

基于光谱编码的太赫兹光谱测量新方法

陈猛¹, 赵自然^{1,2*}, 刘睿丰^{1,2}, 王迎新^{1,2}¹危爆物品探测技术国家工程研究中心, 北京 100084;²清华大学工程物理系, 北京 100084

摘要 为了提升太赫兹光谱分析的瞬时性和系统集成度, 提出一种超表面光谱编码与计算重建相结合的太赫兹光谱测量方法。利用多种超表面结构的光谱编码器件对入射太赫兹波进行高随机光谱编码, 并提出基于字典学习的稀疏恢复算法以实现光谱重建。理论计算和数值仿真表明, 在 4% 噪声水平下, 所提方法对乳糖透射光谱的重建误差小于 3%, 可为片上集成化太赫兹光谱仪的发展提供新途径。

关键词 太赫兹光谱; 超表面; 光谱编码; 计算重建

中图分类号 O433 文献标志码 A

DOI: 10.3788/LOP231438

Novel Terahertz Spectrum-Measurement Method Based on Spectral Encoding

Chen Meng¹, Zhao Ziran^{1,2*}, Liu Ruifeng^{1,2}, Wang Yingxin^{1,2}¹National Engineering Research Center for Dangerous Articles and Explosives Detection Technologies, Beijing 100084, China;²Department of Engineering Physics, Tsinghua University, Beijing 100084, China

Abstract In order to improve the transient performance and system integration level of terahertz spectral analysis, this study proposes a novel terahertz spectrum-measurement method that combines metasurface spectral encoding and computational reconstruction. High-random spectral encoding of incident terahertz waves is achieved using spectral encoder devices that utilize multiple metasurface structures. Furthermore, a sparse recovery algorithm based on dictionary learning is developed to accurately restore the spectrum. Theoretical calculations and numerical simulations demonstrate that under a 4% noise level, the proposed method achieves a reconstruction error of less than 3% for the lactose transmission spectrum. Thus, the proposed method provides a new pathway for developing on-chip integrated terahertz spectrometers.

Key words terahertz spectrum; metasurface; spectral encoding; computational reconstruction

1 引言

太赫兹波是指频率范围为 0.1~10 THz 的电磁波, 处于电子学向光子学的过渡区域, 具有非电离的光子能量, 对非极性电介质穿透性良好, 且蕴含着丰富的光谱信息, 因此在安全检查、无损检测、生物医学、天文观测、通信等领域有广阔的应用前景^[1]。太赫兹光子能量在毫电子伏 (meV) 量级, 可与皮秒特征时间尺度系统和 meV 范围的能量跃迁发生强烈相互作用, 如束缚电荷、等离子体、激子、瞬时电偶极子、晶体中的声子、弱键合分子晶体等^[2], 进而在光谱上表现出丰富而

独有的特征, 可用于探测和研究电子材料中的低能激发和载流子动力学、凝聚态物质中的集体振动或扭转模式、分子转动和振动跃迁等理化现象^[3]。此外, 各种太赫兹元器件, 如光源、调制器、滤波器、隔离器、吸收器、波导、窗口^[4]等, 也需要通过太赫兹光谱来表征其基本性能。太赫兹光谱分析已成为物理学、化学和生物学研究中的一种有力工具, 是目前太赫兹波段最重要的技术手段和应用之一。

由于传统太赫兹光谱测量方法在采集速度、系统集成度、环境适应性等方面存在瓶颈, 寻找新型快速化、集成化、实用化的光谱测量方法一直是研究热点。

收稿日期: 2023-06-02; 修回日期: 2023-06-24; 录用日期: 2023-08-01; 网络首发日期: 2023-08-12

基金项目: 国家自然科学基金(62105178)

