

太赫兹时域光谱分析中的回波滤除方法

王凌辉, 王迎新, 赵自然*

(清华大学 工程物理系粒子技术与辐射成像教育部重点实验室, 北京 100084)

摘要:回波处理是提高太赫兹时域光谱系统频谱分辨率的重要方法。为了研究样品存在非线性吸收情况下的回波滤除方法,在解卷积算法的基础上考虑介质对太赫兹脉冲的吸收情况和群延迟效应,将已有算法所需的四个参数缩减为与样品种类、厚度无关的两个参数,进一步提高了太赫兹光谱恢复的准确度。经实验验证,该方法可有效滤除太赫兹时域光谱系统中的 GaAs 天线基底以及 ZnTe 探测晶体产生的回波,将时间窗宽度增加一倍,使系统频谱分辨率提高到 20 GHz。

关键词:太赫兹时域光谱;回波;解卷积;分辨率

中图分类号:O657.33 文献标识码:A

The removal of echo signals in terahertz time-domain spectroscopy

WANG Ling-Hui, WANG Ying-Xin, ZHAO Zi-Ran *

(Key Laboratory of Particle & Radiation Imaging, Ministry of Education,
Department of Engineering Physics, Tsinghua University, Beijing 100084, China)

Abstract: Echo removal is an important way to improve the spectral resolution of terahertz time-domain spectroscopy. In order to study the echo removal method for the cases of nonlinear absorbent samples, the absorption and group delay effects were considered based on de-convolution algorithm. Two of the four parameters needed in conventional algorithms were abandoned and the remaining two are not related to the exact material and thickness of the sample, which improves the accuracy of terahertz spectrum recovery. Results show that the presented algorithm can eliminate echoes generated by GaAs antenna and ZnTe detection crystal effectively. The width of the time window is doubled so that the spectral resolution is improved up to 20 GHz.

Key words: terahertz time-domain spectroscopy; echoes; de-convolution; resolution

PACS: 78.47.D-, 42.25.Gy

引言

太赫兹波是指频率范围在 100 GHz 到 10 THz 范围内的电磁辐射,作为电磁波频谱上最后一段空隙,近 20 年来,成为国内外机构研究的热点。太赫兹脉冲频带覆盖范围较宽,可以穿透很多非极性物质,光子能量低,大多数极性分子在该波段内有“指纹”吸收谱,这些特性使得太赫兹波在物质分析^[1]、无损检测^[2-3]、安全检查^[4-5]和医疗成像^[6]等领域有很好的应用前景。

目前通常使用太赫兹时域光谱分析技术获得样品的太赫兹频谱,光谱指标依赖于硬件系统设计。太赫兹波在发射器、探测器以及样品间的多次反射,导致系统的吸收光谱在频域内产生振荡,有可能会隐藏一些重要的吸收特征。去除光谱振荡现象可以从硬件和数据处理两个角度考虑,增加太赫兹发射器 GaAs 基底以及 ZnTe 探测晶体厚度,可以延返回波到主峰的距离,从而提高光谱质量,但这无疑会增加系统的硬件成本。在某些应用场合,如太赫兹成像领域,高能量的激光脉冲将造成厚 GaAs 基底热损伤,

收稿日期:2012-01-05,修回日期:2012-11-08

Received date: 2012-01-05, revised date: 2012-11-08

基金项目:清华大学自主科研专项(2010THZ05);科技部项目(2010DFR10250)

Foundation items: Supported by Independent and Special Research Foundation of Tsinghua University (2010THZ05) and the Project from the Ministry of Science and Technology of China (2010DFR10250)

作者简介(Biography):王凌辉(1988-),男,江苏南通人,清华大学工程物理系硕士研究生,主要从事辐射信息處理及太赫兹光谱处理方面的研究。E-mail: wlh6543210@126.com.

* 通讯作者(Corresponding author): E-mail: zhaoziran@tsinghua.org.cn.

通过增加厚度的方法延返回波并不可行^[7]. 在数据处理方面,最有效的途径是用时间窗将回波排除在外,假设 GaAs 基底 ($n = 3.6$) 厚度为 1 mm, 频域分辨率可以达到 40 GHz. 若希望获得更好的频谱分辨率,需要对回波进行处理.

