

文章编号:1007-2780(2018)08-0645-08

含氟炔基三苯液晶分子太赫兹吸收的计算模拟研究

王雅昕¹,程雅青²,王凯礼¹,陈洋玮¹,阎昊岚¹,袁秋林¹,马 恒^{1*}

(1. 河南师范大学 物理与材料科学学院,河南 新乡 453007;

2.河南信息工程学校 计算技术系,河南 郑州 450000)

摘要:以密度泛函理论为基础,利用 Gaussian09 程序包,通过 Opt+Freq 优化类型,以 B3LYP/6-311g 基组对 10 种不同数目及不同位置部分氟代的 4-丁基-4'-[(4-丁基苯)乙炔]联苯液晶衍生物分子进行数值计算,根据氟原子的置换位置和数目对这些分子在太赫兹波段的光吸收情况进行了对比分析。结果表明,在太赫兹频段,氟原子置换的位置和数目会显著影响分子内其它官能团的吸收位置和强度。其中苯环内的 C-H 吸收会因为苯环上氟原子置换数目增加而减少,苯环上双氟原子的增加导致烷烃的吸收峰强度发生变化;对于炔基,氟原子的置换会通过改变其偶极矩从而产生较强的吸收峰值。计算结果在分子官能团的吸收方面与文献报道的实验测量结果吻合得相当好。根据现有文献报道,作者还对对比分析了 0.3~3 THz 范围计算结果与相关文献的实验数据。总之,计算模拟结果能够较好地反应分子材料对太赫兹波的吸收状况,可为相关液晶分子的设计与合成提供参考。

关键词:含氟液晶;太赫兹;吸收;光谱;高斯模拟

中图分类号:O734⁺.2 文献标识码:A doi:10.3788/YJYXS20183308.0645

Simulation on terahertz absorption of fluorinated phenylacetylene biphenyl liquid crystal molecules

WANG Ya-xin¹,CHENG Ya-qing²,WANG Kai-li¹,CHEN Yang-wei¹,YAN Hao-lan¹,YUAN Qiu-lin¹,MA Heng^{3*}

(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)

Abstract: Based on the density functional theory, ten kinds of fluoro-substituted liquid crystal derivative molecules, 4-butyl-4'-[(4-butylphenyl)acetylene]biphenyl, are simulated using Gaussian09 package with Opt + Freq optimization type and B3LYP/6-311g basis set. Comparing the substituted position and number of fluorine atoms, the absorption in terahertz region is discussed. The results show that the position and number of fluorine atoms can significantly influence the absorption peak and intensity of the functional groups of the molecule in terahertz region. The absorption of C-H bond of benzene ring will decrease due to increasing numbers of fluorine substitution on the benzene. Two

收稿日期:2018-04-20;修订日期:2018-05-11.

基金项目:国家自然科学基金资助项目(No.61540016)

Supported by the National Natural Science Foundation of China(No.61540016)

* 通信联系人,E-mail:hengma@henannu.edu.cn

fluorine atoms on the benzene ring will lead to changes in the absorption peak. On the otherhand, the replacement of fluorine atoms of benzene ring can make the alkynes produce a strong absorption peak because of the changing of the molecular dipole moment. The simulation result agrees well with the literature data on the absorption of molecular functional groups. In addition, the calculation result and the experimental data obtained from literatures in 0.3-3 THz range are also analyzed. In conclusion, the simulation result can reflect well the absorption of liquid crystal molecule, which can provide reference for the design and synthesis of related materials.

Key words: fluorine liquid crystal; terahertz; absorption; spectrum; Gaussian simulation

1 引言

太赫兹(Terahertz, THz)波一般是指包含频率为 0.1~10 THz(波长为 3 000~30 μm)的电磁波。它在电磁波谱上的位置是在红外线和微波之间,连接宏观电子学和微观光子学。由于太赫兹波在不同领域的各种应用以及基础科学意义,使它成为现代物理领域的一个重要部分^[1]。太赫兹时域频谱的发展引起了各个领域的广泛关注,但是由于缺乏有效的太赫兹发射源和灵敏探测器,长期以来,研究者对这个领域的探索遇到诸多困难,形成了所谓的太赫兹空隙。随着近 20 年来超快光电子技术和低尺度半导体技术的发展,这个“空隙”间距逐渐缩小^[2]。太赫兹波有瞬态、低能和相干性等许多优点,使其可以应用在我们生活中的方方面面,比如医学^[3]、安全监测系统^[4]、生命科学领域^[5]、未来无线网络^[6]等。以上这些应用主要集中于太赫兹成像技术和无线通信网络方面,但这方面的技术还不够成熟。

