

小波变换在太赫兹时域光谱分析中的应用

陈龙旺, 孟 阔, 张 岩*

首都师范大学物理系, 北京市太赫兹波谱与成像重点实验室, 省部共建太赫兹光电子学教育部重点实验室, 北京 100048

摘 要 随着超快激光技术的发展及其人们对太赫兹 (THz) 电磁波段与脉冲光源认识的进一步深入, 太赫兹时域光谱 (THz-TDS) 技术作为一种新的、快速发展的光谱分析方法在许多领域备受关注。利用太赫兹时域光谱技术在空气环境下测量样品时, 样品的太赫兹光谱会因空气中水蒸气的影响而出现振荡现象。文章利用太赫兹时域光谱分析技术分别在氮气和空气环境下测量了七种样品在 0.2 ~ 1.9 太赫兹波段的光谱, 并以氮气环境下的太赫兹光谱为参考, 利用小波变换对空气环境下测量的数据进行了处理, 消除了太赫兹光谱中水蒸气吸收造成的影响, 实验结果证明了该方法的可行性, 在此基础上, 还对其中四种样品做了成像和识别, 并得到了较好的结果。

关键词 太赫兹; 太赫兹时域光谱; 小波变换; 水蒸气吸收

中图分类号: O433.4 **文献标识码**: A **DOI** 10.3964/j.issn.1000-0593(2009)05-1168-04

引 言

太赫兹波 (THz wave), 是指频率在 0.1 ~ 10 THz 范围内的电磁波 (1 THz = 10^{12} Hz), 其波段位于电磁波谱中毫米波和远红外光之间。在 20 世纪 80 年代中期以前, 人们对这个频段的电磁波特知之甚少, 形成了远红外线和毫米波之间所谓的“太赫兹空隙” (THz gap)。近十几年来超快激光技术的迅速发展, 为 THz 脉冲的产生提供了稳定、可靠的激发光源, 促进了 THz 辐射在众多领域上的应用^[1, 2]。飞秒激光激发产生的相干 THz 波, 联合基于光电效应的 THz 探测, 就构成了 THz 时域光谱分析技术。THz 时域光谱分析技术是一种非接触测量技术, 具有较高的信噪比, 能够迅速对样品成分的细微变化作出分析和鉴别, 并且能够对被测材料的物理信息进行快速准确的测量^[3-10]。

THz 时域光谱分析技术在实际应用中所面临的一个问题是空气中水蒸气的影响, 理论和实验均表明水蒸气在太赫兹频率范围存在强烈的吸收^[11]。通常, 在实验中降低水蒸气吸收影响的方法是对实验系统充以氮气或将实验系统抽成真空, 这在实际应用中是不可行的。小波变换^[12-15]是 20 世纪 80 年代后期发展起来的应用数学分支, 是把待分析的信号分解成由原始小波经过移位和缩放后的一系列子小波。小波的多分辨率分析具有良好的时间域和频率域局部化特性, 可以

聚焦到分析对象的任意细节, 具有很多傅里叶变换方法无可比拟的优点, 目前广泛的应用于很多工程领域。本文选择了白糖、食盐、淀粉、苏打、阿斯匹林、聚乙烯和二苯甲酮这七种样品, 首先分别在空气和氮气环境下测量了它们的 THz 光谱, 并利用小波变换对空气中直接测量的数据进行了处理, 消除了水蒸气吸收造成的影响, 然后, 对二苯甲酮、淀粉、苏打和阿斯匹林这四种样品做了成像和识别。

1 小波变换

如果一个平方可积函数 $\Psi(t)$ 满足下列容许条件

$$C_{\Psi} = \int \frac{|\Psi(\omega)|^2}{|\omega|} d\omega < \infty \quad (1)$$

称 $\Psi(t)$ 为一个基本小波或母小波, 式中 $\Psi(\omega)$ 为 $\Psi(t)$ 的傅里叶变换。 $\Psi(t)$ 通过平移和伸缩, 就可以得到一族小波基

$$\Psi_{a, \tau}(t) = \frac{1}{\sqrt{a}} \Psi\left(\frac{t - \tau}{a}\right) \quad (2)$$

其中 a 为伸缩因子, τ 为平移因子。任意一个平方可积函数 $f(t)$ 的连续小波变换为

$$W_f(a, \tau) = \frac{1}{\sqrt{a}} \int f(t) \Psi\left(\frac{t - \tau}{a}\right) dt \quad (3)$$