平滑是一种简单的去振荡方法, 中心值由一定数量邻点的平均值代替, 适合处理吸收峰较宽、细节较少的样品, 平滑在一定程度上, 降低了频谱分辨率, 损失了一些细节信息. Ole Hirsch 等^[8]研究了透射式和反射式太赫兹天线的回波处理方法, 通过确定衰减系数、时间延迟和相位延迟三个参数去除回波, 算法假设 GaAs 在系统有效频段内弱吸收, 衰减系数为常数. M. Naftaly 等^[9]提出的解卷积方法, 假设样品吸收与频率成正比, 确定振荡幅度、振荡频率、相位延迟和振荡衰减系数四个参数, 对无吸收样品和弱吸收高厚度样品处理, 取得了较好的结果.

本文在解卷积算法的基础上进一步改进, 放弃了样品吸收与频率成正比的线性假设, 研究了非线性吸收情况下的回波处理方法, 将四个不确定性参数缩减为两个, 提高了太赫兹光谱恢复的准确度. 太赫兹时域光谱系统在 GaAs 基底和 ZnTe 晶体两处存在反射回波, 本文的目的在于去除这两处的第一次反射回波, 时间窗宽度可增加一倍, 频域分辨率提高到 20GHz. 算法所需两个参数仅和 GaAs 基底、ZnTe 晶体厚度以及系统有关, 与样品种类与厚度无关, 测量样品时不需要更改, 具有实际应用的意义.

1 太赫兹时域光谱测量系统

太赫兹时域光谱系统(THz-TDS)结构如图 1 所示, 飞秒激光器中心波长为 780 nm, 脉宽 120 fs, 重复频率 50 MHz, 经分光镜分成两束, 其一作为泵浦光, 透过椭球面镜中心小孔射向低温生长的砷化镓(LT-GaAs)激发太赫兹脉冲, 通过椭球面镜透射样品, 聚焦于探测晶体 ZnTe, 另一束作为探测光被硅片反射, 同样照射到探测晶体上. 太赫兹脉冲的电场通过线性电光效应调制 ZnTe 折射率, 使得探测激光偏振状态发生改变. 平面镜 M4、M5 与平移台组成光学延迟线, 改变泵浦光光程, 实现对太赫兹脉冲的时域扫描, 获得完整的太赫兹时域波形.

系统的回波主要产生于 GaAs 基底和 ZnTe 探测晶体, 飞秒激光照射 GaAs 基底表面, 产生的部分太赫兹波穿透基底在另一个表面反射, 一定光程延迟后与主脉冲混在一起, 形成回波. 在探测部分, 太赫兹波主脉冲穿透 ZnTe 晶体, 回波在界面进行了两

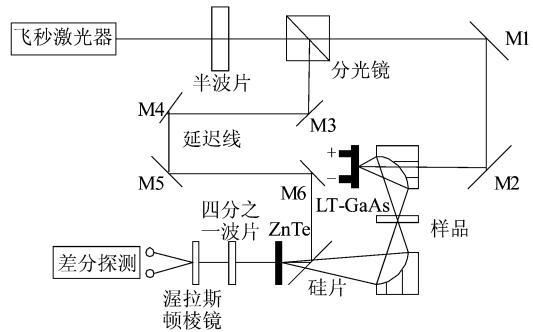


图 1 太赫兹时域光谱系统示意图
Fig. 1 Terahertz time-domain spectroscopy system

次反射, 如图 2 所示.

