

文章编号:1001-9014(2011)05-0401-05

# Hg<sub>1-x</sub>Cd<sub>x</sub>Te 晶体生长及太赫兹性能研究

王 仍<sup>1</sup>, 林杏潮<sup>1</sup>, 张莉萍<sup>1</sup>, 张可锋<sup>1</sup>, 焦翠灵<sup>1</sup>, 陆 液<sup>1</sup>,  
邵秀华<sup>1</sup>, 李向阳<sup>1</sup>, 葛 进<sup>2</sup>, 胡淑红<sup>2</sup>, 戴 宁<sup>2</sup>

(1. 中国科学院上海技术物理研究所 红外成像材料与器件重点实验室, 上海 200083;  
2. 中国科学院上海技术物理研究所 红外物理国家重点实验室, 上海 200083)

**摘要:**利用移动加热区方法(THM)生长了不同Cd组分的Hg<sub>1-x</sub>Cd<sub>x</sub>Te晶体,通过傅立叶光谱仪和太赫兹时域光谱系统,研究了不同Cd组分Hg<sub>1-x</sub>Cd<sub>x</sub>Te晶体在红外波段和太赫兹波段的透射光谱.当Cd组分小于0.279时,Hg<sub>1-x</sub>Cd<sub>x</sub>Te材料在0.2~1.5 THz波段透过率接近0.在0.9 THz附近观察到Hg<sub>1-x</sub>Cd<sub>x</sub>Te晶体的TA声子振动模式.利用德鲁德(Drude)模型对实验值进行拟合,得出组分 $x=0.388$ 和 $0.326$ 的Hg<sub>1-x</sub>Cd<sub>x</sub>Te晶体的载流子浓度,与测得的实验值较为吻合.

**关键词:**太赫兹时域光谱;Hg<sub>1-x</sub>Cd<sub>x</sub>Te晶体;载流子  
**中图分类号:**0472+.3 **文献标识码:**A

## Growth and terahertz characterization of Hg<sub>1-x</sub>Cd<sub>x</sub>Te crystal

WANG Reng<sup>1</sup>, LIN Xing-Cao<sup>1</sup>, ZHANG Li-Ping<sup>1</sup>, ZHANG Ke-Feng<sup>1</sup>, JIAO Cui-Ling<sup>1</sup>,  
LU Ye<sup>1</sup>, SHAO Xiu-Hua<sup>1</sup>, LI Xiang-Yang<sup>1</sup>, GE Jin<sup>2</sup>, HU Shu-Hong<sup>2</sup>, DAI Ning<sup>2</sup>

(1. Key Laboratory of Infrared Imaging Materials and Detectors, Shanghai Institute of Technical Physics,  
Chinese Academy of Sciences, Shanghai 200083, China;  
2. National Laboratory for Infrared Physics, Shanghai Institute of Technical Physics, Chinese Academy of  
Sciences, Shanghai 200083, China)

**Abstract:** Different composition Hg<sub>1-x</sub>Cd<sub>x</sub>Te crystals were grown by THM method. The optical properties of Hg<sub>1-x</sub>Cd<sub>x</sub>Te crystals were investigated by using the Fourier transform infrared spectroscopy and transmission mode THz time-domain spectroscopy. The transmission was approached to zero in 0.2~1.5 THz frequency range as Cd composition of Hg<sub>1-x</sub>Cd<sub>x</sub>Te crystal was lower than 0.279. A TA phonon model of Hg<sub>1-x</sub>Cd<sub>x</sub>Te crystal was observed at 0.9 THz. Drude model was applied for simulation, which fitted well with the experimental results. The carrier densities of the Hg<sub>1-x</sub>Cd<sub>x</sub>Te ( $x=0.388$  and  $0.326$ ) were also characterized, which agreed with the experimental results.

**Key words:** Terahertz time-domain spectroscopy (THz-TDS); Hg<sub>1-x</sub>Cd<sub>x</sub>Te crystal; Carrier  
**PACS:** 81.05.Dz

## 引言

Hg<sub>1-x</sub>Cd<sub>x</sub>Te是一种重要的II-VI族红外材料,通过调节材料中的Cd组分即可实现不同波段红外探测功能.近年来,随着超短激光脉冲的迅速发展,人们对红外波段的研究已经扩展到太赫兹领域(30 μm~3 mm),利用近红外的超短激光脉冲激发合适的电光晶体即产生太赫兹波段的电磁波. R. Mendis<sup>[1]</sup>曾报道通过光整流效应利用Hg<sub>1-x</sub>Cd<sub>x</sub>

