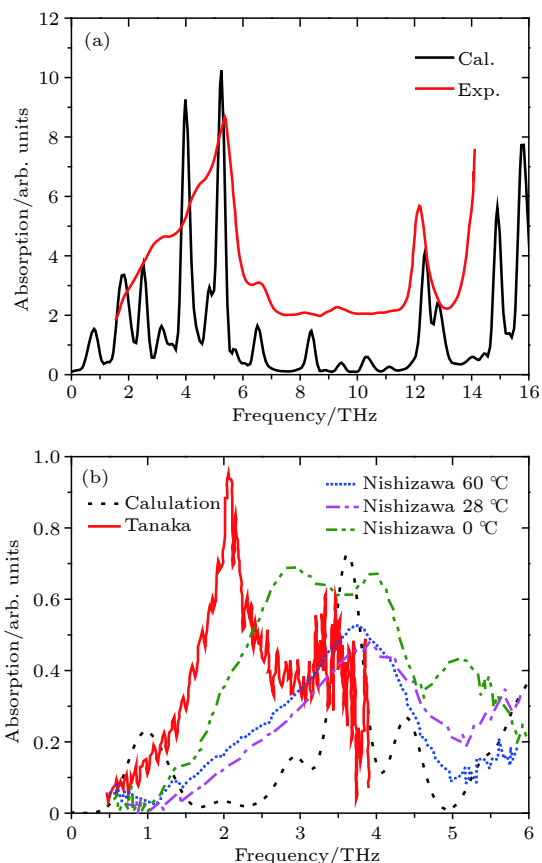


图 1 (a) 5CB 计算值和实验值对比; (b) MBBA 计算值和实验值对比

Fig. 1. (a) Comparison of calculations and experimental results about 5CB; (b) comparison of calculations and experimental results about MBBA.

用的是单分子模型, 没有考虑分子之间的相互作用, 因此没有体现氢键的作用, 吸收峰值体现了偶极子振动和转动的吸收, 吸收峰值比较稀疏. 但是可以看出计算结果和实验测量的吸收趋势十分相似, 说明计算模拟得到偶极子振动和转动的吸收值与实验测量相比是准确的. 通常, 在较高频段, 液晶分子产生的吸收绝大部分为官能团产生的特征吸收峰, 因而计算结果与实验测量符合得较好. 因此, 使用 Gaussian 计算模拟结果是可靠的, 可以详细地展示分子对波吸收的复杂性. 这些计算结果为本工作的可靠性提供支撑<sup>[27–29]</sup>.

本文所研究的 16 种液晶分子, 均是在 CHBT 分子的基本结构基础上, 通过改变烷基链碳原子的数目  $n$  构成不同的液晶分子. 其结构如图 2 所示.

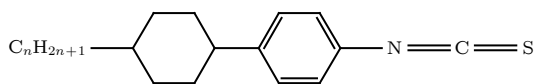


图 2 16 个棒状液晶分子的化学结构 ( $n = 0-15$ )

Fig. 2. Chemical structure of 16 liquid crystal molecules ( $n = 0-15$ ).

在使用 Gaussian09 程序包过程中, 以 Opt + Freq 计算类型, 使用 B3LYP/6G311g 基组优化了 16 种液晶分子, 得到了红外吸收光谱等数值<sup>[20]</sup>. 通过这些数值, 对影响分子吸收的因素进行了讨论. 讨论总体分为两部分: 第一部分对 0.1—5.0 THz 频率范围内分子的吸收进行了分析; 第二部分针对 Chodorow 等<sup>[19]</sup> 的实验数据, 比较了 0.3—3.0 THz 波段范围内 3—12 CHBT 液晶分子的吸收光谱.

### 3 结果与讨论

本文讨论 16 种向列相液晶分子的 THz 吸收状况, 根据文献, 只有  $n = 3-12$  这 10 种分子具有实验数据, 其他 6 种分子暂未发现实验数据. 但是, 作为参考, 我们也对其进行了计算讨论.

#### 3.1 0.1—5.0 THz 波段的波吸收分析

图 3 展示了 0.1—5.0 THz 波段 16 个分子的吸收状况. 可以看出, 所有分子的吸收都有一个较高的峰值, 该吸收峰的分布十分相似, 大约分布在 0.4—0.9 THz 之间. 但分子峰值的大小有所有不同. 当  $n = 3, 4, 5, 6, 7$  时, 分子的吸收峰值较高. 0.1—5.0 THz 属于远红外波段, 对于单个分子模型

而言, 分子的振动与转动是对波吸收的主要因素. 因此, 这些吸收峰差异是由分子自身振动与转动差异带来的<sup>[10,16]</sup>.