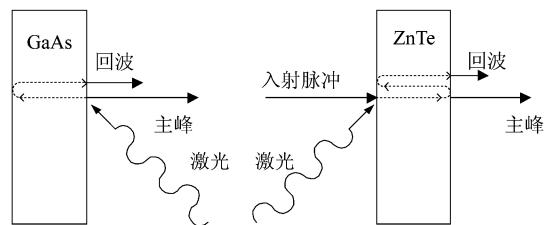


图 2 光电导天线和探测晶体回波产生示意图
Fig. 2 Echoes generated by photoconductive antenna and crystal detector

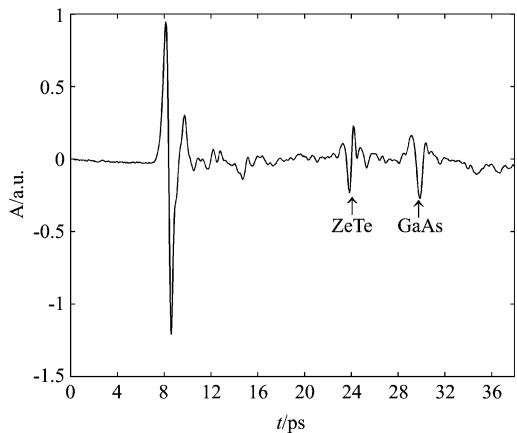


图 3 太赫兹脉冲时域波形图
Fig. 3 Time-domain of terahertz wave

由于 GaAs 和 ZnTe 对太赫兹脉冲有不同程度的吸收和色散, 回波的形状与主脉冲相似度不高. 从图 3 可以看出, 包含回波的太赫兹时域波形主峰起始于 7 ps, 第一个回波出现于 23 ps, 由 ZnTe 探测晶体反射产生, 回波与主峰脉冲在波形上相差很大, 吸收的非线性较强, 第二个回波位于 28 ps 处, 由天线 GaAs 基底反射产生, 和主峰形状较相似, 非线性吸

收程度较弱. 第三个回波在 38 ps 以外, 是 ZnTe 晶体的第二个回波, 本文主要研究前两个回波的去除, 第三个及以后的回波暂不考虑.

2 改进的解卷积去回波算法

首先讨论在介质无吸收情况下, 解卷积滤除回波的方法. 回波脉冲等效于主脉冲乘以衰减系数后延迟的叠加: $A(t) = A_0(t) \otimes \sum_{i=0}^{\infty} a_i \delta(t_i)$, 其中 $A(t)$ 为包含多个回波的时域表达式, $A_0(t)$ 表示主脉冲, 令 $a_0 = 1$, t_0 代表主峰位置, a_i 和 t_i 分别表示第 i 个回波相对于主脉冲的幅值以及时间延迟.

对时域表达式做傅里叶变换, 可得:

$$\begin{aligned} A(w) &= A_0(w) \times FT\left[\sum_{i=0}^{\infty} a_i \delta(t_i)\right] \\ &= A_0(w) \times \left[\sum_{i=0}^{\infty} a_i e^{-jw t_i}\right] \end{aligned}, \quad (1)$$

$$A_{\text{main}}(w) = A_0(w) e^{-jw t_0} = \frac{A(w)}{1 + \sum_{i=1}^{\infty} a_i e^{-jw(t_i-t_0)}} \quad (2)$$

其中 $A(w)$ 为已知包含回波的时域波形傅里叶变换, $A_{\text{main}}(w)$ 为去除回波后所求的主峰频谱. 由于回波的存在, $A(w)$ 在 $A_{\text{main}}(w)$ 的基础上叠加了正弦振荡, 若能够计算出式(2)中的 a_i 和 $t_i - t_0$ 的值, 就可以准确恢复出所求的 $A_{\text{main}}(w)$.

在介质没有吸收的情况下, a_i 和 $t_i - t_0$ 求解较容易, 分别找出主脉冲和回波的位置, 并找出各自的峰值点, 即可确定 a_i 和 $t_i - t_0$ 的值. 若介质在主脉冲带宽内有线性或非线性吸收, 回波与主脉冲不再相似, a_i 和 $t_i - t_0$ 无法通过时域的方法准确获取, 为此, 进一步讨论非线性吸收介质下的 $A_{\text{main}}(w)$ 的恢复.

