

# 太赫兹波不依赖参考信号光谱分析

张亮亮<sup>1,2</sup> 钟 华<sup>1</sup> 邓 朝<sup>1</sup> 张存林<sup>1</sup> 赵跃进<sup>2</sup>

(<sup>1</sup> 首都师范大学物理系, 北京 100048; <sup>2</sup> 北京理工大学光电工程系, 北京 100081)

**摘要** 理论分析了不依赖参考信号的太赫兹(THz)透射式和反射式光谱分析方法,并对弱极性材料 2,4-二硝基甲苯(DNT)和黑索今(RDX)的特征光谱进行实验研究。对于透射式光谱测量,利用单脉冲 THz 波的相位谱呈线性分布的特点,样品信号的相位与频率的比值对频率的一阶导数包含材料的共振吸收频率特征;对于反射式光谱测量,在不考虑大气吸收的理想条件下,对样品信号的相位对频率求二阶导数可以提取弱极性材料的光谱特性。此方法不需要测量参考光,完全消除了反射谱分析中的“位移误差”,提高了反射式光谱测量的精确度。

**关键词** 太赫兹技术;不依赖参考光;太赫兹波;光谱分析

**中图分类号** O434.13 **文献标识码** A **doi**: 10.3788/CJL201138.s111004

## Terahertz Wave Reference-Free Spectroscopic Analysis

Zhang Liangliang<sup>1,2</sup> Zhong Hua<sup>1</sup> Deng Chao<sup>1</sup> Zhang Cunlin<sup>1</sup> Zhao Yuejin<sup>2</sup>

(<sup>1</sup> Department of Physics, Capital Normal University, Beijing 100048, China  
<sup>2</sup> Department of Optical Engineering, Beijing Institute of Technology, Beijing 100081, China)

**Abstract** A reference-free spectroscopic analysis method for terahertz (THz) transmission and reflection measurement is presented. The absorption features of weakly polarized materials (RDX, 2,4-DNT and HMX) are extracted without the reference signal. For transmission spectroscopy, the absorption peaks can be located from the negative first-order derivative of the sample signal phase divided by the frequency. The absorption signatures of the reflection spectroscopy of the materials are extracted directly from the second-order derivative of the phase of the sample beam with respect to frequency. For reflection spectroscopy, the absorption signatures of the materials are extracted directly from the second-order derivative of the phase of the sample beam with respect to frequency. This technique provides a straightforward and fast solution to solve the phase-retrieval problem in reflection time-domain spectroscopy (RTDS) and eliminates the “misplacement error”.

**Key words** terahertz technology; reference-free; terahertz wave; spectroscopic analysis

**OCIS codes** 300.6495; 350.5030; 120.5700

## 1 引 言

传统的太赫兹(THz)光谱学是要分别测量载有样品信息的 THz 信号和参考信号<sup>[1~5]</sup>,例如对于透射式测量,要得到样品材料吸收峰的位置,就需要对透过样品的 THz 信号的功率谱与参考信号的功率谱进行相除并取对数计算。在利用电荷耦合器件(CCD)相机的焦平面成像系统中,CCD 相机可以同时记录样品上每一个像素的光谱,如果要利用参考光束来提取样品的特征,需要知道参考光束轮廓特征的精确信息,例如是近似平面波还是典型的高斯光束。而值得注意的是,对于远距离传输和大尺寸

成像,THz 光束的质量以及每一个像素的信噪比都会变得很差<sup>[6,7]</sup>。并且,最近有研究表明,激光激发空气产生等离子体辐射的 THz 光束横截面具有与频率相关的环状结构<sup>[8]</sup>。因此,传统的特征提取的方法不适合于远距离传输和大尺寸焦平面成像系统。而目前由于参考光的参与,在反射式 THz 光谱的数据处理方面有一个难以攻破的瓶颈——信号光和参考光之间的光程差造成的相位本底很难去除。目前国际上流行的几种理论计算方法要么是计算量过大,要么是对样品的放置采取了精确的要求,使得这种技术在远距离、大面积,甚至户外常温情况下的