Te( $x=0.21$ )薄膜晶体辐射出太赫兹信号,当脉冲宽度<12fs的激光时激发Hg<sub>1-x</sub>Cd<sub>x</sub>Te晶体,用液He制冷的能量计可以探测到太赫兹能量的大小,辐射出的太赫兹能量大小与晶体方位角具有相关性.其太赫兹振幅强度虽然比p-InAs晶体的强度弱,但可以达到与ZnTe晶体辐射信号相当. Albert Betz<sup>[2]</sup>利用分子束外延(Molecular Beam Epitaxy MBE)生长了两种Hg<sub>1-x</sub>Cd<sub>x</sub>Te器件结构制作5~15 THz(20~60 μm)波段的光导混频器.其中一种是HgCdTe

收稿日期:2010-07-20,修回日期:2010-08-17

Received date: 2010-07-20, revised date: 2010-08-17

基金项目:中科院三期创新项目(Y-4),上海市自然科学基金(10ZR1434500)

作者简介:王 仍(1980-),女,山东滕州人,助理研究员,博士,主要从事II-VI族材料生长,E-mail:tiaoqi1980@163.com.

薄膜晶体材料,组分在 0.17 ~ 0.22 范围内. 另一种 HgTe/HgCdTe 是超晶格结构,其带宽完全由  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$  高势垒之间的 HgTe 势阱层厚度决定,用这两种材料结构可以实现量子效率  $\eta > 0.1$ , 响应时间  $t < 50$  ps 的器件结构.

目前关于不同组分  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$  晶体在太赫兹波段的光学性质还没有相关报道,本文主要通过太赫兹时域光谱系统 (THz-TDS) 研究不同组分  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$  晶体在太赫兹波段的透射性质,为  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$  材料在太赫兹波段应用提供实验参数.

## 1 材料生长与表征

由于薄膜  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$  晶体一般都需要生长在 CdZnTe、 $\text{Al}_2\text{O}_3$  或 GaAs 衬底上,而这些衬底在太赫兹时域光谱测量中也会有吸收,从而影响对  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$  晶体的分析. 因此,本实验的  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$  晶体全部采用富 Te 配比的移动加热区方法生长的体晶. 用高纯度 (7N) 不同配比的 Hg、Cd、Te 源材料配料、合成、生长得到不同组分的  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$  晶体. 锭条切成晶圆后,封入退火石英管,经高、低温 Hg 饱和和蒸汽压下长时间退火后,开管取片. 通过密度法初步选取五片不同组分的晶片,双面粗抛、精抛至 430  $\mu\text{m}$  厚.

利用傅立叶红外光谱仪,室温下测量晶片的透射光谱,图 1 给出不同组分  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$  晶体在 1.4 ~ 22  $\mu\text{m}$  波段透射光谱. 通过透射光谱计算出材料的组分分别为 0.199, 0.216, 0.279, 0.326 和 0.388.

利用霍尔测试系统测量了这五片不同组分  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$  晶体的电学参数,图 2 给出室温下载流子浓度和电阻率分别随组分的变化关系. 图 2(a) 给出室温下载流子浓度随组分的变化关系,图中可以

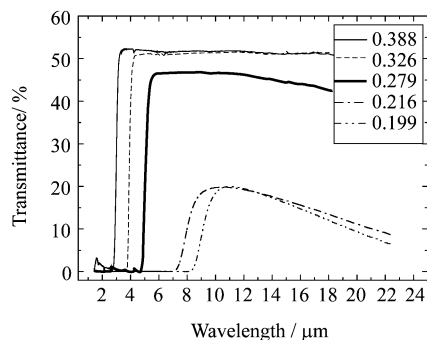


图 1 室温下不同组分  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$  晶体在 1.4 ~ 22  $\mu\text{m}$  波段透射光谱  
Fig. 1 IR transmission spectrum of different composition  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$  crystals in range of 1.4 ~ 22  $\mu\text{m}$  (at 300 k)

看到:随着组分的增大,载流子浓度减小,这与大量实验结果一致<sup>[3]</sup>,研究表明:同样的原材料,本征 n 型材料的载流子浓度与  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$  组分和温度相关,褚君浩<sup>[4]</sup>给出经验公式为:

$$n_i = (1 + 3.25kT/E_g)9.56 \times 10^{14} E_g^{3/2} T^{3/2} [1 + 1.9E_g^{3/4} \exp(E_g/2kT)]^{-1}, \quad (1)$$

公式(1)中的  $E_g$  为禁带宽度,  $n_i$  为载流子浓度,  $T$  为温度,  $k$  为常数,其中

$$E_g = -0.295 + 1.87x - 0.28x^2 + (6 - 14x + 3x^2)10^{-4}T + 0.35x^4, \quad (2)$$

由公式(2)可知随着组分  $x$  的增大,材料的禁带宽度  $E_g$  增加,因此从价带到导带热激发的本征载流子浓度越来越少.