液晶的发现可以追溯到 1888 年奥地利植物学家莱尼泽尔发现胆固醇苯甲酸酯的“双熔点”现象。液晶具有流动性,长程有序,光学各向异性等特点,表现出很好的电光性能^[7-8],在显示技术上已十分成熟。近年来,液晶在其它光学器件领域也有了新的应用,比如含有液晶的光纤可以用于制造光学器件^[8],液晶可以与其它物质混合制成光学快门^[9],一些经过掺杂的液晶可用于制造偏振片、全光学显示器、光学激光器等设备^[10]。液晶在太赫兹波方面的应用也有了较好的发展。例如,在太赫兹波段的可调谐设备中,太赫兹频率的电调谐移相器^[11]、太赫兹电子束切换转向装置^[12]、太赫兹空间光调制器^[13]、太赫兹液晶波片^[14]等。众所周知,氟原子体积小,电负性强,因

此,含氟液晶分子具有较大的介电各向异性、低粘性、高电阻率、宽的向列相温度范围、耐紫外和热稳定性好等特点。采用含氟液晶分子制成的液晶光学器件,具有阈值电压低、响应速度快、光学对比度大、适应环境广泛等优良特性^[15]。但是,含氟液晶分子在太赫兹波范围内的研究和应用目前还比较少。由于液晶对波的吸收会造成一定的损耗,所以研究太赫兹波段含氟液晶分子的吸收情况是先行的基础工作。目前有一些实验工作研究含氟液晶分子在太赫兹波段的吸收、双折射等性质^[16-17],但它们具有一定的局限性。比如,在低太赫兹频率,实验测量误差大,实验器件制备较难等。但随着密度泛函理论的逐步发展,我们可以利用更为简便的理论计算方法,开展理论计算与模拟,为实际应用提供预测和参考。之前已经有过一些这种计算方法的报道^[18-19]。计算模拟可以在较广的频段内获得吸收数据,而且计算模拟的结果准确,方法简单,工作效率高。

本文以密度泛函理论为基础,利用高斯程序包,计算了十种含氟液晶衍生物分子在太赫兹波段的吸收光谱,这些分子均是以苯环-炔基-苯环-苯环(LMR)骨架为基础,通过用氟原子置换不同位置的氢原子得到。它们的区别在于氟原子置换的位置及数目不同。通过文献相关数据与计算结果比对,讨论这些分子不同官能团在太赫兹频段的吸收情况,然后将计算结果和相关文献实验数据在 0.3~3 THz 频段的吸收进行分析。

2 计算

红外光是波长介于微波与可见光之间的电磁波,其波长在 1 mm 到 760 nm 之间。红外光在医学、军事、科研等方面有极其广泛的应用。当一束红外光照射物质,该物质分子会吸收一部分的光,

导致物质分子振动、转动以及振动能级和转动能级的跃迁,探测红外光被吸收的情况即可得到物质的红外吸收光谱。红外光谱主要分为近红外区、中红外区和远红外区。它是鉴别物质结构的有效工具。太赫兹波波谱主要分布在红外光谱上的中、远红外区。本论文就是基于红外光谱图像来讨论分子在太赫兹波范围内的吸收情况。

Gaussian09 是目前单分子计算方面很受欢迎的量子化学软件,包含很多算法和功能。相当多的研究者使用 Gaussian 程序来对分子进行模拟处理,得到初步的理论预测^[20-22],其结果是十分可靠的。本论文使用的方法已经在前期的研究中得到应用^[19]。我们的计算基于密度泛函理论,选择 Opt+Freq 类型、B3LYP/6-311g 基组优化了分子结构,得到了红外吸收光谱图像。通过对图像的分析,讨论 10 种含氟液晶衍生物分子对太赫兹波吸收的原因。

本工作首先讨论在太赫兹频率范围内十种含氟液晶衍生物分子各官能团的吸收情况,以其找到分子内原子基团的特征吸收峰,通过这些特征吸收峰所处位置频率与相关文献数据的对比,验证计算方法的准确性。然后比对了 Chodorow 等人的实验数据。