在介质存在非线性吸收时, $A(t)$ 可如下表示:

$$A(t) = A_0(t) \otimes \sum_{i=0}^{\infty} [a_i \delta(t_i) \otimes h_i(t)] \quad ,$$

其中 $h_i(t)$ 表示第 i 个回波通过介质时被吸收的传递函数, 为了方便阐述, 仅考虑含有一个回波的情况, 多回波可以按照单回波的方法逐一处理. 对上式做傅里叶变换得:

$$\begin{aligned} A(w) &= A_0(w) \times [e^{-jw t_0} + a_1 e^{-jw t_1} \times H_1(w)] \\ &= A_{\text{main}}(w) \times [1 + a_1 e^{-jw(t_1-t_0)} \times H_1(w)] \end{aligned}, \quad (3)$$

$$\begin{aligned} A_{\text{main}}(w) &= \frac{A(w)}{1 + a_1 e^{-jw(t_1-t_0)} \times H_1(w)} \\ &= \frac{A(w)}{1 + e^{-jw(t_1-t_0)} \times H_1'(w)} \end{aligned}$$

$$= \frac{A(w)}{1 + H_1''(w)}, \quad (4)$$

a_1 代表电磁波在介质两个表面反射系数的乘积, $H_1(w)$ 表示电磁波被介质吸收的情况, 两者合并为 $H_1'(w)$, 正弦振荡不再等幅, 而是被一个包络所调制, $e^{-jw(t_1-t_0)}$ 和 $H_1'(w)$ 可进一步合并成 $H_1''(w)$. 为了恢复 $A_{\text{main}}(w)$, 需要知道太赫兹脉冲与介质相互作用情况. 通常的想法是, 将反射介质作为样品, 在时域光谱系统中测出它的吸收 $H_1(w)$, 再代入式(4)中求解. 该方法测量得到的 $H_1(w)$ 由于噪声等因素干扰, 与式(4)中的 $H_1(w)$ 有一定的误差, 会导致频域振荡去除不完整, 且需要确定参数 a_1 的值, 较难准确获得, 操作繁琐, 处理复杂.

在含有一个回波的完整时域波形 $A(t)$ 中, 包含了 $t_1 - t_0$ 以及 $H_1'(w)$ 的信息, 通过对 $A(t)$ 的主峰和回波进行处理, 可以恢复出这两个参数. 以探测晶体的回波为例, 将主峰作为参考信号, 回波作为样品信号, 各自做傅里叶变换后相除, 得到所求的 $H_1''(w)$, 包含了幅频 $|H_1'(w)|$ 和相频信息, 前者代表了反射系数 a_1 和介质吸收谱 $|H_1(w)|$ 的乘积. 结果如图 4 所示, 曲线 1 为包含回波的振荡谱, 曲线 2 为不含回波的平滑谱, 频域分辨率较低, 通过这两个曲线, 可以得到振荡的正弦信号如曲线 3 所示, 该振荡不等幅度, 随着频率的增加, 吸收强度变大, 有近似的线性关系. 曲线 4 为 $H_1'(w)$ 幅频信息, 表示 ZnTe 探测晶体在太赫兹波段的吸收谱, 与 G. Gallot 等人的测量结果相符^[10], 求得的 $|H_1'(w)|$ 很好地包络了振荡信号, 可用来滤除频域振荡.

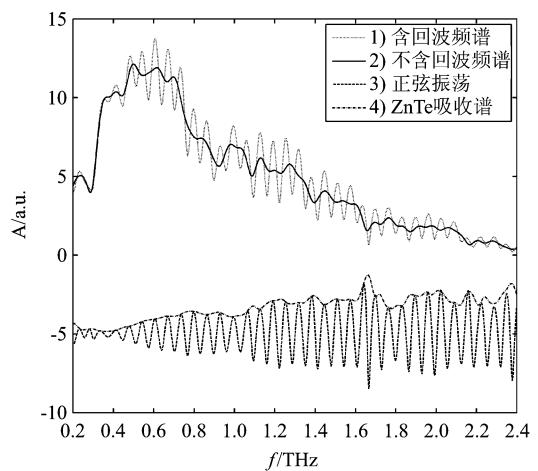


图 4 非线性吸收回波频域图

Fig. 4 Terahertz spectrum with nonlinear absorption

处理 $H_1'(w)$ 的相频信息, 可以恢复出回波与主

峰之间的时间差 $t_1 - t_0$. 对求得的 $H_1''(w)$ 相频解相位结果如图 5 中实线所示, 虚线为线性拟合结果, 可得在研究的频域范围内, 相位满足近似线性条件. 该直线的斜率代表群延迟, 即回波延迟主脉冲的时间, 由此计算出 $t_1 - t_0 = 15.46 \text{ ps}$, 与图 3 的实际观测结果相吻合.