图 2(b) 给出室温下电阻率随组分的变化关系,图中可以看到:随着组分的增加,电阻率呈上升趋势,由于电导率与电阻率成倒数关系,因此材料电导率随组分的增大而减小,这也与图 2(a) 中载流子浓度随组分变化相呼应,由于组分  $x$  增加,禁带宽度  $E_g$  增大,造成载流子浓度减少,因此材料的导电性能减弱,致使电导率减小.

## 2 太赫兹时域光谱系统

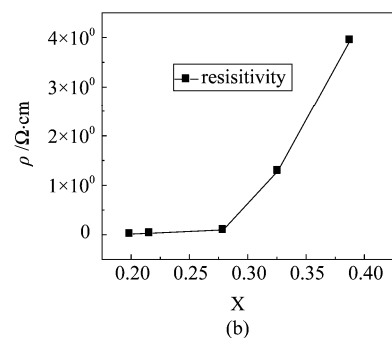
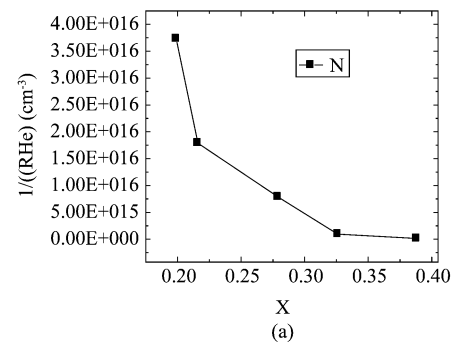


图 2 室温下不同组分  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$  晶体的 (a) 载流子浓度分布; 室温下不同组分  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$  晶体的 (b) 电阻率分布  
Fig. 2 (a) Carrier density of different composition  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$  crystals (at 300 k) (b) Resistivity of different composition  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$  crystals (at 300 k)

THz 时域光谱系统<sup>[5]</sup> (Terahertz time-domain spectroscopy) 是基于超快飞秒激光的 THz 波段光谱测量新技术<sup>[6,7]</sup>. 它利用物质对 THz 的特征吸收谱分析研究物质成分、结构及其相互作用关系. THz 时域光谱系统可分为透射式、反射式、差分式和椭圆偏式等, 其中最常用的是透射式和反射式 THz 时域光谱系统. 图 3 给出透射式 THz 时域光谱系统原理图. 该套系统主要由飞秒激光器、THz 辐射源、THz 探测装置和时间延迟控制系统等几部分组成. 激光光源是一台自锁模钛宝石飞秒激光器 (MaiTai HP 1020), 中心波长 800 nm, 脉冲宽度小于 110 fs, 重复频率 80 MHz. 激光器平均输出功率为 2.7 W. 飞秒脉冲经偏振片起偏, 由分束器 (Beam splitter) 分为泵浦光和探测光两部分. 泵浦光经过调制频率 51 kHz 的斩波器后入射到光延迟线上, 再聚焦在 GaAs 光电导天线上, 进而辐射出 THz 脉冲. 为增加 THz 脉冲向自由空间的耦合效率, 在 GaAs 背面贴置 Si 透镜. THz 脉冲经过 Si 透镜后成为近平行光束出射, 再由高密度聚乙烯透镜聚焦到被测样品上. THz 脉冲穿过样品后被 GaAs 光电导天线探测接收, 经过锁相放大器采样放大后输入电脑进行数据处理.

做探测使用的光电导天线不加偏置电压, 探测脉冲入射其上, 产生光生载流子, 在没有 THz 脉冲时, 光生载流子不能形成电流, 因而锁相放大器探测到的信号为零. 当 THz 脉冲入射到光电导天线时, THz 电场起到了偏置电压作用, 光生载流子在 THz 电场的驱动下形成光电流, 进而被探测. 由于探测脉冲的脉冲宽度远远小于 THz 脉冲宽度, 可以通过调节两个脉冲的时间延迟对 THz 脉冲分时取样, 得到 THz 时域光谱. 对 THz 时域光谱进行傅里叶变换即可得到 THz 频域光谱. 由于空气中水分对 THz 脉冲的吸收比较大, 会影响测试结果, 因此将激发部分、