通信作者: *zhaozr@mail.tsinghua.edu.cn

在光学和红外波段,随着纳米光子学和人工智能的发展,计算型片上光谱仪应运而生^[5],其首先对入射光进行光谱编码,然后通过宽带探测器接收编码后的光强,最终利用人工智能算法对光谱进行计算重建。由于不需要色散元件或光学延迟线,且可以提供足够的光谱分辨率和带宽,片上光谱仪得到了广泛关注。2019年, Yang 等^[6]制备了一种基于 CdS_xSe_{1-x} 纳米线的片上光谱仪,通过组分渐变来控制纳米线不同位置处的光子带隙,在可见光波段实现 10 nm 的光谱分辨率,核心部件尺寸为亚毫米量级。2021年, Yuan 等^[7]提出了一种基于黑磷场效应管的片上集成红外光谱仪,利用外加栅压调控的方法赋予器件频谱选择的红外响应,在 2~9 μm 波长范围内实现了 90 nm 分辨率的光谱测量。2022年, Xiong 等^[8]提出了一种结合超表面的集成化高光谱成像器件,通过选用不同的光谱编码方式,该器件可以在高精度光谱测量和高分辨成像之间切换。然而,受限于频率选择探测材料或分光滤波器的性能,太赫兹波段片上光谱仪还处于初期发展阶段。

综合以上分析,借鉴光学波段的思路,基于光谱编码与计算重建的光谱测量方法有望克服传统太赫兹光谱仪的局限,为太赫兹波段光谱分析技术开辟一条新的思路。本文针对构建的太赫兹波段片上光谱仪,提出了一种基于高随机光谱编码与计算重建的太赫兹光谱测量方法。首先,利用超表面阵列结构对太赫兹光谱进行调控,实现了 0.1~1.1 THz 频段的高随机光谱编码;然后,开发了基于字典学习的机器学习算法,对编码后的光谱进行计算重建;最后,通过理论计算和数值仿真验证了所提方法的有效性。

2 基于高随机光谱编码与计算重建的太赫兹光谱测量方法

如图 1 所示,传统太赫兹光谱测量方法可大致分为时域探测、调频和混频测量、色散光学及窄带滤波 4 类。图 1(a)所示的时域探测方法通过光学延迟扫描获得时域信号^[9-11],再经傅里叶变换得到频谱信息,光谱分辨率可达到 GHz 量级,但机械扫描延迟方式限制了光谱采集速率,而基于双激光器的异步光学采样^[12]和基于啁啾脉冲的单发测量^[13-14]可以实现亚毫秒量级的光谱采集速度,但将导致系统复杂度进一步增加。图 1(b)所示的调频和混频测量方法通常将频率可连续调谐的太赫兹源与宽带探测器配合使用^[15-16],或作为本振与混频器相结合^[17-19],实现光谱测量。这类方法具有光谱分辨率高、灵敏度高、动态范围大等优点,但采集速度较慢,工作范围局限于低太赫兹频段,且系统较为复杂,难以实现集成应用。借鉴图 1(c)所示的色散分光与阵列探测相结合的方式,在太赫兹波段也出现了基于衍射光栅的光谱测量技术^[20]。然而,太赫兹波段的波长远大于可见光波段,在有限的系统尺度下,能发生干涉的光栅周期数量受限,色分辨本领较

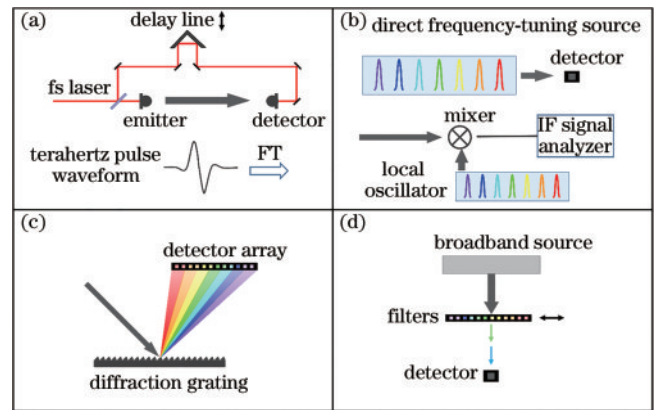


图 1 传统太赫兹光谱测量技术。(a) THz-TDS 测量;(b)直接调频与外差混频探测;(c)色散光学;(d)窄带滤波器阵列

Fig. 1 Traditional terahertz spectroscopy measurement technology. (a) THz-TDS measurement; (b) direct frequency-tuning and heterodyne mixing frequency detection; (c) dispersive optics; (d) narrowband filter array

