论文

芳香族化合物的太赫兹频段动力学及定量分析

田璐^{①②}, 赵昆^{③*}, 尼浩^④, 苗青^③

① 西北大学物理学院, 西安 710069;

② 西北大学光电技术与纳米功能材料国际联合研究中心, 西安 710069;

③ 中国石油大学(北京), 油气光学探测技术北京市重点实验室, 北京 102249;

④ 中国石油大学(华东)理学院, 青岛 266555

*联系人, E-mail: zhk@cup.edu.cn

收稿日期: 2015-04-23; 接受日期: 2015-06-16; 网络出版日期: 2015-08-31

国家重大科学仪器设备开发专项(编号: 2012YQ14005)、陕西省自然科学基金(编号: 2013JQ1010)和陕西省教育厅项目(编号: 14JK1758)资助

摘要 本文利用太赫兹时域光谱技术研究了苯、萘、偶氮苯、萘-苯混合物和偶氮苯-苯混合物在太赫兹频段的光学特性及动力学特征, 应用密度泛函理论计算得到了苯、萘和偶氮苯的分子振动谱. 萘和偶氮苯均有明显的吸收峰, 萘在太赫兹频段的吸收模式来源为萘分子层间的相互作用和晶格振动, 偶氮苯分子沿着 N-N 键的面内摇摆振动、苯环面的面外摇摆振动和面内剪切振动为吸收模式来源, 从而引起了其在太赫兹频段较强的吸收, 苯在太赫兹频段的吸收是由于分子与其邻近分子的碰撞产生的少量诱导偶极矩的作用. 通过对不同质量分数浓度的萘-苯和偶氮苯-苯二元混合物的太赫兹特征谱的研究, 发现混合物的折射率随浓度呈现线性关系, 依据 Lambert-Beer 定律, 利用该线性特性可作为混合物中物质成分和浓度的预测.

关键词 苯, 萘, 偶氮苯, 芳香族化合物, 太赫兹

PACS: 39.30.+w, 78.20.Ci, 83.10.Mj

doi: 10.1360/SSPMA2015-00182

芳香族化合物是指一类含有苯环结构的化合物, 主要来源于石油、化工、纺织等工业生产. 芳香族化合物中仅含碳、氢两种元素的芳香烃简称芳烃, 是一种碳原子以环状结构连接和单双键交替的不饱和烃, 其分子通式有 C_nH_{2n-6} , C_nH_{2n-12} 和 C_nH_{2n-18} 等, 按照其结构特点, 大体上可分单环、多环和环烷芳香烃. 芳香族化合物广泛存在于自然界, 是原油及各类有机物的主要组分之一^[1], 泄露的原油及各类有机物对人

体健康、生态、水体、土壤和空气等造成了严重影响^[2]. 其中含有苯环结构的芳香族化合物对环境的污染也是各国学者关注的重点^[3], 不仅因为它具有较强的毒性和抗降解能力, 而且一些化合物具有致畸、致癌、致突变的作用. 因此研究芳香族分子及其衍生物体系具有重要的理论意义和实践价值, 芳香族化合物分子结构和性质的研究是建立有机物分析的基础, 建立准确的分析方法越来越受到关注.

引用格式: 田璐, 赵昆, 尼浩, 等. 芳香族化合物的太赫兹频段动力学及定量分析. 中国科学: 物理学 力学 天文学, 2015, 45: 104201

Tian L, Zhao K, Ni H, et al. Dynamics and quantitative analysis of aromatic compounds in the terahertz region (in Chinese). Sci Sin-Phys Mech Astron, 2015, 45: 104201, doi: 10.1360/SSPMA2015-00182

目前, 在有机物检测方面常用的方法主要有传统的热力学分析方法^[4]和光谱手段, 光谱分析法主要有紫外分光光度法、气相色谱法、重量法、荧光分光光度法和红外检测方法等^[5]. 石油有机分子中的 C—C 共轭双键、非共轭双键和具有 n 电子的生色基团有机化合物在紫外区均有特征吸收. 利用红外光谱技术通过对主要官能团甲基、亚甲基、次甲基、烯基和芳基的测定, 对有机烃类化合物进行表征, 了解芳香烃的取代程度及不饱和烃的含量等^[6]. 芳香族分子等大多数有机物质在大于 1400 cm^{-1} 波段的吸收为官能团的伸缩振动, 在 1400 cm^{-1} 以下区域的波谱则能够反映分子的整体结构特征.

