(19)	(1	9)	
------	---	---	----	--

Deutsches Patent- und Markenamt



⁽¹⁰⁾ DE 10 2016 206 965 B4 2022.02.03

(12)

Patentschrift

(51) Int Cl.:

- (21) Aktenzeichen: 10 2016 206 965.9
- (22) Anmeldetag: 25.04.2016
- (43) Offenlegungstag: 26.10.2017
- (45) Veröffentlichungstag
 - der Patenterteilung: 03.02.2022

G01N 21/3581 (2014.01) G01J 3/42 (2006.01)

Innerhalb von neun Monaten nach Veröffentlichung der Patenterteilung kann nach § 59 Patentgesetz gegen das Patent Einspruch erhoben werden. Der Einspruch ist schriftlich zu erklären und zu begründen. Innerhalb der Einspruchsfrist ist eine Einspruchsgebühr in Höhe von 200 Euro zu entrichten (§ 6 Patentkostengesetz in Verbindung mit der Anlage zu § 2 Abs. 1 Patentkostengesetz).

(73) Patentinhaber:	(56) Ermittelter Stand der Technik:
BRUKER OPTIK GMBH, 76275 Ettlingen, DE	LU, Zheng [et al.]: Study of terahertz LFMCW
(74) Vertreter: Kohler Schmid Möbus Patentanwälte	imaging radar with Hilbert transform receiver. In Electronics Letters, Vol. 50, 2014, No. 7, S. 549 – 550.
Partnerschaftsgesellschaft mbB, 70563 Stuttgart, DE	ROGGENBUCK, A [et al.]: Coherent broadband continuous-wave terahertz spectroscopy on solid-state samples. In: New Journal of Physics,
(72) Erfinder: Hepp, Christian, Dr., 76275 Ettlingen, DE; Lüttjohann, Stephan, Dr., 76149 Karlsruhe, DE	Vol. 12, 2010, S. 043017-1 - 043017-13. ROGGENBUCK, Axel [et al.]: Using a fiber stretcher as a fast phase modulator in a continuous wave terahertz spectrometer. In: J. Opt. Soc. Am. B, Vol. 29, 2012, No. 4, S. 614 - 620

(54) Bezeichnung: Verfahren zur Messung und Bestimmung eines THz-Spektrums einer Probe

(57) Hauptanspruch: Verfahren zur Messung und Bestimmung eines THz-Spektrums einer Probe (17), umfassend a) Erzeugen eines ersten Laserstrahls (1a) einer Frequenz f₁ und eines zweiten Laserstrahl (2a) einer Frequenz f₂, mit $f_2 > f_1$ und mit f_1 , f_2 im sichtbaren oder nahinfraroten Spektralbereich, wobei beide Laserstrahlen (1a, 2a) in einem Strahlteiler (3) zur Ausbildung einer überlagerten Laserstrahlung mit einer Schwebungsfrequenz fs = $f_2 - f_1$ im THz-Bereich überlagert werden und diese überlagerte Laserstrahlung an den zwei Ausgängen (3a, 3b) des Strahlteilers (3) verfügbar ist,

b) Umwandeln eines ersten Teils (11) der überlagerten Laserstrahlung hinter einem ersten Ausgang (3a) des Strahlteilers (3) an einem Emitter (13) in THz-Strahlung (14) und Transmittieren dieser THz-Strahlung (14) durch eine Probe (17), wodurch eine charakteristische Transmissionsstrahlung (18) erhalten wird,

c) Einstrahlen der charakteristischen Transmissionsstrahlung (18) an einem Detektor (15), dessen Empfindlichkeit durch einen am Detektor (15) eingestrahlten, zweiten Teil (12) der überlagerten Laserstrahlung hinter einem zweiten Ausgang (3b) des Strahlteilers (3) bestimmt wird, so dass ein Messwert I(fs) am Detektor (15) erhalten wird,

d) mehrmalige Wiederholung der Schritte a) bis c) mit n unterschiedlichen Schwebungsfrequenzen fs, so dass ein diskretes frequenzabhängiges Messsignal I(f) erhalten wird, wobei das Messsignal I(f) von der Form I(f) = A(f) · $\cos[\Phi(f)]$ ist, mit A(f): Amplitudenterm, ...



Beschreibung

[0001] Die Erfindung betrifft Verfahren zur Messung und Bestimmung eines THz-Spektrums einer Probe.

[0002] Ein solches Verfahren ist bekannt geworden durch A. Roggenbuck et al., New Journal of Physics 12 (2010), 043017 (13pp), im Folgenden Referenz [2].

[0003] Mittels Terahertz(THz)-Spektroskopie können Proben, insbesondere gasförmige Proben in einer Messzelle, charakterisiert werden.

[0004] Die Erzeugung und Detektion von THz-Strahlung ist experimentell schwierig. Üblicherweise wird die Laserstrahlung zweier Laser überlagert, die geringfügig unterschiedliche Laserfrequenzen f_1 , f_2 aufweisen. Durch die Überlagerung entsteht eine Schwebung entsprechend dem Frequenzunterschied Δf , der im THz-Bereich liegt. Die überlagerte Laserstrahlung wird zu einem ersten Teil auf einen THz-Sender gelegt, der entsprechend THz-Strahlung emittiert. Diese wird durch eine Probe geleitet, wodurch es zu einer charakteristischen Wechselwirkung kommt, und die transmittierte Strahlung wird an einem Empfänger detektiert. Durch Veränderung der Laserfrequenzen f1 und/oder f2 kann ein Durchstimmen der THz-Strahlung erfolgen.

[0005] Der Empfänger muss durch einen zweiten Teil der überlagerten Laserstrahlung aktiviert werden. Dadurch ist das Signal (Fotostrom) $I(\omega)$ am Empfänger proportional zum Produkt der zwei Teile der überlagerten Laserstrahlung, wie sie infolge von optischen Wegdifferenzen und Wechselwirkung mit der Probe am Detektor ankommen, mit:

$$I(\omega) = A(\omega) \cdot \cos\left(\frac{l_1 - l_2}{c} \cdot \omega - \varphi(\omega)\right)$$

Mit $\omega=2\pi f$ Kreisfrequenz der THz-Strahlung; I₁, I₂ optische Weglängen der Teile der überlagerten Laserstrahlung, $\varphi(\omega)$ Phasenverschiebung abhängig von der Probe, A(ω) frequenzabhängige Amplitude abhängig von der Probe; c: Lichtgeschwindigkeit. Der Fotostrom I(ω) wird über eine Vielzahl von einzelnen Kreisfrequenzen ω nacheinander gemessen (abgerastert).

[0006] Der gemessene Fotostrom I(ω) weist aufgrund des Cosinus-Terms eine Oszillation auf. Für die Bestimmung eines Absorptionsspektrums der Probe ist nur die Bestimmung von A(ω) relevant. Die Phase $\Phi(\omega) = \frac{l_1 - l_2}{c} \cdot \omega - \varphi(\omega)$ hängt von der Dispersion der Probe und von der optischen Weglängendifferenz zwi-

schen den zwei Teilen der überlagerten Laserstrahlung ab.

[0007] Um vom Fotostrom I(ω) ohne Kenntnis des Phasenterms $\varphi(\omega)$, in welchem insbesondere die Dispersion der Probe eingeht, auf die frequenzabhängige Amplitude A(ω) zu schließen, kann die Kurve I(ω) lediglich an ihren Extremstellen ausgewertet werden, vgl. Referenz [2]. An diesen Orten beträgt cos(ω) jeweils 1 oder -1. Die zugehörige, so genannte Einhüllende des Fotostroms I(ω) ist relativ einfach zu bestimmen, hat aber ein deutlich groberes Frequenzraster als der Fotostrom I(ω). Datenpunkte des Fotostroms I(ω), die sich nicht an einem Extremwert befinden, werden weggelassen, und entsprechend ist dann auch an den zugehörigen Kreisfrequenzen ω keine Amplitude A(ω) verfügbar.

[0008] Das grobere Frequenzraster der Einhüllenden kann dazu führen, dass schmalbandige Absorptionslinien, wie sie etwa in Gasen bei geringem Druck auftreten, nicht mehr aufgelöst werden können.

[0009] In A. Roggenbuck et al., J. Opt. Soc. Am. B, Vol. 29, No. 4, April 2012, S. 614-620, im Folgenden bezeichnet als Referenz [1], wird vorgeschlagen, bei einer jeweiligen Kreisfrequenz ω die Weglängendifferenz zwischen dem ersten Teil und dem zweiten Teil der überlagerten Laserstrahlung mittels Faserstreckern zu verändern. Über eine Periode wird dann auch das Maximum und das Minimum des Fotostroms durchlaufen, wodurch die Amplitude A(ω) für die zugehörige Kreisfrequenz ω bestimmbar ist. In Referenz [1] wird angegeben, dass eine Signalmittelung über ca. 240 Perioden durchgeführt wird. Mit diesem Verfahren kann die Amplitude A(ω) bei allen Kreisfrequenzen bestimmt werden, jedoch wird der Messaufbau durch die Faserstrecker sehr aufwändig und die Messdauer wegen des erforderlichen Durchstimmens der Weglängendifferenz bei jeder Messfrequenz recht lang.

[0010] Lu Zheng et al., Electronics Letters Vol. 50, 2014, No. 7, S. 549-550, im Folgenden Referenz [3], beschreibt ein Verfahren zur Radar-Bildgebung. Hierbei wird mit elektronischen Bauelementen ein frequenz-

moduliertes Signal erzeugt, das auf einer Grundfrequenz einen Frequenzchirp hat. Das Signal wird durch einen Strahlteiler und eine Linse auf ein Target gerichtet, von dem es reflektiert wird. Die reflektierte Strahlung gelangt wieder durch die Linse zum Strahlteiler, wird von diesem reflektiert und gelangt zu einem Receiver. Am Receiver wird ein zeitabhängige Schwebungssignal gemessen, auf welches eine Hilbert-Transformation angewandt wird. Mit dem Verfahren ist eine Abstandsbestimmung zum Target über einen Laufzeiteffekt möglich.

Aufgabe der Erfindung

[0011] Der Erfindung liegt die Aufgabe zugrunde, ein Verfahren zur Messung und Bestimmung eines THz-Spektrums bereitzustellen, bei dem auf einfache Weise eine verbesserte spektrale Auflösung erzielt werden kann.

