

## Kamers-Kronig 关系在反射太赫兹时域光谱测量中的应用

蔡 禾<sup>1,2</sup>, 张 景<sup>3</sup>, 郑 岩<sup>1</sup>, 孙金海<sup>1</sup>, 张旭涛<sup>1</sup>, 李粮生<sup>1</sup>, 刘永强<sup>1</sup>, 殷红成<sup>1</sup>

1. 北京环境特性研究所, 北京 100854
2. 电磁散射重点实验室, 北京 100854
3. 北京电子工程总体研究所, 北京 100854

**摘 要** 太赫兹时域光谱技术是材料介电参数测量的重要方法, 是材料研究、鉴别和分析的重要工具。太赫兹时域光谱技术是一种太赫兹频段的相干探测技术, 可以同时获得太赫兹波的幅度和相位信息, 通过透射测量、反射测量可获得材料的复透射率或复反射率来反演材料的电磁参数。在实际中, 大多数被测材料太赫兹波无法穿透, 或者不满足透射材料参数反演需要的弱吸收近似, 因此反射测量更具应用价值。在已发表的研究结果中, 研究人员仍普遍采用透射测量的方案, 很少见使用反射测量方案获取材料参数。究其原因, 在反射测量时, 由于样品和参考板位置的放置误差很难消除, 从而导致无法准确提取反射相位。将光学领域广泛使用的 Kamers-Kronig 关系应用于太赫兹时域光谱系统反射测量中, 以解决反射测量中无法准确获得相位信息从而无法提取介电参数的问题。为了验证 Kamers-Kronig 关系的准确性, 一方面, 通过透射、反射方法分别测量硅材料的复透射率、复反射率并反演了其材料参数, 两者的反演结果一致性较好。另一方面, 利用同一组硅的反射测量数据分别用 Kamers-Kronig 关系和最大熵法对其材料参数进行反演, 两种处理方法也可以实现相互印证, 进一步确保了提取数据的可靠性。对 Kamers-Kronig 关系和最大熵法所取得的结果进行了对比讨论, 通过 Kamers-Kronig 关系和最大熵法获得的折射率、消光系数以及复介电参数结果一致性较好, 且基于 Kamers-Kronig 反演了一种精神药物的吸收谱, 与透射结果做了比对。结果表明, Kamers-Kronig 关系非常适合提取材料光学参数和吸收谱, 且相比最大熵法其普适性更强, 甚至对于无法获取相位信息的非相干测量系统依然适用, 但该方法需要整个频段的反射率幅度信息, 对于没有测量的频率需要进行外推, 对于反射率随频率变化不大的物质更加适用。该研究成果对于利用反射式太赫兹时域光谱系统获取材料太赫兹波段的光学参数提供了一种有效方法, 可解决绝大多数情况下反射测量参数提取问题, 对太赫兹时域光谱技术的实际应用具有重要意义。

**关键词** 太赫兹; Kamers-Kronig 关系; 反射; 材料参数反演

**中图分类号:** O433.4 **文献标识码:** A **DOI:** 10.3964/j.issn.1000-0593(2021)01-0105-06

### 引 言

太赫兹辐射指的是频率在 0.1~10 THz(波长在 3 mm~30  $\mu\text{m}$ )之间的电磁波, 其波段处于微波和红外之间, 其能量介于电子和光子之间, 属于远红外电磁辐射范畴。太赫兹技术在物质鉴定、生物医药检测、无损检测、材料研究以及航空航天领域都有独特的应用优势。太赫兹技术的发展很大程度上离不开太赫兹时域光谱技术, 太赫兹时域光谱技术是一种相干探测技术, 已经成为了太赫兹领域研究必不可少的测量手段, 通过太赫兹宽带脉冲对样品的透射、反射波形的提

取, 可获得被测物质的光学参数。

已往绝大多数研究人员普遍采用透射测量方法, 而透射测量具有一定局限性, 只有弱吸收、低反射的材料( $n \gg k$ )更适合透射测量方案<sup>[1]</sup>, 大多情况下, 往往面临待测材料样品无法被太赫兹波穿透或者材料反射了绝大部分入射能量, 透射能量很弱, 这样的材料就更适合通过反射测量来获取其介电参数。太赫兹波段, 反射测量一直无法普及, 最重要的原因是太赫兹波长较短, 准确提取相位信息存在一定的困难。要测准获得反射相位信息, 需要测量材料反射率时放置样品板的前表面与放置参考板前表面严格一致, 但对于只有 0.3 mm(1 THz)的波长而言, 定位精度至少达到 0.003 mm 才能

