

文章编号:1001-5078(2009)08-0884-03

· 光电技术与系统 ·

太赫兹光谱分析中用误差理论确定样品厚度的研究

王秀敏

(北京建筑工程学院理学院,北京 100044)

摘要:太赫兹($1\text{ THz} = 10^{12}\text{ Hz}$)时域光谱作为一种新型的光谱探测技术,被广泛用来研究各种材料在远红外频谱范围内的光学特性。在太赫兹透射光谱分析中,多数情况下需要知道被测样品的厚度,才能准确提取样品的光学参数。然而,有些样品的厚度不宜测量准确甚至不能直接测量。文中介绍和讨论了利用误差理论给出了准确确定样品厚度的同时提取样品的太赫兹波段光学参数的方法,该方法可以广泛应用于该类样品的太赫兹透射谱分析过程。

关键词:太赫兹光谱;太赫兹波段光学参数;样品厚度;误差理论

中图分类号:0433.4 **文献标识码:**A

Determine sample thickness in the process of terahertz spectrum analysis using error theory

WANG Xiu-min

(Science School, Beijing University of Civil Engineering and Architecture, Beijing 100044, China)

Abstract: Terahertz ($1\text{ THz} = 10^{12}\text{ Hz}$) time-domain spectroscopy as a new type of spectrum detection technology, is widely used to study a variety of materials in the far-infrared spectral range of the optical properties. In most cases, it needs to know the thickness of the sample in order to accurately extract the optical parameters of samples in THz transmission spectral analysis. However, some of the thickness of the sample can not be measured with accuracy even can not be measured directly. According to error theory, we propose a method to determine the thickness of the sample accurately, while sample's THz band optical parameters of method can be extracted. It can be widely used in such samples' THz spectrum analysis.

Key words: THz spectroscopy; THz-band optical parameters; sample thickness; error theory

1 引言

太赫兹射线通常指的是频率在(0.1~10) THz(波长在30 μm ~3 mm)之间的电磁波,其波段在微波和红外光之间,属于远红外波段,占其中的很大一部分。但是在20世纪80年代中期以前,由于缺乏有效的产生方法和检测手段,科学家对于该波段电磁辐射性质的了解非常有限。近十几年来,随着超快激光技术的迅速发展(如用克尔透镜锁模钛宝石激光器可以产生短至5 fs的激光脉冲),为太赫兹脉冲的产生提供了稳定、可靠的激发光源,使太赫兹辐射的机理研究、检测技术和应用技术得到了蓬勃发展^[1]。曾经被称为“太赫兹空隙”的这一波段已经

迅速形成一门新的极具活力的研究领域,以至于在2004年被美国《技术评论》杂志评为科学研究和发展的九个开拓性新兴领域之一^[2]。太赫兹电磁波非常重要,因为在这一波段里包含丰富的物理和化学过程。同时,太赫兹的优点又决定了它在很多方面可以成为傅里叶变换红外光谱技术和X射线技术的互补技术。太赫兹电磁波在很多基础研究领域、工业应用及军事应用领域中有相当重要的应用。随着太赫兹技术的发展,太赫兹技术的应用领

作者简介:王秀敏(1974-),女,硕士,讲师,研究方向为太赫兹时域谱应用研究。E-mail:wang_xiu_min@126.com

收稿日期:2009-01-09;**修订日期:**2009-04-22

域也在不断地拓宽。它在生物学、医学、微电子学、农业及其他领域还有很大的应用潜力^[3-9]。

太赫兹辐射成像和光谱分析的应用中,太赫兹的TDS(Time Domain Spectroscopy)作为一种新型的光谱探测技术,可以用来研究样品在太赫兹范围内的一些性质。在太赫兹光谱分析中,有效提取样品的光学参数具有极其重要的意义,尤其是光学参数 n, k 随光学频率而变化的情况,但是许多光学常数手册中并没有给太赫兹范围的数据。在太赫兹光谱分析中,多数情况下需要知道被测样品的厚度,才能准确提取样品的光学参数。然而,有些样品的厚度不宜测量准确甚至不能直接测量。本文根据误差理论,利用样品的太赫兹透射谱分析,在提取样品太赫兹波段的折射率谱和吸收系数谱的过程中准确确定出样品的厚度,该方法可以更精确地提取出样品的太赫兹波段光学参数,具有较大的实际意义。

2 太赫兹时域光谱透射测量时样品的理论模型及传输函数

假设太赫兹时域系统是线性不变系统,样品是均匀的平面介质,如图1所示,这是常用的样品模型^[10-12]。通过一系列的推导过程,可知太赫兹对于样品的透射传输函数为^[10]:

$$\hat{H}(\omega) = \frac{E_{\text{complete}}(\omega)}{E_{\text{ref}}(\omega)} = \frac{4\tilde{n}_{\text{air}}(\omega)\tilde{n}_{\text{sample}}(\omega)\cos\theta\cos\beta}{[\tilde{n}_{\text{air}}(\omega)\cos\beta + \tilde{n}_{\text{sample}}(\omega)\cos\theta]^2} \times \left(\exp\left\{ \frac{-j[d\tilde{n}_{\text{sample}}(\omega) - m\tilde{n}_{\text{air}}(\omega)]\omega}{c} \right\} \right) FP(\omega) \quad (1)$$