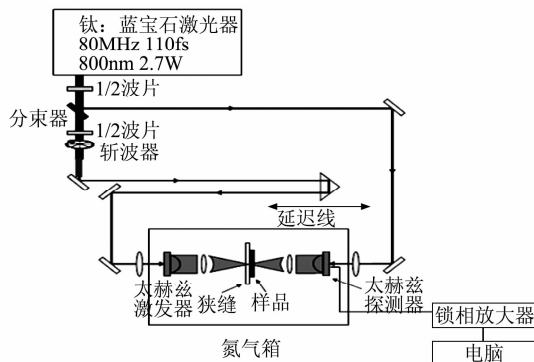


图 3 透射式 THz 时域光谱系统光路原理图<sup>[8]</sup>  
Fig. 3 Schematic of THz time-domain spectroscopy system<sup>[8]</sup>

样品台以及探测部分放在密封的氮气箱里, 通氮气对箱内进行除湿.

### 3 结果与讨论

将前面测的五片不同组分双面抛光、厚 430  $\mu\text{m}$  的  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$  晶体作为样品. 调好光路, 先测量不放样品时的参考信号 (ref), 然后将样品放在样品台上, 并测量样品信号. 对所测的样品信号  $E_{sam}(t)$  和参考信号  $E_{ref}(t)$  分别进行傅立叶变换, 转换到频域中的复值  $\tilde{E}_{sam}(\omega)$  和  $\tilde{E}_{ref}(\omega)$ , 这样便可以得到参考信号和样品信号的振幅和相位.

图 4 给出五种不同组分  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$  晶体的太赫兹时域光谱 (a) 图和频域光谱 (b) 图. 组分为 0.388 和 0.326 材料的太赫兹时域脉冲信号其波形和能量均发生了变化 (图 4a), 经傅立叶变换之后其太赫兹振幅也相比于参考信号发生了衰减 (图 4b). 而对于组分小于 0.279 的材料其太赫兹时域和频域信号基本接近于 0. 在频域光谱中 (图 4b) 将样品信号和参考信号相比得到

$$\frac{\tilde{E}_{sam}(\omega)}{\tilde{E}_{ref}(\omega)} = \rho(\omega) \cdot e^{-j\phi(\omega)} \quad (3)$$

其中  $\rho(\omega)$  表示样品信号和参考信号的振幅比, 即  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$  晶体在该 THz 波段的透过率.  $\phi(\omega)$  表

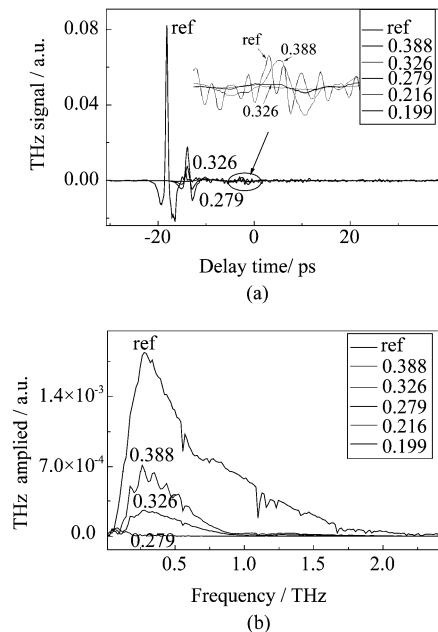


图 4 不同组分  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$  晶体太赫兹 (a) 时域光谱 (b) 频域光谱  
Fig. 4 THz pulse spectrum of different composition  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$  crystals (a) Temporal waveform (b) Frequency waveform

示样品信号与参考信号的相位差.

图 5 给出不同组分  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$  晶体在 0.2 ~ 1.5 THz 波段透射光谱, 在 0.2 到 1 THz 之间的低频区域, 组分 0.388 的  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$  晶体透过率接近 35%, 组分 0.326 的  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$  晶体透过率接近 15%, 而组分小于 0.279  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$  晶体其透过率基本接近 0. 由此可见随着组分的增大,  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$  晶体在太赫兹波段的透过率是增大的, 通过图 2 的室温霍尔测试说明随着组分的增大载流子浓度减少, 电导率减小, 因此在太赫兹波段的吸收减少. 图 5 中还可以看出所有组分的  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$  晶体在 0.9 THz 附近 (约  $30\text{ cm}^{-1}$ ) 处透过率有最小值, 之后又随频率增加而增大. 沈学础<sup>[9]</sup> 曾研究了 Cd 组分 0.33 的  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$  远红外吸收光谱, 在波数  $20\sim 50\text{ cm}^{-1}$  处, 存在一个与  $\text{HgTe}$ 、 $\text{CdTe}$  的 TA 声子态密度函数外形相似的低频吸收带, 并认为是由于混晶化诱发极性晶体声学模晶格振动红外活性的. Rösler 也曾发现用于远红外和亚毫米波段的  $\text{Hg}_{0.56}\text{Cd}_{0.44}\text{Te}$  探测器有比  $\text{InSb}$  远红外探测器快两个数量级的响应速度, 但灵敏度却低得多, 这主要是由于在  $20\sim 50\text{ cm}^{-1}$  波段处的这一 TA 声子红外活性及吸收带造成的. 因此, 对于图 5 中不同组分的  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$  晶体在 0.9 THz 附近的吸收, 在此认为是由于 TA 声子振动模式的存在造成. 另外, 图 5 中可以看到由于瞬态信号在样品前后表面多次反射, 样品信号有许多干涉条纹存在, 随频率的升高至 0.9 THz 附近, 由于 TA 声子红外活性的吸收, 其干涉信号得到明显的衰减.