收稿日期: 2019-12-02, 修订日期: 2020-04-06

基金项目: 国家自然科学基金项目(61490695)资助

作者简介: 蔡 禾, 1985 年生, 北京环境特性研究所电磁散射重点实验室工程师 e-mail: 18510165603@126.com

保证相位精度  $3.6^\circ$ ，这是人工放置样品无法达到的精度。因此，尽管反射式测量具有更广泛的适用性和更高应用价值，上述问题限制了反射测量的普及。但这一现状正在逐渐改变，一些修正太赫兹反射谱相位的方法已出现<sup>[2-4]</sup>。

研究了通过太赫兹时域光谱反射测量提取材料参数的方法，引入光学中常用的 Kramers-Kronig 关系应用在太赫兹波段，尝试恢复正确的反射相位信息，为验证 Kramers-Kronig 关系在相位恢复上的准确性，将提取常见材料硅的光学常数、介电参数，与另一种反射相位恢复方法最大熵法以及透射测量的结果作了比较，并利用反射测量获取了一种具有明显吸收峰的精神类药品的吸收谱，验证了该方法同样适合处理材料的反射吸收谱数据。本文也对 Kramers-Kronig 关系在材料参数反演时的适用范围、应用特点进行了讨论和总结。

## 1 反射测量相位恢复及材料参数提取方法

### 1.1 Kamers-kronig 关系提取材料参数

Kamers-Kronig 关系最早由克拉莫斯(Kramers)和克朗尼格(Kronig)提出，之后越来越引起科学工作者的兴趣，并且渐渐被用于各种实际关系问题中，大部分的测量光学常数的方法都对材料的形态或者是材料的类型都有一定的要求，有的方法只是用于一定状态的材料或者只适用于某一种特定类型的材料，而 Kamers-Kronig 关系分析方法的魅力还在与它适用于各种不同形态、不同类型的材料。从无机到有机，从固体到液体，从体材料到薄膜材料，从 Kamers-Kronig 关系的应用范围就可以看出其在光学测量应用中的重要性<sup>[5-6]</sup>。

传统的太赫兹时域光谱技术在反射测量时，无法保证参考板和样品表面严格处于同一位置，而太赫兹波长较短，微小的放置偏差将导致相位相差数个周期，从而导致了反演太赫兹频段材料介电参数失败或者错误。如何准获得相位信息，是基于太赫兹时域光谱技术提取材料光学参数的关键问题，如果可以直接得到相移  $\theta$  和反射率  $R$  之间的关系，就可通过一次性测量反射谱获得材料的折射率  $n(\omega)$  和消光系数  $k(\omega)$  以及复介电常数，而 Kamers-Kronig 关系正是给出了反射系数的振幅和相移之间的表达式<sup>[9-10]</sup>

$$\theta_\omega = \frac{\omega}{\pi} \int_0^\infty \frac{\ln R(\omega') - \ln R(\omega)}{\omega^2 - \omega'^2} d\omega' \quad (1)$$

有了准确的反射相位，根据特定偏振，特定反射角可计算材料的复折射率

$$\tilde{n} = \sqrt{\frac{1}{2M(\omega)} + \sqrt{W(\omega)} \exp\left[-j\varphi\left(\frac{\omega}{2}\right)\right]} \quad (2)$$

中间变量[见式(2a)和式(2b)]

$$M(\omega) = \left[\frac{1-R(\omega)}{1+R(\omega)}\right]^2 \cos\varphi_1 \quad (2a)$$

$$W(\omega) \exp[-j\theta(\omega)] = \frac{1}{4M(\omega)} - \frac{\sin^2\varphi_1}{M(\omega)} \quad (2b)$$

式(2a)和式(2b)中  $\varphi_1$  为入射角， $M(\omega)$  和  $W(\omega)$  均为中间计算变量；在垂直反射的情况下可获得简洁的形式<sup>[7]</sup>

$$n(\omega) = \frac{1-R^2(\omega)}{R^2(\omega) - 2R(\omega)\cos\theta(\omega) + 1} \quad (3)$$

$$k(\omega) = \frac{2R(\omega)\sin\theta(\omega)}{R^2(\omega) - 2R(\omega)\cos\theta(\omega) + 1} \quad (4)$$