其中, $FP(\omega) = \frac{1 - r_{10}^{2p+2} p_{\text{sample}}^{2p+2}(\omega, d)}{1 - r_{10}^2 p_{\text{sample}}^2(\omega, d)}$;

$$\tilde{n}_{\text{air}}(\omega) = 1.00027 - j0;$$

$$\tilde{n}_{\text{sample}}(\omega) = n(\omega) + ik(\omega)$$

这里的 θ 为入射角可以测量,只有三个变量,复折射率的实部和虚部以及厚度值 d 不知道。

3 误差理论基础^[10]

一般情况下,应该根据实验数据和样品的情况考虑相应的近似。对于空气的折射率取为1,在垂直入射的情况下, $\cos\theta = \cos\beta = 1, \tilde{n}_{\text{air}}(\omega) = 1, d = l$, 则方程(1)变成:

$$\hat{H}(\omega) = \frac{4\tilde{n}_{\text{sample}}(\omega)}{[1 + \tilde{n}_{\text{sample}}(\omega)]^2} \exp\{-j\omega l\} \left[\frac{\tilde{n}_{\text{sample}}(\omega) - 1}{c} \right] \frac{1 - \left[\frac{1 - \tilde{n}_{\text{sample}}(\omega)}{1 + \tilde{n}_{\text{sample}}(\omega)} \right]^{2p+2} p_{\text{sample}}^{2p+2}(\omega, l)}{1 - \left[\frac{1 - \tilde{n}_{\text{sample}}(\omega)}{1 + \tilde{n}_{\text{sample}}(\omega)} \right]^2 p_{\text{sample}}^2(\omega, l)} \quad (2)$$

在已知 $\hat{H}(\omega)$ 的辐角和幅值的情况下,理论上是可以由式(2)解出 n 和 k 的值,但一般情况下,应该根据实验数据和样品的情况考虑相应的近似。现在考虑一些极限情况下的解的情况。

利用实验测得的参考波 $E_{\text{ref}}(\omega)$ 和样品波 $E_{\text{sample}}(\omega)$, 可以计算出传输函数实验值

$$H(\omega) = \frac{E_{\text{sample}}(\omega)}{E_{\text{ref}}(\omega)} = \rho(\omega) \exp[j\phi(\omega)] \quad (3)$$

的模和辐角。

$$\begin{aligned} mER(\omega) &= |H(\omega)| - |\hat{H}(\omega)| \\ \text{令} \quad pER(\omega) &= \angle |H(\omega)| - \angle |\hat{H}(\omega)| \end{aligned} \quad (4)$$

则总的误差为:

$$ER = \sum_{\omega} |mER(\omega)| + |pER(\omega)| \quad (5)$$

总的变化为:

$$\begin{aligned} D[\omega_m] &= |n[\omega_{m-1}] - n[\omega_m]| + |k[\omega_{m-1}] - k[\omega_m]| \\ TV &= \sum_m D[\omega_m] \end{aligned} \quad (6)$$

为了便于操作,可以放大次变化,有公式:

$$TV_2 = \sum_m |D[\omega_m] - D[\omega_{m+1}]| \quad (7)$$

这里的 $n[\omega_m], k[\omega_m]$ 分别对应于第 m 个频率点的复折射率的实部和虚部。如果给一个厚度 l 的值,从式(2)和式(3)就可以解出一个样品的折射率 $n[\omega_m] + ik[\omega_m]$, 但是因为厚度不宜测量准确,从而会影响折射率的数值。对于准确的厚度才能有准确的折射率,当厚度为确切值时,总的误差应为最小值,同时总的变化也为最小值。因此可以通过计算误差大小准确确定样品厚度及样品光学参数。

4 提取样品太赫兹光学参数、确定样品厚度的具体过程

1) 给出厚度的范围及参考值如下:

图1 太赫兹脉冲在平板型介质中传播示意图

$$l_{\text{upper}} = \frac{\Delta t c}{n_1 - n_{\text{air}}} \quad (8)$$

$$l_{\text{lower}} = \frac{\Delta t c}{n_2 - n_{\text{air}}}$$

这里, Δt 是参考光 E_{ref} 和 E_{sample} 样品光的第一个脉冲的时间延迟, 从探测的波形可知。其中 $n_1 = 1.2$, $n_2 = 8$, 给出厚度的参考值如下: $l_1, l_2, l_3, \dots, l_k \dots$ 。