本文所研究的 10 种含氟液晶衍生物分子,均是以 LMR 分子为基础,在其上将苯环上的氢原子以氟原子置换,得到了其它 9 种不同的含氟液晶分子,以此来讨论氟原子的置换对太赫兹吸收效应的影响。它们的结构如图 1 所示。表 1 列出了分子的固有偶极矩和长轴的转动惯量。

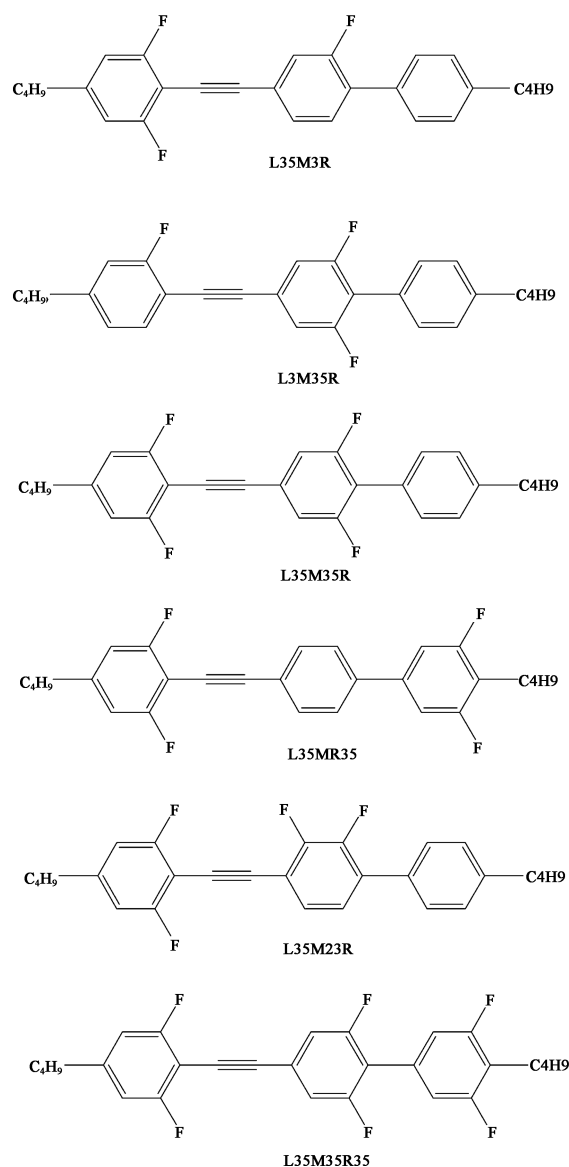
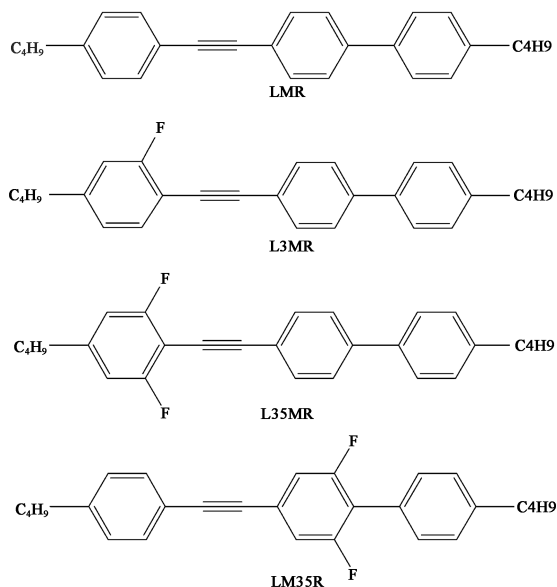


图 1 用于模拟计算考察的 10 种分子化学结构
Fig. 1 Chemical structure of ten molecules investigated by simulation

表 1 10 种分子的偶极矩和转动惯量

Tab.1 Dipole moments and moments of inertia of ten molecules investigated

	dipole moment/D	$I/(\text{g} \cdot \text{cm}^2)$
LMR	0.250 2	$9.727\ 66 \times 10^{-45}$
L3MR	1.628 4	$1.131\ 56 \times 10^{-44}$
L35MR	1.181 2	$1.466\ 73 \times 10^{-44}$
LM35R	2.404 2	$1.158\ 12 \times 10^{-44}$
L35M3R	2.963 3	$1.416\ 22 \times 10^{-44}$