根据材料的复折射率  $n(\omega)$  和  $k(\omega)$ ，可获得材料的介电参数以及吸收系数。

$$\epsilon_r = n^2(\omega) - k^2(\omega) \quad (5)$$

$$\epsilon_i = 2n(\omega)k(\omega) \quad (6)$$

$$\alpha = \frac{2\omega k}{c} \quad (7)$$

应用 Kamers-Kronig 关系需要注意两个问题：积分范围与奇点的处理。Kamers-Kronig 关系中反射率和相移的关系式(1)中，频率积分范围从零到无穷的，而测量频率范围是有限范围 $[\omega_1, \omega_2]$ ，在高端和低端都需要近似来补足，该积分可以分为三部分分别计算

$$\theta_\omega = \frac{\omega}{\pi} \left[ \int_0^{\omega_1} \frac{\ln R(\omega') - \ln R(\omega)}{\omega^2 - \omega'^2} d\omega' + \int_{\omega_1}^{\omega_2} \frac{\ln R(\omega') - \ln R(\omega)}{\omega^2 - \omega'^2} d\omega' + \int_{\omega_2}^\infty \frac{\ln R(\omega') - \ln R(\omega)}{\omega^2 - \omega'^2} d\omega' \right] \quad (8)$$

在测量频率范围外无法进行积分，需要采用端点优化的处理方法，对于不同情况可以采用不同的优化方法，而最常用是有常数外推法。对于反射光谱在高频端或者低频端变化不明显的被测物，未知频段的反射率基本可以当成是常数；即在 $[0, \omega_1]$ 范围内，认为其反射率  $R_1 = R(\omega_1)$ 。对于高频部分 $[\omega_2, \infty]$ ，认为其反射率为恒定值  $R_2 = R(\omega_2)$ 。因此，基于 Kamers-Kronig 关系反演介电参数时，对于两端反射率随频率变化不明显的材料计算结果将会更加准确，测量频率范围越宽，反演结果将会越准确。

在积分过程中， $\omega' = \omega$  时出现奇点，该点的值可以用附近的值代替或者该点的极限值代替<sup>[9]</sup>，根据洛必达法则有

$$\lim_{\omega' \rightarrow \omega} \frac{\ln R(\omega') - \ln R(\omega)}{\omega^2 - \omega'^2} = -\frac{1}{2\omega R(\omega)} \frac{dR}{d\omega} \Big|_\omega \quad (9)$$

### 1.2 最大熵法修复相位提取材料参数

最大熵法作为一个相位恢复过程，在线性和非线性光学光谱中的适用性已得到验证。香农奠定了子信息技术中作为基础的熵的一般概念。Vartiainen 为了解决光学反射光谱的相位恢复问题，引入了这种方法。最大熵一个主要优势是不需要测定在整个电磁波谱的反射，而是旨在感兴趣的区域测量。然而，除了反射数据，在最大熵的框架内通常需要样品在离散频率处的光学特性信息，以确定其复折射率。

这些在固定点处的信息通常包含样品的复折射率的实部和虚部，由在有限光谱范围内至少一个频点确定。在实际中，最大熵相位恢复过程包括由以下公式(具体数学推导可以在文献[2]中找到)得到的反射率  $R(\nu)$ ，即

$$R(\nu) = \frac{|\zeta|^2}{\left|1 + \sum_{m=1}^M a_m \exp(-i2\pi m\nu)\right|^2} \quad (10)$$

式中归一化角频率  $\nu$  定义为

$$\nu = \frac{\omega - \omega_a}{\omega_b - \omega_a} \quad (11)$$

未知的最大熵系数  $a_m$  和  $|\zeta|$  是测量值的相关函数，可以从一

组线性尤利-沃克方程获得, 即

$$\sum_{m=0}^M a_m (M-m) = \begin{cases} |\zeta|^2 & n=0 \\ 0 & n=1, \dots, M \end{cases} \quad (12)$$

式中相关  $C(t)$  通过反射的傅里叶变换获得, 即

$$C(t) = \int_0^1 R(\nu) \exp(i2\pi\nu t) d\nu \quad (13)$$

相位恢复通过使用复反射率来完成

$$r(\nu) = \frac{|\zeta| \exp[-i\phi(\nu)]}{1 + \sum_{m=1}^M a_m \exp(-i2\pi m\nu)} \quad (14)$$