Kurze Beschreibung der Erfindung

[0012] Diese Aufgabe wird gelöst durch ein Verfahren zur Messung und Bestimmung eines THz-Spektrums einer Probe, umfassend

a) Erzeugen eines ersten Laserstrahls einer Frequenz f_1 und eines zweiten Laserstrahl einer Frequenz f_2 mit $f_2 > f_1$ und mit f_1 , f_2 im sichtbaren oder nahinfraroten Spektralbereich, wobei beide Laserstrahlen in einem Strahlteiler, insbesondere faserbasierten Strahlteiler, zur Ausbildung einer überlagerten Laserstrahlung mit einer Schwebungsfrequenz fs = f_2 - f_1 im THz-Bereich überlagert werden und diese überlagerte Laserstrahlung an den zwei Ausgängen des Strahlteilers verfügbar ist,

b) Umwandeln eines ersten Teils der überlagerten Laserstrahlung hinter einem ersten Ausgang des Strahlteilers an einem Emitter in THz-Strahlung und Transmittieren dieser THz-Strahlung durch eine Probe, wodurch eine charakteristische Transmissionsstrahlung erhalten wird,

c) Einstrahlen der charakteristischen Transmissionsstrahlung an einem Detektor, dessen Empfindlichkeit durch einen am Detektor eingestrahlten, zweiten Teil der überlagerten Laserstrahlung hinter einem zweiten Ausgang des Strahlteilers bestimmt wird, so dass ein Messwert I(fs) am Detektor erhalten wird,

d) mehrmalige Wiederholung der Schritte a) bis c) mit n unterschiedlichen Schwebungsfrequenzen fs, so dass ein diskretes frequenzabhängiges Messsignal I(f) erhalten wird,

insbesondere bei den Schwebungsfrequenzen $f[k] = k \cdot \delta f + f_0$, mit k= 1,...,n und f_0 : Startfrequenz, wobei das Messsignal I(f) von der Form I(f) = A(f) - cos[$\Phi(f)$] ist, mit A(f):

Amplitudenterm, und $\Phi(f)$: Phasenterm,

e) Bestimmung eines um 90° verschobenen Hilfssignals $\tilde{I}(f)$ aus dem Messsignal I(f), mit $\tilde{I}(f) = A(f) \cdot \cos [\Phi(f) \pm 90^{\circ}]$,

f) Bestimmung des THz-Spektrums S(f) mittels des Hilfssignals $\tilde{I}(f)$, mit S(f)=|z(f)|=|I(f)+i\tilde{I}(f)| mit z(f): komplexer Vektor.

[0013] Die Erfindung schlägt vor, aus dem gemessenen Messsignal bzw. Fotostrom I(f) ein Hilfssignal $\tilde{I}(f)$ zu bestimmen, welches gegenüber dem Fotostrom I(f) um 90° (bzw. $\pi/2$) phasenverschoben ist, aber ansonsten gleich ist, insbesondere bezüglich der Amplitude. Dies kann beispielsweise mittels einer Hilberttransformation erfolgen. Mittels der Signale I(f) und $\tilde{I}(f)$ ist es dann leicht möglich, für alle Frequenzen f jeweils den Betrag

 $|I(f) + i\tilde{I}(f)| = \sqrt{[I(f)]^2 + [\tilde{I}(f)]^2}$ zu bestimmen (mit i: imaginäre Einheit), welcher der Amplitude A(f) bzw. dem Spektrum S(f) entspricht.

[0014] Das Spektrum S(f) kann dabei mit allen Messpunkten bzw. Frequenzen f bestimmt werden, insbesondere auch für Messpunkte zwischen den Extremstellen der Fotostromkurve. Dadurch kann bei gleichem Frequenzraster der erzeugten, durch die Probe geleiteten und vermessenen THz-Strahlung eine bessere Auflösung erzielt werden als bei einer Beschränkung der Auswertung der Fotostromkurve auf die Extremstellen. Insbesondere können auch schmale Absorptionslinien zwischen den Extremstellen der Fotostromkurve erfasst und aufgelöst werden.

[0015] Das Verfahren kann weiterhin mit einem herkömmlichen Versuchsaufbau durchgeführt werden, mit dem lediglich die Schwebungsfrequenz für die verschiedenen Messpunkte durchgestimmt zu werden braucht. Es ist nicht notwendig, die Phase bei jedem Messpunkt über eine Änderung der optischen Weglän-

gendifferenz durchzustimmen; es werden also insbesondere keine Faserstrecker benötigt. Die Messung des Messsignals I(f) bzw. des Spektrums S(f) kann in relativ kurzer Zeit erfolgen.

[0016] Der erste und der zweite Laserstrahl liegen im sichtbaren Spektralbereich (ca. 400 nm bis 800 nm, bzw. 7,5*10¹⁴ Hz bis 3,75*10¹⁴ Hz) oder auch im nahinfraroten Spektralbereich (ca. 800 nm bis 3000 nm bzw. 3,75*10¹⁴ Hz bis 1,0*10¹⁴ Hz); die THz-Strahlung liegt typischerweise in einem Frequenzbereich von 200 GHz (2*10¹¹ Hz) bis 5 THz (5*10¹² Hz), und bevorzugt zwischen 300 GHz und 3 THz. Die Probe liegt typischerweise gasförmig in einer Gaszelle vor.

Bevorzugte Varianten der Erfindung

[0017] In einer bevorzugten Variante des erfindungsgemäßen Verfahrens wird in Schritt e) das Hilfssignal $\tilde{I}(f)$ durch Anwendung einer Hilbert-Transformation aus dem Messsignal I(f) bestimmt, mit $\tilde{I}(f) = \mathfrak{P}\mathfrak{L}[I(f)]$. Durch die Hilbert-Transformation wird der Cosinus-Term des Fotostroms I(f) bzw. I(ω) (mit ω =2 π f) in einen Sinus-Term überführt, wodurch die erwünschte Phasendifferenz von 90° auf einfache Weise erhalten wird.

[0018] Vorteilhaft ist weiterhin eine Variante, bei der im Schritt e) folgende Teilschritte angewandt werden:

i) Anwendung einer komplexen Fouriertransformation auf das Messsignal I(f), so dass ein transformiertes Messsignal I(t) im Zeitraum erhalten wird,

ii) Anwendung einer Filterfunktion auf das transformierte Messsignal I(t), so dass ein gefiltertes transformiertes Messsignal GEF[I(t)] erhalten wird,

iii) Anwendung der inversen komplexen Fouriertransformation auf das gefilterte transformierte Messsignal GEF[I(t)], so dass ein komplexes rücktransformiertes Messsignal RUC(f) erhalten wird, dessen Imaginärteil als Ĩ(f) genutzt wird. Durch dieses Vorgehen kann mittels (diskreter) Fouriertransformation bzw. inverser Fouriertransformation auf einfache Weise das Hilfssignal Ĩ(f) gebildet werden. Dieses Vorgehen ist zudem sehr genau, da es das Hilfssignal aus dem gesamten Messsignal (mit allen Frequenzen) ableitet. Man beachte, dass das rücktransformierte Signal als Realteil wiederum das Signal des Fotostroms I (f) enthält. Für die Berechnung von |z(f)| kann wahlweise das ursprüngliche Messsignal des Fotostroms oder der Realteil des rücktransformierten Signals verwendet werden.

[0019] Bevorzugt ist eine Weiterbildung der obigen Variante, bei der als Filterfunktion ein Vektor h der Länge n eingesetzt wird, mit

a. h_i = 1 für i = 1 und für $i = \frac{n}{2} + 1$

b. h_i = 2 für i = 2, 3, ...,
$$\frac{n}{2}$$

c. h_i = 0 für $i = \frac{n}{2} + 2,...,n$

für n gerade, und

a'.
$$h_i = 1$$
 für i = 1 und für i=n/2 + $\frac{1}{2}$
b'. $h_i = 2$ für $i = 2, 3, ..., \frac{n}{2} - 1/2$

für n ungerade,

wobei der Vektor h elementweise mit dem transformierten Messsignal I(t) multipliziert wird. Das transformierte Messsignal I(t) umfasst "positive" und "negative" Zeiten. Mit diesen Filterfunktionen wird eine Hälfte der Zeiten (etwa die negativen Zeiten) im transformierten Messsignal I(t) abgeschnitten, wodurch ein gewünschter Phasenversatz von 90° erzeugt wird.

[0020] Vorteilhaft ist weiterhin eine Variante des erfindungsgemäßen Verfahrens, die vorsieht, dass in Schritt e) das Hilfssignal Ĩ(f) mittels eines digitalen Filters näherungsweise bestimmt wird, wobei das digitale Filter schrittweise jeweils nur auf einen zusammenhängenden Teil der Messwerte des Messsignals I(f) angewandt wird, um einen jeweiligen Einzelwert des Hilfssignals Ĩ(f) zu bestimmen, dessen Frequenz in dem zusammen-

hängenden Teil der Messwerte vorkommt. Mit dieser Variante ist es möglich, noch während der Messung des Messsignals I(f) bereits mit der Berechnung des Hilfssignals Ĩ(f) zu beginnen bzw. entsprechende Teile des Spektrums S(f) zu erhalten. Insbesondere ist es nicht nötig, für die Bestimmung von Datenpunkten des Hilfssignals Ĩ(f) oder zugehörigen Teilen des Spektrums S(f) zunächst die Aufnahme des gesamten Messsignals I (f), also für alle Frequenzen f, abzuwarten. Der zusammenhängende Teil sind typischerweise eine bestimmte Anzahl von Messpunkten (z. B. zwanzig), die zuletzt gemessen wurden.

[0021] Für die Anwendung des digitalen Filters auf das Messsignal gelten folgende Vorschriften:

- Für das Filter (der Ordnung M) existiert ein reellwertiger Vektor H(f), welcher die Impulsantwort des Filters im Frequenzraum beschreibt.

- Das Filter wird über die folgende Vorschrift auf das Messsignal I(f) angewendet:

 $H[I(f)] = \sum_{k=0}^{M-1} H(k) \cdot I(f-k)$. Das Ergebnis der Berechnung wird in einen (reellen) Vektor H[I(f)] geschrieben.

- Das digitale Filter H approximiert die Bildung der Hilberttransformierten $\mathfrak{H}[I(f)]$, d.h. es verschiebt die Phase des Eingangssignals I(f) um 90° und verändert dabei die Amplitude des Eingangssignals idealerweise nicht. Zusätzlich verursacht es eine Verzögerung des Signals H[I(f)] gegenüber I(f).

- Diese Verzögerung wird mit geeigneten Methoden kompensiert oder rückgängig gemacht, so dass zwischen I(f) und H[I(f)] bis auf die 90°-Phasenverschiebung identisch sind.

- Bildung des komplexen Vektors z(f) = I(f) + i H[I(f)].

- Weiteres Verfahren entsprechend Schritt f) des Hauptanspruches, wobei H[I(f)] dabei Ĩ(f) entspricht.

[0022] Für das digitale Filter H gelten folgende Eigenschaften:

- Das Filter ist vollständig über seine Antwortfunktion $\tilde{H}(t)$ (im Zeitraum, d.h. im konjugierten Raum zum Frequenzraum, in welchem das Messsignal I(f) vorliegt) definiert, aus welcher die Amplituden- und die Phasenantwortfunktion $A_H(t) = |H(t)|$ bzw. $\phi_H(t) = \arg(H(t))$ berechnet werden können.

- Die Amplitudenantwortfunktion $A_H(t)$ ist idealerweise $A_H(t) = 1$ für alle positiven Zeiten t > 0 und $A_H(t) = 0$ für t ≤ 0 .

- Die Phasenantwortfunktion $\phi_H(t)$ ist idealerweise 90° plus eine lineare Komponente, d.h. $\phi_H(t) = \pm 90^\circ + \text{const} \cdot t$, wobei const eine Konstante ist.

[0023] Bei einer alternativen Variante des erfindungsgemäßen Verfahrens ist vorgesehen, dass in Schritt e) anstelle von $\tilde{I}(f)$ ein z(f) näherungsweise bestimmt wird als $H_1[I(f)]+iH_2[I(f)]$, wobei H_1 , H_2 digitale Filter sind, wobei die digitalen Filter schrittweise jeweils nur auf einen gleichen, zusammenhängenden Teil der Messwerte des Messsignals I(f) angewandt werden, um einen jeweiligen Einzelwert von z(f) zu bestimmen, dessen Frequenz in dem zusammenhängenden Teil der Messwerte vorkommt, mit $H_1[I(f)]=A(f)\cdot cos[\Phi(f)+\alpha]$ und $H_2[I(f)]=A(f)\cdot cos[\Phi(f)\pm90^\circ+\alpha]$, mit α : Phasenversatz der digitalen Filterungen, und dass in Schritt f) die Bestimmung des THz-Spektrums S(f) nicht mittels des Hilfssignals $\tilde{I}(f)$, sondern mit S(f)=|z(f)|=| $H_1[I(f)']$ +i $H_2[I(f)]$ | erfolgt. Mit dieser Variante ist es möglich, noch während der Messung des Messsignals I(f) bereits mit der Berechnung von z(f) zu beginnen bzw. wiederum entsprechende Teile des Spektrums S(f) zu erhalten. Insbesondere ist es nicht nötig, für die Bestimmung von Datenpunkten von z(f) bzw. entsprechenden Teilen des Spektrums s(f) zunächst die Aufnahme des gesamten Messsignals I(f), also für alle Frequenzen f, abzuwarten. Der zusammenhängende Teil sind typischerweise eine bestimmte Anzahl von Messpunkten (z.B. zwanzig), die zuletzt gemessen wurden.