对于图 5 中组分  $x=0.388$ 、 $0.326$  的  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$  晶体, 通过公式 (3) 可以得到样品信号与参考信号的相位差  $\phi(\omega)$ , 因此可进一步计算出  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x$

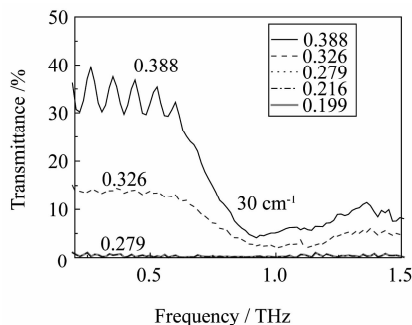


图 5 不同组分  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$  晶体在 0.2 ~ 1.5 THz 波段透射光谱

Fig. 5 Transmission spectrum of different composition  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$  crystals at 0.2 ~ 1.5 THz wave range

Te 晶体的复折射率  $\tilde{n}(\omega) = n_r(\omega) + in_i(\omega) = n(\omega) + ik(\omega)$ , 其中实部为折射率  $n(\omega)$ , 虚部为消光系数  $k(\omega)$ , 当得到样品复折射率  $\tilde{n}(\omega) = n(\omega) + ik(\omega)$  后, 根据德鲁德 (Drude) 模型可得到样品的介电常数和电导率等光学参数, 复介电常数与复折射率的关系为  $\tilde{\epsilon}(\omega) = \epsilon'(\omega) + i\epsilon''(\omega) = (n_r(\omega) + in_i(\omega))^2$ <sup>[10]</sup>, 因此, 可以通过实验值计算出  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$  晶体在 THz 波段的复介电常数. 介电常数的实部和虚部可以表示如下<sup>[11]</sup>:

$$\begin{aligned}\epsilon' &= n_r^2(\omega) - n_i^2(\omega) = n^2(\omega) - k^2(\omega) \\ \epsilon'' &= 2n(\omega)k(\omega)\end{aligned}\quad (4)$$

通过公式 (4) 计算出的介电常数结果由图 6 给出, 其中图 6 (a) 和 (b) 中的实线为  $x=0.388$  的  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$  晶体在 0.2 ~ 1.5 THz 波段介电常数实部 (图 6a) 和虚部 (图 6b), 图 6 (c) 和 (d) 中的虚线为  $x=0.326$  的  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$  晶体在 0.2 ~ 1.5 THz 波段介电常数实部 (图 6c) 和虚部 (图 6d) 的拟合曲线.

由于太赫兹电磁波与导体或高自由载流子浓度的半导体相互作用时主要表现为太赫兹波与自由载流子的相互作用, 一般情况下这种相互作用可以用经典的德鲁德 (Drude) 模型进行处理. 根据这一模型, 介电常数还可以表示为<sup>[12]</sup>

$$\tilde{\epsilon}(\omega) = \epsilon_\infty - \frac{\epsilon_\infty \omega_p^2}{\omega^2 - i\omega\gamma}$$

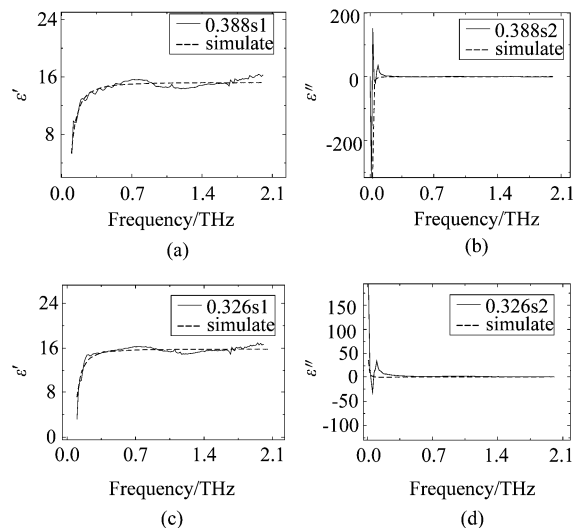


图 6 不同组分  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$  晶体在 0.2 ~ 1.5 THz 波段介电常数 (实线为实验值, 虚线为 Drude 模型拟合; simulate)  
Fig. 6 Dielectric constant of different composition  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$  crystals at 0.2 ~ 1.5 THz wave range (Solid line is the experimental results, Dash line is the simulation results with Drude model; simulate)

