

文章编号: 1672-2892(2011)03-0280-03

便携式太赫兹波谱仪的概念设计

吴卫东

(中国工程物理研究院 激光聚变研究中心, 四川 绵阳 621900)

摘要: 为了获得材料在太赫兹波段的信息, 设计了一种频率在 1 THz~15 THz 范围的便携式波谱仪。该仪器以可调谐的 THz 量子级联激光器为光源, 实现 1 THz~15 THz 的连续“白光”发射, 以高灵敏度的超晶格结构半导体为探测器, 利用电子学系统、计算机控制和数据处理得出材料在该波段的光谱信息, 进而得出材料的结构信息。由于太赫兹量子级联激光器具有发热少, 衰减弱, 信噪比高, 范围宽等优点, 以此为光源的波谱仪小巧紧凑, 便于移动和携带, 具有传统波谱仪无法实现的优点。

关键词: 太赫兹波谱仪; 便携式; 分子振动光谱; 量子级联激光器

中图分类号: TN206

文献标识码: A

Concept design of portable terahertz wave spectrometer

WU Wei-dong

(Research Center for Laser Fusion, China Academy of Engineering Physics, Mianyang Sichuan 621900, China)

Abstract: In order to obtain material information in the terahertz band, a portable spectrometer in 1 THz–15 THz was designed in this study. THz quantum cascade laser with wavelength tunable was used as light source, which can emit continuous “white” light in 1 THz–15 THz, and semiconductor of superlattice structure was used as high sensitivity detector in the instrument. The electronics, computer control and data processing system were used to derive the spectral information of the materials, which would reflect the structural information. The terahertz quantum cascade laser bears the advantages of less heat output, less attenuation, high ratio of signal to noise, and wide range. The spectrometer is compact and easy to be moved when it adopts the terahertz quantum cascade laser as a light source. It exceeds conventional spectrometer in many applications.

Key words: THz wave spectrometer; portable; spectrum of molecular motion; quantum cascade lasers

太赫兹波在电磁波频谱中占有很特殊的位置, 其长波方向与毫米波相重合, 短波方向与红外线相重合, 位于电子学与光子学的交叉区域。太赫兹波段光谱包含了丰富的物理和化学信息, 研究物质在太赫兹波段的光谱信息能弥补以往在该波段所缺乏的关于物质结构、性质以及分子的低频运动方式等的信息, 对于物质结构的探索具有重要意义。目前用于材料分析的光谱仪包括: 紫外-可见-近红外光谱仪、红外谱仪和拉曼谱仪, 这 3 种谱仪给出的材料信息各不相同, 谱型和谱结构的物理意义也不相同。紫外-可见-近红外谱反映的是材料中电子在不同能级之间的跃迁。红外光谱(吸收或反射)的谱峰反映的是材料中原子间非对称振动对光的吸收和散射。拉曼光谱较为特殊, 它不仅反映材料中原子间对称振动模式信息, 而且给出某些原子-分子转动模式的信息。拉曼光谱与红外光谱在某种程度上具有一定的互补性, 二者对同一种材料进行分析时往往能给出其精确的结构信息。但是 2 种谱仪对低能级间距的振动-转动仍无法检测。以红外光谱为例, 尽管许多仪器公司宣称他们的谱仪可使测量范围低至 50 cm^{-1} (1.5 THz), 但是 $400\text{ cm}^{-1}\sim 50\text{ cm}^{-1}$ 这段范围内红外谱仪的辐射能量非常微弱, 因而往往得不到有用的信息。位于 $20\text{ }\mu\text{m}\sim 300\text{ }\mu\text{m}$ (15 THz~1 THz) 波段的光谱包含了非常丰富的物质的物理和化学信息, 它反映了许多轻分子的转动频率, 大分子活性官能团的振动模式, 生物大分子的低频振动模式, 固体材料的声子、磁振子, 等离子体激元以及液体分子振动等现象^[1-4]。研究物质在太赫兹波段的光谱能弥补以往在该波段所缺乏的关于物质结构、性质以及分子的低频运动方式等的信息, 对于物质结构的探索具有重要意义。同时太赫兹脉冲光源与传

统的光源相比,具有能量低,衰减小,信噪比高,频谱宽等优点,在无损检测中也将扮演重要角色^[5]。

1 理论分析

1.1 目标设定

在设计出实用化的便携式 THz 谱仪之前,应首先明确目标—相似结构的材料区分和未知材料的结构分析。要实现这一目标,现有的检测分析仪器是否够用?举一个简单例子:在某一高分子链,对其末端的某一基团分别用另外 2 种基团替换,形成了 2 种新的高分子链,如何区分?显然用现有的手段来区分它们是十分困难的。因此,先从理论上分析,从而得到谱仪的整体设计。为简单起见,以多原子分子为例。