在实际运用中, 尤其在用计算机实现时, 连续小波变换必须加以离散化, 离散化主要是针对连续的伸缩因子 a 和平移

收稿日期: 2008-03-05, 修订日期: 2008-06-08

基金项目: 国家重点基础研究发展计划项目 (2007CB310408) 和国家自然科学基金项目 (10674038) 资助

作者简介: 陈龙旺, 1982 年生, 首都师范大学物理系硕士研究生 e-mail: king3662@163.com

*通讯联系人 e-mail: yzhang@mail.cnu.edu.cn

因子 τ 的离散, 通常取 $a = 2^j$, $\tau = 2^j$, 此时, $\Psi_{a, \tau}(t)$ 变为 $\Psi_{j, k}(t)$, 且

$$\Psi_{j, k}(t) = 2^{-j/2} \Psi(2^{-j}t - k), \quad j, k \in \mathbb{Z} \quad (4)$$

对应 WT_f 的为

$$WT_f(j, k) = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_{j, k}^*(t) dt \quad (5)$$

2 THz光谱的获取

我们把样品对 THz 波的吸收系数曲线称作其 THz 光谱。实验数据采用 Timothy 和 DuVillaret 等^[16-18]提出的提取材料 THz 光学参数的物理模型处理。样品的吸收系数 α 可用下式表示

$$\alpha = \frac{4\pi k\nu}{c} = \frac{2}{d} \ln \left[\frac{4n}{A(n+1)^2} \right] \quad (6)$$

其中, $n = c\varphi/2\pi d\nu + 1$ 为样品的折射率, A 和 ν 分别为振幅和频率, φ 为样品与参考信号的位相差, d 为样品的厚度。

3 实验装置及样品制备

本实验采用的是太赫兹时域光谱透射系统, 系统光路如图 1 所示。图中 BS 为分束器, HWP 为半波片, QWP 为四分之一波片, M1 ~ M14 为反射镜, PM1 ~ PM4 为离轴抛物面镜, L1 ~ L3 为聚焦透镜, P 为检偏器, A1 ~ A2 为光阑, PBS 为沃拉斯顿棱镜。系统使用的飞秒激光器是自锁模可调谐式钛蓝宝石激光器, 其产生的飞秒激光脉冲中心波长为 810 nm, 重复频率为 82 MHz, 脉宽为 100 fs, 输出功率为 980 mW。钛蓝宝石产生的飞秒激光脉冲经分束棱镜 (CBS) 被分为两束, 一束作为产生太赫兹脉冲的泵浦光, 另一束作为探测太赫兹脉冲的探测光。泵浦光经过频率为 1.1 kHz 的斩波器调制, 通过时间延迟台后, 经透镜聚焦以 45° 入射角照射在 $\langle 100 \rangle$ -InAs 晶体表面上, 辐射出太赫兹脉冲, 产生的太赫兹脉冲经两对表面镀金的离轴抛物面镜准直和聚焦, 通过一个高阻硅薄片, 聚焦在 $\langle 110 \rangle$ -ZnTe 晶体上; 探测光与太赫兹脉冲同时聚焦 ZnTe 晶体的同一位置。偏振态被调制的探测光经过四分之一波片 (QWP) 和透镜 L3 聚焦到渥拉斯顿棱镜 (PBS), 被分为偏振方向互相垂直的两个分量, 被差分探测器—光电二极管探测, 差分信号经锁相放大器解调后输入计算机得到最终的太赫兹脉冲时域信息。

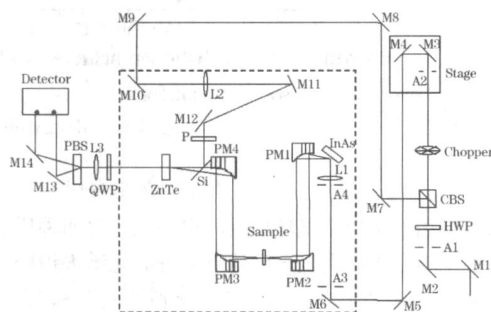


Fig. 1 Schematic of the experiment setup

实验所需的样品均经过研磨成粉末状, 用 5 t 的压力压成圆柱形的薄片。薄片样品直径为 13.0 mm, 厚度为 1 mm 左右, 且结构均匀, 前后表面平行。

4 实验结果与讨论

4.1 样品 THz 光谱的测量

实验中采用上述实验装置分别在氮气和空气环境下测量了样品信号和参考信号。在氮气环境下测量时, 为了降低空气中水分对太赫兹波的吸收, 我们在上述实验装置虚线框内充入氮气, 使得实验环境的湿度低于 4%, 实验温度保持在 21° 左右。