续 表

	dipole moment/D	$I/(g \cdot cm^2)$
L3M35R	3.359 6	$1.498\ 49 \times 10^{-44}$
L35M35R	3.529 3	$1.673\ 61 \times 10^{-44}$
L35MR35	3.911 7	$1.530\ 84 \times 10^{-44}$
L35M23R	3.771 9	$1.779\ 86 \times 10^{-44}$
L35M35R35	6.334 0	$1.889\ 42 \times 10^{-44}$

3 结果与讨论

本论文共讨论 10 种不同位置和数目氟对氢置换的液晶分子。由于高频段的太赫兹波吸收主要体现为分子内各官能团的特征吸收,而且这些官能团的特征吸收都有详尽的实验文献数据,通过对比这些数据,可以检验我们计算的可靠性。对于液晶材料而言,目前针对太赫兹波吸收的实验通常在 10 THz 以下。本研究发现的液晶材料的文献实验数据仅在 0.3~3 THz 范围之内。所以,我们将分子的吸收讨论分为两部分,一部分为 5 THz 以上的频段,另一部分为低太赫兹频段计算结果与相关文献实验数据的对比。

3.1 5THz 以上部分频率的波吸收

对于太赫兹波的吸收,高频率的太赫兹波主要对分子内基团的和原子之间的单键振动产生作用。其特征吸收峰是由基团的伸缩振动产生,原子单键吸收主要是伸缩振动、弯曲振动以及骨架振动产生。本部分主要讨论官能团对液晶分子吸收的贡献及氟原子的置换位置和数目对官能团吸收的影响。十种含氟液晶衍生物分子主要的官能团有烷烃、炔烃和芳烃。

3.1.1 烷烃

烷烃中的 C-H 面内弯曲振动的特征峰范围主要分布于 41.1~41.4 THz, 42.9~44.1 THz 和 43.35~44.55 THz 这 3 个频段^[23]。为了能够清晰观察烷烃中 C-H 面内弯曲振动对这 10 种含氟液晶分子的吸收贡献,我们截取了 40.2~45 THz 这个频率范围显示在图 2 中。

从图 2 中我们可以看出,含氟液晶衍生物分子在 40.2~40.8 THz 波段产生吸收的原因是甲基中 C-H 键的面内对称弯曲振动。但我们发现 L35M35R35、L35MR35 和 L35M23R 这 3 种分子

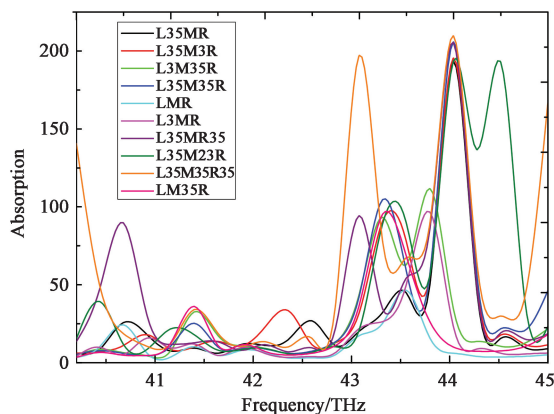


图 2 40.2~45THz 波段液晶分子的吸收光谱

Fig.2 Molecular absorption spectroscopy of liquid crystal in 40.2~45 THz region

有较高吸收峰值,从表 1 中我们看出这 3 种含氟液晶分子的偶极矩都较大,在分子振动的时候,由于甲基链较长,分子容易发生弯曲,导致固有偶极矩的变化较大,造成它们在该波段有明显的吸收峰值。在 42.9~44.4 THz 波段,我们发现 10 种液晶分子都有吸收峰出现,这是甲基的面内不对称弯曲和亚甲基的面内弯曲造成的。通过比对 10 种液晶分子的结构,我们发现左苯环(L)上有 2 个氟原子的液晶分子在 43.5 THz 处峰值较高,如果没有氟原子或只有一个氟原子的时候,分子吸收峰值较低且吸收频率都向左移。