[0024] Für die Anwendung der Filter H₁ und H₂ auf das Messsignal gelten folgende Vorschriften:

- Für die Filter existieren reellwertige Vektoren $H_1(f)$ und $H_2(f)$, welche die Impulsantwort des Filter im Frequenzraum beschreiben.

- Die Filter werden jeweils über die Formel $H_{1,2}[I(f)] = \sum_{k=0}^{M-1} H_{1,2}(k) \cdot I(f-k)$ auf das Messsignal I(f) angewendet. Die Ergebnisse der Berechnung werden in zwei (reelle) Vektoren $H_{1,2}[I(f)]$ geschrieben.

- Die Filter H₁ und H₂ sind dabei so gestaltet, dass sie die Amplitude des Messsignals in exakt gleichem Maße ändern, und dass sie bei Anwendung auf I(f) eine relative Phasenverschiebung von 90° zwischen H₁[I(f)] und H₂[I(f)] erzeugen.

- Zusätzlich verursachen H₁ und H₂ dieselbe Verzögerung auf den Signalen H₁[I(f)] und H₂[I(f)], so dass H₁[I(f)] und H₂[I(f)] bis auf die 90°-Phasenverschiebung identisch sind. Bei beiden Signalen wird die gemeinsame

[0025] Verzögerung rückgängig gemacht.

- Bildung des komplexen Vektors $z(f) = H_1[I(f)] + iH_2[I(f)]$.

- Weiteres Verfahren entsprechend Schritt f) des Hauptanspruches, wobei H₁[I(f)] dann I(f) entspricht und H₂[I(f)] dann $\tilde{I}(f)$ entspricht.

[0026] Für die digitalen Filter H_1 und H_2 gelten folgende Eigenschaften:

- Die Filter sind vollständig über ihre Antwortfunktionen H₁(t) und H₂(t) im Zeitraum definiert, aus welchen die Amplituden- und die Phasenantwortfunktion A_{H1,2} (t) = $|H_{1,2}(t)|$ bzw. $\phi_{H1,2}(t)$ = arg (H_{1,2}(t)) berechnet werden können.

- Die Antwortfunktionen H₁(t) und H₂(t) der Filter H₁ und H₂ sind durch die Beziehung H₁(t) = -sgn(t)·i·H₂ (t) mit der Vorzeichenfunktion sgn(t) miteinander verbunden. Weiterhin gilt: $H_i(-t) = H_i^*(t)$ für i = 1,2 und mit dem komplex Konjugierten H_i^* .

- Für die Amplitudenantwortfunktionen A_{H1,2}(t) gilt idealerweise:

$$A_{H1,2}(t) = \begin{cases} 1 \text{ für } t < 0 \\ 0 \text{ für } t = 0 \\ 1 \text{ für } t > 0 \end{cases}$$

- Die Phasenantwortfunktionen $\phi_{H1}(t)$ und $\phi_{H2}(t)$ haben für t > 0 idealerweise eine Phasendifferenz von $\Delta \phi(t) = |\phi_{H1}(t) - \phi_{H2}(t)| = 90^{\circ}$.

[0027] Bei einer vorteilhaften Variante ist vorgesehen, dass

- ein THz-Referenz-Spektrum $S_0(f)$ analog zu den Schritten a) bis f) gemessen und bestimmt wird, jedoch ohne Probe;

- und das THz-Spektrum S(f) der Probe elementweise durch das THz-Referenz-Spektrum S $_0(f)$ geteilt

wird, so dass ein Transmissionsspektrum $T(f) = \frac{S(f)}{S_0(f)}$ erhalten wird. Im Transmissionspektrum gehen

die spektralen Informationen ausschließlich auf die Probe zurück; Hintergrundeffekte werden durch die Division herausnormiert. Dadurch ist das Transmissionsspektrum leichter zu interpretieren als das "unnormierte" THz-Spektrum der Probe, insbesondere bezüglich qualitativer und quantitativer Zusammensetzung der Probe. Falls die Probe in einem Behälter (etwa einer Gaszelle) angeordnet ist, dessen Behälterwände bei der Messung im Strahlengang angeordnet sind, sollte die Referenz-Messung "ohne Probe" mit demselben oder einem gleichartigen Behälter im Strahlengang, jedoch leer (ohne Befüllung des Behälters mit der Probe) erfolgen.

[0028] Eine bevorzugte Weiterbildung dieser Variante sieht vor, dass aus dem Transmissionsspektrum T(f) durch Bildung des negativen dekadischen Logarithmus eine Absorbanz Abs(f) berechnet wird, mit: Abs(f) = $-\log_{10}(T(f))$. Über die Absorbanz können in einem Diagramm unterschiedlich starke Absorptionslinien besser gleichzeitig erfasst bzw. ersehen werden.

[0029] Bevorzugt ist weiterhin eine Variante, die vorsieht, dass - $I_0(f)$ und $\tilde{I}_0(f)$ analog zu den Schritten a) bis e) gemessen und bestimmt werden, jedoch ohne Probe; - und bei bekannter Probendicke d der Realteil des Brechungsindex n(f) der Probe bestimmt wird, als Funktion der Frequenz f, mit folgenden Schritten:

• Berechnung der Phase $\varphi(f) = \arctan\left(\frac{\tilde{I}(f)}{I(f)}\right)$ für alle Frequenzpunkte der Größen I(f) und Ĩ(f), bestimmt mit Probe:

mit Probe;

 \circ Berechnung der Phase $\varphi_0(f) = \arctan\left(\frac{\tilde{I}(f)}{I(f)}\right)$ für alle Frequenzpunkte der Größen I₀(f) und $\tilde{I}_0(f)$,

bestimmt ohne Probe;

 \odot Berechnung der Phasendifferenz $\Delta \varphi(f) = \varphi(f) - \varphi_0(f)$ für alle Frequenzen f, und anschließende Berechnung des Realteils des Brechungsindex n(f) durch Anwendung folgender Formel:

$$n(f) = \frac{\Delta \varphi(f) \cdot c}{2\pi \, df}$$

mit der Lichtgeschwindigkeit c.

[0030] Über dieses Vorgehen ist eine einfache und schnelle Bestimmung des frequenzabhängigen Brechungsindex bzw. der Dispersion der Probe möglich. Die Bestimmung ist hoch aufgelöst und benötigt keine speziellen Versuchsaufbauten, insbesondere keine Faserstrecker.

[0031] Ebenso bevorzugt ist eine Variante, die vorsieht, dass

- $I_0(f)$ und $\tilde{I}_0(f)$ analog zu den Schritten a) bis e) gemessen und bestimmt werden, jedoch ohne Probe;

- und bei bekanntem Realteil n(f) des Brechungsindex der Probe die Probendicke d bestimmt wird, mit folgenden Schritten:

• Berechnung der Phase $\varphi(f) = \arctan\left(\frac{\tilde{I}(f)}{I(f)}\right)$ für alle Frequenzpunkte der Größen I(f) und Ĩ(f), bestimmt

mit Probe;

 \circ Berechnung der Phase $\varphi_0(f) = \arctan\left(\frac{\tilde{I}(f)}{I(f)}\right)$ für alle Frequenzpunkte der Größen I₀(f) und $\tilde{I}_0(f)$,

bestimmt ohne Probe;

 \odot Berechnung der Phasendifferenz $\Delta \varphi(f) = \varphi(f) - \varphi_0(f)$ für alle Frequenzen f;

Anwenden der Formel

$$d(f) = \frac{\Delta \varphi(f) \cdot c}{2\pi n(f) f}$$

an den Frequenzstellen f, und Mittelung der Größe d(f) über alle Frequenzen f zum Erhalten der Probendicke $d = \overline{d(f)}$.

[0032] Der Vorteil dieser Variante ist, dass man $\Delta \varphi$ (f) mit hoher Auflösung, d.h. für viele Frequenzen f misst. Dadurch stehen viele Punkte für die Mittelung zur Verfügung, und die Bestimmung von d wird genauer.

[0033] Bevorzugt ist auch eine Variante, bei der aus dem THz-Spektrum S(f) der Probe und/oder aus dem Transmissionsspektum T(f) und/oder aus der Absorbanz Abs(f) Informationen über eine qualitative und/oder guantitative Zusammensetzung der Probe bestimmt werden. Aufgrund der hohen Auflösung des THz-Spektrums der Probe bzw. der daraus abgeleiteten Größen T(f) oder Abs(f) können besonders genaue Aussagen über die Probenzusammensetzung gemacht werden. Für die gualitative Analyse kann insbesondere die Position von Absorptionslinien ausgewertet werden, und für die quantitative Analyse das Integral unter Absorptionslinien und/oder die Peakhöhe der Absorptionslinien.

[0034] Weitere Vorteile der Erfindung ergeben sich aus der Beschreibung und der Zeichnung. Ebenso können die vorstehend genannten und die noch weiter ausgeführten Merkmale erfindungsgemäß jeweils einzeln für sich oder zu mehreren in beliebigen Kombinationen Verwendung finden. Die gezeigten und beschriebenen Ausführungsformen sind nicht als abschließende Aufzählung zu verstehen, sondern haben vielmehr beispielhaften Charakter für die Schilderung der Erfindung.