低,限制了该类光谱仪的性能。图 1(d)所示的窄带滤波方法^[21]采用可切换的滤波器组和宽带探测器,其测量带宽和分辨率取决于滤波器的数量和 Q 因子,很难在紧凑的系统结构下获得足够的光谱带宽和分辨率,此外,由于需要切换滤波器,该方法的测量速度也通常较慢。

与传统色散分光或窄带滤波的探测方法不同,基于计算重建的光谱测量方法无须严格按照频率分光,而是利用具有频谱选择特性的编码机制对入射光进行编码,通过多组不同的编码赋予入射光不同的频谱信息。利用宽带探测器对编码后的入射光进行测量,获得一系列光强值,再经人工智能算法重建复原,得到原始的宽带高分辨率光谱。这一过程描述为

$$HS = I, \quad (1)$$

式中: S 为待测太赫兹波的光谱,由 n 个元素构成,描述不同频率处的光谱强度; H 为光谱传输矩阵,包含 $m \times n$ 个元素,表示各编码器对不同频率的传输效率; I 为所测得编码后的光强,由 m 个数据构成。计算重建过程:由已知的 H 和测量的 I 求解得到重建光谱 S' 。通常情况下, n 约为 m 的数倍大,因此式(1)属于欠定方程组,可以借助人工智能算法来求解。

3 高随机太赫兹光谱编码用超表面设计

太赫兹波段光子能量较低,通常无法激发半导体材料的带间跃迁,采用带隙调控的方式难以使材料的太赫兹光谱响应在波长维度产生足够丰富的变化,不能满足光谱编码调控的需求。另一方面,人工电磁超表面结构灵活,物理内涵广泛,可以激发众多机理不同、性质各异的电磁传输模式,在传输谱上表现出诸如谐振、耦合、劈裂、退化等一系列丰富的光谱特征,

与光谱重建所需的编码调控非常契合。因此,本文采用阵列式超表面对待测太赫兹波进行光谱编码,如图 2 所示。超表面器件分为 36 个不同的区域,每个区域由结构不同的超表面构成。入射太赫兹波经由超表面器件编码后,通过透镜会聚到面阵探测器上。探测器的像素区域与超表面结构区域一一对应,因此,探测器上从某一区域所测得的光响应即可表征对应超表面编码后的太赫兹波强度。考虑到实际光斑强度通常呈中心强、边缘弱的高斯分布,需要提前测量无编码器时光斑的强度分布,用以对编码后的光强值

进行修正。由于不需要任何机械扫描装置,所提方法的光谱采集速度理论上取决于所选用探测器的响应时间。如果探测器具有微秒甚至纳秒级的响应,所提方法的光谱采集时间也可以达到相当量级,相比依赖机械延迟装置的 THz-TDS 等方法,在实现太赫兹瞬态光谱测量方面具有重要优势。所设计光谱重建的带宽为 0.1~1.1 THz,分辨率为 5 GHz,因此光谱中包含 201 个数据点。根据 36 个光强数据,还原出包含 201 个数据点的太赫兹光谱,即为要完成的计算重建任务。

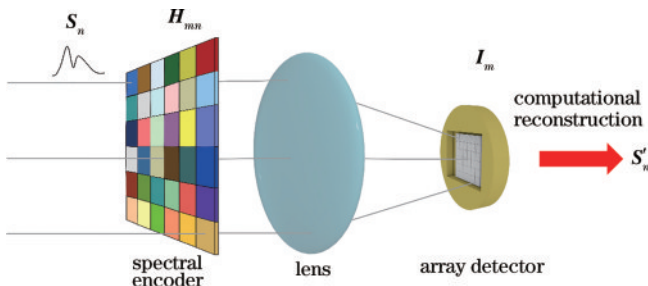


图 2 光谱编码与计算重建过程示意图

Fig. 2 Schematic of the spectral encoding and computational reconstruction process

所提光谱编码超表面器件的结构如图 3 所示。以 500 μm 厚的高阻硅为衬底,在其表面刻蚀出高度为 100 μm 的超表面结构。器件包含 36 组不同形状和尺寸的超表面结构,均针对 0.1~1.1 THz 频段设计,目的是在该频段产生一系列光谱信息丰富、随机性强的传输光谱。使用时域有限差分(FDTD)法对这些超表面结构的传输谱进行仿真,其中高阻硅的介电常数通过 THz-TDS 测得。在设计时,仿真了圆形、方形、十字形的柱、孔、环等 12 种结构,通过对各结构的尺寸参数进行扫描计算,选择其中在 0.1~1.1 THz 波段光谱信息丰富、特征密度高、随机性强的结构。部分超表面