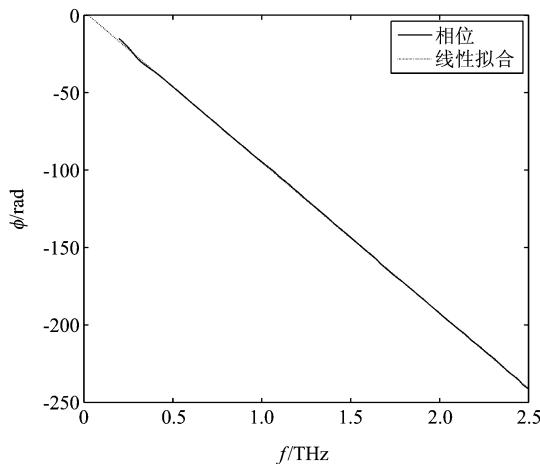


图 5 相频特性曲线

Fig. 5 Phase-frequency response curve

将式(4)中 $H_1''(w)$ 幅频和相频分开, 可得下式:

$$\begin{aligned} A_{\text{main}}(w) &= \frac{A(w)}{1 + H_1''(w)} \\ &= \frac{A(w)}{1 + e^{-j[w(t_1-t_0)+\theta]} \times |H_1'(w)|} \end{aligned} \quad (5)$$

其中 $e^{-j[w(t_1-t_0)+\theta]}$ 表示正弦振荡, 图 5 中的线性相位不一定通过原点, 引入相位项 θ 调节, 使得正弦振荡与 $A(w)$ 中的振荡同相位, $|H_1'(w)|$ 为振荡的包络. 算法假设回波与主峰之间的时间延迟较长, 也即在 t_1 处, 主峰的值 $A_{\text{main}}(t_1)$ 远小于回波 $A(t_1)$, 可以忽略不计, 该假设在大部分情况下成立. 式(5)是去除回波的关键, 由于回波的存在, 造成了谱 $A(w)$ 的振荡, 被回波淹没的主脉冲信号 $A_{\text{main}}(t_1)$ 不会引起振荡现象, 该式在频域上, 仅滤除某一个频率分量的振荡信号, 从而为恢复被淹没信号提供了可能.

算法对参数 $t_1 - t_0$ 以及 θ 的精度要求较高, 分别表示振荡正弦信号的频率和相位, 由系统结构以及介质厚度决定的. 对于一个固定的系统, 可以通过一次参数选择, 使之适合系统, 后续的测量以及去回波都可利用这一套参数, 方便快捷.

3 实验结果

本节首先考虑不包含样品情况下, 非线性解卷

积对 ZnTe 探测晶体的回波滤除, 通过与前人结果对比, 说明本文算法的优势. 随后, 在太赫兹时域光谱系统中放入片状固体样品, 验证算法同样适用于样品回波的滤除; 测量气体样品的太赫兹光谱, 半定量分析算法对光谱分辨率的改进.

3.1 不包含样品情况下的回波滤除结果

图 3 所示的时域波形中, 第一个回波由 ZnTe 探测晶体产生, ZnTe 晶体对太赫兹脉冲有一定的吸收, 导致回波与主脉冲波形相差较大. 按照非线性解卷积讨论的处理方法, 首先恢复正弦振荡的包络 $|H_1'(W)|$, 随后调整 $t_1 - t_0$ 以及 θ 的值, 使得正弦干扰频率与 $A(w)$ 的振荡频率和相位相同, 代入式(5), 求解出滤除回波后的频域波形 $A_{\text{main}}(w)$ 如图 6 曲线 4 所示. 曲线 1 为滤除回波前, 包含振荡的光谱; 将 Ole Hirsch^[8] 提出的去除天线回波算法应用于探测晶体, 光谱处理结果如曲线 2 所示; 曲线 3 为使用 M. Naftaly^[9] 提出线性解卷积思想的回波处理结果, 为了便于观察, 各曲线经过平移处理.