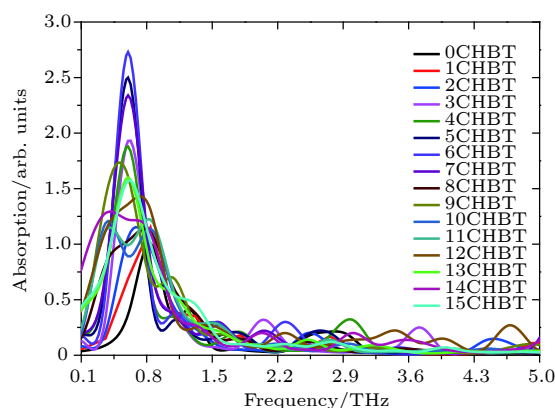


图 3 0—5 THz 波段分子吸收光谱

Fig. 3. Molecular absorption spectroscopy at 0–5 THz.

另一方面, 红外吸收谱的强度是分子振动跃迁概率的表征, 与分子振动时偶极矩的变化相关. 因此, 与基团固有偶极矩有关, 极性越强, 振动时偶极矩变化越大, 吸收谱峰值越高; 分子中的原子对称性好, 振动时偶极矩变化就小, 吸收谱峰值越弱. 液晶分子在低太赫兹波段的吸收同时又是分子转动的一个重要体现. 分子的转动取决于分子内原子质量分布和转动惯量. 因此, 为了分析 0.1—5.0 THz 波段吸收峰产生的原因, 我们计算了这些分子的偶极矩和转动惯量.

16 个分子转动惯量和偶极矩的计算结果随烷基链长度的变化展示在图 4 和图 5 中. 从图 4 和图 5 可以看出, 分子的转动惯量随碳原子数目的增加而增大. 偶极矩只有  $n = 3, 5$  候有些异常, 可能

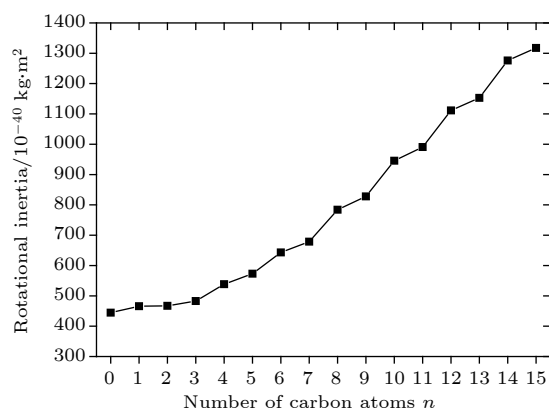


图 4 16 个分子在其长轴的转动惯量值的变化趋势

Fig. 4. Trend of the rotational inertia of 16 molecules on their long axis.

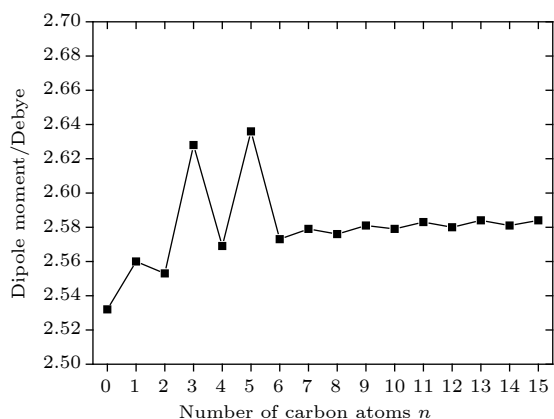


图 5 16 个分子在其长轴的总偶极矩值的变化趋势

Fig. 5. Trend of the total dipole moment of 16 molecules on their long axis.

是烷基链碳氢的增加对分子重心从苯环到环己烷的迁移产生的电荷中心的差异造成的. 其他分子的偶极矩整体差异不大, 但是微小差别显示出偶极矩的奇偶效应. 这说明分子的电荷分布随烷基链的增加变化较小, 显示烷基链对分子的极性贡献不大.