收稿日期: 2011-08-01; 收到修改稿日期: 2011-09-15

基金项目: 国家自然科学基金(11004140)资助课题。

作者简介: 张亮亮(1979—),女,副研究员,主要从事太赫兹光谱和成像等方面的研究。E-mail: zhlliang@126.com

应用都受到极大的限制。

本文提出了不依赖参考光的 THz 波特征光谱提取方法,单纯对样品信号的相位进行数据分析,得到弱极性材料 2,4-二硝基甲苯(DNT)和黑索今(RDX)的特征吸收光谱,解决了在远距离、大尺寸等条件下对参考信号测量困难或不准确的难题。

## 2 理论分析

### 2.1 透射式光谱分析

THz 波在空气中通过光程  $L$  并穿过厚度为  $h$  的样品后,它的相位满足

$$\varphi_s(\omega) = \omega h n(\omega)/c + \omega n_{\text{air}}(L-h)/c, \quad (1)$$

式中  $\omega$  是角频率,  $n(\omega)$  和  $n_{\text{air}}$  分别是样品和空气的折射率,  $c$  是光速。式中包括标准大气压和室温下空气的折射率,可以表示为<sup>[9]</sup>

$$\bar{n}_{\text{air}} = 1.0027 - i0. \quad (2)$$

可以用散射理论中的洛仑兹振子模型来模拟介电材料的复折射率,已经有报道证明,对于弱极化的有机化合物(例如生化药剂、爆炸物等),THz 频段的吸收相对于散射很弱,共振频率的位置不仅可以由吸收系数  $\alpha$  或消光系数  $\kappa$  来表征,而且可以由折射率  $n(\omega)$  对频率的一阶导数  $-dn(\omega)/d\omega$  来标定<sup>[10,11]</sup>。将(1)式的等号两边分别对频率求一阶导数得到

$$-d\left[\frac{\varphi_s(\omega)}{\omega}\right]/d\omega = -\frac{h}{c}dn(\omega)/d\omega, \quad (3)$$

(3)式表明,相位与频率的比值对频率的一阶导数同样包含有材料的共振吸收频率特征。

### 2.2 反射式光谱分析

被样品表面反射后的 THz 波在空气中传播光程  $L$  后,它的相位  $\varphi_s$  满足

$$\varphi_s(\omega) = \varphi_0 + \omega n_{\text{air}}L/c, \quad (4)$$

式中  $\varphi_0$  是由样品吸收引起的相位变化。在低湿度的

条件下,  $n_{\text{air}}$  通常被当作常数。利用散射理论中洛仑兹振子模型来模拟介电材料的复折射率,对于在 THz 频段吸收不是很强的弱极性有机化合物,共振频率的位置可以通过近似直接由  $\varphi_0$  得到,表示为<sup>[9,10]</sup>

$$\varphi_0 = \arctan\left(\frac{2\kappa}{n^2 + \kappa^2 - 1}\right) \sim \arctan\left(\frac{2\kappa}{n_{\infty}^2 - 1}\right), \quad (5)$$

式中  $n_{\infty}$  指在无穷频率的折射率,它是一个常数。由(5)式可知,在弱极性的近似条件下,样品信号的相位对频率的一阶导数可表示为

$$\frac{d\varphi_0}{d\omega} = \frac{2}{(n_{\infty}^2 - 1)[1 + 4\kappa^2/(n_{\infty}^2 - 1)^2]} \times \frac{d\kappa}{d\omega} \sim \frac{2}{(n_{\infty}^2 - 1)} \frac{d\kappa}{d\omega}, \quad (6)$$

结合(4)式可得

$$\frac{d^2\varphi_s}{d\omega^2} = \frac{d^2\varphi_0}{d\omega^2} \sim \frac{2}{(n_{\infty}^2 - 1)} \frac{d^2\kappa}{d\omega^2}. \quad (7)$$

根据文献[12]中相同的数学方法可以证明,对于弱极性分子,  $\frac{d^2\kappa}{d\omega^2}$  与  $\kappa$  具有相同的曲线形状(只是正负相反)。实际上,消光系数  $\kappa$  与自己的二阶导数的关系来源于 K-K 关系:复折射率的虚部  $\kappa$  与实部  $n$  可以相互表示为对方的积分<sup>[13]</sup>。这就意味着如果  $n_{\text{air}}$  可以近似为常数,则样品信号相位的二阶导数  $\frac{d^2\varphi_s}{d\omega^2}$  包含有表征化合物分子共振频率的吸收特性。