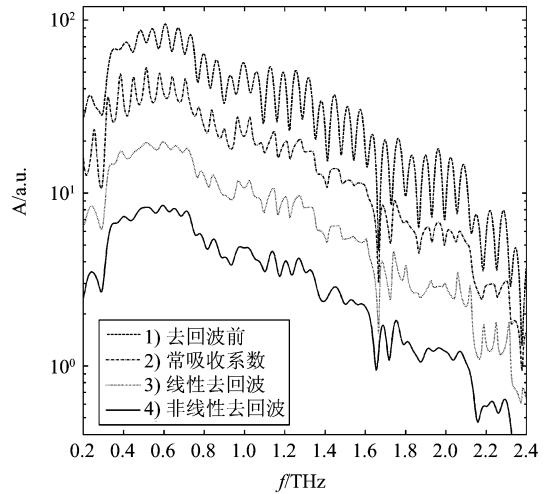


图 6 ZnTe 晶体去回波频域结果

Fig. 6 Echo removing of ZnTe crystal in frequency domain

从频谱图上可以看出, 曲线 2 在 1 THz 以上的振荡有一定的滤除, 1 THz 以下振荡较为明显, Ole Hirsch 方法等效公式(5)中 $|H_1'(W)|$ 为常系数, 可适用于 GaAs 等弱吸收介质, 不适合处理强吸收情况下的回波处理. 曲线 3 在较高频率处仍有一定程度的振荡, M. Naftaly 方法等效公式(5)中 $|H_1'(W)|$ 为线性函数, 在一些含有吸收特征的频率处, 振荡滤除效果不好. 曲线 4 在 $|H_1'(W)|$ 的求解过程中考虑了非线性成分, 光谱更加平滑, 结果优于曲线 2 和 3.

观察图6中去回波前后的曲线1和4,可以看出 $A(w)$ 中的振荡被有效地抑制,得到了求解的 $A_{\text{main}}(w)$.由于式(1)到(5)对回波滤除的讨论仅在频域内进行,若时域内有较好的滤除效果,则能验证该方法的可行性.将 $A_{\text{main}}(w)$ 进行傅里叶逆变换,得到时域波形如图7所示.曲线2在频谱上的低频振荡导致时域回波滤除不理想;光谱在高频部分能量较低,曲线3中的某些高频的振荡对时域波形影响较小;曲线4将位于24 ps处的回波有效地滤除,在一定程度上恢复了被回波淹没的主脉冲信息,在细节上相对曲线3略为平滑.

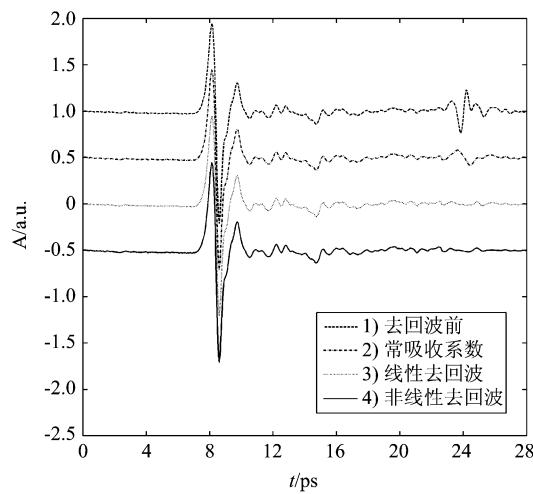


图7 ZnTe 晶体去回波时域结果

Fig. 7 Echo removing of ZnTe crystal in time domain

理论上,对于多回波的情况,可以参照单回波处理算法,从前向后逐个加以滤除,该方法是可行的.

3.2 含样品情况下的回波滤除结果

3.2.1 固体样品的回波处理结果

太赫兹时域光谱系统通常用于测量样品,以得到样品的吸收系数谱,作为检测和识别的依据.此处简要讨论在含样品情况下,滤除由系统GaAs天线和ZnTe晶体产生的回波,样品产生的回波也可以用类似的方法处理.