式(14)中, 相位误差  $\phi$  是唯一一个不能通过测量  $R(\nu)$  获得的量。这一问题反映到最大熵相位恢复中表现为找到真正的相位  $\phi$  被简化为找到相位误差  $\phi$ , 它与真正给的相位相比通常是一个更加简单的函数。关于  $r(\nu)$  的额外信息, 在  $L+1$  个离散归一化频点  $V_i$  处决定, 用于多项式估算相位误差, 即

$$\phi = \sum_{l=0}^L B_l \nu^l \quad (15)$$

式中, 相位误差通常是一个缓慢变化的函数, 在较优情况下只需要一个或两个固定点来确定, 即此时多项式的阶数很低。

### 1.3 实验系统

使用了两套系统, 美国 API 公司生产的 T-ray 5000 型光纤耦合的商用太赫兹系统, 作为本研究的主要测量工具如图 1 所示, 将发射器和接收器置于一个半圆形轨道, 使其能够实现多角度的反射测量, 所有反射测量实验均基于  $15^\circ$  入射角进行。系统工作频率范围  $0.05 \sim 3$  THz, 频谱分辨率最高 1.5 GHz。另外采用日本生产的 Advantest 的 TAS7500 型太赫兹时域光谱系统, 基于 1550 nm 激光激发切伦科夫辐射源和光电天线的探测机制, 可实现  $0.5 \sim 7$  THz 频率分辨率 7.6 GHz。图 2 为两套系统频谱比对, 可以看到 API 的 T-RAY 5000 型的能量分布主要集中在低频, 2 THz 以内信噪比较高, 而 Advantest 的 TAS7500 能量主要集中在中高频, 在  $1.5 \sim 6.5$  THz 以内具有较高的信噪比。

## 2 结果与讨论

基于反射测量以及 Kamers-Kronig 关系对太赫兹频段常用的半导体材料硅的光学参数进行提取, 并与另一种反射处理方法最大熵法以及透射测量方法进行比对, 以验证应用 Kamers-Kronig 关系反演材料光学参数的准确性。选择高阻硅片材是因为硅在太赫兹频段常作为半反半透材料使用, 不仅能够反射太赫兹波, 同时有较低的吸收, 适合透射测量, 便于结果比对。

### 2.1 相位恢复效果比对

通过 Kamers-Kronig 关系和最大熵方法都可以实现对相位偏差的恢复, 虽然对相位进行恢复原理不太一样, 但能够达到异曲同工的效果。图 3 为利用同一硅材料的反射测量数据, 通过 Kamers-Kronig 关系和最大熵方法对相位进行恢复并与实验测量相位进行比对; 可以看出实验直接测量所得的相位斜率较大, 而通过两种方法恢复的相位更加平缓且基本一致。如果认为通过两种方法恢复的相位相当于更接近真实

情况, 实验测量的相位相对真实相位都存在一定的偏离, 且这个偏离值随着频率的提升而升高是合理的, 因为对于固定的样品放置偏差, 波长越短, 相位偏差将越大。由于系统发射、接收天线的频谱能量主要集中在低频部分, 1.5 THz 以上的高频部分的辐射功率较弱, 经硅片只能反射小部分, 进一步的削弱了信噪比, 因此相位高频部分存在一定的相位抖动。取图 3 中 1 THz 处的相位误差并参考硅在太赫兹频段的折射率, 可估算出样品放置误差约 0.014 mm。