$$= \varepsilon_{\infty} \left( 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + \gamma^2} - i \frac{\omega_p^2 \gamma}{\omega(\omega^2 + \gamma^2)} \right) \quad (5)$$

公式(5)中实部定义为  $\varepsilon'(\omega)$ , 虚部定义为  $\varepsilon''(\omega)$ , 表示如下:

$$\begin{aligned} \varepsilon'(\omega) &= \varepsilon_{\infty} \left( 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + \gamma^2} \right) \\ \varepsilon''(\omega) &= -\varepsilon_{\infty} \frac{\omega_p^2 \gamma}{\omega(\omega^2 + \gamma^2)} \end{aligned} \quad (6)$$

$\gamma$  为物质中载流子相位相干性的衰减系数  $\gamma = 1/\tau$  其中  $\tau$  为载流子的平均寿命,

$$\omega_p \text{ 为等离子体振荡频率 } \omega_p = \sqrt{\frac{Ne^2}{m^* \varepsilon_{\infty} \varepsilon_0}} \quad (8)$$

$N$  为本征载流子浓度,  $m^*$  为电子有效质量

$$m^* = 0.05966 \frac{E_g(E_g + 1)}{E_g + 0.667} \quad (9)$$

$\varepsilon_0$  为真空介电常数  $\varepsilon_0 = 8.85418 \times 10^{-14}$  F/cm,  $e$  为电子电量  $e = 1.60 \times 10^{-19}$  C,  $\varepsilon_{\infty}$  为高频介电常数<sup>[13]</sup>

$$\varepsilon_{\infty} = 15.1 - 10.3x - 2.6x^2 + 10.2x^3 - 5.2x^4 \quad (10)$$

由公式(7)~(10)可以计算出组分  $x = 0.388$ 、 $0.326$  的  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$  晶体其相关物理参量, 见表 1:

表 1 不同组分  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$  晶体相关物理参量  
Table 1 Physical parameters of  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$  with different compositions

$x$	$\varepsilon_{\infty}$	$E_g/\text{eV}$	$\mu/\text{cm}^2 \cdot \text{v}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$	$m^*/\text{kg}$	$\omega_p/2\pi/\text{THz}$
0.388	15.4484	0.41106	4253.50915	2.92E-32	0.074
0.326	16.1839	0.33355	5529.44429	2.42E-32	0.194

将表 1 中的相关物理量作为初始值带入公式(5)进行拟合, 图 6(a)和(b)中的虚线为  $x = 0.388$  的  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$  晶体在  $0.2 \sim 1.5$  THz 波段介电常数实部(图 6a)和虚部(图 6b)的拟合曲线, 当  $\varepsilon_{\infty} = 15.4$ ,  $\frac{\omega_p}{2\pi} = 0.09$  THz,  $\frac{\gamma}{2\pi} = 0.00036$  THz 时与实验测得结果较为吻合, 由此公式(8)算得载流子浓度为  $2.22 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ , 与图(2a)霍尔测量得到  $1.58 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$  实验结果较为接近. 图 6(c)和(d)中的虚线为  $x = 0.326$  的  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$  晶体在  $0.2 \sim 1.5$  THz 波段介电常数实部(图 6c)和虚部(图 6d)的拟合曲线, 当  $\varepsilon_{\infty} = 16.0$ ,  $\frac{\omega_p}{2\pi} = 0.194$  THz,  $\frac{\gamma}{2\pi} = 0.8727$  THz 时拟合结果较好, 由此公式(8)算得载流子浓度为  $9.37 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ , 与图(2a)霍尔测量得到  $9.37 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$  实验结果一致.

由此看来, 利用 Drude 模型可以较好的分析半

导体材料与太赫兹电磁波的相互作用, 从而直接得到半导体材料在太赫兹波段的光学常数和介电常数, 以及载流子浓度等电学参数.

