УДК 621.372.8:535 ТЕРАГЕРЦОВАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ ВОЗДУХА ПРИ ИСПОЛЬЗОВАНИИ ВОЛНОВОДОВ С ПОЛОЙ СЕРДЦЕВИНОЙ

А. В. ШИЛОВ, А. Б. СОТСКИЙ, *Л. И. СОТСКАЯ

УО «Могилевский государственный университет им. А. А. Кулешова» *ГУ ВПО «Белорусско-Российский университет» Могилев, Беларусь

UDC 621.372.8:535 TERAHERTZ SPECTROSCOPY OF AIR WITH THE USE OF HOLLOW-CORE WAVEGUIDES *A. V. SHILOV, A. B. SOTSKY, L. I. SOTSKAYA*

Аннотация

Теоретически исследованы вопросы импульсной терагерцовой спектроскопии воздуха, заполняющего полую сердцевину полимерных капиллярных волноводов кругового сечения с металлизированной внешней границей. На примере восстановления спектра поглощения водяного пара получены оценки точности метода.

Ключевые слова: волновод, мода, терагерцовая импульсная спектроскопия.

Abstract

Problems of the pulse terahertz spectroscopy of air filling the hollow core of polymer capillary waveguides with circular cross section are investigated theoretically. Effectiveness of the approach is checked on example of the water vapor absorption spectrum reconstruction.

Key words:

waveguide, mode, terahertz pulsed spectroscopy.

В настоящее время интенсивно развивается метод импульсной терагерцовой (ТГц) спектроскопии сред. Данный метод предполагает использование импульсных источников ТГц излучения, принцип действия которых основан на нелинейном преобразовании оптических лазерных импульсов в ТГц-диапазоне с помощью фотоантенн. В стандартном варианте метода ТГц спектроскопии воздуха сравниваются импульсы, прошедшие через однородное пространство [1]. Здесь с помощью регулируемой линии задержки измеряются импульсы $E_y^{(0)}(\tau)$ и $E_y(\tau)$, ($\tau = t - zc^{-1}$, t – время, c – скорость света), прошедшие расстояние z между источником и приемником ТГц поля через чистый сухой воздух и воздух с исследуемой примесью соответственно. Определение спектра коэффициента поглощения примеси k(f) осуществляется по формуле [1]

$$k(f) = -(k_0 z)^{-1} \ln \left| \hat{E}_y(f) [\hat{E}_y^{(0)}(f)]^{-1} \right|, \qquad (1)$$

где $k_0 = 2\pi f c^{-1}$; $\hat{E}_y(f)$ и $\hat{E}_y^{(0)}(f) - фурье-образы функций <math>E_y(\tau)$ и $E_y^{(0)}(\tau)$; f – частота.

Серьезным препятствием при таком подходе является значительная дифракционная расходимость ТГц импульсного излучения [1].

Использования ТГц волновода с полой сердцевиной, содержащей исследуемый воздух, позволяет устранить эффект дифракционной расходимости и за счет этого существенно повысить отношение сигнал/шум. Вместе с тем, волноводная ТГц спектроскопия также имеет ограничения, которые исследуются в настоящем сообщении.

Среди волноводов с полой сердцевиной, предназначенных для передачи ТГц сигналов, наиболее перспективны полимерные капилляры кругового сечения с металлизированными границами. Известны два типа таких волноводов: волноводы 1, у которых металлическое покрытие микронной толщины, превышающей толщину скин-слоя, нанесено на внутреннюю поверхность полимерного капилляра и волноводы 2, которые отличаются от волноводов 1 наличием дополнительного диэлектрического слоя с диэлектрической проницаемостью $\varepsilon_L = \varepsilon'_L + i\varepsilon''_L$ и толщиной *d*, который находится между металлическим покрытием и полой сердцевиной. Данный слой служит для минимизации затухания основной моды волновода на частоте *f* за счет изоляции ее поля от металлического покрытия. Приближенно такая минимизация достигается при условии

$$k_0 d = (\varepsilon_L' - 1)^{-0.5} \tan^{-1} [(\varepsilon_L' (\varepsilon_L' - 1)^{-0.5})^{0.5}].$$
⁽²⁾

В современных работах, где анализируются характеристики названных волноводов, основное внимание уделяется расчету затухания их мод в случае монохроматического излучения. Пропускание через волноводы широкополосных ТГц импульсов исследовалось только экспериментально, с использованием коротких отрезков волноводов, длина которых не превосходила 45 см. Слабо изучены и вопросы ТГц спектроскопии воздуха, заполняющего полую сердцевину волноводов. Качественные соображения, высказанные в литературе, позволяют лишь предположить, что основным ограничивающим фактором при такой спектроскопии может быть многомодовый режим работы капиллярных волноводов с металлизированной границей, неизбежный при передаче широкополосных импульсов.