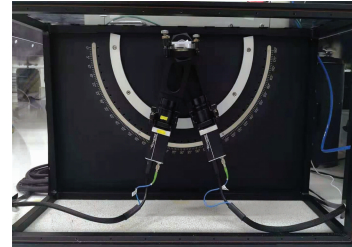


图 1 光纤耦合式介电参数测量系统

Fig. 1 Fiber coupled TDS system

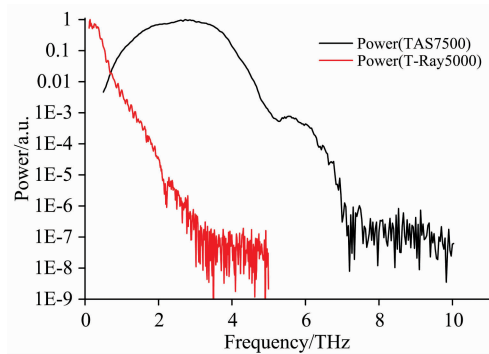


图 2 两套太赫兹时域光谱系统频率-能量分布曲线

Fig. 2 Energy distribution curves of two TDS system

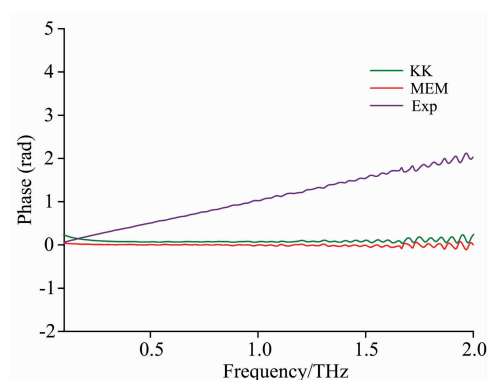


图 3 通过 Kamers-Kronig 关系、MEM 方法恢复的相位

Fig. 3 Phase results recovered by Kamers-Kronig relation and MEM method

### 2.2 材料参数恢复结果比对

图 4 为硅片的材料参数反演结果, 包括了透射、反射测量反演的折射率(a)、消光系数(b)、复折射率实部(c)、虚部(d), 从材料参数反演结果分析, 通过透射测量、反射测量反演的硅的折射率略有不同, 都在  $3.2 \sim 3.4$  附近, 透射测量反

演的硅材料的折射率在 3.4 水平, 而反射测量分别通过最大熵(MEM)以及(Kamers-Kronig)关系反演硅的折射率略低, 两种反射处理方法都使用了同一次测量数据, 细微的差异主要来自于两种不同的相位恢复方法。Kamers-Kronig 关系反

演方法更依赖于测量频段曲线端点的数据, 通常采用线性外推, 外推值并非真实反射率, 造成了与实际值存在一定差异, MEM 法反演的结果更依赖于最大熵法谱估计技术的准确度。