影响分子振动和转动的因素主要考虑分子的重心和转动惯量, 因此, 需要讨论分子内的原子质量分布 (如表 1) 和转动惯量对吸收的影响. 我们把整个分子分为 NCS-Benzene-Cyclohexane- $C_nH_{2n+1}$  几个部分. 根据各部分的原子质量之和, 确定分子的重心位置. 表 1 和图 6 展示了分子质量分布和重

心位置的标定. 以  $n = 1$  为例, 经过计算发现, 分子的质量中心在靠近环己烷一端的苯环位置.

下面具体分析所有分子的质量分布和重心位置与吸收的关系. 从表 1 可以看出, 当  $n \leq 3$  时, 异硫氰酸脂加苯环的质量大于环己烷加烷基链的质量, 分子的重心在苯环上. 因为苯环的结构坚硬, 所以分子短而且不容易发生弯曲, 振动吸收较弱. 但当  $n = 3$  时, 分子的重心十分接近苯环与环己烷相连的 C—C 键, 导致该 C—C 键容易弯曲, 分子的振动变得容易, 从而增加 3CHBT 对光的振动吸收, 所以 3CHBT 峰值较高, 而 (0—2)CHBT 峰值较低. 当  $4 \leq n \leq 7$  时, 异硫氰酸脂加苯环的质量小于环己烷加烷基链的质量, 分子的重心迁移在环己烷上. 因为环己烷的结构柔软, 导致环己烷的 C—C—H 与连接苯环的 C—C—C 形成的面角扭曲或者弯曲振动变得容易, 从而增加 4CHBT, 5CHBT, 6CHBT 和 7CHBT 对 THz 的吸收, 所以它们的峰值较高. 当  $n \geq 8$  时, 虽然分子的重心继续迁移, 结构稳定性较差. 但是, 随着烷基链上碳原子的数目不断增加, 分子逐渐变长, 质量逐渐增大, 转动惯量增大变得显著, 相对于同样的温度和分子内能, 分子的转动速度变低, 振动与转动状态变得稳定, 对 THz 波的吸收变得较弱, 所以吸收峰值较低.

表 1 16 个分子各个组成部分的原子质量

Table 1. Atom mass of each component of 16 molecules.

$n$ CHBT	NCS/ $g \cdot mol^{-1}$	Benzene/ $g \cdot mol^{-1}$	NCS+ Benzene/ $g \cdot mol^{-1}$	Cyclohexane/ $g \cdot mol^{-1}$	NCS+ Benzene + Cyclohexane/ $g \cdot mol^{-1}$	$C_nH_{2n+1}/$ $g \cdot mol^{-1}$	Cyclohexane + $C_nH_{2n+1}/$ $g \cdot mol^{-1}$
0CHBT	58	76	134	82	216	1	83
1CHBT	58	76	134	82	216	15	97
2CHBT	58	76	134	82	216	29	111
3CHBT	58	76	134	82	216	43	125
4CHBT	58	76	134	82	216	57	139
5CHBT	58	76	134	82	216	71	153
6CHBT	58	76	134	82	216	85	167
7CHBT	58	76	134	82	216	99	181
8CHBT	58	76	134	82	216	113	195
9CHBT	58	76	134	82	216	127	209
10CHBT	58	76	134	82	216	141	223
11CHBT	58	76	134	82	216	155	237
12CHBT	58	76	134	82	216	169	251
13CHBT	58	76	134	82	216	183	265
14CHBT	58	76	134	82	216	197	279
15CHBT	58	76	134	82	216	211	293

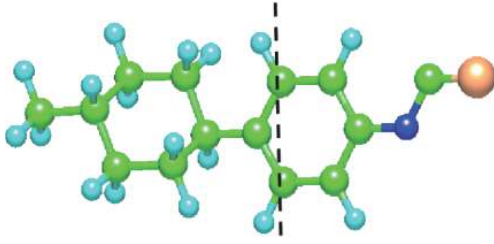


图 6 1CHBT 的分子质量分布和重心位置标定

Fig. 6. Calibration of mass distribution and center of gravity for 1CHBT.