Figurenliste

[0035] Die Erfindung ist in der Zeichnung dargestellt und wird anhand von Ausführungsbeispielen näher erläutert. Es zeigen:

Fig. 1 eine schematische Übersicht des Aufbaus eines THz-Spektrometers, für das erfindungsgemäße Verfahren;

Fig. 2 das THz-Spektrometer von **Fig. 1**, mit Kennzeichnung der Weglängen des ersten Teils und des zweiten Teil der überlagerten Laserstrahlung;

Fig. 3 ein Diagramm einer THz-Absorptionsmessung mit einer Probe in einer Gaszelle, mit dem Fotostrom I(f) nach oben aufgetragen, und der Frequenz f nach rechts aufgetragen;

Fig. 4 das Diagramm von **Fig. 3**, mit Einhüllender bestimmt nach dem Stand der Technik, mit nicht aufgelöstem Dip;

Fig. 5 ein Diagramm einer THz-Absorptionsmessung mit einer Probe in einer Gaszelle, mit dem Fotostrom I(f) nach oben aufgetragen, und der Frequenz f nach rechts aufgetragen, mit Einhüllender bestimmt nach dem Stand der Technik bei einer breitbandigen Absorption;

Fig. 6a ein Diagramm einer THz-Absorptionsmessung, darstellend nach oben den Fotostrom I(f) (durchgezogene Linie) und ein 90° phasenverschobenes Hilfssignal Ĩ(f) (gestrichelte Linie) als Funktion der nach rechts aufgetragenen Frequenz f, gemäß der Erfindung;

Fig. 6b das Diagramm von **Fig. 6a**, zusätzlich mit dem Spektrum der Probe S(f)=|I(f) + i Ĩ(f)| (fett dargestellt), gemäß der Erfindung;

Fig. 7 eine Detailvergrößerung des Spektrums der Probe $S(f)=|I(f) + i \tilde{I}(f)|$ von **Fig. 6b**, im Bereich des Peaks bei ca. 1160 GHz;

Fig. 8a ein Diagramm darstellend einen FIR (Filter mit endlicher Impulsantwort) H_{90°}, für die Erfindung, mit dem Wert des Filterkoeffizienten nach oben aufgetragen, und der Nummer des Filterkoeffizienten nach rechts aufgetragen;

Fig. 8b einen Ausschnitt aus dem Diagramm von **Fig. 8a**, im Bereich um die Nummer des Filterkoeffizienten k=100 herum;

Fig. 9a ein Diagramm einer THz-Absorptionsmessung, darstellend nach oben das Messsignal (Fotostrom) I(f) als Funktion der nach rechts aufgetragenen Frequenz f;

Fig. 9b das Diagramm von Fig. 9a, nach Anwendung des FIR-Filters H_{90°} auf I(f), gemäß der Erfindung;

Fig. 9c das Diagramm von **Fig. 9a**, nach Anwendung des FIR-Filters $H_{90^{\circ}}$ auf das Messsignal I(f+f_{delay}) mit Frequenzverschiebung f_{delay}, gemäß der Erfindung,

Fig. 9d das Diagramm von **Fig. 9a**, nach Bestimmung des Spektrums $S(f) = |I(f) + i \cdot H_{90^{\circ}}[I(f + f_{delay})]|$, gemäß der Erfindung;

Fig. 10a ein Diagramm darstellend zwei FIR (Filter mit endlicher Impulsantwort) $H_{30^{\circ}}$ (Kreise) und $H_{120^{\circ}}$ (Dreiecke), für die Erfindung, mit dem Wert der Filterkoeffizienten nach oben aufgetragen, und der Nummer der Filterkoeffizienten nach rechts aufgetragen;

Fig. 10b einen Ausschnitt aus dem Diagramm von **Fig. 10a**, im Bereich um die Nummer des Filterkoeffizienten k=100 herum;

Fig. 11a ein Diagramm einer THz-Absorptionsmessung, darstellend nach oben das Messsignal (Fotostrom) I(f) als Funktion der nach rechts aufgetragenen Frequenz f;

Fig. 11b das Diagramm von **Fig. 11a**, nach Anwendung der FIR-Filter H_{30°} und H_{120°} auf I(f), gemäß der Erfindung;

Fig. 11c das Diagramm von **Fig. 11a**, nach Anwendung der FIR-Filters $H_{30^{\circ}}$ und $H_{120^{\circ}}$ auf das Messsignal I(f+f_{delay}) mit Frequenzverschiebung f_{delay}, gemäß der Erfindung;

Fig. 11d das Diagramm von **Fig. 11a**, nach Bestimmung des Spektrums $S(f) = |H_{30^{\circ}}[I(f+f_{delay})]+i \cdot H_{120^{\circ}}[I(f+f_{delay})]|$, gemäß der Erfindung.

1. Hintergrund der Erfindung

a) Überblick über das Vorgehen im Stand der Technik

[0036] Zur Ermittlung eines THz-Spektrums wird der Fotostrom I(f) gemessen, der aufgrund der verwendeten Messmethode Oszillationen aufweist. Das THz-Spektrum ist durch die Amplitude A(f) dieses oszillierenden Fotostroms gegeben.

[0037] Bisher wurde die Amplitude A(f) und damit das THz-Spektrum aus den Beträgen der Maxima I(f_{max}) an den Stellen f = f_{max} und aus den Beträgen der Minima I(f_{min}) an den Stellen f = f_{min} zusammengesetzt.

[0038] Dadurch ist die spektrale Auflösung des THz-Spektrums auf die Oszillationsperiode der Fotostrommesskurve limitiert.

b) Messaufbau für THz-Spektren und Eigenschaften des Fotostroms

[0039] Zunächst wird der Messaufbau zur Erfassung des Messsignals [Fotostrom I(f)] erläutert. Ein solcher Messaufbau wird auch für das erfindungsgemäße Verfahren verwendet, und das erfindungsgemäße Verfahren nutzt ein durch einen solchen Messaufbau bestimmtes Messsignal.

[0040] In **Fig. 1** ist schematisch ein typischer Messaufbau eines THz-Spektrometers dargestellt. Zur Erzeugung der THz-Strahlung werden zunächst zwei Laser 1, 2, welche bei leicht unterschiedlichen Frequenzen f_1 , f_2 betrieben werden, auf einem faserbasierten 50/50-Strahlteiler 3 gemischt. Die Wellenlänge der Laser 1, 2 ist dabei a priori egal (sie liegt meist bei etwa 1500 nm), wichtig ist aber der Frequenzunterschied $\Delta f = f_1 - f_2$ bzw. $\Delta \omega = \omega_1 - \omega_2$ mit $\omega = 2\pi f$ (im Folgenden wird vor allem auf die Kreisfrequenz ω Bezug genommen). Der Frequenzunterschied der Laser 1, 2 liegt im Bereich von einem Terahertz, und kann durch Verstimmung der Laser 1, 2 zueinander variiert werden. Bei der Überlagerung der (kohärenten) Laserstrahlen 1a, 2a der Laser 1, 2 am Strahlteiler 3, vgl. den ersten Teil 11 und den zweiten Teil 12 der überlagerten Laserstrahlung, entsteht eine Schwebung (Laser Beat), wobei die Einhüllende der Schwebung gerade mit der Frequenzdifferenz Δf der beiden Laser 1, 2 oszilliert. Diese Schwebungsfrequenz liegt also ebenfalls im Terahertz-Bereich.

[0041] Hinter dem 50/50-Strahlteiler 3 werden die (nun überlagerten) Laserstrahlen zum einen (vgl. den ersten Teil 11) auf den Emitter (THz-Sender) 13 gesendet, wo eine THz-Strahlung 14 erzeugt wird. Zum anderen (vgl. den zweiten Teil 12) werden die Laserstrahlen auf den Detektor (THz-Empfänger) 15 gesendet.

[0042] Im Sender 13 (auch als Transmitter oder kurz Tx bezeichnet) werden durch das eingestrahlte Lasersignal (also den ersten Teil 11) Ladungsträger zum Schwingen angeregt. Diese können allerdings aufgrund ihrer Beweglichkeit nur der niederfrequenten Frequenz, die durch die Einhüllende gegeben ist, folgen. Da die Einhüllende mit THz-Frequenz oszilliert, wird somit eine elektromagnetische Welle erzeugt, welche die Kreisfrequenz $\omega_{THz} = \Delta \omega$ besitzt (im Folgenden wird bei der Frequenz ω auf das Subskript "THz" verzichtet). Diese THz-Welle durchläuft nun einen Probenraum 16 und wird auf den Empfänger 15 fokussiert. Im Strahlengang bzw. im Probenraum 16 (etwa ausgebildet durch eine Gaszelle) kann eine Probe 17 (insbesondere eine gasförmige Probe) mit einer Dicke d platziert werden, deren spektrale Eigenschaften (Transmission / Absorption) von Interesse sind; hierdurch wird aus der THz-Strahlung 14 eine charakteristische Transmissionsstrahlung 18.

[0043] Der Empfänger 15 (auch als Receiver oder kurz Rx bezeichnet) ist ein halbleiterbasierter Detektor, der durch Einstrahlung von Laserstrahlung "scharf geschaltet" werden kann. Wird er durch den in **Fig. 1** von links eintreffenden Laserstrahl (also den zweiten Teil 12) getroffen, ist er in der Lage, das Feld der einfallenden THz-Welle zu messen. Das detektierte Signal (das ist der Fotostrom I(f)) ist dabei sowohl proportional zum elektrischen Feld des eintreffenden Laserstrahls $E_{Rx}^{Laser}(t,z)$ als auch zum elektrischen Feld $E_{Rx}^{THz}(t,z)$ der THz-Welle am Ort des Detektors 15, d.h. der Fotostrom I(f) ist proportional zum Produkt der beiden Felder:

 $I \propto E_{\mathsf{Rx}}^{\mathsf{THz}}(t, z) \cdot E_{\mathsf{Rx}}^{\mathsf{Laser}}(t, z) \qquad (1)$

[0044] Auf dem Weg zum Detektor 15 nehmen die beiden Felder auf ihren unterschiedlichen Wegen vom Fotomischer (Strahlteiler 3) aus unterschiedliche Phasen ϕ_1, ϕ_2 auf, denn sie durchlaufen unterschiedliche optische Wegstrecken I_1 , I_2 . Diese beiden Strecken I_1 , I_2 sind als gepunktete und durchgezogene Kurven in **Fig. 2** illustriert. Der Aufbau ähnelt einem Interferometer mit zwei unterschiedlich langen Armen, aber im vor-

liegenden Fall werden die Felder miteinander multipliziert, und nicht wie bei einem Interferenzexperiment addiert.

[0045] Man kann sowohl Laser- als auch THz-Feld vereinfacht als ebene Welle der Frequenz ω schreiben, wobei der Laser gerade die Strecke z = I_2 und die THz-Welle die Strecke z = I_1 durchläuft:

$$E_{\mathsf{Rx}}^{\mathsf{THz}}(t, z = l_1) \propto \cos(\omega t - \varphi_1)$$
 (2a)

 $E_{\mathsf{Rx}}^{\mathsf{Laser}}(t, z = I_2) \propto \cos(\omega t - \varphi_2)$ (2b)

[0046] Der Fotostrom ergibt sich dann zu:

 $I \propto \cos(\omega t - \varphi_1) \cdot \cos(\omega t - \varphi_2)$ (3)

[0047] Diesen Ausdruck kann man mit einer Multiplikationsregel des Cosinus vereinfachen zu:

$$I \propto \cos(\varphi_1 - \varphi_2) + \cos(2\omega t - \varphi_1 - \varphi_2).$$
 (4)

[0048] Der zweite Term oszilliert mit der Frequenz 2 ω . Diese Frequenz ist zu schnell, als dass man sie mit der Elektronik erfassen könnte; der Term mittelt sich also zu Null. Der erste Term ist ein Gleichstromanteil, den man messen kann. Der Phasenunterschied $\varphi_1 - \varphi_2$ läßt sich ausdrücken als:

$$\varphi_1 - \varphi_2 = \frac{l_1 - l_2}{c} \cdot \omega.$$
 (5)

[0049] Das heißt, der Phasenunterschied hängt von der THz-Frequenz und der Weglängendifferenz ab. Zur Bestimmung eines Spektrums S(ω) [bzw. S(f)] verstimmt man die Frequenz ω und lässt dabei die Weglängendifferenz bis auf den Einfluss der Dispersion konstant. Damit ändert sich die Phasendifferenz $\phi_1 - \phi_2$. Der detektierte Fotostrom oszilliert daher mit der Änderung der Phasendifferenz.

$$I(\omega) \propto \cos\left(\frac{l_1 - l_2}{c} \cdot \omega\right)$$
 (6)

[0050] Die Periode dieser Oszillation ist gegeben durch $c/(l_1 - l_2)$, d.h. wenn die beiden Wegstrecken sehr ähnlich sind $l_1 \approx l_2$, dann hat die Oszillation des Fotostroms eine sehr lange Periode als Funktion der eingestellten Teraherzfrequenz. Entgegengesetzt, wenn die Wegstrecken sehr unterschiedlich sind, dann oszilliert der Fotostrom sehr schnell als Funktion der Teraherzfrequenz.