## 3 结果分析

THz 波透射式光谱测量的实验装置是传统的时域光谱系统(THz-TDS),THz 波垂直入射被测样品,穿透样品后的信号被接收,详细的系统描述可见文献[12]。利用不依赖参考光的太赫兹透射光谱特征提取方法对爆炸性材料(RDX 和 2,4-DNT)进行测量。图 1 给出了传统光谱处理方法和不依赖参

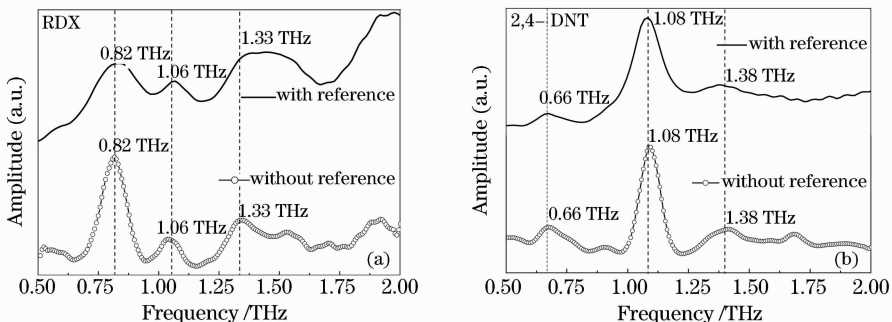


图 1 RDX(a)和 2,4-DNT(b)的透射吸收光谱

Fig. 1 Transmission absorption spectra of RDX (a) and 2,4-DNT (b)

考光的相位特征提取方法对爆炸物样品特征光谱的处理结果比较。实曲线为利用参考光计算得到的结果,点线为不依赖参考光的相位谱,图中虚线标注了样品的共振吸收峰位。

图 1 给出了分别利用样品信号和参考信号的功率谱比值和不依赖参考光的相位谱  $-d\left[\frac{\varphi_s(\omega)}{\omega}\right]/d\omega$  对三种材料的透射特征吸收谱进行处理的结果。图 1(a) 中的虚线指出 RDX 在频率 0.82, 1.06 和 1.33 THz 的特征吸收峰, 图 1(b) 中的虚线显示了 2,4-DNT 样品在频率 0.66, 1.08 和 1.38 THz 处的吸收峰。两种方法处理结果在吸收线位置上是-致的, 充分表明不依赖参考光的相位处理方法对材料吸收特征提取的有效性。

THz 波反射式光谱测量的实验装置是反射式时域光谱仪, THz 波垂直入射被测样品表面, 被样品反射的信号被接收, 详细的系统描述可见文献 [13]。图 2 给出了 RDX 的反射式 THz 光谱数据的处理结果, 图中利用透射谱的吸收曲线作为参考来表征材料吸收峰的真实位置。

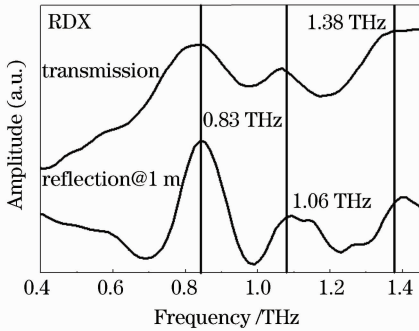


图 2 对 RDX 进行不依赖参考光的相位特征提取的处理结果

Fig. 2 Results of phase retrieval without reference signal to RDX

图 2 的顶部给出了在标准的透射式系统中测量得到的 RDX 的吸收谱线, 数据是在冲入氮气的条件下测得, 并且在谱分析中使用了参考信号, 它作为参考曲线用来表征 RDX 吸收峰的真实位置。底部的曲线是在相对湿度 (RH) 为 0%, 产生源和探测样品间距为 1 m 的条件下测得的  $\frac{d^2\varphi_s}{d\omega^2}$  谱(曲线沿纵轴翻转得到正值)。结果表明, 反射式测量数据经过这种方法处理后清楚地辨认出样品的特征吸收峰。图 3 给出了 2,4-DNT 的反射式 THz 光谱数据的处理结果。