### 3.2 计算与实验结果对比

Chodorow 等<sup>[19]</sup>通过实验测量了 0.3—3.0 THz 波段 ( $n = 3—12$ )CHBT 分子的吸收光谱. 图 7 对比了 10 组实验数据与计算结果. 由于实验测量分为 o 光和 e 光, 根据相关理论, 我们将 o 光与 e 光吸收数据加和绘制为一条曲线. 由于实验测量和计算结果吸收的单位不同, 实验测量的单位是吸收系数, 而计算结果只是吸收的相对数值大小, 实验结果和计算结果的吸收峰值高低的绝对值比较没有意义, 只需要观察不同分子相对峰值的高低. 因此, 为了方便对比和观察, 我们将计算结果的数值进行倍数放大.

通过图 7 的数据对比, 可以看出, 就像其他计

算得到的结果一样<sup>[17,18]</sup>, 在 0.3—0.8 THz 之间计算得到的强吸收峰, 实验测量都没有得到. 实验测量没有发现明显的吸收峰, 吸收只是随着频率的增加而增加, 但是在 1.7 THz 之后, 液晶开始出现吸收, 大部分材料都有平坦的吸收峰. 而计算值在 0.5 THz 处有特别明显的吸收峰, 在之后又有一些较低的吸收峰.

实验测量在低频段峰值很少, 在这个频段, 有机分子之间的氢键 (N—H) 弱相互作用在吸收中占据主要成分, 而不同液晶材料的分子结构与分子间的氢键是相似的. 偶极子的振动-转动跃迁以及晶体中声子的低频骨架振动所对应的吸收频率占据次要成分, 因此吸收的峰值位置差异难以体现, 而吸收的强度差别体现在偶极子跃迁. 换句话说, 实验测量更取决于氢键和声子的贡献, 由于液晶分子有些振动频率简并或十分接近不易分辨, 还有一些简正振动无红外活性, 使分子不产生红外吸收, 所以从吸收谱难以观察到吸收峰. 另一方面, 理论模拟采用的是在 300 K 设置温度下的单分子模型, 没有考虑分子之间的相互作用, 因此氢键的作用没有体现. 计算得到的峰值取决于偶极子的振动跃迁, 这个跃迁吸收只对吸收强度有贡献, 而吸收峰值比较稀疏.