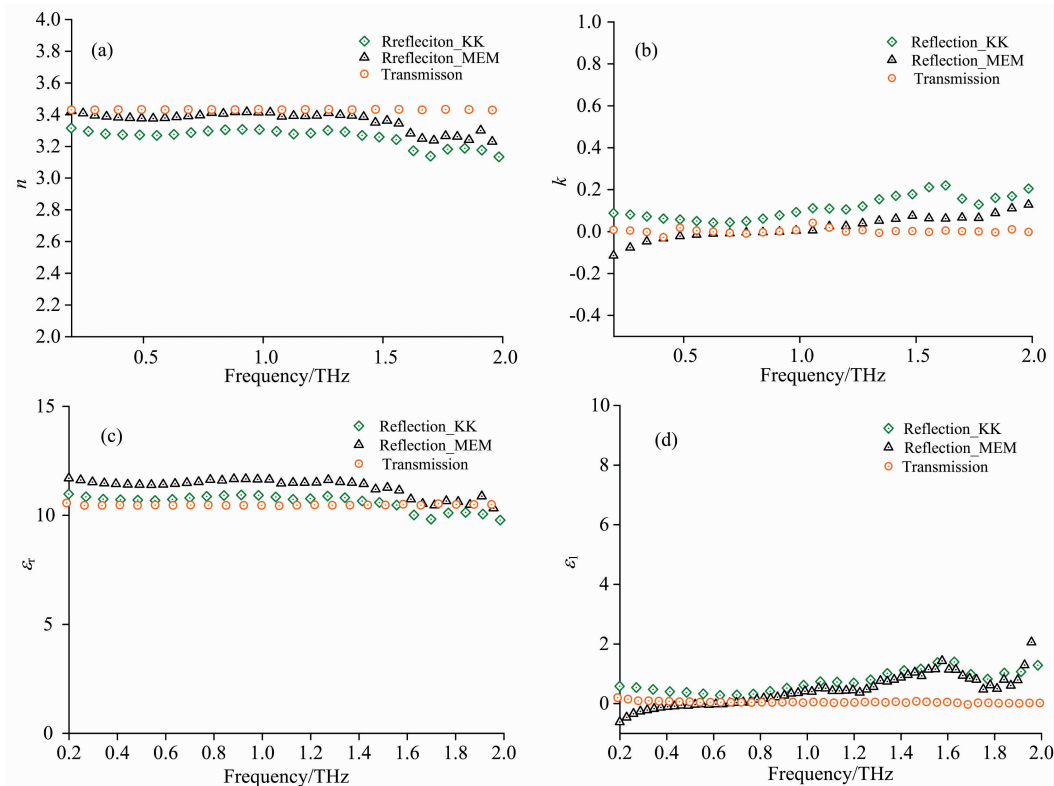


图 4 硅片的材料参数反演结果

(a): 折射率; (b): 消光系数  $k$ ; (c): 介电常数实部; (d): 介电常数虚部

Fig. 4 Inversion result of silicon wafer's material parameters

(a): The refractive index; (b): Extinction coefficient; (c): Real part of permittivity; (d): Imaginary part of permittivity

### 2.3 吸收谱的提取

基于反射测量提取吸收谱一直是时域光谱需要克服的困难之一, 基于 Kamers-Kronig 关系同样可以用于吸收谱提取。为了验证这一过程, 测量了一种精神类药物卡马西平的吸收谱, 之所以选择该药品是因为其在 1.23 THz 也有尖锐的吸收峰, 在 2 THz 以内整体吸收较弱, 同时又有一定的反射, 既可以透射测量也可反射测量, 方便两种方法进行比较。样品为粉末状, 样品制备时在卡马西平样品中掺了没有明显吸收的聚乙烯粉末增加粘性, 压片后放入系统进行测量。如图 5 所示, 分别通过透射、反射方法对样片进行了测试, 并计算了其吸收谱, 幅度进行了归一化以便比较。虽然透射可获得 2 THz 的吸收谱, 但由于反射谱高频反射信号较弱<sup>[10]</sup>, 吸收谱只能计算到 1.5 THz, 通过 Kamers-Kronig 关系和最大熵(MEM)处理的反射测量数据在 1.24 THz 处的吸收峰相互吻合较好, 且与透射测量吸收峰位与有些研究结果一致。由于反射测量采用 Kamers-Kronig 变换时, 其相位稳定度完全依赖反射率的积分, 因此计算出的相位曲线抖动较大。

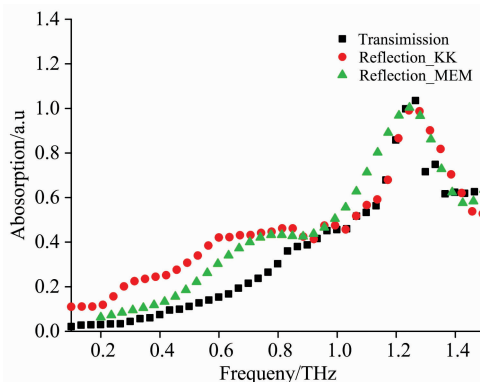


图 5 精神类药物卡马西平的吸收谱测量

Fig. 5 The absorption spectrum of carbamazepine

### 2.4 两种方法的使用范围讨论

利用 Kamers-Kronig 关系反演材料参数的方法, 理论上若能获得全频段的反射率的情况下, 反演结果才足够准确, 但对于实际情况, 只能测量有限频段的反射率, 其余部分采取外推近似的方法, 因此会引入误差。为了评估拓宽测量频

段带来的多大的改善效果,分别采用 API(0.1~2 THz)和 Advantest(1~4.5 THz) 两套系统的测量其反射率,再利用 Kamers-Kronig 关系对反射率的拼接结果进行反演获得硅在 0.1~4.5 THz 的材料参数,结果如图 6 所示,从结果可以看出,拓宽测量频率对材料的光学参数影响并不大。即扩展测量频率范围对于反射率在整个频段较平坦的材料适用,测量更宽的频带必要性不大。