取麦芽糖片状固体作为样品,厚度为0.98 mm,在太赫兹时域光谱系统下测量,实验在室温空气环境下进行,相对湿度约为25%.在含样品吸收的情况下,相对参考信号,样品信号产生一个延时,主峰被吸收,能量变弱,波形形状改变.采用实验3.1所确定的系统参数去除参考信号以及样品信号的回波,样品信号时域上同样有很好的处理效果,如图8所示.对比样品信号滤除回波前后的频谱,如图9所示.

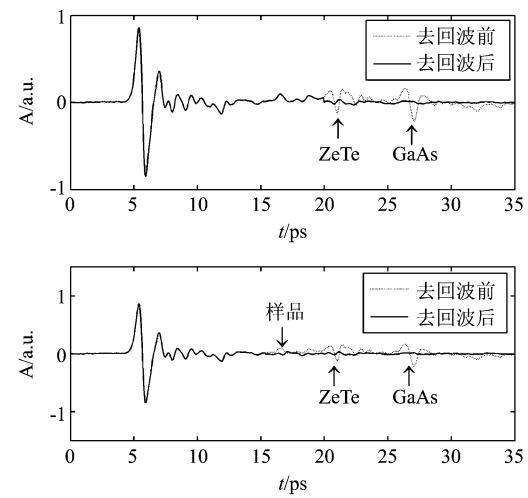


图8 去除麦芽糖回波时域结果

Fig. 8 Removing the echoes with maltose in time domain

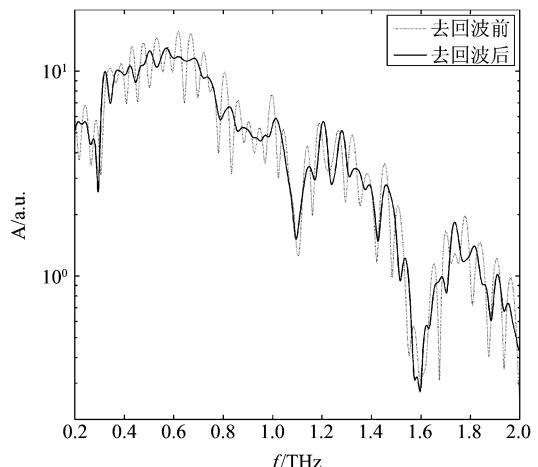


图9 去除麦芽糖回波频域结果

Fig. 9 Removing the oscillations with maltose in frequency domain

示,振荡被有效滤除,可以看出麦芽糖在1.1 THz和1.6 THz附近有特征吸收峰.

3.2.2 气体样品的回波处理结果

固体样品在太赫兹频段吸收峰一般较宽,不利于直接观察滤除回波后对频谱分辨率的改善.气体样品吸收峰相对较窄,为了研究去回波算法对太赫兹频谱分辨率的影响,测量水蒸气的吸收谱,研究光谱分辨率的变化.在干燥的空气环境下,相对湿度约为10%,测量太赫兹脉冲作为参考信号;在潮湿的空气环境下,相对湿度为40%,测量水蒸气吸收后的时域波形作为样品信号.分别计算在不包含回波和去除回波情况下的水蒸气吸收谱,如图10所示.

(下转第276页)

- [J]. *Pattern Recognition*, 2008, 41(4) : 3356 – 3365.
[4] Ingla J , Adragna F , Automatic multi-sensor image registration by edge matching using genetic algorithms, IGARSS 2001: SCANNING THE PRESENT AND RESOLVING THE FUTURE[C]. 2001, VOLS 1-7: 2313 – 2315.
[5] Yi Z , Zhiguo C , Yang X , Multi-spectral remote image reg-

(上接 269 页)