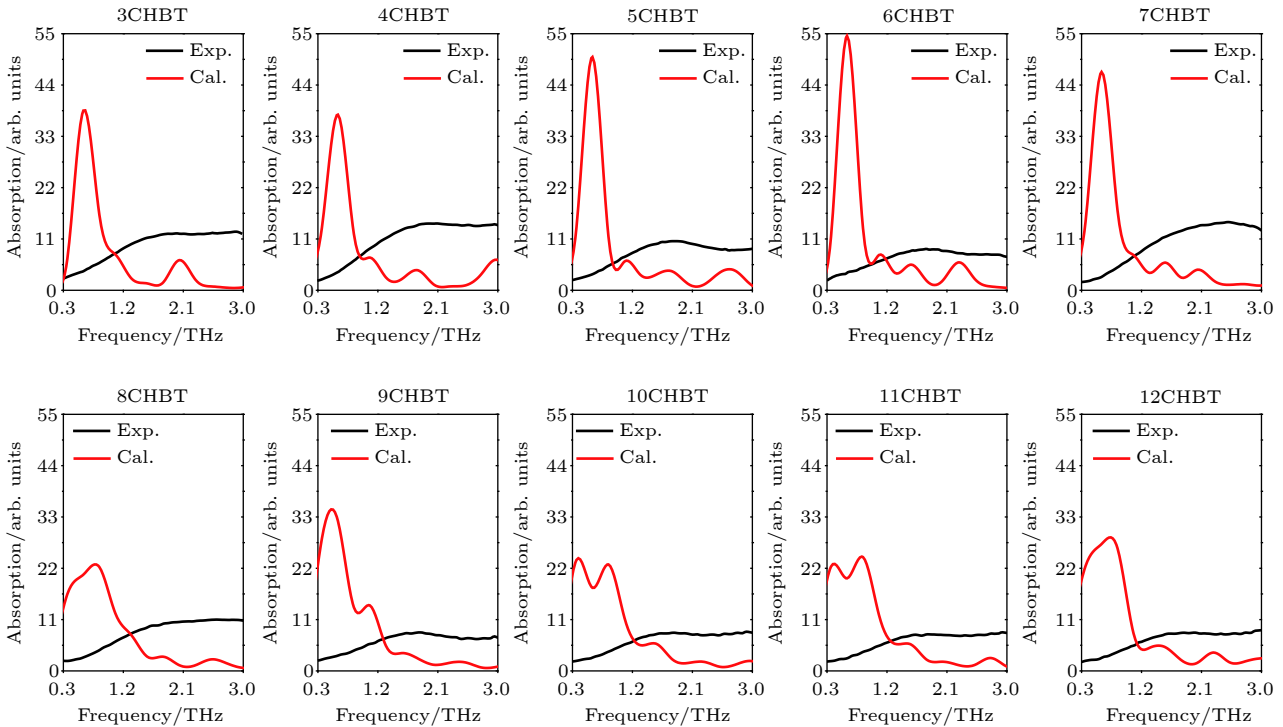


图 7 0.3—3.0 THz 波段 (3—12)CHBT 吸收光谱的实验值与计算值对比

Fig. 7. Comparison of calculations and experimental results about (3—12)CHBT in 0.3—3.0 THz.

为了说明上述现象和便于观察, 图 8 展示了计算结果在 0.5 THz 之后的较低峰值与实验值的对比. 可以发现, 对于实验测量中吸收强度较大的 ( $n = 3-7$ )CHBT) 的分子, 计算结果在相应的位置也表现出强的吸收, 表明该强度来源于偶极子振动吸收的贡献 (图 8(b) 中标出). 相反, 其他几个分子具有较低吸收峰. 也就是说, 计算结果的峰值体现的是偶极子振动和转动吸收, 对吸收强度的贡献结果与实验测量体现出来的规律是一致的.

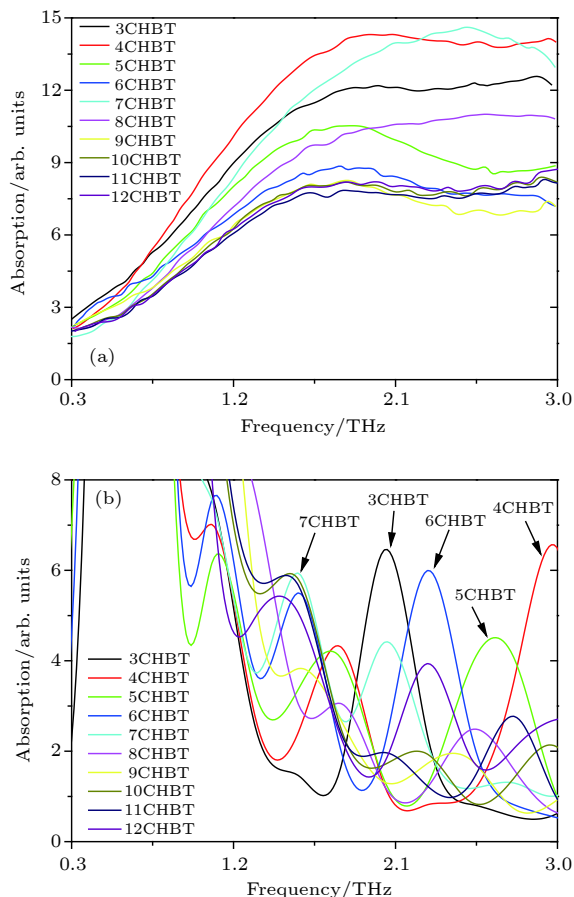


图 8 计算结果与实验测量的吸收峰值分析 (a) 实验测量; (b) 计算在 1.2—3.0 THz 的吸收峰值

Fig. 8. Analysis of the absorption peaks between the calculation and the experimental data: (a) The experimental measurements; (b) the calculation of absorption peaks in 1.2—3.0 THz.

遗憾的是, 文献中的实验数据仅仅只有 0.3—3.0 THz 的结果, 不像 5CB 分子那样具有较宽的波段<sup>[18]</sup>, 因此, 难以对计算值的吸收峰和实验值的趋势进行更宽域的对应. 就像前边讨论的那样, 液晶材料 5CB 的理论计算也是在较高的频率才能够与实验结果在吸收峰位置有重合, 在低频段, 实验

测量也只是得到了线性增加的类似结果, 也说明了实验测量可能是来源于氢键的贡献. MBBA 的测量中, TANAKA 的数据让人难以置信, 我们已在前边的工作中做过陈述<sup>[17]</sup>. NISHIZAWA 的测量数据也像 5CB 一样显示出了上述特性, 特别是温度对波吸收的影响也不是很大, 但是零度的测量明显具有较多的吸收峰<sup>[17]</sup>. 在本研究中, 我们尝试了使用其他计算方法和关键词, 但是得到的结果与本职工作使用的参数相差不大, 规律相同. 因此, 实验测量的起始阶段, 是否是仪器设备无法精确探测, 我们不得而知, 只能寄希望于未来有更多的实验数据进行比对.