Ниже представлена техника расчета распространения ТГц импульсов в волноводах. В ней поле импульса представляется в виде суперпозиции импульсов полей отдельных волноводных мод, найденных интегрированием монохроматических компонент. Выполнен сопоставительный анализ капиллярных волноводов обоих из указанных выше типов с позиций восстановления спектра поглощения примесного компонента в воздухе, заполняющем полую сердцевину волновода методом ТГц спектроскопии. В качестве примесного компонента рассмотрен водяной пар.

Пусть на входной торец волновода, находящийся в плоскости z = 0, поступает линейно поляризованный вдоль оси 0y ТГц импульс, создаваемый фотоантенной. Воспользуемся моделью этого импульса [2]

$$E_{y} = A \exp(-r^{2} w^{-2}) P(t), \qquad (3)$$

где E_y – компонента напряженности электрического поля; A – амплитудный множитель; $r = \sqrt{x^2 + y^2}$; w – радиус гауссова пучка;

$$P(t) = -1,229U(-2,-\zeta\sqrt{2})\exp(-0,5\zeta^{2}), \qquad (4)$$

где U(...) – функция параболического цилиндра; $\zeta = tT^{-1}$; t – время; t – масштабный фактор, который может регулироваться длительностью и условиями фокусировки оптического лазерного импульса [2]. Фурье-образ функции (4) $\hat{P}(f)$, определяющий спектр импульса, имеет вид:

$$\begin{split} \hat{P}(f) &= -\frac{0,6143}{\sqrt{\pi}} T \exp\left(-\frac{\Omega^2}{4}\right) \sum_{j=0}^{\infty} \left(\prod_{l=1}^{j} \frac{l+j}{4}\right) \sum_{k=0}^{j} [A_j^{(0)} S_{kj}^{(0)} - i(j+\frac{1}{2}) \Omega A_j^{(2)} S_{kj}^{(2)}], \\ \Omega &= 2\pi f T, \\ A_j^{(p)} &= A_{j-1}^{(p)} \frac{(4j-7+p)}{2j(2j-1+p)}; \\ S_{kj}^{(p)} &= -S_{k-1j}^{(p)} \frac{(j-k+1)\Omega^2}{2k(2k-1+p)}; \\ A_0^{(0)} &= -\Gamma\left(\frac{5}{4}\right) 2^{\frac{1}{4}} (\sqrt{\pi})^{-1}; \\ A_0^{(2)} &= -\Gamma\left(\frac{7}{4}\right) 2^{\frac{5}{4}} (\sqrt{\pi})^{-1}; \\ S_{0j}^{(0)} &= S_{0j}^{(2)} = 1. \end{split}$$

Максимум модуля $|\hat{P}(f)|$, равный 0,2215*T*, достигается при $f = 0,2769T^{-1}$. В дальнейших расчетах выбрано значение $T = 0,2769 \,\mathrm{nc}$, при котором указанному максимуму соответствует частота $f = 1 \mathrm{T} \Gamma \mathrm{I}$.

Электромагнитное поле импульса в волноводе представим в виде суммы импульсов полей волноводных мод:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{E}(r,\phi,z,t) \\ \mathbf{H}(r,\phi,z,t) \end{pmatrix} = A \sum_{\nu=1}^{m} \begin{pmatrix} \mathbf{E}_{\nu}(r,\phi,z,t) \\ \mathbf{H}_{\nu}(r,\phi,z,t) \end{pmatrix},$$
(5)

где r, φ, z ($z \ge 0$) – цилиндрические координаты; ν – номер моды; m – число учитываемых мод.

$$\begin{pmatrix} \mathbf{E}_{v}(r,\phi,z,t) \\ \mathbf{H}_{v}(r,\phi,z,t) \end{pmatrix} = 4\pi \operatorname{Re} \int_{0}^{\infty} C_{v}(f) \begin{pmatrix} \mathbf{e}_{v}(r,\phi,f) \\ \mathbf{h}_{v}(r,\phi,f) \end{pmatrix} \exp\{i[2\pi ft - k_{0}\beta_{v}(f)z]\} df, \quad (6)$$

где C_v – амплитуда моды; β_v – безразмерная постоянная распространения моды; \mathbf{e}_v и \mathbf{h}_v - векторы электромагнитного поля моды на частоте f.