氮气环境下七种样品的 THz 光谱显示, 阿斯匹林, 二苯甲酮, 白糖各有一明显的吸收峰 (见图 2 ~ 图 4 中的曲线 a, 为清楚起见, 各样品的 THz 光谱作了平移处理), 食盐, 淀粉, 苏打的 THz 光谱随频率的增加呈上升趋势, 而聚乙烯的 THz 光谱则近似于一条直线。空气环境下各 THz 光谱均有局部振荡现象 (见图 2 ~ 图 4 中的曲线 b), 这是由于空气中水蒸气对 THz 辐射吸收所致。

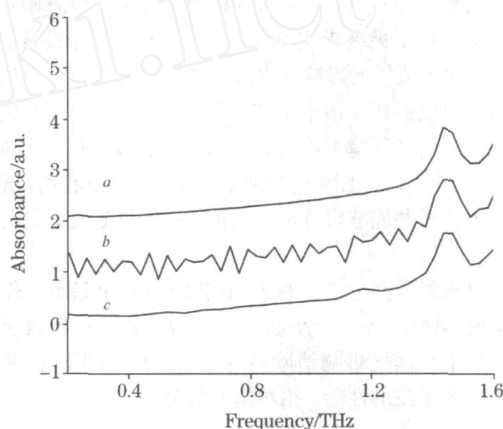


Fig. 2 THz spectra of white sugar

a: In the nitrogen environment; b: In air environment; c: Processed result of b using wavelet transform

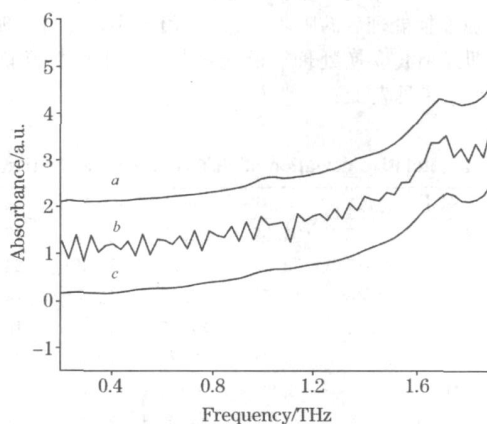


Fig. 3 THz spectra of aspirin

a: In the nitrogen environment; b: In air environment; c: Processed result of b using wavelet transform

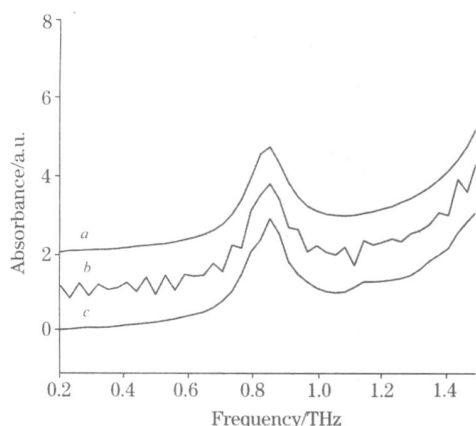


Fig. 4 THz spectra of benzophenone

a: In the nitrogen environment; b: In air environment;
c: Processed result of b using wavelet transform

事实上水蒸气的吸收是系统本身的响应,与样品的属性无关,利用(6)式求解吸收系数时理论上能够除去水蒸气的影响,但由于噪声的存在,信号的频谱在水蒸气吸收线对应频率处信噪比相对较低,相除运算会放大这些位置附近的噪声,这就导致了最终求得的 THz 光谱会出现振荡现象。因此,要消除水蒸气的影响就要除去 THz 光谱曲线上的振荡,即尽量除出或消弱频谱中水蒸气的吸收线。为此,我们采用小波变换对空气环境下测得的数据进行滤波处理后再求吸收系数,结果见图 2~图 4 中的曲线 c 所示,可以看到,光谱曲线上的干扰振荡能够很好地消除掉,并且与氮气下的光谱比较接近。

为寻求最佳的小波,使得光谱处理效果最好,作者对 sym4, db4, haar 等多个小波做了研究,并采用氮气下的光谱与空气下水蒸气影响消除后的光谱之间的相对偏差 Δ 来定量考察各小波的性能。相对偏差的定义为

$$\Delta = \frac{\sum |\alpha_N(\omega_n) - \alpha_w\omega_n|}{\sum |\alpha_N(\omega_n)|} \quad (7)$$