## 4 结 论

利用理论模拟的方法研究了 16 种向列相液晶分子在 0.1—5.0 THz 波段的吸收情况. 结果发现, 随着分子烷基链上碳原子数目的增加, 分子对太赫兹波的吸收会带来影响. 通过分析分子结构发现, 分子烷基链的长度决定分子质量、重心、转动惯量, 这些不同的力学参数导致分子的转动与振动差异, 最终带来了太赫兹波吸收的差异. 当碳原子数目小于 3 或大于 7, 分子对太赫兹的吸收较低, 其他分子吸收较高. 通过比较实验测量与计算结果的吸收峰位置, 结果发现, 虽然低频波段计算结果无法体现氢键对吸收的贡献, 但是实验测量的吸收强度的差异可能来源于偶极子振动、转动的吸收, 这个差异能够在计算结果中显示出来, 体现出了计算模拟的积极意义. 期待未来的实验测量结果, 对计算的方法和关键词以及计算温度等参数加以修正.

## 参考文献

- [1] Lagerwall J P F, Scalla G 2012 *Curr. Appl. Phys.* **12** 1387
- [2] Ghasemi M, Choudhury P K, Pankaj K 2014 *J. Nanophoton.* **8** 083997
- [3] Kumar R, Aain K K 2014 *Liq. Cryst.* **41** 228
- [4] Bisoy H K, Li Q 2014 *Acc Chem. Res.* **47** 3184
- [5] Hartmann R R, Kono J, Portnoi M E 2014 *Nanotechnology* **25** 1
- [6] Li X 2016 *Ph. D. Dissertation* (Hangzhou: Zhejiang University) (in Chinese) [李弦 2016 博士学位论文 (杭州: 浙江大学)]
- [7] Dhillon S S, Vitiello M S, Linfield E H 2017 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **50** 043001
- [8] Zhao L, Hao Y H, Peng R Y 2014 *Mil. Med. Res.* **27** p1
- [9] Mittleman D M 2017 *J. Appl. Phys.* **122** p1
- [10] Chen Z Z 2016 *Ph. D. Dissertation* (Xinxiang: Henan Normal

- University) (in Chinese) [陈泽章 2016 博士学位论文(新乡: 河南师范大学)]
- [11] Mueller E R 2006 *Photon. Spectra* **40** p60
- [12] Park H, Fan F, Li M M, Han H, Chigrinov V G, Macpherson E 2011 *36th International Conference on Infrared, Millimeter, and Terahertz Waves* Houston, USA, 2011 p6104918
- [13] Ma H 2004 *Ph. D. Dissertation* (Toyama: Toyama University)
- [14] Vieweg N, Shakfa M K, Scherger B, Mikulics M, Koch M 2010 *J. Infrared Millim. Terahertz Waves* **31** 1312
- [15] Wang L, Ge S J, Hu W, Nakajima M, Lu Y Q 2017 *Opt. Mater. Express* **7** 2023
- [16] Silverstein R M, Webster F X, Kiemle D J 2005 *Spectrometric Identification of Organic Compounds* (7th Ed.) (New York: John Wiley & Sons) p512
- [17] Ma H, Shi D H, He J, Peng Y F 2009 *Chin. Phys. B* **18** 1085
- [18] Dong J Q, Cheng W Q, Li M G, Wang K L, Ma H 2017 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **50** 1
- [19] Chodorow U, Parka J, Garbat K, Robb M A 2015 *Liq. Cryst.* **40** 1089
- [20] Frisch M J, Trucks G W, Cheeseman J R, et al. 2013 *Gaussian, Inc, Wallingford* **1** 09
- [21] Peng F L, Chen Y, Wu S T, Tripathi S, Twieg R G 2014 *Liquid Crystals* **41** 1545
- [22] Depalma J W, Bzdek B R, Ridge D P, Johnston M V 2014 *J. Phys. Chem. A* **118** 11547
- [23] Kreutzer J, Blahal P, Schubert U 2016 *Comput. Theor. Chem* **1084** 162
- [24] Priest C, Zhou J W, Jiang D E 2017 *Inor. Chim. Acta* **458** 39
- [25] Wang Y X, Cheng Y Q, Wang K L, Chen Y W, Yan H L, Yuan Q L, Ma H 2018 *Chin. J. Liquid Crystals and Displays* **33** 645 (in Chinese) [王雅昕, 程雅青, 王凯礼, 陈洋玮, 阎昊岚, 袁秋林, 马恒 2018 液晶与显示 **33** 645]
- [26] Dong J Q, Cheng W Q, Li M G, Wang K L, Ma H 2017 *Chin. J. Liquid Crystals and Displays* **32** 590 (in Chinese) [董建奇, 程文其, 李梦阁, 王凯礼, 马恒 2017 液晶与显示 **32** 590]
- [27] Vieweg N, Fischer B M, Reuter M, Kula P, Dabrowski R, Celik M A, Frenking G, Koch M, Jepsen P U 2012 *Opt. Express* **20** 28249
- [28] Parka J, Sielezin K 2017 *Molecular Crystals and Liquid Crystals* **657** 66
- [29] Vieweg N, Celik M A, Zakel S, Gupta V, Frenking G, Koch M 2014 *J. Infrared, Millimeter and Terahertz Waves* **35** 478