Учитывая известные соотношения ортогональности

$$\int_{0}^{2\pi} d\phi \int_{0}^{\infty} drr(\mathbf{e}_{\mu} \times \mathbf{h}_{\nu}^{*})_{z} = \delta_{\mu\nu} \int_{0}^{2\pi} d\phi \int_{0}^{\infty} drr(\mathbf{e}_{\nu} \times \mathbf{h}_{\nu}^{*})_{z}$$

из выражений (3,5,6) получаем:

$$C_{v} = -\hat{P}(f)\int_{0}^{\infty} drr \exp(-r^{2}w^{-2}) \left(\int_{0}^{2\pi} d\phi \int_{0}^{\infty} drr (\mathbf{e}_{v} \times \mathbf{h}_{v}^{*})_{z}\right)^{-1}.$$
 (7)

В соответствии с (7), амплитуды C_v отличны от нуля только для тех мод, у которых компонента поля h_{vx} является четной функцией x и y. Такие моды являются аналогами HE_{1m} мод круглого диэлектрического волновода. В разложении (5, 6) фигурируют только поля указанных мод.

Для рассматриваемых в настоящей работе с цилиндрической симметрией строгий расчет их модовых характеристик может быть выполнен с использованием цилиндрических функций.

Заметим, что при естественном условии $k_0 z >> 1$ численное интегрирование в (6) затруднено быстрыми осцилляциями подынтегральной функции. Избежать этой проблемы позволяет квадратурная формула

$$\begin{pmatrix} \mathbf{E}_{v} \\ \mathbf{H}_{v} \end{pmatrix} = 8\pi \operatorname{Re} \sum_{j} \frac{\sin(\pi \Delta f \,\alpha_{vj})}{\alpha_{vj}} \left\{ C_{v} \begin{pmatrix} \mathbf{e}_{v} \\ \mathbf{h}_{v} \end{pmatrix} \exp \left[2\pi i f \left[\tau - (\beta_{v} - 1) \frac{z}{c} \right] \right] \right\}_{f=f_{j}}, \quad (8)$$

где $\alpha_{vj} = \tau + zc^{-1} \{1 - c[\upsilon_{gv}(f_j)]^{-1}\},$ вещественная часть параметра $\upsilon_{gv}(f_j) = c(\beta_v + fd\beta_v / df)_{f=f_i}^{-1},$ имеет смысл групповой скорости моды.

Выражение (8) получено в результате разбиения эффективного промежутка интегрирования в (6) на элементарные интервалы протяженности Δf с центрами на частотах $f = f_j$ и аналитического интегрирования на этих интервалах быстро осциллирующей экспоненты.

Пусть $E_y(\tau)$ и $E_y^{(0)}(\tau)$ представляют собой импульсы компоненты напряженности электрического поля на выходе волновода в центре его полой сердцевины. Предположим также, что выполняется естественное условие $|\Delta n| << 1$, где $\Delta n = \text{Re}\Delta n - ik(f)$ – приращение комплексного показателя преломления сердцевины волновода n, вызванное наличием примеси в

сухом воздухе. В этом случае заметное изменение фурье-образа поля (5) будет связано только с экспоненциальными множителями в (6), содержащими большой параметр $k_0 z$. В главном приближении

$$\frac{\hat{E}_{y}(f)}{\hat{E}_{y}^{(0)}(f)} = \left[\sum_{\nu=1}^{m} C_{\nu} e_{\nu y} \exp(-ik_{0}\beta_{\nu}z)\right]^{-1} \sum_{\nu=1}^{m} C_{\nu} e_{\nu y} \exp\left[-ik_{0}\left(\beta_{\nu} + \frac{\partial\beta_{\nu}}{\partial n}\Delta n\right)z\right], \quad (9)$$

где функции частоты $C_{\nu}(f)$, $e_{\nu\nu}(0,0,f)$, $\beta_{\nu}(f)$, $\partial\beta_{\nu}(f)/\partial n$ вычисляются при $\Delta n = 0$. Заметим, что в соответствии с волноводной теорией возмущений, мнимая часть производной $\partial\beta_{\nu}(f)/\partial n$ пренебрежимо мала по сравнению с ее вещественной частью. Поэтому производные $\partial\beta_{\nu}/\partial n$ в (9) могут быть заменены на $\partial \operatorname{Re}\beta_{\nu}/\partial n$.

В общем случае найти функцию k(f) из уравнения (9) достаточно сложно. Ситуация упрощается, если на данной частоте при некотором номере $\mu \exp(\text{Im}\beta_{\mu}k_{0}z) >> \exp(\text{Im}\beta_{\nu}k_{0}z)$ ($\nu \neq \mu$). Тогда волновод может рассматриваться как одномодовый, и в соответствии с (9)

$$k(f) = -(k_0 z \partial \operatorname{Re} \beta_{\mu} / \partial n)^{-1} \ln \left| \hat{E}_y(f) [\hat{E}_y^{(0)}(f)]^{-1} \right|.$$
(10)

Выражение (10) сохраняет силу и в случае многомодового волновода, если зависимостью производных $\partial \beta_v(f) / \partial n$ от номера моды можно пренебречь. Именно такая ситуация имеет место для рассматриваемых волноводов 1 и 2. Здесь основной вклад в суммы в (9) дают только моды, находящиеся в условиях, удаленных от критических, для которых $\partial \beta_v(f) / \partial n \approx 1$.