3.1.2 炔烃

本论文讨论的液晶分子涉及到的炔烃振动只有 $C \equiv C$ 的伸缩振动,其特征峰频率范围主要为 63~67.8 THz 波段内^[24]。从图 3 中我们发现,10 种液晶分子的吸收频率相比于 $C \equiv C$ 伸缩振动的文献数据向右移至 69~69.6 THz,而且 L35MR 和 LM35R 吸收峰的强度较大,而 L35M35R、LMR 和 L35M23R 则没有吸收峰。LMR 的无吸收现象说明 $C \equiv C$ 的伸缩振动被两端苯环耦合固化,振动引起的偶极矩变化十分微弱,说明 $C \equiv C$ 两端的基团对称性对其吸收影响十分显著。所以,对于 L35M35R 和 L35M23R 的无吸收现象,也可以按照相同方式理解。而 L35MR 和 LM35R 出现的强吸收现象,则是因为 $C \equiv C$ 两端的基团严重不对称导致的。这说明氟原子的置换,导致这两种含氟液晶分子两端基团的电性中心不对称,带来较高吸收峰。

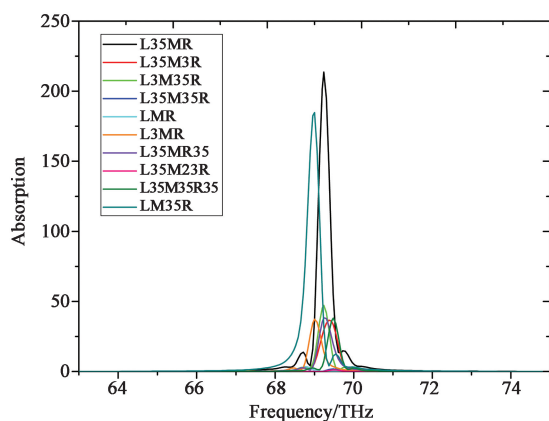


图 3 63~75 THz 波段液晶分子的吸收光谱

Fig.3 Molecular absorption spectroscopy of liquid crystal in 63~75 THz region

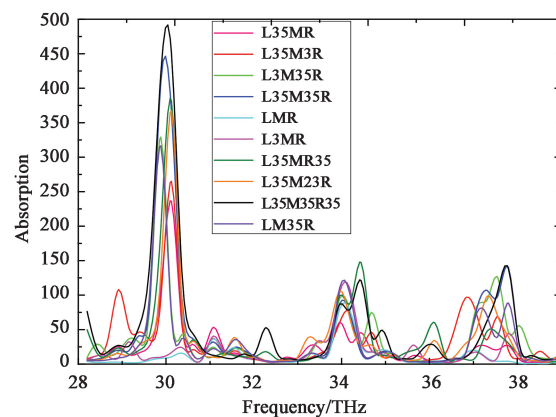


图 5 28~39 THz 波段液晶分子吸收光谱

Fig.5 Molecular absorption spectroscopy of liquid crystal in 28~39 THz region

3.1.3 芳烃

(1) 苯环上 C-H 键的面外弯曲

苯环上 C-H 键的面外弯曲振动产生的谱带波段为 20.25~27 THz^[24]。图 4 显示了这 10 种液晶分子在该波段上的计算结果。从图中我们可以看出,在 25.32~26.28 THz 波段范围内,以 LMR 吸收峰为中心,该吸收峰的左右、高低都有相应的吸收峰,这可能是氟原子置换后,C-F 键长要大于 C-H 键长,会影响到邻位的 C-H 键,导致其面外弯曲振动的吸收发生变化。事实上,这些移位的吸收峰有可能是 C-F 的特征吸收峰,但是,目前尚未发现详细的文献数据。

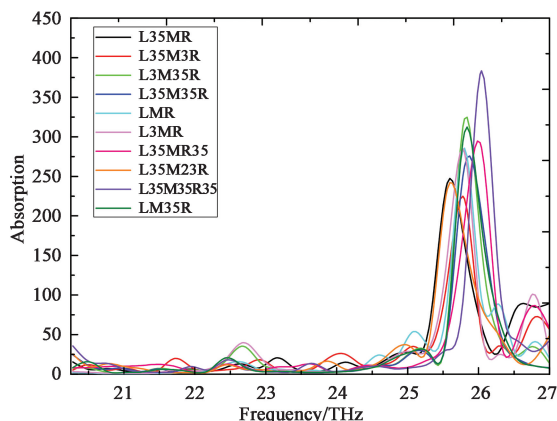


图 4 20.25~27 THz 波段液晶分子的吸收光谱

Fig.4 Molecular absorption spectroscopy of liquid crystal in 20.25~27 THz region.