#### 4 结语

采用透射式太赫兹时域光谱系统测量了室温下不同组分  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$  晶体在  $0.2 \sim 1.5$  THz 波段透射光谱, 分析了 Cd 组分变化对太赫兹波段透射光谱的影响, 对于组分大于 0.279 的晶体, 在 0.9 THz 附近由于存在一个混晶化诱发的 TA 晶格振动模式, 造成强吸收, 从而造成透过率下降. 随着 Cd 组分的减少, 材料中的载流子浓度增加, 电导率增加, 对太赫兹光的吸收增强, 其透过率呈下降趋势. 利用 Drude 模型拟合了组分  $x = 0.388$  和  $0.326$  的  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$  晶体在太赫兹波段的介电常数, 得出相关电学参数与实验测得值较为吻合, 进而说明太赫兹时域光谱可以较为快速、准确得到半导体材料的光学和电学参数.

#### REFERENCES

- [1] Mendis R, Smith M L, Vickers R E M. Terahertz Emission from Mercury Cadmium Telluride [J]. *The Joint 31st International Conference on Infrared Millimeter Waves and 14th International Conference on Terahertz Electronics*. 2006
- [2] Albert Betz, Rita Boreiko, Yongdong Zhou, et al. HgCdTe photoconductive mixer for 3-15 terahertz [J]. *14th International Symposium on Space Terahertz Technology*. 2003;101-111.
- [3] Yang Jian-rong. Physics and Technology of HgCdTe Material [M]. Shanghai Institute of Technical Physics, Internal information. (杨建荣. 碲镉汞材料物理与技术. 中科院上海技术物理所内部资料). 2008.
- [4] Chu Jun-hao. The energy band gap and lattice vibration spectra of ternary semiconductor  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$  [D]. PhD. thesis, Shanghai Institute of Technical Physics, Chinese Academy of Sciences. 1984. (褚君浩.  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$  三元半导体能带参数和晶格振动的光谱研究. 中科院上海技术物理所博士论文), 1984.
- [5] Ma Xin-fa, Zhang Xi-cheng. Subpicosecond Optical Rectification Effect [J]. *Physics* (马新发, 张希成. 亚皮秒光整流效应. 物理), 1994, **23**(7): 390-393.
- [6] Lin H, Withayachumnankul W, Fischer B M. Gas recognition with terahertz time-domain spectroscopy and spectral catalog: a preliminary study [J]. *Proc. SPIE*, 2007, **6840**: 68400.
- [7] Jepsen P U, Fischer B M. Dynamic range in terahertz time-domain transmission and reflection spectroscopy [J]. *Optics Letters*. 2005, **30**(1): 29-31.
- [8] Withayachumnankul W, Lin H, Mickan S P, et al. Analysis of measurement uncertainty in THz-TDS [J]. *Proc. SPIE, Photonic Materials, Devices, and Applications II*, 2007, **6593**: 6593-26.

(下转 462 页)

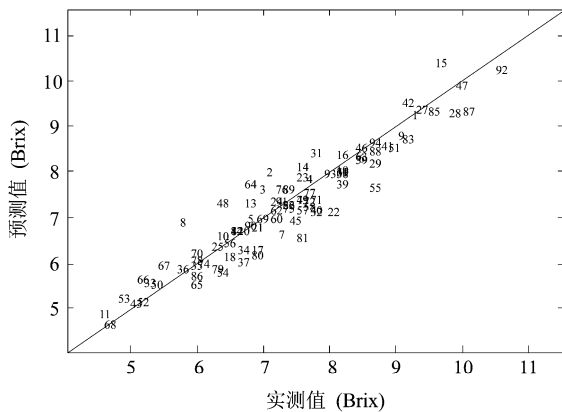


图3 预测集样本预测值和实测值之间的散点图  
Fig.3 Reference determination versus NIR prediction model

#### 4 结语

借助先进的近红外光谱仪,研究者可以在短时间内快速获得海量光谱数据,如何对海量光谱数据进行有效筛选是国内外学者研究的重点.本研究根据样品通常在近红外光的某个或者某几个波段发生特征吸收,即光谱数据具有一定的连续性这一特点,采用特征子区间选择方法快速定位特征波长所在的子区间,然后采用特征波长选择方法得到草莓可溶性固形物对应的特征波长.