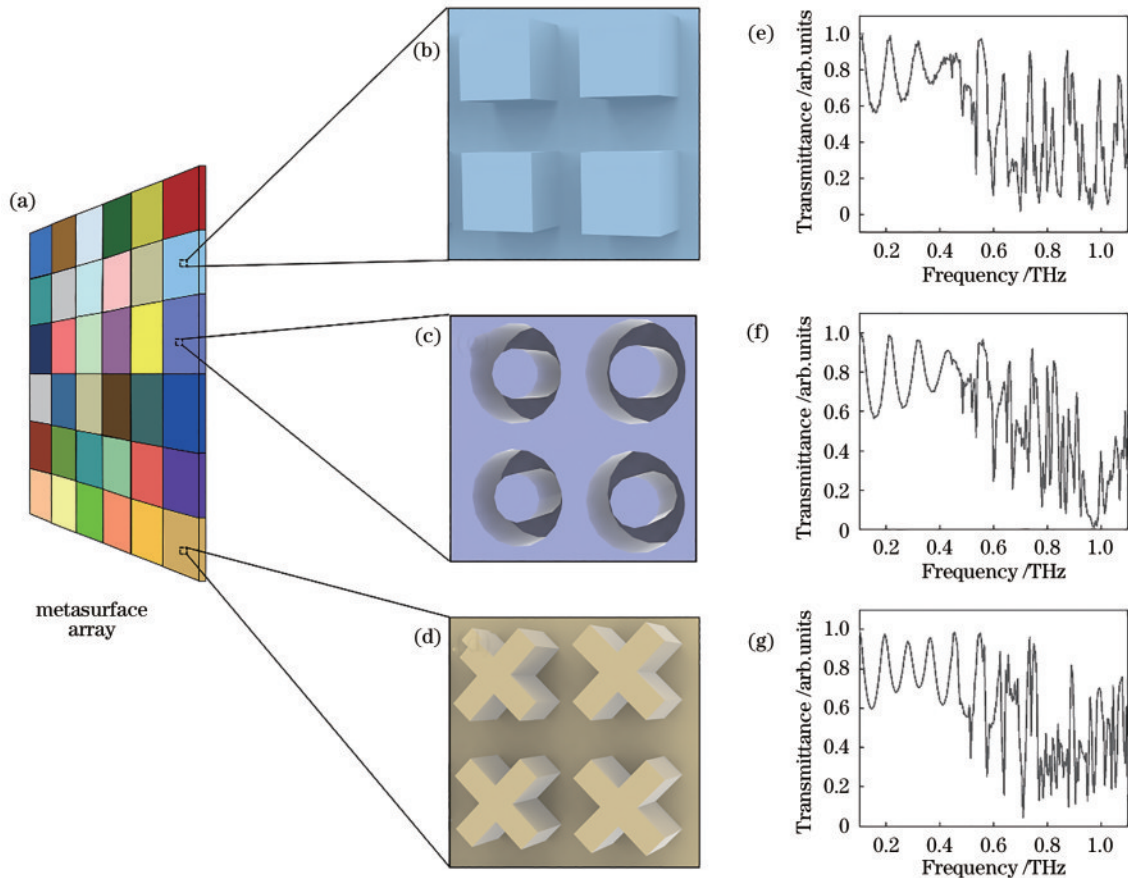


图 3 光谱编码器件结构设计及传输光谱。(a)阵列式超表面光谱编码器示意图;(b)~(d)部分所设计的超表面结构单元;(e)~(g)对应的传输谱

Fig. 3 Structural design and transmission spectra of spectral encoder device. (a) Schematic of array-type metasurface spectral encoder; (b)~(d) several metasurface units designed in this paper; (e)~(g) corresponding transmission spectra