(2) 苯环上 C-H 键的面内弯曲

苯环中 C-H 键面内弯曲的特征峰频率波段是 30~39 THz^[24]。我们将十种液晶分子在

30~39 THz 波段的计算结果放在图 5 中,从图中可以发现,有 3 个特征吸收峰的频率范围分别为 30~30.6 THz、33~35.1 THz 和 36~38.4 THz。LMR 在 33~35.1 THz 范围的吸收强度较大,说明这个吸收峰是苯环中 C-H 键面内弯曲的特征峰,其它液晶分子的吸收峰频率范围的变化说明氟原子的置换对吸收频率带来了一定的影响。那么,其它 2 个位置的液晶分子的吸收峰强度都比较大,特别是置换的氟原子个数越多,吸收峰强度越大。但是,LMR 并没有吸收,据此,我们推测,这些光谱吸收有可能是 C-F 键的面内弯曲带来的特征吸收峰。

(3) 苯环上 C-C 骨架振动

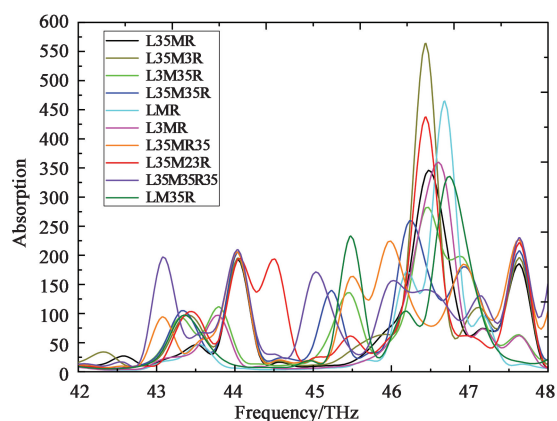


图 6 42~48 THz 波段液晶分子的吸收光谱

Fig.6 Molecular absorption spectroscopy of liquid crystal in 42~48 THz region.

苯环上的 C-C 骨架振动特征吸收峰的频率范围在 42.9~48 THz 波段内^[23],并且通常以双

峰的形式出现^[24]。我们将 10 种液晶分子在 42~48 THz 波段的计算结果放在图 6 中。从图中我们发现,吸收峰的形式是以双峰的形式出现而且符合相关文献所给出的频率范围,说明此段的振动就是苯环上的 C-C 骨架振动,这也证明了我们计算结果的可靠性。特别是在 46~47 THz 波段产生的吸收峰中,右苯环(R)上有氟原子置换时,吸收峰强度较大,说明这个位置的吸收峰极有可能是 R 苯环上 C-C 骨架的振动吸收峰,具体的吸收峰指认需要更为详细的工作。

3.2 计算结果与实验数据对比

针对以上计算结果与官能团的实验吸收数据对比与讨论,我们的计算结果与实验数据符合地很好,这进一步证实了我们计算结果的准确性。为讨论低太赫兹频段的吸收奠定基础。

Urszula Chodorow 等人通过实验测量了 0.3~3 THz 波段范围内 L35MR、L35M3R、L3M35R 和 L35M35R4 种含氟液晶衍生物分子的吸收光谱^[16]。为了比对计算结果与实验结果,我们对其实验数据进行提取和处理与计算结果一起显示在图 7 中。实验数据是将 o 光与 e 光分开测量,在下面的比对中,我们利用公式 $\alpha = (\alpha_o + 2 * \alpha_e) / 3$ ^[19],将实验结果的 o 光与 e 光合并为一条吸收曲线后,再和我们的计算结果进行比对分析。

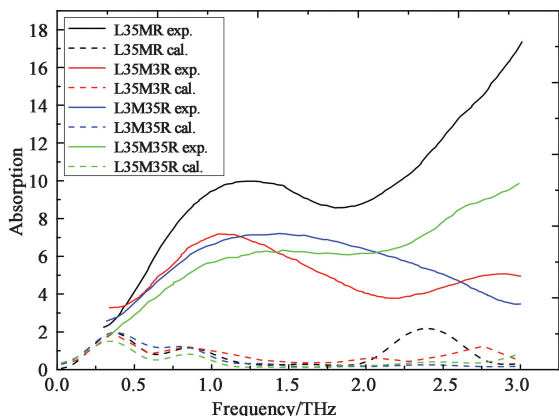


图 7 液晶分子 L35MR、L35M3R、L3M35R 和 L35M35R 计算和实验结果比对

Fig.7 Comparison of calculations and experimental results reported on literature for L35MR, L35M3R, L3M35R and L35M35R