对有机分子的分子内和分子间相互作用的研究表明, 溶质与溶剂分子的相互作用及动力学对控制化学反应过程非常重要, 而分子相互作用的属性与其偶极矩相关^[7], 分子及分子之间相互作用的特征频率一般小于 100 cm^{-1} , 研究这种超快现象的关键技术在于发展一种在时间分辨能力上与烃类分子的振-转运动以及分子相互作用时间相关的超快激光技术, 而太赫兹时域光谱技术是具有多种优点的一种非接触式无损测量技术. 芳香烃物质在太赫兹频段的运动模式来源为振动, 温度对振动有较强的影响^[8]. 2004 年, Mickan 等人^[9]利用 THz-TDS 和 OHD-RIKES 手段研究了苯、甲苯和溴苯在 $0.1\text{--}1.6\text{ THz}$ 范围内的振动力学, 通过分析分子的多方式分解来确认该技术用于分子动态坐标检验的相对性. 2013 年, 太赫兹技术用于多种多环芳烃的研究结果表明, 多环芳烃在太赫兹频段的结构动力学研究为石油等有机化学提供了理论依据^[10]. 目前关于芳香族分子在太赫兹频段的性质研究仍然较少, 该区域被称之为指纹区, 物质在该频段的指纹谱能够为化合物的结构和性质分析提供可靠的依据.

本文利用太赫兹时域光谱技术研究苯、萘和偶氮苯在太赫兹频段的频谱相应特性, 结合密度泛函理论分析它们的吸收模式来源. 另外, 制备不同浓度的萘-苯和偶氮苯-苯二元混合物, 研究混合物的光学特性与浓度的关系特性, 采用线性回归技术, 验证芳香族分子的特征谱作为混合物中成分和含量的可行性.

1 实验方法

本文采用透射式太赫兹光谱装置^[11], 研究了芳

香族分子的光学性质. 本文所使用的苯、萘和偶氮苯购自国药集团化学试剂北京有限公司, 苯为液体, 萘和偶氮苯为固体. 二元混合物的配制浓度有多种计量方法, 如质量浓度、物质的量浓度、质量分数、体积分数、摩尔分数和溶质的摩尔比等, 本文采用了质量分数的计量方法配制. 萘和偶氮苯按照不同的质量分数混合在苯溶液中, 溶质的质量分数 $C_{\text{溶质}} = m_{\text{溶质}} / (m_{\text{溶质}} + m_{\text{溶剂}})$, 浓度量纲为 1, 获得了浓度均为 0.01, 0.04, 0.07, 0.1 的萘-苯和偶氮苯-苯二元混合物. 液态的苯和两种二元混合物储存于光程为 10 mm 的聚苯乙烯样品池内, 厚度小于 0.5 mm 的聚苯乙烯材料透明而且对太赫兹波有较低的折射率和较弱的吸收^[12], 经过检查, 在样品中没有发现影响实验结果的小气泡. 固态的萘和偶氮苯采用压片的制样方法, 在样品压制过程中, 需要注意样品的粒度和用量两个因素. 由于固体样品颗粒的大小会影响散射效应, 对光谱的质量有所影响. 为了使样品粉末的粒度达到实验要求, 将以上粉末依次放在玛瑙研钵中粉碎磨细, 但是如果样品研磨的时间过长, 可能造成样品晶格的破坏, 因此要把握好研磨的效果和时间. 另外样品的用量会影响谱图的质量和有效光谱范围, 样品太薄时, 有些吸收峰会受噪音信号掩盖, 反之样品太厚, 则会造成吸收峰的峰形变宽^[13]. 称得质量分别为 0.34 和 0.24 g 的偶氮苯和萘样品后, 将样品加到压片专用的模具上, 合上模具后在油压机上加压维持 3 min 左右, 获得了厚度分别为 2.5 和 2.8 mm 的偶氮苯和萘圆盘试样.

2 实验结果与讨论

石油中的芳香烃物质主要为含有多个苯环的多环芳烃, 多环芳烃有联苯、多苯代脂烃和稠环芳烃. 萘为稠环芳烃, 图 1 是萘的场发射扫描电子显微图, 扫描范围为 $50\text{ }\mu\text{m} \times 50\text{ }\mu\text{m}$. 根据晶体生长理论分析, 萘的结晶过程伴随着晶核形成、晶体生长和晶体颗粒连接三个过程. 萘的表面形貌图显示晶体表面比较平整, 由多层片状晶粒堆积而成. 萘是片状晶体, 晶体以片状结构方式生长, 然后每层片状晶体之间由范德华力结合. 使用高分辨率的扫描隧道显微镜研究萘和萘在 $\text{Cu}(111)$ 溶液中的吸收, 萘和萘以有序的层状结构排列, 萘具有 4×4 的对称性, 在 $8\text{ nm} \times 8\text{ nm}$ 的扫描范围内, 能清晰地看到萘的双苯环连接结构^[14].