[0051] Wird zusätzlich eine Probe 17 in den Strahlengang gebracht, so muss Gleichung (6) modifiziert werden. Das Einbringen einer Probe 17 der Dicke d in den Strahlengang kann sich beispielsweise durch Absorption von Strahlung auf die Amplitude der Strahlung und durch den Brechungsindex n der Probe 17 auf die Phase auswirken. Gleichung (6) muss daher durch einen frequenzabhängigen Amplitudenterm A(ω) und eine durch die Dispersion der Probe 17 zusätzliche Phase $\varphi(\omega)$ ergänzt werden. Man erhält den Fotostrom als Funktion der THz-Frequenz:

$$I(\omega) = A(\omega) \cdot \cos\left(\frac{l_1 - l_2}{c} \cdot \omega - \varphi(\omega)\right)$$
(7)

[0052] Für diesen Phasenterm gilt:

$$\varphi(\omega) = \frac{nd}{c} \cdot \omega \text{ mit } n = n(\omega)$$
 (8)

[0053] Aus der Dispersion folgt eine Änderung der Oszillationsperiode des Fotostroms $I(\omega)$. Das optisch dichtere Medium der Probe 17 verlängert einen der beiden Teilstrahlen 11, 12 (hier Teilstrahl 11) im Aufbau.

[0054] Der Fotostrom I(f) bei einer typischen Messung mit einer Gaszelle ist in **Fig. 3** dargestellt. Bei der Messung wurde die Absorption der Terahertz-Strahlung beim Durchgang durch eine Gaszelle untersucht. Wichtig ist das spektrale Merkmal ("Dip") im rechten Bereich der Kurve (bei ca. 1160 GHz); hierbei handelt

es sich um eine Absorptionslinie von Wasser. Die Linie ist spektral schmalbandig, da ein geringer Gasdruck in der Gaszelle verwendet wurde.

[0055] Im folgenden Abschnitt wird gezeigt, dass dieses spektrale Merkmal mit dem Stand der Technik nicht ausreichend aufgelöst wird.

c) Bestimmung der Amplitude nach dem Stand der Technik

[0056] Nunmehr wird die Methode der Datenauswertung nach dem Stand der Technik beschrieben, und die dadurch entstehende Limitierung dargestellt.

[0057] Die funktionale Abhängigkeit des Fotostroms von der THz-Frequenz ω ist gegeben durch Gleichung (7). Diese Gleichung enthält als frequenzabhängige Variablen die Amplitude A(ω) sowie die Phase $\varphi(\omega)$. Beide Größen müssen aus der Messkurve bestimmt werden, wobei für die Bestimmung eines Absorptionsspektrums (der "Absorbanz") nur die Amplitude A(ω) relevant ist.

[0058] Die Bestimmung zweier Unbekannter aus nur einer Messkurve ist ein nicht triviales, inverses Problem, denn in jedem Punkt der Kurve müssen zwei Variablen aus einer Gleichung bestimmt werden.

[0059] Bisher (vgl. Referenz [2]) wurde die Amplitude A(ω) in den Maxima $\omega = \omega_{max}$ und Minima $\omega = \omega_{min}$ der Kurve I(ω) bestimmt, denn an diesen Punkten weiß man, dass das Argument des Cosinus das gerade bzw. ungerade Vielfache von π ist:

$$\frac{l_1 - l_2}{c} \cdot \omega_{\max} - \varphi(\omega_{\max}) = n \cdot 2\pi, \ n = 0, 1, 2, \dots \text{ für Maxima und}$$
(9a)
$$\frac{l_1 - l_2}{c} \cdot \omega_{\min} - \varphi(\omega_{\min}) = (2m + 1) \cdot \pi, \ m = 0, 1, 2, \dots \text{ für Minima.}$$
(9b)

[0060] Damit entfällt an diesen Punkten die Bestimmung der Phase $\varphi(\omega)$ (denn der Cosinus ergibt sich hier jeweils zu 1 oder zu -1) und die Bestimmung von A(ω) ist eindeutig. Eine entsprechende Berechnung kann in die Messsoftware integriert werden, und deren Ergebnis A($\omega_{min/max}$) wird auch als "Einhüllende" bezeichnet. **Fig. 4** zeigt eine solchermaßen nach dem Stand der Technik bestimmte Amplitudenkurve (Kreise gestrichelt verbunden). Man erkennt, dass die so berechnete Amplitudenkurve nur wenige Punkte enthält, und der oben beschriebene Dip im rechten Teil der Kurve des Fotostroms I(f) in der Einhüllenden nicht aufgelöst wird.

[0061] Wäre der Absorptionsdip breiter als der Abstand mehrerer Extrema, so wäre die begrenzte Auflösung kein Problem. Ein solches Beispiel ist in **Fig. 5** dargestellt. In der Mitte des Spektrums beobachtet man, dass der Fotostrom auf einer Breite von ca. 5 GHz einbricht, d.h. die Oszillationen eine deutlich geringere Amplitude aufweisen. Auch in diesem Fall handelt es sich um eine Absorptionslinie von Wasserdampf, jedoch wurde diese Linie bei hohem Druck gemessen. Durch den hohen Druck kommt es zur sogenannten Stoßverbreiterung und die Absorptionslinie weist eine deutlich höhere Linienbreite als in **Fig. 3** und **Fig. 4** auf. Die Absorptionslinie in **Fig. 5** erstreckt sich über ca. 10 Oszillationen im Fotostrom und kann somit durch die konventionelle Bestimmung der Einhüllenden (Amplitudenkurve, Kreise gestrichelt verbunden) aufgelöst werden.

d) Zur Definition des Begriffes "Auflösung" bei der Auswertung der Fotostromkurve

[0062] Im Folgenden wird mehrfach der Begriff "Auflösung" in vergleichender Form ("höhere Auflösung" bzw. "niedrigere Auflösung") verwendet. Es ist daher sinnvoll, den Begriff im Kontext der Bestimmung der Amplitude A(f) des Fotostroms I(f) zu definieren.

[0063] Gegeben sei ein periodisch oszillierender Fotostrom gemäß GI. (7). Diese Fotostromkurve wird für diskrete Frequenzwerte f_i gemessen (mit i: Zählindex). Wir nehmen an, dass innerhalb einer Periode $p = c/(I_1 - I_2)$ der Fotostromkurve m Messwerte im Abstand $\delta f = |f_{i+1} - f_i|$ liegen. Mit der Auswertung nach dem Stand der Technik erhält man innerhalb einer Periode zwei Punkte für die Amplitudenkurve – einen Punkt für das Maximum innerhalb der Periode und einen Punkt für das Minimum. Im Folgenden werden diese Punkte "Ergebnispunkte" r genannt. Das spektrale Auflösungsvermögen Δf unter Verwendung der Methode gemäß dem Stand der Technik (mit r = 2) beträgt damit

$$\Delta f=\frac{p}{r}=\frac{m\cdot\delta f}{2},$$

und hängt direkt mit der Oszillationsperiode p zusammen (s. auch folgenden Abschnitt). Damit die Oszillation als solche erkannt werden kann, sollten ausreichend viele Datenpunkte zwischen einem Minimum und einem benachbarten Maximum liegen. Je mehr Datenpunkte dazwischen liegen, desto genauer können die Extremwertstellen identifiziert werden, d.h. für den Abstand der Messwerte δf gilt: $\delta f << p = c/(I_1 - I_2)$. Als Folge muss die Fotostromkurve in Schritten von δf gemessen werden, die Auswertemethode nach dem Stand der Technik liefert aber nur eine Auflösung Δf , welche um den Faktor m/2 gröber ist. Möchte man das Auflösungsvermögen verbessern, so muss zunächst die Oszillationsperiode p verringert werden (s. auch folgenden Abschnitt). Gleichzeitig muss aber auch die Schrittweite δf verkleinert werden, um die Oszillation korrekt zu detektieren. Soll der gleiche spektrale Bereich wie zuvor abgefahren werden, so erhöht sich die Gesamtzahl der Messpunkte der Messung. Für jeden Messpunkt wird eine feste Integrationszeit benötigt; somit erhöht sich der Zeitbedarf einer Messung.

[0064] Wie später gezeigt wird, ist bei der vorliegenden Erfindung die Auflösung nur durch die Schrittweite δf begrenzt; die Erfindung bietet daher bei gleichem Zeitbedarf eine um den Faktor m/2 verbesserte Auflösung.

e) Zusammenhang zwischen Auswertungsmethode und physikalischem Aufbau der Messung

[0065] Wie oben in Gleichung (6) und (7) dargestellt, ist die Oszillationsperiode des Fotostroms proportional zur Wegstreckendifferenz $I_1 - I_2$. Im konkreten Experiment wird diese Wegstreckendifferenz mit der Länge der Glasfasern zwischen Strahlteiler und Sender bzw. Empfänger eingestellt. In einem typischen experimentellen Aufbau beträgt beispielsweise die Weglängendifferenz $I_1 - I_2 \approx 21$ cm, was zu einer Oszillationsperiode von

$$p = \frac{c}{l_1 - l_2} = 1,4 \text{ GHz führt.}$$

[0066] Wenn man nun die oben beschriebene Auswertemethode verwendet, und bei der Berechnung der Amplitude des Fotostroms die Extremwertstellen verwendet, dann erhält man Datenpunkte mit einer Auflösung von 0,7 GHz (man berücksichtigt auch die Minima, d.h. man sucht nach den Maxima des Absolutwerts des Fotostroms, daher bekommt man Datenpunkte im Abstand von einem Maximum zum angrenzenden Minimum). Das bedeutet, die Auflösung ist direkt an die "physikalische Konfiguration des Aufbaus" (der gewählten Faserlänge) gekoppelt. Will man die mögliche Auflösung ändern, so muss man die Konfiguration ändern, und damit gibt es eine Rückwirkung von der Auswertemethode auf das Experiment. Im Rahmen der Erfindung ist man von dieser Rückwirkung befreit.

f) Gezielte Veränderung der optischen Weglänge zur Kontrolle der Phase $\phi(\omega)$

[0067] In Referenz [1] wird eine instrumentelle Technologie beschrieben, die als Alternative zur oben gezeigten Auswertetechnik genutzt werden kann, und die es ermöglicht, die Amplitude A(ω) für alle Messpunkte ω zu bestimmen. Bei dieser Technologie wird in die Glasfaser, welche den Strahlteiler mit dem THz-Sender bzw. mit dem Empfänger verbindet, ein sogenannter Faserstrecker eingebaut. Mit diesem Faserstrecker wird die Glasfaser mechanisch in die Länge gezogen und somit die optische Weglänge I₁ bzw. I₂ gezielt verändert. Bei einer Änderung etwa der Weglänge I₁ kann man das Argument des Cosinus in Gleichung (7) umschreiben in

$$\frac{\dot{l_1} - l_2}{c} \cdot \omega - \varphi(\omega), \text{ mit } \dot{l_1} = l_1 + l_{Faser},$$

wobei I_{Faser} die eingestellte zusätzliche Länge der Faser ist. Man kann die Länge der Faser I_{Faser} für jeden Messpunkt ω gezielt einstellen; damit wird I_{Faser} eine Funktion der Frequenz I_{Faser}(ω). Es ist instruktiv, den Term I_{Faser}(ω) mit der frequenzabhängigen Phase $\varphi(\omega)$ zusammen zu ziehen:

$$\frac{I_{1}-I_{2}}{c}\cdot\omega+\underbrace{I_{Faser}\left(\omega\right)}_{=\tilde{\varphi}\left(\omega\right)}\omega-\varphi\left(\omega\right)}_{=\tilde{\varphi}\left(\omega\right)},$$

d.h. die Verwendung des Faserstreckers führt zu einer Kontrolle der Phase $\tilde{\phi}(\omega)$. Beispielsweise kann man nun $\tilde{\phi}(\omega)$ für jede Frequenz ω so einstellen, dass das Argument des Cosinus immer gerade ein ganzzahliges Vielfaches von 2π ist und der Cosinusterm in Gleichung (7) immer 1 ergibt:

$$I(\omega) = A(\omega) \cdot \underbrace{\cos\left(\frac{l_1 - l_2}{c} \cdot \omega - \tilde{\varphi}(\omega)\right)}_{=1} = A(\omega).$$

[0068] Die Bestimmung der Amplitude $A(\omega)$ ist damit eindeutig für jeden Messpunkt und die Beschränkung auf die Extremwertstellen der Fotostromkurve entfällt.