与双原子分子相比,多原子分子的振动-转动谱复杂得多。不仅原子排列的几何构型对谱有影响,而且分子中原子的种类对光谱结构影响也十分大。根据经典的分子光谱理论^[6],分子的转动能级 E 可标识为:

$$E = h\nu = hc \cdot F(J, K) \quad (1)$$

式中: h 为普朗克常数; ν 为转动频率; F 为转动项值,是分子的转动量子数 J 和 J 沿轴向的分量子数 K 的函数; c 为光速。对于不同结构的分子,其转动项值 F 具有不同的表达式^[6]:

$$F(J, K) = 2B(J+1) - 4D(J+1)^3 \quad (\text{线型分子}) \quad (2)$$

$$F(J, K) = BJ(J+1) + (A-B)K^2 - D_J J^2(J+1)^2 - D_{JK} J(J+1)K^2 - D_K K^4 \quad (\text{对称、陀螺分子}) \quad (3)$$

$$F(J, K) = BJ(J+1) \quad (\text{球陀螺分子}) \quad (4)$$

$$F(J, K) = BJ(J+1) + (C-B)K^2 \quad (\text{不对称球陀螺分子}) \quad (5)$$

式(2)~式(5)中 A, B, C, D 为分子在不同方向上的转动光谱常数。根据经典分子光谱理论,多原子分子光谱的转动光谱很难被观察到,原因是这些光谱项均在很远的红外区域。以简单的氢氰酸(HCN)为例,它的转动能级从 $100 \mu\text{m}$ ~ $300 \mu\text{m}$ (3 THz ~ 1 THz) 范围内分布了至少 5 个以上转动能级,但实验上尚未观察到这些能级的跃迁。

事实上,就目前许多大分子而言,在原子种类和数据相同或差别不大的情况下,转动谱的观测成为区分它们的重要手段。但正如上述理论分析所表明,多原子分子的转动谱通常位于长波区($20 \mu\text{m}$ ~ $300 \mu\text{m}$)或者更长的长波区(可达 $2000 \mu\text{m}$)。这一谱段正好落在当前的研究热点—THz 波段范围内。有关多原子分子的结论可以推广到高分子固体材料分析领域。对于无机晶体材料和无机非晶材料,则主要是侧重于低频声子谱分析,尤其是声学声子谱分析,这一谱段也正好落在 THz 谱段范围内。

基于上述分析,设计 THz 波谱仪应具有如下功能:波长范围 $20 \mu\text{m}$ ~ $300 \mu\text{m}$,波数分辨力为 0.3 cm^{-1} ,可测透射谱和反射谱;能获得多原子分子、高分子固体材料的转动谱;可获得无机晶体材料和无机非晶体材料的红外激活模式声学声子谱。

1.2 现有红外和拉曼谱仪的困难

在商品化的红外谱仪中,要获得转动谱只能通过振动谱带组来识别转动特征。但由于各种因素的干扰,相似结构的振动-转动谱带组很难区分。另外,由于现有红外谱仪在长波段十分微弱,要获得纯转动谱更困难,因而当分子中原子数目增多,结构变得很复杂时,用红外谱仪区分它们十分困难。

在商品化的拉曼谱仪中,由于拉曼激活模式的限制,相当一部分结构相似的材料无法识别,因此现有商品化的红外及拉曼谱仪不能实现设定的目标。

1.3 光源的设计

要实现 1 THz ~ 15 THz 的光波输出,量子级联激光器是较好的输出,但目前的 THz 量子级联激光器是单波长输出的,要实现对波长的调谐和多波长输出就需要设计一种新型的结构。