图 2 给出了苯、萘和偶氮苯的太赫兹吸收谱和折射率谱, 苯的有效频率范围为 0.2–1.8 THz, 苯在 1.8 THz 附近的吸收系数相对比较杂乱, 这是由于太赫兹脉冲在苯样品中透过时的噪音引起的. 苯在有效频率范围内没有明显的吸收峰, 随着频率的增加, 苯的吸收系数逐渐增加. 萘在 1.996 THz 处有尖锐的吸收峰, 偶氮苯的吸收峰分别在 1.392, 1.722 和 2.179 THz. 苯的折射率随着频率变化较小, 萘和偶氮苯的折射率在 1.65–1.7 之间. 根据 Lorentz-Lorenz 理论, 物质的折射率与其分子极化率有关, 由于苯的极化率大于萘和偶氮苯, 所以苯的折射率值最大. 萘在大

图 1 萘的表面形貌图

Figure 1 FESEM images of naphthalene.

图 2 (网络版彩图) 苯、偶氮苯和萘的太赫兹吸收谱(实线)和折射率谱(虚线)

Figure 2 (Color online) The frequency dependence of absorption coefficients (solid lines) and refractive indices (dotted lines) of benzene, azobenzene and naphthalene.

于 1.85 THz 时的折射率出现了拐点, 偶氮苯在与其吸收峰位对应的频率处出现了拐点, 这是由于反常色散的原因.

为了进一步分析芳香族分子在太赫兹频段的吸收模式来源, 本文利用 Gaussian03 软件模拟了苯、萘和偶氮苯的红外吸收谱, 如图 3 显示了萘和偶氮苯分子在 10 THz 以内的吸收谱. 这是因为苯在太赫兹频段没有吸收峰, 苯沿着苯环面的扭摆振动出现在 421.986 和 422.611 THz 处即红外波段. 有文献报道, 苯、四氯化碳、二硫化碳、环己烷、萘烷等非极性液体在 0.1–6 THz 范围内的吸收是由于分子与其邻近分子的碰撞产生的少量诱导偶极矩的作用^[15]. 1997 年, Keiding 等人^[7]通过研究 C_6H_{12} , C_6H_6 , C_6D_6 , $C_6H_3F_3$ 和 C_6F_6 的介电性能, 证明苯在 0–2.5 THz 频段的吸收是由于分子碰撞过程引起的. 苯在 -4°C , 21°C 和 65°C 时的介电性能不同, 吸收系数随着温度的升高而降低, 但是吸收谱的波形没有变化, 不同温度的苯在 2.3 THz 处为吸收系数的最大值^[7]. 萘在 5.397, 5.772 和 11.191 THz 处有明显的吸收峰, 偶氮苯在 4.8 THz 处有较宽的吸收峰, 在大于 7 THz 时的吸收系数随着频率逐渐增加. 不含重原子的固体在远红外波段的振动模式主要是分子之间的振动, 振动形势分为 3 种, 第 1 种是例如氢键振动的分子间相互作用; 第 2 种为晶格振动, 晶体内部的分子或离子(包含复合粒子)作为一个整体, 在晶格中的平动、扭动和摆动等相对运动所引起的振动吸收叫做晶格振动吸收. 分子晶体在远红外通常有较多的晶格振动吸收^[16]. 根据模拟的结

图 3 (网络版彩图) 萘和偶氮苯在红外波段的吸收谱模拟结果

Figure 3 (Color online) The simulated absorption results of naphthalene and azobenzene in the infrared region.

果, 萘在 0.2–2.5 THz 频段内并没有明显的吸收峰, 但是根据图 1 所示的萘的层状结构分析, 不能形成氢键的分子晶体萘在 1.996 THz 处的吸收峰可能是由于分子层之间的范德华相互作用以及晶格振动所引起的共振吸收. 同苯分子类似, 联苯在 0.2–2.5 THz 范围内也没有吸收峰^[17], 但是在联苯之间引入 N—N 键后形成偶氮苯分子, 偶氮苯出现了明显的吸收峰, 根据偶氮苯在 0.2–2.5 THz 频段的吸收谱结果, 它的理论吸收峰位在 1.355, 1.416 和 2.91 THz 处, 其分子运动模式分别为沿着 N-N 链的面内摇摆振动、苯环面的面外摇摆振动和面内剪切振动.