本研究利用 BiPLS 对草莓近红外光谱初步定位出 4 个特征子区间,然后用 SAA 优选  $7565\text{ cm}^{-1}$ 、 $7706\text{ cm}^{-1}$ 、 $8289\text{ cm}^{-1}$ 、 $8489\text{ cm}^{-1}$ 、 $8499\text{ cm}^{-1}$ 、 $8724\text{ cm}^{-1}$ 、 $8807\text{ cm}^{-1}$  共 7 个可溶性固形物对应的特征波数点,并采用 MLR 回归建立了草莓可溶性固形物光谱模型. MLR 模型对应的  $r_c$  和  $r_p$  分别为 0.9478 和 0.9412,对应的 RMSEC、RMSEP 分别为 0.403 和 0.428. 同全光谱 PLS 模型, BiPLS-SAA-MLR 极大的减少了建模所需的波数点数,降低了模型复杂度,同时模型精度明显提高,同 BiPLS 模型相比较, BiPLS-

(上接 405 页)

SAA-MLR 在降低模型复杂度方面仍具有明显优势. 研究结果充分表明,将 BiPLS、SAA 和 MLR 相结合对草莓可溶性固形物含量进行建模,简化了模型复杂度,提高模型的预测精度和计算效率,为近红外光谱技术的在线运用提供了一套建模解决方案.

#### REFERENCES

- [1] Tsai C Y, Chen H J, Hsieh J F, *et al.* Fabrication of a near infrared online inspection system for pear fruit[J]. *International Agricultural Engineering Journal*, 2007, **16**:57 - 70.
- [2] Walsh K B, Long R L, Middleton S G. Use of near infrared spectroscopy in evaluation of source-sink manipulation to increase the soluble sugar content of stonefruit[J]. *Journal of Food Engineering*, 2007, **78**(2):701 - 707.
- [3] Camps C, Guillermin P, Mauget J C, *et al.* Discrimination of storage duration of apples stored in a cooled room and shelf-life by visible-near infrared spectroscopy[J]. *Journal of near Infrared Spectroscopy*, 2007, **15**(3):169 - 177.
- [4] Lu R, Ariana D. A near-infrared sensing technique for measuring internal quality of apple fruit[J]. *Applied Engineering in Agriculture*, 2002, **18**(5):585 - 590.
- [5] WANG Jia-Hua, LI Peng-Fei, CAO Nan-Ning, *et al.* Study on the combination weight PLS model for determining ssc of peach based on the optimal information regions obtained from iPLS methods[J]. *J. Infrared Millim. Waves* (王加华,李鹏飞,曹楠宁,等.基于 iPLS 原理最优化信息区间的桃糖度组合权重 PLS 模型研究. *红外与毫米波学报*), 2009, **28**(5):386 - 391.
- [6] HE Yong, LI Xiao-Li. Discrimination varieties of waxberry using near infrared spectra[J]. *J. Infrared Millim. Waves* (何勇,李晓丽.用近红外光谱鉴别杨梅品种的研究. *红外与毫米波学报*), 2006, **25**(3):192 - 194,212.
- [7] ZOU Xiao-Bo, ZHAO Jie-Wen, Li Yan-Xiao. Selection of the efficient wavelength regions in FT-NIR spectroscopy for determination of SSC of 'Fuji' apple based on BiPLS and FiPLS models[J]. *Vibration Spectroscopy*. 2007, **44**:220 - 227.
- [8] Guyer D, Yang X K. Use of genetic artificial neural networks and spectral imaging for defect detection on cherries [J]. *Computers and Electronics in Agriculture*, 2000, **29**(3):179 - 194.
- [9] Kirkpatrick S, Gelatt C D Jr, Vecchi M P. Optimization by simulated annealing[J]. *Science*. 1983, **220**:671 - 680.

- [9] Shen Xue-Chu. Spectroscopy and Optical Properties of Semiconductors[M]. *Science Press* (沈学础. 半导体光谱和光学性质. 科学出版社), 2002.
- [10] Guo H C, Liu W M, Tang S H. Terahertz time-domain studies of far-infrared dielectric response in 5 mol % MgO: LiNbO<sub>3</sub> Ferroelectric single crystal[J]. *Journal of Applied Physics*, 2007, **102**:033105(1-4).
- [11] Thamizhmani L, Azad A K, Dai Jianming. Far-infrared optical and dielectric response of ZnS measured by tera-

hertz time-domain spectroscopy [J]. *Applied Physics Letters*, 2005, **86**:131111(1-3).

- [12] Xu Jingzhou, Zhang Xicheng. Terahertz technology and application[M]. *Peking University press* (许景周,张希成. 太赫兹科学技术与应用. 北京大学出版社), 2007.
- [13] Li Biao. LPE Growth and Characterization of Hg<sub>1-x</sub>Cd<sub>x</sub>Te Films[D]. PhD. thesis, Shanghai Institute of Technical Physics, Chinese Academy of Sciences. (李标. Hg<sub>1-x</sub>Cd<sub>x</sub>Te 薄膜的 LPE 生长与特性分析. 中科院上海技术物理所博士论文), 1995.