[0069] In Referenz [1] wird erläutert, dass die Veränderung der Faserlänge periodisch angewandt wird, d.h. dass die Phase $\tilde{\phi}(\omega)$ periodisch zwischen 0 und 2π variiert wird. Das genaue Vorgehen in [1] ist nicht exakt dargelegt; die Autoren schreiben, dass der Fotostrom am Empfänger durch Mittelung des Signals bestimmt wird.

[0070] Obwohl die Methode mit dem Faserstrecker nicht den Limitierungen des oben beschriebenen Auswerteverfahrens unterliegt, birgt die Methode folgende Nachteile:

- Ein zusätzliches Bauteil (Faserstrecker) mit hohem Kostenfaktor muss in den Aufbau integriert werden.
- Für jeden Messpunkt ω muss die Phase $\tilde{\phi}(\omega)$ variiert werden, dadurch verlängert sich die Messzeit.

[0071] Mit dem erfindungsgemäßen Verfahren ist der Einsatz eines Faserstreckers nicht notwendig, wodurch sich der experimentelle Aufbau vereinfacht, und eine Variation der Phase für jedem Messpunkt bzw. jede Messfrequenz ω ist nicht erforderlich, wodurch sich die Messzeit verkürzt.

2. Erfindungsgemäße Messung und Bestimmung eines THz-Spektrums a) Überblick

[0072] Gemäß der Erfindung wird die Amplitude A(ω) für jeden Datenpunkt im oszillierenden Fotostrom berechnet, nicht nur für die Extremwertstellen. Mittels des Messsignals (Fotostroms) I(f) wird ein um 90° phasenverschobenes Hilfssignal Ĩ(f) gebildet. Der Betrag der Amplitude A(f) bzw. das Spektrum S(f) kann dann für alle Frequenzen f bestimmt werden aus

$$\left|I(f)+i\tilde{I}(f)\right|=\sqrt{\left[I(f)\right]^{2}+\left[\tilde{I}(f)\right]^{2}}.$$

[0073] Bevorzugt ist folgende Möglichkeit zur Ermittlung der Amplitude: Es wird die Berechnung des analytischen Signals verwendet. Aus dem Messsignal (Fotostromkurve I(f)) wird eine komplexe Zahl $z(f) = x(f) + i \cdot y$ (f) gebildet (i: imaginäre Einheit). Dabei ist der Realteil x(f) gleich der Fotostromkurve I(f), und der Imaginärteil ist gleich der Hilbert-Transformierten $\mathfrak{Re}[I(f)]$ der Fotostromkurve I(f). Aus dem komplexen Betrag |z(f)| erhält man für jede Frequenz / der Messkurve einen Wert der Amplitude A(f).

[0074] Damit ist man in der Bestimmung der Amplitude nicht auf die Periode der Extremwertstellen f_{min/max} limitiert, und erreicht damit eine höhere spektrale Auflösung für die Amplitude und damit für das Spektrum.

b) Beschreibung einer bevorzugten Variante zur Bestimmung des Spektrums S(f) über eine Fouriertransformation

[0075] Gegeben sei eine Fotostromkurve als Funktion der Frequenz f [vgl. Gleichung (7)]:

$$I(f) = A(f) \cdot \cos\left(\frac{2\pi f}{p} + \varphi(f)\right) + A_0 \qquad (10)$$

[0076] Hierbei ist A(f) die frequenzabhängige Amplitude des Messsignals, $\varphi(f)$ die frequenzabhängige Phase und p = c/(I₁- I₂) die Oszillationsperiode des Fotostroms. Ein möglicher konstanter Offset A₀ wird vernachlässigt (A₀ = 0). Gesucht ist die Amplitude A(f) des Messsignals.

[0077] Zur Berechnung der Amplitude wird in der hier vorgestellten Variante folgender Algorithmus verwendet:

1. Man nehme das reellwertige Messsignal (Fotostrom) I(f) und bilde die diskrete, komplexe Fouriertransformation (DFT oder FFT). Das Ergebnis speichere man in einem (komplexen) Vektor v. Der Vektor v hat, wie auch das Ausgangssignal I(f), die Länge n. Zur Vereinfachung sei hier angenommen, dass n gerade sei.

2. Bilde einen Vektor h, der die gleiche Länge wie der Vektor v aufweist. Die Elemente h_i von h haben die folgenden Werte:

- h_i = 1 für i = 1 und für
$$i = \frac{n}{2} + 1$$

- h_i = 2 für $i = 2, 3, ..., \frac{n}{2}$

- $h_i = 0$ für $i = \frac{n}{2} + 2, ..., n$

3. Berechne das elementweise Produkt von h und v.

4. Berechne die inverse, diskrete und komplexe Fouriertransformierte (IDFT oder IFFT) des eben berechneten Produkts aus h und v.

Das Ergebnis dieser inversen FFT ist der komplexe Vektor $z(f) = I(f) + i \tilde{I}(f)$ mit dem ursprünglichen Messsignal I(f) als Realteil und mit der Hilberttransformierten $\tilde{I}(f) = \mathfrak{H}[I(f)]$ als Imaginärteil. Der komplexe Vektor z(f) wird auch als analytisches Signal bezeichnet.

5. Bilde den komplexen Betrag S(f) = |z(f)|, dieser entspricht in guter Näherung der gesuchten Amplitude A(f), d.h. S(f) \approx A(f).

[0078] Die in Punkt 5 bezeichnete Näherung besteht darin, dass die berechnete Amplitude S(f) an den Rändern des Messbereichs (<5 Oszillationsperioden) gegenüber der tatsächlichen Amplitude A(f) Artefakte aufweist.

c) Vorteile des erfindungsgemäßen Verfahrens

[0079] Erfindungsgemäß wird die Amplitude A(f) für jeden Messpunkt f bestimmtman kann deshalb auch von der Instantaneinhüllenden oder Momentaneinhüllenden sprechen.

[0080] In **Fig. 6a** und **Fig. 6b** ist die Berechnung der Amplitude A(f) bzw. Instantaneinhüllenden nach dem erfindungsgemäßen Verfahren für die Fotostromkurve aus **Fig. 3** dargestellt. Ausgehend vom ursprünglichen Messsignal I(f) wird mit oben beschriebener Methode (Schritte 1-4) ein um 90° phasenverschobenes Hilfssignal Ĩ(f) (gestrichelt dargestellt) des Signals I(f)

(durchgezogen dargestellt) berechnet (**Fig. 6a**). Ausgehend von diesen beiden Kurven wird das analytische Signal $z(f) = I(f) + i \tilde{I}(f)$ berechnet, dessen Betrag |z(f)| (fett dargestellt) der Instantaneinhüllende A(f) entspricht (**Fig. 6b**).

[0081] Man erkennt, dass die Instantaneinhüllende sich - wie zuvor - glatt an die Maxima der Fotostromkurve schmiegt. Im Gegensatz zur vorherigen Methode hat die berechnete Amplitudenkurve A(f) bei der erfindungsgemäßen Methode allerdings genauso viele Messpunkte wie die ursprüngliche Fotostromkurve. Dies führt zu einer Verbesserung der spektralen Auflösung gegenüber der vorherigen Methode. Man erkennt in der rechten Hälfte des Spektrums, dass die Absorptionslinie auch in der Amplitudenkurve aufgelöst wird. Zur besseren Übersicht ist in **Fig. 7** noch einmal die Amplitudenkurve A(f) ohne die Fotostromkurven im Bereich um den Peak bei ca. 1160 GHz als Detailvergrößerung zu **Fig. 6b** dargestellt (y-Achse ist auf relevanten Bereich skaliert).

d) Auflösungsvermögen der erfindungsgemäßen Methode

[0082] Oben wurde gezeigt, dass bei der Berechnung der Amplitudenkurve gemäß dem Stand der Technik (ohne Fasenstrecker) ein spektrales Auflösungsvermögen von $\Delta f = p/2$ möglich ist, wobei $p = m \cdot \delta f$ einer Oszillationsperiode des Fotostroms entspricht, die mit m Schritten der Schrittweite δf abgerastert wird. Unter Verwendung der erfindungsgemäßen Methode entspricht das Auflösungsvermögen Δf gerade der Schrittweite δf , da die Amplitudenkurve beim erfindungsgemäßen Verfahren genauso viele Punkte enthält wie die Fotostromkurve. Bei gleichen Messparametern verbessert sich daher das Auflösungsvermögen gegenüber der konventionellen Methode um den Faktor m/2.

e) Alternative Bildung der Hilberttransformierten

[0083] Die oben gezeigte Variante verwendet die Bildung der Fouriertransformation zur Berechnung der Hilberttransformierten bzw. des analytischen Signals. Damit diese Methode angewendet werden kann, muss das Messsignal I(f) für den gesamten Messbereich, also alle relevanten Frequenzen f, vorliegen. Weiterhin wird die berechnete Amplitudekurve A(f) umso genauer, je breiter der gewählte Messbereich ist. Das bedeutet, dass eine Berechnung der Amplitudenkurve während der laufenden Messung nur mit unzureichender Genauigkeit erfolgen kann.

[0084] Daher werden im Folgenden mehrere Alternativen gezeigt, mit welchen die Hilberttransformierte \mathfrak{H} bzw. das analytische Signal z(f) ohne Verwendung der Fouriertransformation berechnet werden können. Diese Methoden sind direkt auf das Messsignal I(f) anwendbar, so dass während der laufenden Messung die Amplitudenkurve A(f) berechnet werden kann.

f) Verwendung eines Hilberttransformators

[0085] Bei diesen alternativen Methoden werden vordefinierte, diskrete Filterkurven H(f) ("digitale Filter") auf das Messsignal I(f) angewendet. Das Filter H(f) liegt als Filter mit endlicher Impulsantwort (FIR) der Ordnung M vor, und wird über die sogenannte Differenzgleichung auf das Messsignal I(f) angewandt (man beachte, dass es sich bei den Messpunkten um diskrete Frequenzen / mit Schrittweite δ f handelt):

$$H[I(f)] = \sum_{k=0}^{M-1} H(k) \cdot I(f - \delta f \cdot k)$$
(11)

[0086] Ein erster Ansatz ist es, die Impulsantwort H(f) so zu erstellen, dass durch Anwendung H[I(f)] des Filters auf das Messignal I(f) die Hilbertransformierte $\mathfrak{Pt}[I(f)]$ approximiert wird, d.h. dass die Filterung H[I(f)] ein Signal Ĩ(f) erzeugt, welches sich von I(f) idealerweise nur durch eine 90° Phasenverschiebung unterscheidet. Ein solches Filter H wird auch Hilberttransformator genannt. Man konstruiert dann aus I(f) und Ĩ(f) den komplexen Vektor z(f) = I(f) + i Ĩ(f), aus welchem wie oben die Amplitude |z(f)| berechnet wird.