Kamers-Kronig 关系和 MEM 的适用范围有些区别,

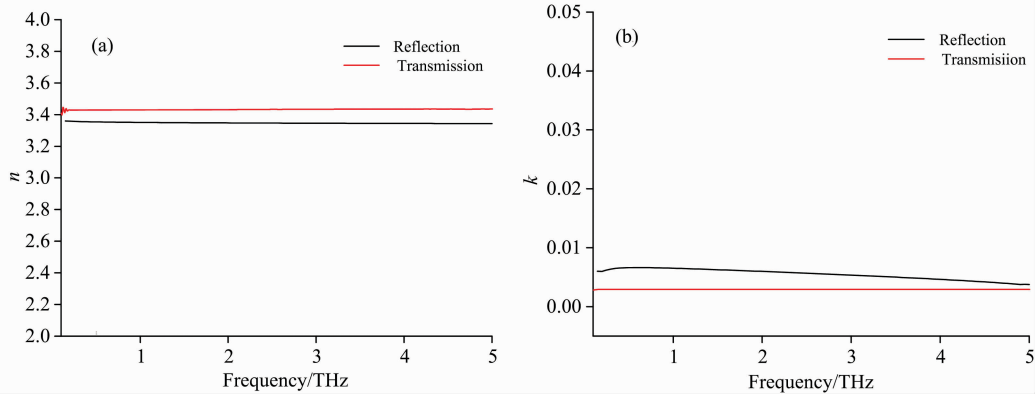


图 6 透射和反射法测量的硅折射率和消光系数比较

(a): 折射率; (b): 消光系数

Fig. 6 Comparison of refractive index and extinction coefficient of silicon by transmission and reflection measurement

(a): The refractive index; (b): Extinction coefficient

值得注意的是,无论是 Kamers-Kronig 关系法还是 MEM 方法提取材料参数时都会出现较大的噪声,原因是在相位恢复过程中都用到了反射率, Kamers-Kronig 关系法的相位恢复利用了反射率的积分, MEM 法通过计算相位误差时也用到了反射率,即幅度噪声传递到了相位中,而透射测量中,相位由直接测量的时域波形变换而得,因此用, Kamers-Kronig 关系和 MEM 法处理反射测量数据时,处理的材料参数的抖动将高于透射测量。因此用以上两种反射处理方法时,如信噪比不足够高的情况下,对数据进行一定的平滑才能得到较好的结果。

### 3 结 论

为了解决反射式太赫兹时域光谱数据的准确提取问题,将 Kamers-Kronig 关系引入太赫兹时域光谱系统的反射谱处理过程,该方法能够较好地恢复反射相位信息从而用于材料

Kamers-Kronig 关系的优势是只需要获得材料的反射率幅度,恢复相位的过程中无需借助测量的相位进行,因此该方法不仅可以用于太赫兹时域光谱技术,也适用于如傅里叶变换光谱仪 (FTIR) 等非相干测量装置。而 MEM 方法的优势是无需反射率外推,更适合相干测量使用。此外, Kamers-Kronig 关系适用于反射率在测量频率范围内变化不大的物质。反射率在全频段浮动较大的物质,会影响相位的恢复精度,从而影响材料反演材料参数的精度。

复折射率、复介电常数、吸收谱等反演,该方法与另一种反射测量处理方法-最大熵法以及透射测量得到的结果都能够实现相互印证,证明了该方法提取材料参数具有较好的准确性。该方法有效的解决了长久以来时域光谱技术只应用于透射测量的技术困境,使太赫兹时域光谱测量更具实用价值。 Kamers-Kronig 关系非常适合处理太赫兹波无法穿透的高吸收材料或者对太赫兹波具有高反射特性的材料参数提取过程,不仅可应用于相干测量,也适用于不能获得相位信息的非相干测量,如 FTIR 测量数据。 Kamers-Kronig 关系适用于反射率在测量频率范围内变化不大的物质,反射率在全频段波动较大的物质,会影响反演材料参数的精度。本研究成果对于利用反射式太赫兹时域光谱系统获取材料太赫兹波段的光学参数提供了一种有效方法,解决了反射测量无法准确提取材料参数的困境,使太赫兹时域光谱技术可满足更宽的应用范围。

### References

- [ 1 ] Jin Yun-Sik, Kim Geun-Ju, Jeon Seok-Gy. Journal of the Korean Physical Society, 2006, 49(2): 513.
- [ 2 ] Erik M Vartiainen, Yusuke Ino, Ryo Shimano, et al. Journal of Applied Physics, 2004, 96(8): 4171.
- [ 3 ] Kyujin Choi, Taeyoon Hong, Kyung Ik Sim, et al. Journal of Applied Physics, 2014, 115(2): 023105.
- [ 4 ] Norbert Palka, Mateusz Szala. Journal of Infrared, Millimeter and Terahertz Waves, 2016, 37(10): 977.
- [ 5 ] Hamid Entezar Mehdi, Parisa Esmaili, Mehdi Nasiri Sarvi. Optical and Quantum Electronics, 2018, 50(9): 344.
- [ 6 ] Esmaeil Pakizeh, Mahmood Moradi. International Journal of Modern Physics B, 2018, 32(8): 1850096.
- [ 7 ] Zhang Z M, Choi B I, Flik M I. Journal of the Optical Society of America B-Optical Physics, 1994, 11(11): 2252.