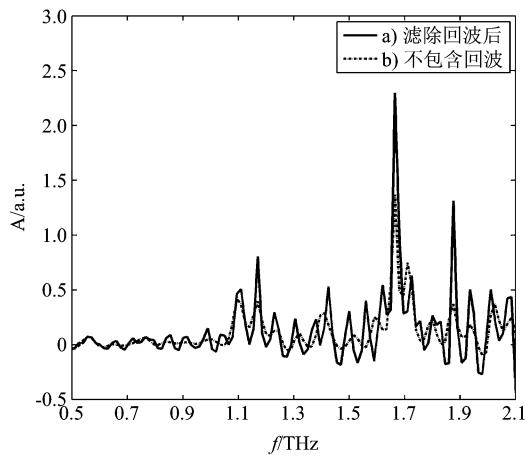


图 10 水蒸气太赫兹波段吸收谱
Fig. 10 Spectrum of water vapor

图中虚线表示不包含回波的情况, 实线为去除回波后计算得到的水蒸气吸收谱。观察水蒸气在 1.177 Hz、1.67 Hz 和 1.87 Hz 处三个吸收峰, 去回波以后, 峰强度明显增加, 半峰宽分别为 15 GHz、15 GHz、15 GHz, 不包含回波时, 半峰宽度分别为 30 GHz、30 GHz、15 GHz, 频谱分辨率提高了接近一倍, 验证了算法的可行性和正确性。由于水蒸气吸收峰很窄, 接近系统分辨能力的极限, 故计算半峰宽时, 做了近似估计。

4 结论

本文在解卷积去回波算法的基础上, 进一步提出了在非线性吸收介质情况下, 回波滤除的方法, 通过恢复未知的回波振荡包络以及回波相对于主脉冲的时间延迟, 对回波的滤除取得了很好的效果。本算法可应用在太赫兹时域光谱系统中, 去除 GaAs 天线和 ZnTe 晶体产生的回波, 旨在提高太赫兹时域光

谱系统的频域分辨率, 算法参数与硬件系统有关, 和样品的种类无关, 可用于物质检测、安全检查等相关领域的实用系统。

REFERENCES

- [1] Ferguson B , Wang S , Gray D , et al. Identification of biological tissue using chirped probe THz imaging[J]. *Microelectronics Journal*, 2002, 33:1043 – 1051.
- [2] Hiromichi Hoshina , Yoshiaki Sasaki , Aya Hayashi , et al. Noninvasive mail inspection system with terahertz radiation [J]. *Applied Spectroscopy*, 2009, 63(1):81 – 86.
- [3] GE Xin-Hao , LV Mo , ZHONG Hua , et al. Terahertz wave reflection imaging system based on backward wave oscillator and its application[J]. *J. Infrared Millim. Waves* (葛新浩, 吕默, 钟华, 等. 反射式太赫兹返波振荡器成像系统及其应用. 红外与毫米波学报), 2010, 29(1):15 – 31.
- [4] Shen Y C , Lo T , Taday P F , et al. Detection and identification of explosives using terahertz pulsed spectroscopic imaging[J]. *Applied Physics Letters*, 2005 , 86 , 241116:1 – 3.
- [5] Davies A G , Burnett A D , FAN Wen-Hua , et al. Terahertz spectroscopy of explosives and drugs[J]. *Materials today*, 2008, 11(3):18 – 26.
- [6] Nakajima S , Hoshina H , Yamashita M , et al. Terahertz imaging diagnostics of cancer tissues with a chemometrics technique[J]. *Applied Physics Letters*, 2007, 90, 041102: 1 – 3.
- [7] Mittleman D M , Gupta M , Neelamani R , et al. Recent advances in terahertz imaging [J]. *Applied Physics*, 1999, 68:1085 – 1094.
- [8] Hirsch O , Alexander P , Gladden L F . Techniques for cancellation of interfering multiple reflections in terahertz time-domain measurements[J]. *Microelectronics Journal*, 2008, 39:841 – 848.
- [9] Naftaly M , Miles R E . A method for removing etalon oscillations from THz time-domain spectra[J]. *ScienceDirect Optics Communications*, 2007, 280:291 – 295.
- [10] Gallot G , Zhang Jiang-Quan , McGowan R W , et al. Measurements of the THz absorption and dispersion of ZnTe and their relevance to the electro-optic detection of THz radiation[J]. *Applied Physics Letters*, 1999;23(7): 2449 – 2452.