结构和对应的传输谱如图 3(b)~(g)所示。可以看出,这些光谱包含带宽、强度、线型不同的透射峰和谷,具备丰富的光谱信息和良好的随机性。

4 光谱计算重建

针对太赫兹光谱计算重建问题,开发了一种基于字典学习的稀疏恢复算法。字典学习是一种机器学习算法,通过对欠定问题中的高维未知量进行稀疏表示,达到降维计算的目的。算法开发过程中,首先要构建太赫兹光谱训练集 $T=[t_1, t_2, \dots, t_p] \in \mathbf{R}^{n \times p}$, 其中 $t_i \in \mathbf{R}^n (i=1, 2, \dots, p)$ 为光谱数据。由于太赫兹波段目前尚没有合适的公开数据库可供直接使用,因此所使用的太赫兹光谱训练集主要通过利用理论计算的方法,以目前较为常用的光电导天线发射谱为原型得到构建。光电导天线在飞秒光激发下的时域光电流^[22]描述为

$$I(t) \sim A \left[\exp\left(\frac{\tau_p^2}{4\tau_c^2} - \frac{t}{\tau_c}\right) \cdot \operatorname{erfc}\left(\frac{\tau_p}{2\tau_c} - \frac{t}{\tau_p}\right) - \exp\left(\frac{\tau_p^2}{4\tau_{cs}^2} - \frac{t}{\tau_{cs}}\right) \cdot \operatorname{erfc}\left(\frac{\tau_p}{2\tau_{cs}} - \frac{t}{\tau_p}\right) \right], \quad (2)$$

式中: τ_p 、 τ_c 、 t 分别为光脉冲持续时间、载流子寿命、时间,有 $1/\tau_{cs} = 1/\tau_p + 1/\tau_c$; A 为与泵浦光强和调制电压相关的常数。对式(2)求导后进行傅里叶变换,即可得到光电导天线所发射太赫兹波的频谱。进一步地,可以在频谱中添加高斯型或者洛伦兹线型的吸收峰,改变峰的数量、位置、宽度、强度等参数,可以得到大量不同的太赫兹光谱。通过这种方法,构建了一个包含 500000 个数据的太赫兹光谱训练集。然后训练字典 $\Psi=[\Psi_1, \Psi_2, \dots, \Psi_k] \in \mathbf{R}^{n \times k}$, 使得 $T = \Psi D$, 即

$$\begin{aligned} & \min \|T - \Psi D\|_F^2 \\ & \text{s.t. } \|d_i\|_0 \leq \tau (i=1, 2, \dots, p), \end{aligned} \quad (3)$$

式中: $D=[d_1, d_2, \dots, d_p] \in \mathbf{R}^{k \times p}$ 是稀疏表示矩阵。最后使用得到的字典 Ψ , 结合约束凸规划算法求解稀疏优化问题,表达式为

$$\begin{aligned} & \min \|s\|_1 \\ & \text{s.t. } \|\Phi \Psi s - b\|_2 \leq \epsilon, \Psi s \geq 0, \end{aligned} \quad (4)$$

式中: $\Phi \in \mathbf{R}^{m \times n}$ 即为所设计超表面阵列所对应的光谱传输矩阵; $b \in \mathbf{R}^{m \times 1}$ 为太赫兹波经过 36 个不同的超表面后得到的光强数据。由于光谱是天然非负的,因此要添加非负约束项。 Ψs 即为重建的光谱。

接下来采用仿真计算的方式对所开发算法进行验证。以 THz-TDS 所测得的参考光谱和乳糖的透射光谱为例,根据式(1)计算出其理论光强,然后加入 1%~10% 的随机噪声,再利用所开发的字典学习算法进行重建。计算归一化均方根误差的方法可以对光谱重建的质量进行定量表征,表达式为