- [ 8 ] Roessler D M. *British Journal of Applied Physics*, 1965, 16(8): 1119.
- [ 9 ] ZHANG Zheng, HUANG Yu, JIN Chen, et al(张 正, 黄 玉, 金 晨, 等). *Journal of Beijing Normal University · Natural Science Edition*(北京师范大学学报·自然科学版), 2017, 53(3): 272.
- [10] Peter Uhd Jepsen, Bernd M Fischer. *Optics Letters*, 2005, 30(1): 29.

## The Application of Kamers-Kronig Relation in Time Domain Spectral Measurement of Reflection Terahertz

CAI He<sup>1,2</sup>, ZHANG Jing<sup>3</sup>, ZHENG Yan<sup>1</sup>, SUN Jin-hai<sup>1</sup>, ZHANG Xu-tao<sup>1</sup>, LI Liang-sheng<sup>1</sup>, LIU Yong-qiang<sup>1</sup>, YIN Hong-cheng<sup>1</sup>

1. Beijing Institute of Environment Features, Beijing 100854, China

2. Science and Technology on Electromagnetic Scattering Laboratory, Beijing 100854, China

3. Beijing Institute of Electronic System Engineering, Beijing 100854, China

**Abstract** Terahertz timedomain spectroscopy (THzTDS) technology is extremely significant in measuring the dielectric parameters of materials in the Terahertz band, and it is also important for analyzation and identification of these materials. The THzTDS technology is based on coherent detection, which can measure the amplitude and phase of terahertz wave simultaneously. The electromagnetic parameters of materials can be retrieved from the complex transmittance or complex reflectivity which measured by transmission or reflection of the materials. In most practical application, the refractive index and extinction coefficient cannot be obtained when materials are hard to penetrated by THz wave, and the weak absorption approximation condition cannot be met in the measurement. Therefore, reflection measurement has more application value in this field. However, in the published research results, researchers still generally use the transmission measurement scheme and rarely use the reflection scheme to obtain the material parameters. The reason is that the position error of the sample in the reflection measurement is difficult to eliminate, so it is impossible to extract the reflection phase accurately. In this paper, the Kamers-Kronig relation, which is widely used in the field of optics, is applied to the reflection measurement of terahertz timedomain spectral system to solve the problem that the phase information cannot be obtained accurately and the dielectric parameters cannot be extracted correctly. In order to verify the accuracy of the Kamers-Kronig relationship, on the one hand, the complex transmittance and reflectivity of silicon materials are measured by transmission detection and reflection detection respectively, and then the material parameters are inverted. The results indicated that they have a good consistency. On the other hand, Kamers-Kronig relation and maximum entropy method(MEM) are used to inverse the material parameters of the silicon reflection measurement data, and these two methods can also agree with each other, which ensuring the reliability of the extracted data. Finally, the results obtained by the Kamers-Kronig relation and the maximum entropy method are compared and discussed in this paper, respectively. Compared with the maximum entropy method, The Kamers-Kronig relation is more applicable in the extraction of material parameters and absorption spectrum. Therefore, the Kamers-Kronig relation is not only suitable for the coherent measurement, but also for the incoherent measurement in which the phase information cannot obtain. However, the method needs the reflectivity amplitude information of the whole frequency band, the frequency which we can't measure needs to be extrapolated, so it is more suitable for the matter whose reflectivity changes little with the frequency. This paper provides an effective method for obtaining the terahertz optical parameters of materials by using the reflection THzTDS system, which can solve the problem of extracting the reflection measurement parameters in the vast number of cases. It is of great significance to the application of Terahertz Technology.

**Keywords** Terahertz; Kamers-kronig relationship; Reflection; Material parameters

(Received Dec. 2, 2019; accepted Apr. 6, 2020)