Расчеты выполнены для волноводов 1 и 2 с серебряным покрытием и внутренним радиусом 1,5 мм. Для задания диэлектрической проницаемости покрытия ε_m использована дисперсионная модель Друде:

$$\varepsilon_{m} = 1 - \Omega_{p}^{2} (F^{2} + \Omega_{t}^{2})^{-1} - i \Omega_{p}^{2} \Omega_{t} [F(F^{2} + \Omega_{t}^{2})]^{-1},$$

где $\Omega_p = 73381$; $\Omega_t = 147,376$; F = 100 f / 3; f берется в ТГц.

Материалом диэлектрического слоя, отделяющего металлическое покрытие от полой сердцевины волновода выбран полипропилен с диэлектрической проницаемостью $\varepsilon_L = 2,229 - i3,88 \cdot 10^{-3}$. Толщина слоя d = 41,2 мкм найдена из (1) при f = 1ТГц. Радиус гауссова пучка w полагался равным 1024 мкм для волновода 1 и 800 мкм для волновода 2. Эти значения обеспечивают максимальную передачу энергии импульса (3) через рассмотренные далее отрезки волноводов длиной z = 1м.



Рис. 1. Импульсы на выходе волноводов 1 (а) и 2 (б). Сплошные кривые соответствуют сухому воздуху (n=1), дискретные точки – влажному воздуху (левая ось). Штриховые кривые – импульсы в однородном пространстве с n=1(правая ось)

На рис. 1 приведены импульсы компоненты поля E_y в волноводах 1, 2 и в свободном пространстве. Вычисления выполнены на основании квадратурной формулы (8) при выборе эффективного диапазона интегрирования в (6) 4TГц $\geq f \geq 0$ ТГц. Результаты, устойчивые относительно задания частотного шага Δf , получены при $\Delta f \leq 0,01$ ТГц. Дискретными точками на рис.1. представлены импульсы, соответствующие заполнению сердцевины волноводов влажным воздухом. Для задания Δn использована модель Друде – Лоренца: $\Delta n = \sum_{j=1}^{29} a_j [b_j (f_j^2 - f^2) + ifb_j^2]^{-1}$, в которой параметры a_j , b_j , f_j – определены путем интерполяции экспериментальных данных для спектра $k(f) = -\Delta n(f)$, измеренного в лабораторных условиях в [3].

На рис.2 представлены результаты решения обратной задачи ТГц спектроскопии, полученные на основании (1) после вычисления фурьеобразов, приведенных выше импульсов на выходе волноводов.

Согласно рис.2., волноводная ТГц спектроскопия воздуха в целом достаточно эффективна. Вместе с тем, она приводит к колебаниям восстанавливаемых функций, которые объясняются не полным совпадением производных $\partial \beta_{v} / \partial n$ при различных v в (9) и их отклонением от 1.



Рис. 2. Восстановление спектра коэффициента поглощения водяного пара методом ТГц спектроскопии при использовании волноводов 1 (а) и 2 (б). Серая кривая – точная функция k(f), черные колеблющиеся кривые – ее восстановление на основании (9)

Данные расхождения сильнее выражены для мод волновода 1, с чем связана более низкая точность восстановления функции k(f) на рис. 2, а по сравнению с рис. 2, б (среднеквадратичные погрешности восстановления k(f) функции на рис. 2, а и 2, б равны $1,14 \cdot 10^{-6}$ и $3,99 \cdot 10^{-7}$ соответственно).

Развитый подход может быть использован для оптимизации условий волноводной импульсной ТГц спектроскопии.

Работа выполнена при поддержке БРФФИ (грант F15R-138).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Dexheimer, S. L.** Terahertz spectroscopy: principles and applications / S. L. Dexheimer // CRS Press. Taylor and Francis group. 2007. – 360 p.

2. Cherenkov Radiation from Femtosecond Optical Pulses in Electro-Optic Media / D. H. Auston [et. al.] // Physics Review Letters. – Vol. 53, N.16 – 1984. – P. 1555–1558.

3. Cheville, R. A. Far-infrared terahertz time-domain spectroscopy of flames / R. A. Cheville, D. Grischkowsky // Optics Letters. – Vol. 20, No. 15. – 1995. – P. 1646–1648.