$$R_{\text{err}} = \sqrt{\sum (S_i - S'_i)^2 / n}, \quad (5)$$

式中: S 和 S' 分别为按原始光谱最大值进行归一化的原始光谱和重建光谱; $n=201$ 为频点数。在每种噪声水平下,开展 100 次光谱计算重建,计算每次重建的均方根误差,取其平均值作为各噪声水平下的光谱重建误差,如图 4 所示。图 5(a)和图 5(b)分别为 1% 噪声水平下随机选取的某一次计算重建结果。重建结果和原始光谱吻合良好,证明了所提方法的有效性。从图 4 可以看出:在光强噪声较小时,所提方法可以获得较好的重建效果;随着噪声水平增加,光谱重建的误差也逐渐变大。在 5% 噪声水平下,参考光谱的重建误差约为 2%,而乳糖透射光谱的重建误差略大,约为 3%,这是因为所提方法所使用的训练集中包含大量式(2)计算到的无吸收峰频谱,强调了光谱的平滑性。因此对于平滑性更好、光谱特征更为简单的谱线,所提方法重建效果要优于对特征较为复杂的谱线的重建效果。通过在参考光谱中分别加入 2 个和 3 个高斯吸收峰,可以得到光谱特征更为复杂的谱线,利用与前述类似的方法计算在不同噪声水平下的重建误差,如图 4 中“2 peaks”和“3 peaks”曲线所示。其重建误差较乳糖吸收光谱的重建误差更大,但在 5% 噪声水平下,重建误差仍小于 3.5%。图 5(c)和图 5(d)为所提方法在 1% 噪声水平下的单次重建结果,可以看出,所提方法仍然可以有效地重现原光谱包含的特征峰,但重建光谱在峰尖处更为平滑,引入了较大的误差,这可以通过扩充光谱训练集、加入更多包含精细谱线结构的光谱来改进。

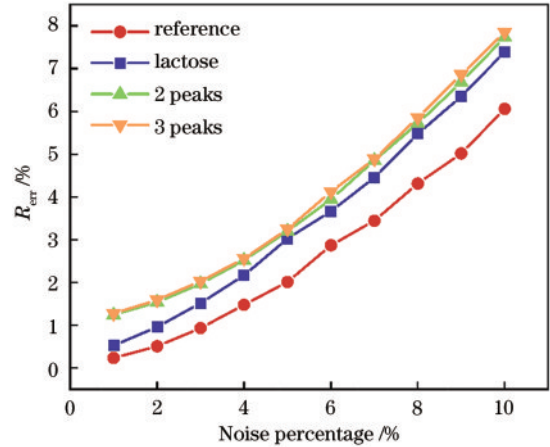


图 4 不同噪声水平下的光谱重建误差

Fig. 4 Spectral reconstruction error under different noise levels

从数学角度而言,本文所要解决光谱重建任务的本质为求解包含 36 个方程和 201 个未知数的欠定方程组。考虑到所设计超表面器件的传输谱具有较高的随机性,可认为该方程组的秩与方程数量相等,从而可以通过计算未知数与方程个数的比值来评估该欠定方程组的病态程度。所求解方程组的病态程度为 $201/36=5.6$,与目前已发表的一些可见光波段