图 7 显示了 L35MR、L35M3R、L3M35R 和 L35M35R 这 4 种含氟液晶衍生物分子在 0~3 THz 波段内实验结果与计算结果的比对。对于 L35MR 来说,计算数据表明,该分子在 0.65 和 2.4 THz 有吸收峰,在 0.8 THz 处有微弱吸收峰,而实验测量没有 0.65 THz 以下的吸收峰。从图中可以看出,虽然吸收峰的出现频率位置有所差异,但是在 0.25~3 THz 波段范围内,两者都呈现出驼峰的吸收特性,即都有先增加再减少再增加的趋势。对于 L35M3R 来说,由于实验数据较少,导致其两端的吸收峰无法比对,但是 0.8 THz 处的吸收与实验符合得比较好。对于 L3M35R 来说,与前两个分子类似,其在 0.3~3 THz 范围内,实验总吸收曲线与计算吸收曲线都有先增再减的趋势,只是两者吸收峰的位置有差异。对于 L35M35R 来说,在 0.5~3 THz 波段范围内,实验总吸收曲线与计算吸收曲线都有相同的增减趋势,这也说明计算结果是可靠的。

通过以上的比对,尽管实验与计算的吸收峰出现的频率位置不完全相同,但大体趋势一致,这可能是由于低太赫兹波段的太赫兹波的分辨率较低,误差较大等原因造成的。根据我们计算的官能团对太赫兹波吸收数据与文献数据^[23-24]准确吻合这个事实,说明我们的计算还是可靠的。

4 结 论

本研究模拟计算了 10 种液晶分子在太赫兹波段的吸收情况。在太赫兹波段,氟原子的置换会对不同的官能团的特征吸收峰造成影响,说明分子结构的变化会对太赫兹的吸收带来较大的影响。由于相关液晶材料的太赫兹吸收实验数据较少,计算结果与实验测量的比对数据较少,特别是高频段的实验数据更少,而低频段的实验测量误差较大,因此比较结果不能完全相同,只能观察到两者的趋势一致。正是这样的原因,我们的计算结果才显得十分必要,希望我的计算研究会对以后新型液晶分子的设计和合成提供一定的参考。

参 考 文 献:

- [1] HARTMANN R R, KONO J, PORTNOI M E. Terahertz science and technology of carbon nanomaterials [J].