表 1 列出了本文所得到的萘和偶氮苯的特征吸收峰位以及近年来文献报道的吸收峰位值. 文献[18]报道了萘在 0.5–2.2 THz 频段内的吸收峰位为 1.95 THz, 与萘分子结构不同的蒽和 β -萘酚同样在 1.95 THz 处有吸收峰. 文献[19]报道了萘在 0.5–6.0 THz 范围内的太赫兹吸收谱, 萘在 5.28 THz 处有非常明显的吸收峰. 颜色鲜艳的橘黄色偶氮苯是一种致癌物质, 偶氮苯有反式和顺式两种分子结构. 通过研究偶氮苯在太赫兹频段的超快动力学^[20], 反式和顺式偶氮苯的吸收峰位完全不同, 反式偶氮苯的吸收峰在较高频率段, 应用 Gaussian 03 软件 B3LYP 方法和 cc-pvdz 基组模拟, 反式偶氮苯的吸收峰位在 0.7, 1.9 和 2.6 THz, 顺式结构的吸收峰位在 1.4, 2.3, 4.4, 5.6 和 8.4 THz. 通过对比国产和进口偶氮苯的太赫兹光谱, 国产偶氮苯的吸收峰位分别为 0.65, 1.1 和 1.5 THz, 进口偶氮苯的吸收峰位在 1.39 和 1.75 THz 处, 吸收峰位差别较大^[21]. 本论文所得的萘的吸收峰位与文献报道的比较一致, 而偶氮苯的吸收峰位差别较大, 且理论吸收峰与实验值没有完全符合, 这是由于不同产地的样品制备工艺不同、放置时间会影响偶氮苯的分子结构以及理论模拟没有考虑分子状态和温度等因素.

图 4 是苯、萘、偶氮苯以及浓度均为 0.01, 0.04, 0.07, 0.1 的萘-苯混合物和偶氮苯-苯混合物在 0.2–2.5

图 4 (网络版彩图)萘-苯混合物和偶氮苯-苯混合物的太赫兹吸收谱

Figure 4 (Color online) The terahertz absorption spectrum of azobenzene-benzene mixtures and naphthalene-benzene mixtures.

THz 频段的吸收谱, 为了便于分辨混合物的吸收系数, 对两种混合物的吸收系数均进行了相同数值的补偿. 多种浓度的萘-苯混合物和偶氮苯-苯混合物在整个实验频段没有明显的吸收峰, 且吸收谱特征与萘和偶氮苯的吸收峰位并不对应, 这是因为萘和偶氮苯在苯溶液中的浓度较小所致. 但是其曲线趋势与苯的吸收系数保持一致性, 且相同浓度的萘-苯混合物比偶氮苯-苯混合物的吸收系数大. 从图中可以看出, 仅仅从吸收峰峰位上无法准确地分辨混合物的指纹特征, 因此考虑样品的折射率特性, 可以进一步提高分析的准确性和准确度.

利用 THz-TDS 装置测量得到了萘-苯混合物和偶氮苯-苯混合物在不同浓度下的折射率谱, 本文选取 1 THz 处的折射率为研究对象, 得到了混合物的折射率与浓度的关系曲线, 如图 5 的实线所示, 萘-苯混合物和偶氮苯-苯混合物的折射率与浓度呈现出良好的线性关系, 偶氮苯-苯混合物的折射率曲线斜率比萘-苯混合物的斜率大, 这是因为偶氮苯的折射率比萘的折射率大, 即偶氮苯的分子极化率大于萘的分子极化率. 根据 Lambert-Beer 定律^[22]以及折射率与吸收系数间的关系^[23], 由质量分别为 $m_1, m_2, \dots, m_n$, 折射率分别为 $n_1, n_2, \dots, n_n$ 的样品 $s_1, s_2, \dots, s_n$ 均匀混合而成的总质量为 m 的 n 元混合物样品 S 的折射率等于

$$n = \sum_{i=1}^n s_i n_i, \quad (1)$$

$$s_1 : s_2 : \dots : s_n = m_1 : m_2 : \dots : m_n, \quad (2)$$

表 1 萘和偶氮苯的特征吸收峰位

Table 1 The absorption peaks of naphthalene and azobenzene

Aromatics	Naphthalene	Azobenzene
Peaks (THz)	1.996	1.392, 1.722, 2.179
Peaks (THz)	ref. [19]: 1.95	ref. [20]:
[Reference]	ref. [20]: 5.28	Trans-0.7, 1.9, 2.6, 2.9, 9.1; Cis-1.4, 2.3, 4.4, 5.6, 8.4.