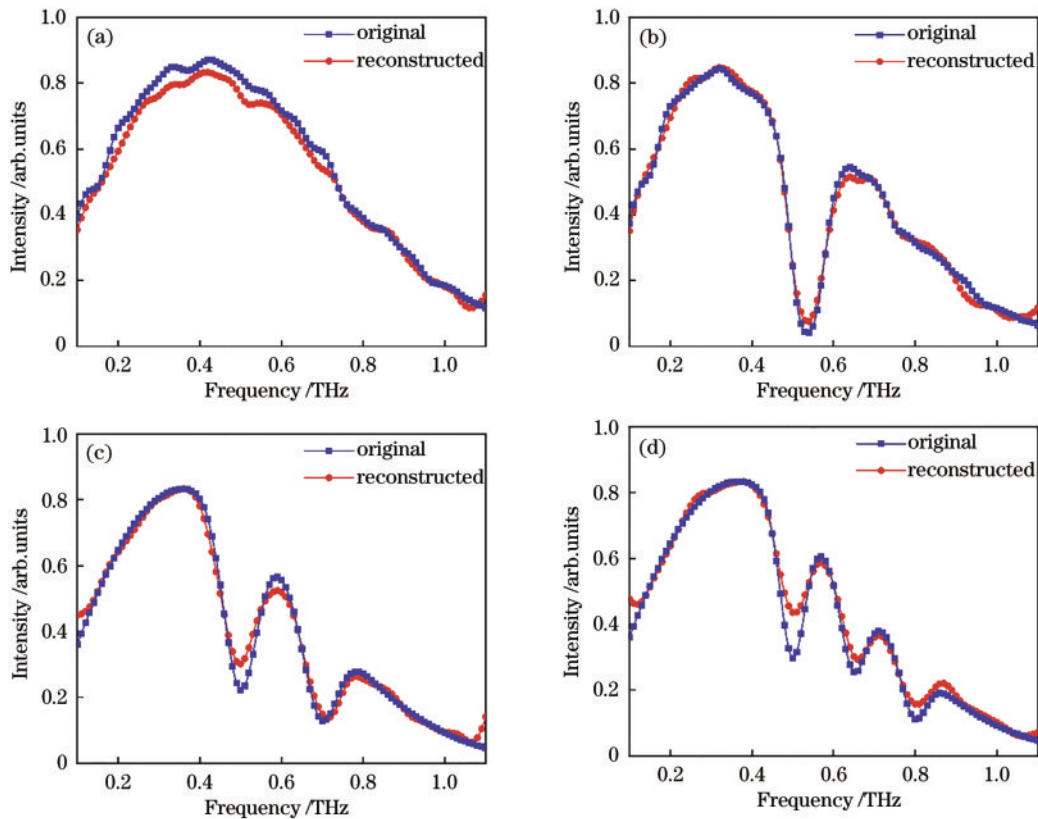


图5 所提字典学习算法的光谱重建结果。(a) THz-TDS的参考光谱;(b) 乳糖的吸收光谱;(c) 包含2个吸收峰的吸收光谱;(d) 包含3个吸收峰的吸收光谱

Fig. 5 Spectral reconstruction results of proposed dictionary learning algorithm. (a) Reference spectrum measured by THz-TDS; (b) absorption spectrum of lactose; (c) absorption spectrum containing two peaks; (d) absorption spectrum containing three peaks

相关工作的难度相当^[6,23]。如果减小频域采样间隔,则谱线中数据点个数将增加,方程组的病态程度也将随之提高,这对求解该方程组是不利的,将导致重建误差增大。换言之,在不降低光谱重建质量的前提下,如果想要增加频域采点数量,也应当相应地增加编码器的数量,从而将方程组的病态程度控制在算法可处理的范围内。例如,若使用72个编码器,则可将光谱采样间隔降低为2.5 GHz,这样谱线中将包含401个数据点,方程组的病态程度未增加,算法重建的效果也不会变差。理论上,通过不断增加编码器的个数,可以不断提高光谱重建的分辨率,但在实际中显然是不可能的。作为目前主流的太赫兹光谱测量方法,THz-TDS的分辨率由其时域测量长度决定。例如,在时域测量100 ps时,THz-TDS的频域分辨率为10 GHz。所提方法按照36个编码器和201个频点来设计,可以获得5 GHz的光谱分辨率,与THz-TDS的分辨能力相当。

5 结 论

作为一种新兴的光谱测量设备,基于光谱编码和计算重建的光谱仪结构简单、结构紧凑、适用性强,且无须构建光学延迟线,具有比传统太赫兹光谱测量手段更快的采集速度。设计了一种基于超表面阵列结构

的太赫兹光谱编码器件,利用超表面丰富灵活的光场调控能力,实现了对0.1~1.1 THz波段阵列式光谱编码。该方法的光谱采集速度仅取决于探测器的响应时间,有望实现对太赫兹光谱的瞬态测量。开发了基于字典学习的稀疏恢复算法,通过理论和仿真方法开展了太赫兹光谱重建实验。结果表明,所提光谱编码器件和重建算法可以较好地实现太赫兹光谱重建,对开发新型集成化太赫兹光谱仪具有重要意义。

参 考 文 献

- [1] Tonouchi M. Cutting-edge terahertz technology[J]. *Nature Photonics*, 2007, 1(2): 97-105.
- [2] Jepsen P U, Cooke D G, Koch M. Terahertz spectroscopy and imaging-modern techniques and applications[J]. *Laser & Photonics Reviews*, 2011, 5(1): 124-166.
- [3] Baxter J B, Guglietta G W. Terahertz spectroscopy[J]. *Analytical Chemistry*, 2011, 83(12): 4342-4368.
- [4] 陈猛, 范飞, 杨磊, 等. 机械可调谐太赫兹等离子体波导滤波器[J]. *中国激光*, 2016, 43(4): 0411001. Chen M, Fan F, Yang L, et al. Mechanically tunable terahertz plasmonic waveguide filter[J]. *Chinese Journal of Lasers*, 2016, 43(4): 0411001.
- [5] Hahn Y H, Fernandez Henry A, Fedor N, et al.