1.3.1 电压调谐

由图 1 可知,当加载电压不同时,超晶格的跃迁能级之间的间距不同,但这种调控是有限的,因而只能覆盖很小的波谱范围。

1.3.2 串联结构

利用半导体生长技术,可在一个芯片上叠加多个单元层,实现多波长的同时输出,正如现在的白光二极管那样,但这样输出的是线谱,不是连续谱,因而也不能覆盖全谱段。

1.3.3 电压调谐和串联结构结合

将电压调谐和串联结构结合起来,即把调节电压加在叠加了多个单元层的芯片上,实现在所需的谱段内连续调控,达到全谱段连续覆盖的目的。

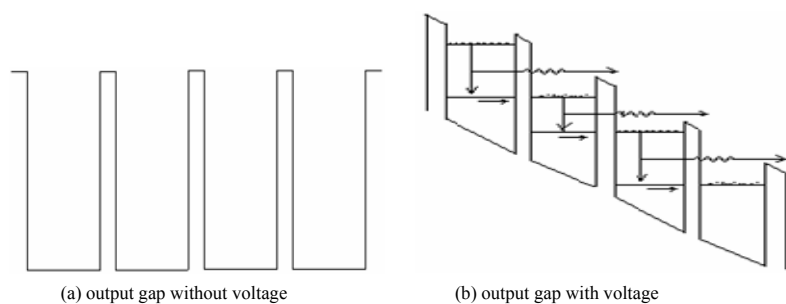


Fig.1 Schematic diagram of voltage regular wavelength

图1 电压调控波长示意图

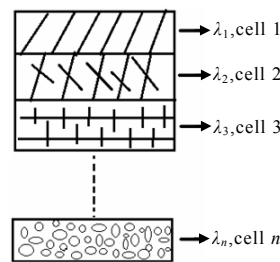


Fig.2 Structure of multiple cells in series

图2 多个单元串联结构

2 THz 波谱仪整体构架

图3是设想中的THz波谱仪整体构架示意图。15 THz~1 THz 的波段由连续可调的“白光”THz量子级联激光器输出,经分束片分成2束,一束经过样品到达探测器,另一束为参比光,用于消除光源的波动和仪器响应函数,经电子学系统输出信号,进行谱分析。在这样一个谱仪中,除了光源要特殊设计外,还需要对分束片和探测器进行特殊设计。首先,分束片要设计成15 THz~1 THz宽谱范围内均满足半透半反需要的无源器件;其次,探测器要求在15 THz~1 THz之间灵敏度较高,响应较快的器件。只要上述3种关键元件研制成功后,这种结构的谱仪就有可能实用化。

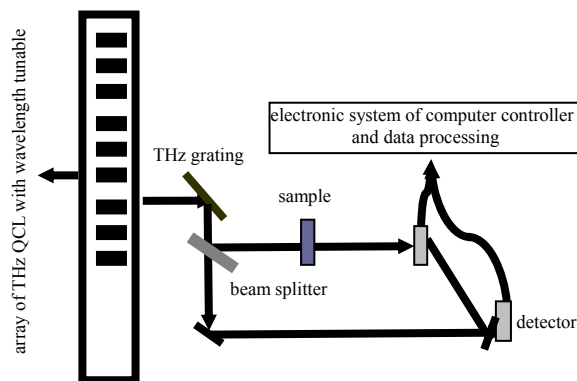


Fig.3 Schematic diagram of the structure of THz spectroscopy system

图3 THz波谱仪整体构架示意图

3 结论

本文探讨了一种新型THz波谱仪的概念设计,对其中3个关键元件:源、分束片和探测器的要求作了说明。按这种方式设计的谱仪具有可获得红外激活模式的转动谱,可获得红外激活模式的声学声子谱,测量波长范围20 μm ~300 μm (15 THz~1 THz);波长分辨率0.3 cm^{-1} 。

参考文献:

- [1] Parthasarathy R, Globus T, Khromova T, et al. Dielectric properties of biological molecules in the Terahertz gap[J]. Appl. Phys. Lett., 2005, 87(11): 113901-1-113901-3.
- [2] Floss C, Stadermann F J, Braadley J, et al. Carbon and nitrogen isotopic anomalies in an anhydrous interplanetary dust particle[J]. Science, 2004, 303: 1355-1358.
- [3] 刘盛纲. 太赫兹科学技术的新发展[J]. 中国基础科学, 2006, 8(1): 7-12.
- [4] 姚建铨. 太赫兹技术及其应用[J]. 重庆邮电大学学报: 自然科学版, 2010, 22(6): 703-707.
- [5] 许景周, 张希成. 太赫兹科学技术和应用[M]. 北京: 北京大学出版社, 2007.
- [6] 赫兹堡. 分子光谱与分子结构[M]. 王鼎昌, 译. 北京: 科学出版社, 1986.

作者简介:



吴卫东(1967-),男,武汉市人,研究员,博士生导师,主要从事 ICF 薄膜科学与制备技术及纳米材料等领域的科研工作,发表学术论文 100 多篇,专利 1 项, email: wuweidongding@163.com.