[0087] Das Filter H(f) wird im Vorfeld als reellwertiger Vektor konstruiert. Dabei wird das Filter über seine Fouriertransformation $\tilde{H}(t) = \mathcal{F}[H(t)]$ H im Zeitraum eindeutig definiert, d.h. der funktionale Verlauf von \tilde{H} in Abhängigkeit der Zeit t wird festgelegt. Zwischen der Darstellung im Zeitraum und der Darstellung im Frequenzraum besteht über die inverse Fouriertransformation dann ein eindeutiger Zusammenhang. Es ist üblich, die Funktion $\tilde{H}(t)$ im Zeitraum so zu konstruieren, dass die Darstellung H(f) im Frequenzraum einen einfachen analytischen Ausdruck aufweist.

[0088] Um eine Hilberttransformation zu realisieren, wird das Filter im vorliegenden Fall so konstruiert, dass $\tilde{H}(t)$ einem Bandpass ähnelt, d.h. dass $|\tilde{H}(t)|$ eine Rechteckform aufweist. Der Durchlassbereich des Filters sind idealerweise alle positiven Zeiten (t > 0) und das Stoppband sind idealerweise alle negativen Zeiten (t ≤ 0). Da das Messsignal I(f) aus n diskreten Messpunkten mit Abstand δf besteht, erstreckt sich die Fouriertransformierte $\mathcal{F}[I(f)]$ des Messsignals nur über den Bereich von - $(\delta f)^{-1}$ bis + $(\delta f)^{-1}$ mit einem Punkteabstand von (n · $\delta f)^{-1}$. Daher genügt es, endliche, obere und untere Grenzen für den Durchlassbereich des Filters $\tilde{H}(t)$ zu definieren. Die untere Grenze für den Durchlassbereich ist dann $t_L \approx (\pi \cdot \delta f)^{-1}$ und die obere Grenze $t_H \approx (2\delta f)^{-1}$. Die Impulsantwort H(f) des Filters für eine solche Form von $\tilde{H}(t)$ entspricht näherungsweise der Form $\sin^2(f)/f$, allerdings ist die konkrete funktionale Form von H(f) abhängig von der Wahl verschiedener Faktoren, wie z.B. des Filtertyps oder der Parität des Filterlänge (gerade/ungerade Anzahl von Punkten).

[0089] Zusätzlich zur Phasenverschiebung von 90° besitzt das digitale Filter eine von Null verschiedene, konstante Gruppenlaufzeit, welche eine zusätzliche Verzögerung f_{delay} des gefilterten Signals H[I(f)] verursacht. Das bedeutet, dass die Anwendung des Filters zunächst einmal H[I(f)] = Ĩ(f - f_{delay}) erzeugt. Die Verzögerung f_{delay} hängt von der Länge des Filters ab und ist damit eine bekannte Größe. Man kann also einfach die Frequenzachse der komplexen Größe Ĩ um den Wert - f_{delay} verschieben, d.h. man bildet H[I(f+ f_{delay})] und somit Ĩ(f - f_{delay}) \mapsto I(f). Aus den Kurven I(f) und Ĩ(f) konstruiert man anschließend das analytische Signal z(f) = I(f) + i Ĩ(f).

[0090] Das Konzept eines digitalen Filters impliziert, dass das Messsignal, auf welches das Filter angewandt wird, in diskreten, äquidistant verteilten Punkten vorliegt. Bei der erfindungsgemäßen Messmethode kann der Fotostrom I(f) in diskreten Frequenzschritten $f = f_k = \delta f \cdot k + f_0$ mit Index k = 0, ..., n, Schrittweite δf und Startfrequenz f_0 ermittelt werden, d.h. er erfüllt dann diese Bedingung. Ein Filter H₉₀ wird analog dazu in diskreten Schritten definiert, die a priori unabhängig von den Frequenzwerten / sind. Um diesen Umstand zu verdeutlichen, schreiben wir in der Folge die Impulsantwort H(k) als Funktion der Variable k = 0, 1, ..., M - 1. Die Größe M bezeichnet die Ordnung des Filters und entspricht der Länge des Filters. Durch Anwendung des Filters auf die Messkurve (mit Schrittweite δf) erhält man dann eine Beziehung zwischen der Länge (der sogenannten Ordnung) des Filter und seiner Breite im Frequenzraum. Bei der Konstruktion des Filters ist es wichtig zu beachten, dass die Filterordnung M von H₉₀ in etwa der Größenordnung der Periodenlänge p des periodischen Messsignals entspricht.

Beispiel zur Anwendung eines Hilberttransformators

[0091] Zur Illustration des Verfahrens wird ein FIR-Filter H_{90} der Ordnung M = 200 konstruiert, d.h. das Filter besitzt eine Länge von 200 Filterkoeffizienten. Die Filterkoeffizienten berechnen sich gemäß der Funktion

$$H(k) = \begin{cases} 0 , \text{ für } k = \frac{M}{2} \\ \frac{\sin^2\left(\frac{\pi}{2}\left(\frac{M}{2} - k\right)\right)}{\frac{\pi}{2}\left(\frac{M}{2} - k\right)} , \text{ sonst} \end{cases}$$
(12)

[0092] Die aus Gleichung (12) resultierende Impulsantwort $H_{90^{\circ}}(k)$ des 90° FIR-Filtern, zur Verwendung als Hilberttransformator, ist in **Fig. 8a** und vergrößert im Bereich um k=100 in **Fig. 8b** dargestellt. Man erkennt, dass jeder zweite Filterkoeffizient gleich Null ist.

[0093] Die Filterordnung M entspricht bei Anwendung des Filters auf den unten (vgl. **Fig. 9a)** gezeigten Datensatz etwa einer spektralen Breite von 0,8 GHz, und liegt damit in der gleichen Größenordnung wie die Oszillationsperiode p = 1,4 GHz des Fotostroms I(f).

[0094] Das in **Fig. 8a** und **Fig. 8b** definierte FIR-Filter H_{90} wird nun gemäß Gleichung (11) auf das Messsignal I(f) aus **Fig. 3** angewandt. Die Anwendung des FIR-Filters H_{90} auf eine Fotostromkurve I(f) (dargestellt in **Fig. 9a**) führt zur 90°-phasenverschobenen, verzögerten Kurve $H_{90°}[I(f)]$ (dargestellt in **Fig. 9b**). Zum Entfernen der Verzögerung wird die Kurve um die Frequenz f_{delay} verschoben (wie in **Fig. 9c** dargestellt), und die Instantaneinhüllende S(f) wird als Betrag |z(f)| des analytischen Signals $z(f) = I(f) + i \cdot H_{90°}[I(f + f_{delay})]$ berechnet (siehe **Fig. 9d**).

[0095] Man erkennt in **Fig. 9d**, dass durch die Anwendung von H₉₀ die Amplitudenkurve A(f) ebenfalls mit hoher Genauigkeit rekonstruiert werden kann. Im direkten Vergleich mit der zuvor gezeigten erfindungsgemäßen Variante (unter Verwendung der Fouriertransformation) sind keine signifikanten Abweichungen zu erkennen.

g) Verwendung eines Phasensplitters

[0096] Die zentrale Eigenschaft des analytischen Signals $z(f) = I(f) + i \tilde{I}(f)$ ist, dass zwischen Realteil I(f) und Imaginärteil $\tilde{I}(f)$ eine Phasendifferenz von 90° besteht; bis auf diese Phasenverschiebung sind die Anteile ansonsten aber identisch. Im zuvor gezeigten Ansatz wurde der Hilberttransformator H verwendet, um diese 90° Phasenverschiebung auf dem Messsignal I(f) zu erzeugen. Dabei handelt es sich um ein asymmetrisches Verfahren, bei dem die Phasenverschiebung im Imaginärteil $\tilde{I}(f)$ vorliegt und der Realteil I(f) identisch

zu dem ursprünglichen Signal ist. Als weiteren alternativen Ansatz kann man ein symmetrisches Filterverfahren verwendeten, bei welchem sowohl Real- als auch Imaginärteil des analytischen Signals z(f) mit zwei getrennten Filtern H₁, H₂ ("digitale Filter") bearbeitet werden. Wiederum ist das Ziel dieser Filterung, dass zwischen Real- und Imaginärteil eine Phasendifferenz von 90° besteht, die Amplituden der Anteile aber gleich sind. Man bezeichnet die Filter H₁, H₂ im Zusammenspiel auch als Phasensplitter.



[0097] Wie im vorigen Ansatz werden H₁ und H₂ so konstruiert, dass sie - zusammen angewandt - als Bandpass-Filter wirken, und wiederum ist es zweckdienlich, die Eigenschaften der Filter im Fourier-Raum, d.h. für $\tilde{H}_1(t)$ und $\tilde{H}_2(t)$ festzulegen. Dabei gilt: $\tilde{H}_1(t) = -i \cdot \text{sgn}(t) \cdot \tilde{H}_2(t)$, mit der Vorzeichenfunktion sgn(t).

[0098] Weiterhin gilt $H_i(-t) = H_i^*(t)$ für i = 1,2 und mit dem komplex Konjugierten H_i^* . Aus diesen Bedingungen folgt, dass die Amplitudenantworten $|\tilde{H}_1(t)|$ und $|\tilde{H}_2(t)|$ der Filter H_1 und H_2 identisch sind, und dass zwischen den Antwortfunktionen $\tilde{H}_1(t)$ und $\tilde{H}_2(t)$ eine Phasendifferenz $\Delta \phi(t) = |\phi_{H1}(t)-\phi_{H2}(t)| = 90^\circ$ besteht, wobei

 $\varphi_{H1}(t) = \arctan\left(\frac{\Im\left[\tilde{H}_{1}(t)\right]}{\Re\left[\tilde{H}_{1}(t)\right]}\right)$, analog für $\varphi_{H2}(t)$.

Idealerweise gilt für die Amplitudenantworten

$$\left|\tilde{H}_{i}(t)\right| = \begin{cases} 1 \text{ für } t < 0\\ 0 \text{ für } t = 0, \text{ wiederum für } i = 1,2\\ 1 \text{ für } t > 0 \end{cases}$$

[0099] Die Impulsantworten H₁(f) und H₂(f) der Filter H₁ und H₂ im Frequenzraum werden erzeugt, indem die diskrete, inverse Fouriertransformation auf $\tilde{H}_1(t)$ bzw. $\tilde{H}_2(t)$ angewandt wird:

$$H_1(f) = \mathcal{F}^{-1}\left[\tilde{H}_1(t)\right] \text{ und } H_2(f) = \mathcal{F}^{-1}\left[\tilde{H}_2(t)\right]$$

[0100] Die Impulsantworten H₁(f) und H₂(f) werden wie zuvor direkt auf das Messsignal I(f) angewandt. Analog zu dem Hilberttransformator H im vorherigen Ansatz erzeugen H₁ und H₂ eine zusätzliche Verzögerung des Signals I(f). Diese Verzögerung ist identisch für H₁ und H₂, und sie kann ähnlich zum vorherigen Ansatz korrigiert werden. Allerdings ist die Verzögerung nicht konstant für alle Zeiten t, so dass ein geringes Artefakt (sog. Chirp) bei der Korrektur der Verzögerung verbleibt.