图 5 (网络版彩图)萘-苯混合物和偶氮苯-苯混合物在 1 THz 处的实验和理论折射率值

Figure 5 (Color online) The experimental and calculated refractive index of azobenzene-benzene mixtures and naphthalene-benzene mixtures at 1 THz.

其中, 式(2)为多元混合物中每种样品的质量比值. 针对本文采用的萘-苯和偶氮苯-苯二元混合物, 以苯、萘和偶氮苯在 1 THz 处的折射率为指纹特征, 根据公式(1)和(2), 采用线性回归技术计算得到了不同浓度下的萘-苯和偶氮苯-苯二元混合物在 1 THz 处的折射率值(图 5 虚线), 从图 5 可以看出, 虚线部分代表计算得到的折射率值与实线所对应的实验结果值

非常接近, 因此依据 Lambert-Beer 定律, 证明本实验结果可以预测混合物中某种物质的成分或含量.

3 结论

通过实验和理论相结合的方法, 研究了苯、萘、偶氮苯、萘-苯混合物和偶氮苯-苯混合物在太赫兹频段的光学特性. 苯在太赫兹频段没有明显的吸收峰, 吸收系数随着频率单调递增. 萘和偶氮苯有明显的吸收峰, 调研发现其他芳香烃分子在太赫兹频段一般会有明显的吸收峰. 采用密度泛函理论计算得到了分子振动谱, 苯在太赫兹频段的吸收是由于分子与其邻近分子的碰撞产生的少量诱导偶极矩的作用, 萘的吸收峰来源为分子层之间的相互作用以及晶格振动所引起的共振吸收, 偶氮苯的吸收峰是由于分子沿着 N-N 链的面内摇摆振动、苯环面的面外摇摆振动和面内剪切振动. 萘-苯和偶氮苯-苯二元混合物在 1 THz 处的折射率与浓度呈现出良好的线性关系, 根据 Lambert-Beer 定律, 理论计算得到的折射率值与实验值比较符合, 因此可以利用该线性关系作为二元混合物成分和含量的预测分析, 本文的研究结果为理解有机分子体系的物理和化学特性奠定了基础.

参考文献

- Tielens A G G M. 25 years of PAH hypothesis. *EAS Pub Ser*, 2011, 46: 3–10
- Rules R. Oil is bad for the heart. *Science*, 2014, 343: 707
- Adebisi F M, Oluyemi E A, Adeyemi A F, et al. A measurement of selected polycyclic aromatic hydrocarbons in petroleum product contaminated soils using a gas chromatograph. *Pet Sci Tech*, 2015, 33: 62–71
- Briard A, Bouroukba M, Petitjean D, et al. Models for estimation of pure n-alkanes' thermodynamic properties as a function of carbon chain length. *J Chem Eng Data*, 2003, 48: 1508–1516
- Yamaguchi M, Serafin S V, Morton T H, et al. Infrared absorption studies of n-heptane under high pressure. *J Phys Chem B*, 2003, 107: 2815–2821
- Fingas M, Brown C. Review of oil spill remote sensing. *Mar Pollut Bull*, 2014, 83: 9–23
- Keiding S R. Dipole correlation functions in liquid benzenes measured with terahertz time domain spectroscopy. *J Phys Chem A*, 1997, 101: 5250–5254
- Thorsmølle V K, Averitt R D, Chi X, et al. Ultrafast conductivity dynamics in pentacene probed using terahertz spectroscopy. *Appl Phys Lett*, 2004, 84: 891–893
- Mickan S P, Shvartsman R, Munch J, et al. Low noise laser-based T-ray spectroscopy of liquids using double-modulated differential time-domain spectroscopy. *J Opt B-Quantum Semiclass Opt*, 2004, 6: S786–S795
- Cataldo F, Angelini G, García-Hernández D A, et al. Far infrared (terahertz) spectroscopy of a series of polycyclic aromatic hydrocarbons and application to structure interpretation of asphaltenes and related compounds. *Spectrochim Acta Part A*, 2013, 111: 68–79
- Li J S. Optical parameters of vegetable oil studied by Terahertz time-domain spectroscopy. *Appl Spectrosc*, 2010, 64: 231–234
- Tian L, Zhou Q L, Zhao K, et al. Consistency-dependent optical properties of lubricating grease studied by terahertz spectroscopy. *Chin Phys B*, 2011, 20: 010703