- Miniaturized spectrometers with a tunable van der Waals junction[J]. *Science*, 2022, 378(6617): 296-299.
- [6] Yang Z Y, Albrow-Owen T, Cui H X, et al. Single-nanowire spectrometers[J]. *Science*, 2019, 365(6457): 1017-1020.
- [7] Yuan S F, Naveh D, Watanabe K, et al. A wavelength-scale black phosphorus spectrometer[J]. *Nature Photonics*, 2021, 15(8): 601-607.
- [8] Xiong J A, Cai X S, Cui K Y, et al. Dynamic brain spectrum acquired by a real-time ultraspectral imaging chip with reconfigurable metasurfaces[J]. *Optica*, 2022, 9(5): 461-468.
- [9] Grischkowsky D, Keiding S, van Exter M, et al. Far-infrared time-domain spectroscopy with terahertz beams of dielectrics and semiconductors[J]. *Journal of the Optical Society of America B*, 1990, 7(10): 2006-2015.
- [10] Han P Y, Tani M, Usami M, et al. A direct comparison between terahertz time-domain spectroscopy and far-infrared Fourier transform spectroscopy[J]. *Journal of Applied Physics*, 2001, 89(4): 2357-2359.
- [11] Park S G, Melloch M R, Weiner A M. Analysis of terahertz waveforms measured by photoconductive and electrooptic sampling[J]. *IEEE Journal of Quantum Electronics*, 1999, 35(5): 810-819.
- [12] Klatt G, Gebbs R, Schäfer H, et al. High-resolution terahertz spectrometer[J]. *IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics*, 2011, 17(1): 159-168.
- [13] Jiang Z P, Zhang X C. Electro-optic measurement of THz field pulses with a chirped optical beam[J]. *Applied Physics Letters*, 1998, 72(16): 1945-1947.
- [14] Roussel E, Szwaj C, Evain C, et al. Phase diversity electro-optic sampling: a new approach to single-shot terahertz waveform recording[J]. *Light: Science & Applications*, 2022, 11: 14.
- [15] Drouin B J, Maiwald F W, Pearson J C. Application of cascaded frequency multiplication to molecular spectroscopy[J]. *Review of Scientific Instruments*, 2005, 76(9): 093113.
- [16] Kawase K, Ogawa Y, Watanabe Y, et al. Non-destructive terahertz imaging of illicit drugs using spectral fingerprints[J]. *Optics Express*, 2003, 11(20): 2549-2554.
- [17] Oberto L, Bisi M, Kazemipour A, et al. Measurement comparison among time-domain, FTIR and VNA-based spectrometers in the THz frequency range[J]. *Metrologia*, 2017, 54(1): 77-84.
- [18] Wang N, Cakmakyapan S, Lin Y J, et al. Room-temperature heterodyne terahertz detection with quantum-level sensitivity[J]. *Nature Astronomy*, 2019, 3(11): 977-982.
- [19] Yang Y, Burghoff D, Hayton D J, et al. Terahertz multiheterodyne spectroscopy using laser frequency combs[J]. *Optica*, 2016, 3(5): 499-502.
- [20] Headland D, Zatta R, Hillger P, et al. Terahertz spectroscope using CMOS camera and dispersive optics[J]. *IEEE Transactions on Terahertz Science and Technology*, 2020, 10(5): 513-523.
- [21] Endo A, Karatsu K, Laguna A P, et al. Wideband on-chip terahertz spectrometer based on a superconducting filterbank[J]. *Journal of Astronomical Telescopes, Instruments, and Systems*, 2019, 5(3): 035004.
- [22] Lee Y S. Principles of terahertz science and technology [M]. New York: Springer, 2009.
- [23] Wang Z, Yi S, Chen A, et al. Single-shot on-chip spectral sensors based on photonic crystal slabs[J]. *Nature Communications*, 2019, 10: 1020.