图 3 的顶部给出了在标准的透射式系统中测量

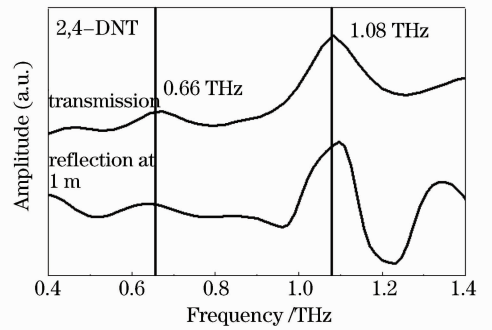


图 3 对 2,4-DNT 进行不依赖参考光的相位特征提取的处理结果

Fig. 3 Results of phase retrieval without reference signal to 2,4-DNT

得到的 2,4-DNT 的吸收谱线, 底部的曲线是反射式测量得到的  $\frac{d^2\varphi_s}{d\omega^2}$  谱。结果表明, 两种测量结果都清晰地表明 2,4-DNT 在频率 0.66 THz 和 1.08 THz 具有特征吸收峰。

## 4 结 论

利用从弱极性材料透射或者表面反射的 THz 波的相位与材料吸收谱线的关系, 在不依赖于参考光的情况下, 直接从信号光的相位中提取材料的光谱特性。不依赖参考光提取材料光谱特性的方法突破了 THz 时域脉冲光谱中相位信息提取的瓶颈, 为 THz 技术在远距离、大面积的识别和成像研究提供重要的理论和实验依据, 是 THz 技术在安全检测, 反恐等领域应用的一个重要突破。

## 参 考 文 献

- 1 D. M. Mittleman, R. H. Jacobsen, M. C. Nuss. T-Ray imaging[C]. IEEE J. Sel. Topics Quant. Electron. 1996, **2**(3): 679~692
- 2 B. B. Hu, M. C. Nuss. Imaging with Terahertz wave[J]. *Opt. Lett.*, 1995, **20**(16): 1716~1718
- 3 D. M. Mittleman, S. Hunsche, L. Boivin *et al.*. T-ray tomography[J]. *Opt. Lett.*, 1997, **22**: 904~906
- 4 D. M. Mittleman, G. Gupta, B. Neelamani *et al.*. Recent advantages in terahertz imaging [J]. *Appl. Phys. B*, 1999, **68**(6): 1085~1094
- 5 T. D. Dorney, R. G. Baraniuk, D. M. Mittleman. Material parameter estimation with terahertz time-domain spectroscopy [J]. *J. Opt. Soc. Am. A*, 2001, **18**(7): 1562~1565
- 6 Q. Wu, T. D. Hewitt, X.-C. Zhang. Two dimensional electro-optic imaging of THz beams [J]. *Appl. Phys. Lett.*, 1996, **68**(8): 1026~1028
- 7 Z. G. Lu, P. Campbell, X.-C. Zhang. Free-space electro-optic sampling with a high-repetition-rate regenerative amplified laser [J]. *Appl. Phys. Lett.*, 1997, **71**(5): 593~595
- 8 H. Zhong, N. Karpowicz, X.-C. Zhang. Terhaertz emission

- profile from laser-induced air plasma[J]. *Appl. Phys. Lett.*, 2006, **88**(26): 261103
- 9 H. Zhong, A. Sanchez, X.-C. Zhang. Identification and classification of chemicals using terahertz reflective spectroscopic focal plane imaging system[J]. *Opt. Express*, 2006, **14**(20): 9130~9141
- 10 M. Fox. Optical properties of solids[M]. New York: Oxford University Press, 2001
- 11 M. Van Exter, Ch. Fattinger, D. Grischkowsky. Terahertz time-domain spectroscopy of water vapor[J]. *Opt. Lett.*, 1989, **14**(20): 1128~1131
- 12 L. Zhang, H. Zhong, C. Zhang *et al.*. Terahertz wave reference-free phase imaging for identification of explosives[J]. *Appl. Phys. Lett.*, 2008, **92**(9): 091117
- 13 H. Zhong, C. Zhang, L. Zhang *et al.*. A phase feature extraction technique for terahertz reflection spectroscopy[J]. *Appl. Phys. Lett.*, 2008, **92**(22): 221106

栏目编辑: 李文喆