- 13 Tian L, Zhao K, Zhou Q L, et al. Optical parameters of zinc dialkyldithiophosphate in terahertz regime. *Optik*, 2012, 124: 554–556
- 14 Wan L, Itaya K. *In situ* scanning tunneling microscopy of benzene, naphthalene, and anthracene adsorbed on Cu(111) in solution. *Langmuir*, 1997, 13: 7173–7179
- 15 Beard M C, Lotshaw W T, Kortner T M, et al. Comparative OHD-RIKES and THz-TDS probes of ultrafast structural dynamics in molecular liquids. *J Phys Chem A*, 2004, 108: 9348–9360
- 16 Pethig R. Coherent excitations in biological systems. *Int J Radiat Biol*, 1984, 46: 95–96
- 17 Xu H, Han J G, Yu X H, et al. THz time-domain spectroscopy of polyring aromatic compounds in solid phase (in Chinese). *Chem Online*, 2005, 3: 220–225 [徐慧, 韩家广, 余笑寒, 等. 固态多环芳烃化合物的 THz 时域光谱研究. *化学通报*, 2005, 3: 220–225]
- 18 Han J G, Xu H, Zhu Z Y, et al. Terahertz spectroscopy of naphthalene, α -naphthol, β -naphthol, biphenyl and anthracene. *Chem Phys Lett*, 2004, 392: 348–351
- 19 Ponseca C J S, Estacio E, Murakami H, et al. Experimental and calculated terahertz spectra of naphthalene and 1,4-dihydroxynaphthalene in the 0.5 - 6 terahertz region. *J Phys-Conf Ser*, 2008, 112: 042073
- 20 Esenturk O, Heilweil E J. Ultrafast transient THz spectroscopy of azobenzene. In: *Infrared and Millimeter Waves and 13th International Conference on Terahertz Electronics*. MA: IEEE, 2005, 2: 479–480
- 21 Zhang L L, Zhang C L, Zhao Y J, et al. Time-resolved terahertz spectroscopy of explosives (in Chinese). *Spectrosc Spectr Anal*, 2007, 27: 1457–1460 [张亮亮, 张存林, 赵跃进, 等. 爆炸性物质太赫兹时间分辨光谱测量. *光谱学与光谱分析*, 2007, 27: 1457–1460]
- 22 Markelz A G, Roitberg A, Heilweil E J. Pulsed terahertz spectroscopy of DNA, bovine serum albumin and collagen between 0.1 and 2.0 THz. *Chem Phys Lett*, 2000, 320: 42–48
- 23 Tian L, Zhou Q L, Jin B, et al. Optical property and spectroscopy studies on the selected lubricating oil in the terahertz range. *Sci China Ser G-Phys Mech Astron*, 2009, 39: 1938–1943

Dynamics and quantitative analysis of aromatic compounds in the terahertz region

TIAN Lu^{1,2}, ZHAO Kun^{3*}, NI Hao⁴ & MIAO Qing³

¹ Physics Department, Northwest University, Xi'an 710069, China;

² International Collaborative Center on Photoelectric Technology and Nano Functional Materials, Northwest University, Xi'an 710069, China;

³ Beijing Key Laboratory of Optical Detection Technology for Oil and Gas, China University of Petroleum, Beijing 102249, China;

⁴ College of Science, China University of Petroleum, Qingdao 266555, China

The optical properties and characteristic spectral features of benzene, naphthalene, azobenzene, azobenzene-benzene mixtures and naphthalene-benzene mixture are investigated in the terahertz region using terahertz time-domain spectroscopy. To further resolve the origins of characteristic spectral features of aromatic compounds in terahertz region, the vibrational properties of benzene, naphthalene and azobenzene are studied using Gaussian 03 software package. The absorption of benzene, naphthalene originate from the induced dipole moment by molecular collision, crystal lattice vibration and interaction between molecular layers, respectively. The bending vibration of azobenzene is the major factor of absorption in terahertz region. Moreover, the quantitative analysis of azobenzene-benzene mixtures and naphthalene-benzene mixtures are studied. The refractive index of mixtures is found to vary linearly with concentration. The results can be used for the component and concentraion prediction of mixtures on the basis of Lambert-Beer law.

benzene, naphthalene, azobenzene, aromatic compound, terahertz

PACS: 39.30.+w, 78.20.Ci, 83.10.Mj

doi: 10.1360/SSPMA2015-00182