式中, $\alpha_N(\omega_n)$ 为氮气环境下的吸收系数, $\alpha_w(\omega_n)$ 为空气环境下经小波变换处理后的吸收系数。 Δ 值越小,表明处理效果越好,即经小波变换处理后的光谱与氮气下的标准谱愈接近,所得结果见表 1。

Table 1 Relative deviation of different wavelet (units: %)

样品名称	sym4	db4	haar	bio3.5	coif5
白糖	22.73	24.85	24.47	25.06	27.41
食盐	24.12	23.55	23.36	23.80	24.23
苏打	14.43	14.77	15.82	15.25	14.89
淀粉	15.21	14.45	14.78	15.01	15.71
聚乙烯	45.10	46.31	49.88	42.84	46.59
阿司匹林	3.42	3.82	4.04	3.17	2.96
二苯甲酮	23.89	24.39	24.39	23.87	23.59

由表 1 可知,用于处理白糖、食盐、苏打、淀粉、聚乙烯、阿司匹林和二苯甲酮这七种样品的最佳小波分别为 sym4

小波、haar 小波、sym4 小波、db4 小波、bio3.5 小波、coif5 小波、coif5 小波。除食盐外,其它样品的最佳小波与实验结果基本吻合。关于小波变换的层数选取问题,作者也进行了一些研究,实验中发现,进行小波变换的层数愈高,效果愈差,一般选择 1~3 层较为合适。

4.2 样品成像及识别

在空气中,对淀粉、阿司匹林、苏打、二苯甲酮四种样品进行了逐点扫描成像。在逐点扫描成像过程中,通过一个 $x-y$ 的移动台来改变样品的方位,从而使 THz 脉冲通过样品的不同点,对不同时间延迟样品进行扫描,这样就得到了 $x-y$ 平面上每一空间点上带有样品信息的透射时域波形。实验时,环境温度保持在 21 左右,湿度保持在 13.4% 左右。

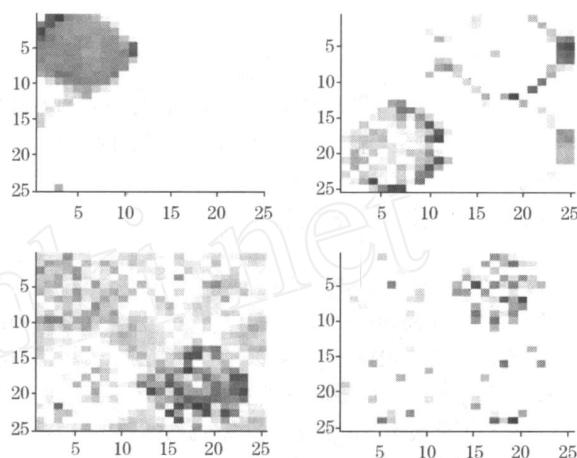


Fig. 5 Component spatial distribution achieved with data measured in air environment

(a): Benzophenone; (b): Starch; (c): Sota; (d): Aspirin

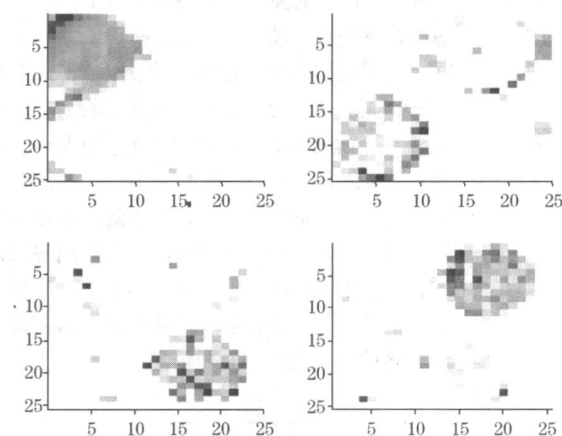


Fig. 6 Component spatial distribution achieved with processing of wavelet transform

(a): Benzophenone; (b): Starch; (c): Sota; (d): Aspirin

采用空间图样成份分析^[19]的方法来实现样品图像的识别。首先利用上文中空气环境下测得的光谱对四种样品图像进行识别,然后再利用氮气环境下测得的光谱去识别经小波变换处理后的样品图像,识别结果分别见图 5 和图 6 所示。可见,上述两种方法都能正确的把四种样品识别出来,但经小波变换处理后的样品图像识别率更高,识别效果更为清