- Nanotechnology*, 2014, 25(32): 322001.
- [2] 陈泽章. 太赫兹波段液晶材料光学特性密度泛函理论研究[D]. 新乡: 河南师范大学, 2016: 1-103.
CHEN Z Z. Density functional theory studies on the optical properties of liquid crystals in terahertz band [D]. Xinx-
iang: Henan Normal University, 2016: 1-103. (in Chinese)
- [3] 李弦. 基于 THz 的人体胃癌组织检测技术研究[D]. 杭州: 浙江大学, 2016: 1-95.
LI X. Study on the key techniques of human gastric cancerous tissue detection based on terahertz spectroscopy [D].
Hangzhou: Zhejiang University, 2016: 1-95. (in Chinese)
- [4] DHILLON S S, VITIELLO M S, LINFIELD E H, *et al.* The 2017 terahertz science and technology roadmap [J].
J. Phys. D: Appl. Phys., 2017, 50(4): 043001.
- [5] ZHAO L, HAO Y H, PENG R Y. Advances in the biological effects of terahertz wave radiation [J]. *Mil. Med.*
Res., 2014, 1: 26.
- [6] MITTLEMAND M. Perspective: terahertz science and technology [J]. *J. Appl. Phys.*, 2017, 122(23): 230901.
- [7] LAGERWALL J P F, SCALIA G. A new era for liquid crystal research: applications of liquid crystals in soft mat-
ter nano-, bio- and microtechnology [J]. *Curr. Appl. Phys.*, 2012, 12(6): 1387-1412.
- [8] GHASEMI M, CHOUDHURY P K. Propagation through complex structured liquid crystal optical fibers [J]. *J.*
Nanophotonics, 2014, 8(1): 083997.
- [9] KUMAR R, RAINA K K. Electrically modulated fluorescence in optically active polymer stabilised cholesteric
liquid crystal shutter [J]. *Liq. Cryst.*, 2014, 41(2): 228-233.
- [10] BISOYI H K, LI Q. Light-directing chiral liquid crystal nanostructures: from 1D to 3D [J]. *Acc. Chem. Res.*,
2014, 47(10): 3184-3195.
- [11] ALTMANN K, REUTER M, GARBAT K, *et al.* Polymer stabilized liquid crystal phase shifter for terahertz
waves [J]. *Opt. Express*, 2013, 21(10): 12395-12400.
- [12] SCHERGER B, REUTER M, SCHELLER M, *et al.* Discrete terahertz beam steering with an electrically con-
trolled liquid crystal device [J]. *J. Infrared Millim. Terahertz Waves*, 2012, 33(11): 1117-1122.
- [13] SAVO S, SHREKENHAMER D, PADILLAW J. Liquid crystal metamaterial absorber spatial light modulator for
THz applications [J]. *Adv. Opt. Mater.*, 2014, 2(3): 275-279.
- [14] WANG L, GE S J, HU W, *et al.* Tunable reflective liquid crystal terahertz waveplates [J]. *Opt. Mater. Ex-*
press, 2017, 7(6): 2023-2029.
- [15] MA H. Molecular physics of fluorinated liquid crystals [D]. Toyama University: National Diet Library, 2004:
1-96.
- [16] CHODOROW U, PARKA J, KULA P, *et al.* Terahertz properties of fluorinated liquid crystals [J]. *Liq. Cryst.*,
2013, 40(11): 1586-1590.
- [17] CHODOROW U, CHOJNOWSKA O, PARKA J. Properties of two-component nematic liquid crystal mixtures in
the range of 0.3-3.0 THz [J]. *Liq. Cryst.*, 2015, 42(9): 1243-1249.
- [18] MA H, SHI D H, HE J, *et al.* Simulation study on terahertz vibrational absorption in liquid crystal compounds
[J]. *Chin. Phys. B*, 2009, 18(3): 1085-1088.
- [19] DONG J Q, CHENG W Q, LI M G, *et al.* A simulation study on terahertz absorption of liquid crystal mixture E7
[J]. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 2017, 50(37): 375602.
- [20] DEPALMA J W, BZDEK B R, RIDGE D P, *et al.* Activation barriers in the growth of molecular clusters derived
from sulfuric acid and Ammonia [J]. *J. Phys. Chem. A*, 2014, 118(49): 11547-11554.
- [21] KREUTZER J, BLAHA P, SCHUBERT U. Assessment of different basis sets and DFT functionals for the calcu-
lation of structural parameters, vibrational modes and ligand binding energies of Zr_4O_2 (carboxylate)₁₂ clusters
[J]. *Comput. Theor. Chem.*, 2016, 1084: 162-168.
- [22] PRIEST C, ZHOU J W, JIANG D E. Solvation of the vanadate ion in seawater conditions from molecular dynam-
ics simulations [J]. *Inor. Chim. Acta*, 2017, 458: 39-44.
- [23] 陶少华, 刘国根. 现代谱学[M]. 北京: 科学出版社, 2015: 99-121.
TAO S H, LIU G G. *Modern Spectroscopy* [M]. Beijing: Science Press, 2015: 99-121. (in Chinese)

- [24] SILVERSTEIN R M, WEBSTER F X, KIEMLE D J. 有机化合物的波谱分析[M]. 药明康德新药开发有限公司分析部, 译. 上海: 华东理工大学出版社, 2007: 71-105.
- SILVERSTEIN R M, WEBSTER F X, KIEMLE D J. *Spectrometric Identification of Organic Compounds* [M]. Medicine Ming Kang New Drug Development Co., Ltd. Analysis Department, Trans. Shanghai: East China University of Science and Technology Press, 2007: 71-105. (in Chinese)

作者简介:王雅昕(1997—),女,河南洛阳人,主要从事计算物理学研究。E-mail:leewangyx@163.com

马恒(1963—),男,河南方城人,博士,教授,主要从事液晶材料,有机太阳能电池等方面的研究。E-mail:hengma@henannu.edu.cn