2) 选定厚度参考值 l_k 。

3) 选定频率值 ω_m , 并分析对应光谱的 $\text{argmax}[|h(t)|]$ 和 l_k , 代入下式:

$$n_0 = \frac{\text{argmax}[|h(t)|]c}{l_k} + 1.00027 \quad (9)$$

得到对应该厚度时, 对应一个频率的初折射率 $n_0[\omega_m]$;

4) 把上面的初折射率值代入下式, 直到 $|pER(\omega)|$ 和 $|mER(\omega)|$ 不再单调减少。

$$n_{\text{new}}(\omega_m) = n_{\text{old}}(\omega_m) + \varepsilon pER(\omega_m) \quad (10)$$

$$k_{\text{new}}(\omega_m) = k_{\text{old}}(\omega_m) + \varepsilon mER(\omega_m)$$

其中, 取 $\varepsilon = 0.01$ 。

$$mER(\omega) = |H(\omega)| - |\hat{H}(\omega)| \quad (11)$$

$$pER(\omega) = \angle |H(\omega)| - \angle |\hat{H}(\omega)|$$

记录下此时的折射率数值 $n(\omega_m) + ik[\omega_m]$, 并计算出对应该频率的误差值, 得到对应点 $(\omega_m, n[\omega_m])$ 和 $(\omega_m, |pER(\omega_m)| + |mER(\omega_m)|)$;

5) 重复第3步和第4步直到对应所有的频率都计算完成。从而可以由方程(5)和方程(6)计算出对应此厚度值的总的误差值 ER 和总的变化值 TV 。得到对应点 (l_k, ER) 和 (k_k, TV) 以及对应厚度为 l_k 的曲线 $n - \omega$ 线。

6) 重复第2步直到第5步结束, 此时就有了对应厚度总的误差曲线 $ER - l_k$ 和总的变化曲线 $TV - l_k$ 。从两条曲线可以找出它们的极小值所对应的厚度是唯一而且是重合的。此厚度值就是样品的厚度 l_0 , 由第5步计算出的折射率曲线即为样品的折射率。

5 总结

本文介绍了太赫兹时域光谱的光学参数提取问题, 利用误差理论分析了厚度不易测准或不易测量的样品提取太赫兹波段光学参数的具体做法。这些方法可以普遍适用于太赫兹光谱分析及成像研究中。当然, 太赫兹光谱分析中还有许多关于数据提取的问题需要进一步研究, 目前很多工作正在研究

之中。

致谢 感谢所有曾经在一起工作过的和现在正在一起工作的合作者们, 他们包括中国科学院物理研究所光物理实验室的汪力研究员、徐新龙博士、杨玉平博士、施玉蕾博士, 首都师范大学物理系的李福利教授等。

参考文献:

- [1] Wang Xiu-min, Xu Xin-long, Li Fuli. Progress of the THz' s technology [J]. 首都师范大学学报: 自然科学版, 2003, 24(3): 17-25.
- [2] 杨玉平, 张振伟. 太赫兹成像技术[M]. 北京: 中央民族大学出版社, 2008: 2-4.
- [3] 刘盛纲. 太赫兹科学技术的新发[J]. 中国基础科学·科学前沿, 2006(1): 7-12.
- [4] 马晓菁, 代斌, 葛敏. 太赫兹辐射的研究及应用[J]. 化工时刊, 2006, 20(12): 50-53.
- [5] Charles A, Schmuttenmaer. Exoloring dynamics in the far-infrared with terahertz spectroscopy [J]. Chem. Rev., 2004, 104: 1759-1779.
- [6] Bradldy Ferguson, X-C Zhang. Materials for terahertz science and technology [J]. Nature materials, 2002, 1: 26-33.
- [7] Nagel M, Bolivar P H, Brucherseifer M, et al. Integrated THz technology for label-free genetic diagnostics[J]. Appl. Phys. Lett., 2002, 80: 154.
- [8] P Y Han, M Tani, M Usami, 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.
- [9] S W Smye, J M Chanberlain, A J Filzgerald, et al. The interaction between terahertz radiation and biological tissue [J]. Physics in medicine and biology, 2001, 46: 101.
- [10] Timothy D Dorney, Richard G Baraniuk, et al. Material parameter estimation with terahertz time-domain spectroscopy[J]. J. Opt. Soc. Am. A, 2001, 18: 1562.
- [11] Lionel Duvillaret, Jean-Louis Coutaz, et al. Highly precise determination of optical constants and sample thickness in terahertz time-domain spectroscopy [J]. Applied optics, 1999, 38: 409.
- [12] Lionel Duvillaret, Jean-Louis Coutaz, et al. A reliable method for extraction of material parameters in terahertz time-domain spectroscopy [J]. IEEE Jouranal of Selected Topics in Quantum Electronics, 1996, 2: 739.