晰。由于在实际应用中,存储在数据库中的数据通常是氮气下的标准谱,所以第二种方法更具有应用价值。

5 结 论

本文通过 THz 时域光谱分析技术分别测量了七种样品

在空气和氮气环境下的 THz 光谱,采用小波变换消除了空气下 THz 光谱测量和成像过程中水蒸气的吸收造成的影响,处理结果较为理想。因此,在实际应用中,可以考虑通过对实验数据的后续处理来消除水蒸气的影响。

致谢:感谢首都师范大学物理系的江德军、张平同学在实验样品上提供的帮助。

参 考 文 献

- [1] James J, Cui H L. Proceedings of the SPIE, 2007, 6549: 654.
- [2] Liu H B, Zhong H, Kapowicz N, et al. Proceedings of the IEEE, 2007, 95: 1514.
- [3] Leahy-Hoppa M R, Fitch M J, Zheng X, et al. Chem. Phys. Lett., 2007, 434: 227.
- [4] Liu H B, Chen Y, Bastiaans G J, et al. Opt. Express, 2006, 14: 415.
- [5] Baker C, Lo T, Tribe W R, et al. Proceedings of the IEEE, 2007, 95: 1559.
- [6] Federici J F, Schulkin B, Huang F, et al. Semicond. Sci. Technol., 2005, 20: 266.
- [7] Kodo K, Yuichi O, Yuuki W, et al. Opt. Express, 2003, 11: 2549.
- [8] Li N, Shen J L, Sun J H, et al. Opt. Express, 2005, 13: 6750.
- [9] WANG Xiao-hong, ZHANG Liang-liang, HU Ying, et al (王晓红, 张亮亮, 胡 颖, 等). Spectroscopy and Spectral Analysis (光谱学与光谱分析), 2006, 26(3): 385.
- [10] HU Ying, WANG Xiao-hong, GUO Lan-tao, et al (胡 颖, 王晓红, 郭澜涛, 等). Spectroscopy and Spectral Analysis (光谱学与光谱分析), 2006, 26(6): 1008.
- [11] Van Exter M, Fittinger C, Grischkowsky D. Opt. Lett., 1989, 14: 1128.
- [12] Coifman R, Daubechies I. Pure and Appl. Math., 1988, 41: 909.
- [13] Mallat S G. Pure and Appl. Math., 1988, 41: 674.
- [14] Grossmann A, Morlet J. SIAM Journal of Mathematical Analysis, 1984, 15(4): 723.
- [15] Beylkin G, Coifman R, Comm Rokhlin V. Pure Appl. Math., 1991, 44: 141.
- [16] Timothy D D, Richard G B, Daniel M M. J. Opt. Soc. Am. A, 2001, 18: 1562.
- [17] Duvillaret L, Garet F, Coutaz J L. IEEE J. Selected Topics Quantum Electronics, 1996, 2: 739.
- [18] Duvillaret L, Garet F, Coutaz J L. Appl. Opt., 1999, 38: 409.
- [19] Kawata, Sasaki K, Minami S. J. Opt. Soc. Am., 1987, 4: 2101(A).

Application of the Wavelet Transform in Terahertz Time-Domain Spectroscopy

CHEN Long-wang, MENG Kuo, ZHANG Yan*

Department of Physics, Capital Normal University, Beijing Key Lab for Terahertz Spectroscopy and Imaging, Key Laboratory of Terahertz Optoelectronics, Ministry of Education, Beijing 100048, China

Abstract With the development of ultrafast laser technique and deeper understanding of the terahertz (THz) electromagnetic wave, THz time domain spectroscopy (THz-TDS) has become a novel and rapidly developed technique. It has been applied in many fields such as biomedical diagnostics, semiconductor wafer diagnostics, and inspection of artwork. However, the achieved spectrum will exhibit strong oscillations when it is measured in air environment due to the absorption of water vapor. In the present paper, spectra in the range of 0.2-1.9 THz for seven kinds of samples were measured by THz-TDS in both nitrogen and air environment. The wavelet transform was used to process the data measured in the air environment to eliminate the influence of water vapor. The feasibility of this method was demonstrated by the experimental results.

Keywords Terahertz; Terahertz time-domain spectroscopy; Wavelet transform; Water vapor absorption

* Corresponding author

(Received Mar 5, 2008; accepted Jun 8, 2008)