# Terahertz wave absorption for alkylcyclohexyl-isothiocyanatobenzene liquid crystal materials\*

Yan Hao-Lan<sup>1)</sup> Cheng Ya-Qing<sup>2)</sup> Wang Kai-Li<sup>1)</sup> Wang Ya-Xin<sup>1)</sup>  
Chen Yang-Wei<sup>1)</sup> Yuan Qiu-Lin<sup>1)</sup> Ma Heng<sup>1)†</sup>

1) (*College of Physics and Materials Science, Henan Normal University, Xinxiang 453007, China*)

2) (*Department of Computing Technology, Henan Information Engineering School, Zhengzhou 450000, China*)

( Received 18 February 2019; revised manuscript received 2 April 2019 )

## Abstract

According to density functional theory, in this paper we report a simulation result obtained by using the Gaussian09 package. Adopted in the calculation are an optimized Opt Freq and a base group of B3LYP/6-311g to simulate the absorption of 16 kinds of liquid crystal (LC) molecules of 4-(trans-4-n-alkylcyclohexyl) isothiocyanatobenzenes (CHBT) in a 0.1–5.0 terahertz band (THz). The results show that in the low terahertz band, the absorption is caused mainly by the vibration and rotation of the molecules. So for convenience, we present an novel analytical method of studying the influence of molecular moment of inertia and mass center of gravity shift on absorption. An important result is found that the length of the molecular alkyl chain can lead to different molecular mass, mass center of gravity and moment of inertia, which causes the rotation and vibration of the molecule to be different. These factors lead to the difference in terahertz wave absorption. In the 0.1–5.0 terahertz band, the molecules with 3–7 alkyl chain carbon atoms show a strong absorption. As a reference, reducing and increasing the carbon atoms in the alkyl chain will cause the molecules to reduce the absorption of terahertz waves. In the end, the calculated results are compared with the experimental results obtained from 10 molecules according to the reference data in a frequency range of 0.3–3.0 terahertz. It is found that in the low frequency band there exist some differences between the calculation results and the experimental measurements, in which the difference in the position of the absorption peak may originate from a hydrogen bond. Comparing the relative magnitudes of the absorption intensities, it is found that the experimental measurements are consistent with the calculated results, indicating that the absorption intensity comes from the absorption of dipole vibration and rotation, which demonstrates the positive significance of computational simulation. We look forward to the experimental measurements in the future, and correct the calculation methods and keywords as well as the parameters such as temperature calculation that is to be done in future work. As a theoretical basis, the calculation results can better reflect the absorption of molecular materials, and it is expected to provide useful suggestions for designing and synthesizing the liquid crystal molecules.

**Keywords:** liquid crystal, terahertz, alkyl chains, Gaussian

**PACS:** 61.30.Vx, 33.20.Ea, 32.30.Bv, 78.47.–p

**DOI:** [10.7498/aps.68.20190209](https://doi.org/10.7498/aps.68.20190209)

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 61540016).

† Corresponding author. E-mail: [hengma@henanmu.edu.cn](mailto:hengma@henanmu.edu.cn)