Beispiel zur Anwendung eines Phasensplitters

[0101] Analog zum vorherigen Beispiel wird die Anwendung des zuvor beschriebenen Phasensplitters demonstriert. Dazu wurden zwei FIR-Filter $H_1 = H_{30^\circ}$ und $H_2 = H_{120^\circ}$ der Ordnung M = 200 konstruiert, welche jeweils eine Phasenverschiebung von 30° bzw. 120° verursachen, und somit zueinander eine Phasendifferenz von 90° aufweisen. Die Filterkoeffizienten $H_{30^\circ}(k)$ (Kreise) und $H_{120^\circ}(k)$ (Dreiecke) der Impulsantworten der 30°- und 120°FIR-Filter, zur Verwendung als Phasensplitter, sind in **Fig. 10a** und in Vergrößerung um den Bereich k=100 in **Fig. 10b** dargestellt. Man erkennt, dass analog zum Hilberttransformator H_{90° oben, jeder zweite Filterkoeffizient von H_{30° und H_{120° gleich Null ist.

[0102] Beide Filter werden jeweils gemäß Gleichung (11) auf den Datensatz aus **Fig. 3** angewandt; das Ergebnis der Anwendung und die berechnete Instantaneinhüllende A(f) sind in **Fig. 11a-11d** dargestellt. Die Anwendung auf die ursprünglichen Messdaten I(f) (dargestellt in **Fig. 11a)** erzeugt zwei um 30° (gestrichelt dargestellt) bzw. 120° (durchgezogen dargestellt) phasenverschobene, verzögerten Kurven (vgl. **Fig. 11b)**. Zum Entfernen der Verzögerung werden beide Kurve um die Frequenz f_{delay} verschoben (siehe **Fig. 11c**).

Die Instantaneinhüllende S(f) wird als Betrag |z(f)| des analytischen Signals $z(f) = H_{30^{\circ}} \left[I \left(f + f_{delay} \right) \right] + i \cdot H_{120^{\circ}} \left[I \left(f + f_{delay} \right) \right]$ berechnet (siehe **Fig. 11d**).

[0103] Ähnlich zum vorhergehenden Beispiel (vgl. **Fig. 9d**) erkennt man in **Fig. 11d**, dass auch unter Verwendung von $H_{30^{\circ}}$ und $H_{120^{\circ}}$ die Amplitudenkurve A(f) mit hoher Genauigkeit rekonstruiert werden kann. Wiederum zeigen sich im direkten Vergleich mit der zuvor gezeigten Variante (unter Verwendung der Fouriertransformation) keine signifikanten Abweichungen.

[0104] Zusammenfassend betrifft die Erfindung ein Verfahren zur Messung und Bestimmung eines THz-Spektrums einer Probe (17), wobei zwei Laserstrahlen (1a, 2a) überlagert werden, so dass zwei Teile (11, 12) einer überlagerten Laserstrahlung erzeugt werden, die eine Schwebungsfrequenz im THz-Bereich aufweisen, wobei der erste Teil (11) in einen Emitter (13) zur Erzeugung einer THz-Strahlung (14) eingeleitet wird, wobei die THz-Strahlung (14) die Probe (17) durchläuft und die so erhaltene charakteristische Transmissionsstrahlung (18) einem Detektor (15) zugeleitet wird, wobei der Detektor (15) durch den zweiten Teil (12) der überlagerten Laserstrahlung aktiviert wird, wobei durch Wiederholung mit unterschiedlichen Schwebungsfrequenzen ein Messsignal I(f) der Form der Form I(f) = A(f) - cos[$\Phi(f)$] für die Probe (17) erhalten wird, wobei ein um 90° verschobenes Hilfssignals I(f) aus dem Messsignal I(f) bestimmt wird, mit Ĩ(f) = A(f) · cos[$\Phi(f)$] ±90°],

und wobei das THz-Spektrums S(f) der Probe (17) mittels des Hilfssignals I(f) bestimmt wird, mit S(f)= $|z(f)|=|I(f)+i\tilde{I}(f)|$. Die Erfindung stellt ein Verfahren zur Messung und Bestimmung eines THz-Spektrums bereit, bei dem auf einfache Weise eine verbesserte spektrale Auflösung erzielt werden kann.

Literaturliste

[1] Roggenbuck A. et. al., J. Opt. Soc. Am. B 29 (4), 614 (2012)

[2] Roggenbuck A. et. al., New J. Phys. 12, 043017 (2010)

[3] Lu Zheng et al., Electronics Letters Vol. 50, 2014, No. 7, S. 549-550.

Patentansprüche

1. Verfahren zur Messung und Bestimmung eines THz-Spektrums einer Probe (17), umfassend

a) Erzeugen eines ersten Laserstrahls (1a) einer Frequenz f_1 und eines zweiten Laserstrahl (2a) einer Frequenz f_2 , mit $f_2 > f_1$ und mit f_1 , f_2 im sichtbaren oder nahinfraroten Spektralbereich, wobei beide Laserstrahlen (1a, 2a) in einem Strahlteiler (3) zur Ausbildung einer überlagerten Laserstrahlung mit einer Schwebungsfrequenz fs = $f_2 - f_1$ im THz-Bereich überlagert werden und diese überlagerte Laserstrahlung an den zwei Ausgängen (3a, 3b) des Strahlteilers (3) verfügbar ist,

b) Umwandeln eines ersten Teils (11) der überlagerten Laserstrahlung hinter einem ersten Ausgang (3a) des Strahlteilers (3) an einem Emitter (13) in THz-Strahlung (14) und Transmittieren dieser THz-Strahlung (14) durch eine Probe (17), wodurch eine charakteristische Transmissionsstrahlung (18) erhalten wird,

c) Einstrahlen der charakteristischen Transmissionsstrahlung (18) an einem Detektor (15), dessen Empfindlichkeit durch einen am Detektor (15) eingestrahlten, zweiten Teil (12) der überlagerten Laserstrahlung hinter einem zweiten Ausgang (3b) des Strahlteilers (3) bestimmt wird, so dass ein Messwert I(fs) am Detektor (15) erhalten wird,

d) mehrmalige Wiederholung der Schritte a) bis c) mit n unterschiedlichen Schwebungsfrequenzen fs, so dass ein diskretes frequenzabhängiges Messsignal I(f) erhalten wird, wobei das Messsignal I(f) von der Form I(f) = A(f) · cos[Φ (f)] ist, mit A(f): Amplitudenterm, und Φ (f): Phasenterm,

e) Bestimmung eines um 90° verschobenen Hilfssignals I(f) aus dem Messsignal I(f), mit $\tilde{I}(f) = A(f) \cdot \cos[\Phi(f) \pm 90^\circ]$,

f) Bestimmung des THz-Spektrums S(f) mittels des Hilfssignals $\tilde{I}(f)$, mit S(f)=|z(f)|=|I(f)+i\tilde{I}(f)|, mit z(f): komplexer Vektor.

2. Verfahren nach Anspruch 1, **dadurch gekennzeichnet**, dass in Schritt e) das Hilfssignal $\tilde{I}(f)$ durch Anwendung einer Hilbert-Transformation aus dem Messsignal I(f) bestimmt wird, mit $\tilde{I}(f) = \mathfrak{H}[I(f)]$.

3. Verfahren nach Anspruch 1 oder 2, **dadurch gekennzeichnet**, dass im Schritt e) folgende Teilschritte angewandt werden:

i) Anwendung einer komplexen Fouriertransformation auf das Messsignal I(f), so dass ein transformiertes Messsignal I(t) im Zeitraum erhalten wird,

ii) Anwendung einer Filterfunktion auf das transformierte Messsignal I(t), so dass ein gefiltertes transformiertes Messsignal GEF[I(t)] erhalten wird,

iii) Anwendung der inversen komplexen Fouriertransformation auf das gefilterte transformierte Messsignal GEF[I(t)], so dass ein komplexes rücktransformiertes Messsignal RUC(f) erhalten wird, dessen Imaginärteil als Ĩ(f) genutzt wird.

4. Verfahren nach Anspruch 3, **dadurch gekennzeichnet**, dass als Filterfunktion ein Vektor h der Länge n eingesetzt wird, mit

a. $h_i = 1$ für i = 1 und für $i = \frac{n}{2} + 1$

b. $h_i = 2$ für $i = 2, 3, ..., \frac{n}{2}$

c. $h_i = 0$ für $i = \frac{n}{2} + 2, ..., n$

für n gerade, und a'. h_i = 1 für i = 1 und für i=n/2 + $\frac{1}{2}$ b'. h_i = 2 für *i* = 2, 3, ..., $\frac{n}{2}$ - 1/2

c'. h_i = 0 für i= n/2+3/2,..., n
für n ungerade,
wobei der Vektor h elementweise mit dem transformierten Messsignal I(t) multipliziert wird.

5. Verfahren nach Anspruch 1 oder 2, **dadurch gekennzeichnet**, dass in Schritt e) das Hilfssignal $\tilde{I}(f)$ mittels eines digitalen Filters näherungsweise bestimmt wird, wobei das digitale Filter schrittweise jeweils nur auf einen zusammenhängenden Teil der Messwerte des Messsignals I(f) angewandt wird, um einen jeweiligen Einzelwert des Hilfssignals $\tilde{I}(f)$ zu bestimmen, dessen Frequenz in dem zusammenhängenden Teil der Messwerte vorkommt.

6. Verfahren nach Anspruch 1 oder 2, **dadurch gekennzeichnet**, dass in Schritt e) anstelle von $\tilde{I}(f)$ ein z(f) näherungsweise bestimmt wird als $H_1[I(f)]+iH_2[I(f)]$, wobei H_1 , H_2 digitale Filter sind, wobei die digitalen Filter schrittweise jeweils nur auf einen gleichen, zusammenhängenden Teil der Messwerte des Messsignals I(f) angewandt werden, um einen jeweiligen Einzelwert von z(f) zu bestimmen, dessen Frequenz in dem zusammenhängenden Teil der Messwerte vorkommt, mit $H_1[I(f)]=A(f) \cdot \cos[\Phi(f) + \alpha]$ und $H_2[I(f)]=A(f) \cdot \cos[(\Phi(f) \pm 90^\circ + \alpha], mit \alpha$: Phasenversatz der digitalen Filterungen, und dass in Schritt f) die Bestimmung des THz-Spektrums S(f) nicht mittels des Hilfssignals $\tilde{I}(f)$, sondern mit $S(f)=|z(f)|=|H_1[I(f)]+iH_2[I(f)]|$ erfolgt.

7. Verfahren nach einem der Ansprüche 1 bis 6, dadurch gekennzeichnet, dass

- ein THz-Referenz-Spektrum $S_0(f)$ analog zu den Schritten a) bis f) gemessen und bestimmt wird, jedoch ohne Probe (17);

- und das THz-Spektrum S(f) der Probe (17) elementweise durch das THz-Referenz-Spektrum S₀(f) geteilt wird, so dass ein Transmissionsspektrum $T(f) = \frac{S(f)}{S_0(f)}$ erhalten wird.

with, so dass ein transmissionsspectrum $r(r) = S_0(f)$ emater with.

8. Verfahren nach Anspruch 7, **dadurch gekennzeichnet**, dass aus dem Transmissionsspektrum T(f) durch Bildung des negativen dekadischen Logarithmus eine Absorbanz Abs(f) berechnet wird, mit: Abs(f) = $-\log_{10}(T(f))$.

9. Verfahren nach einem der Ansprüche 1 bis 6, dadurch gekennzeichnet, dass

- $I_0(f)$ und $\tilde{I}_0(f)$ analog zu den Schritten a) bis e) gemessen und bestimmt werden, jedoch ohne Probe (17); - und bei bekannter Probendicke d der Realteil des Brechungsindex n(f) der Probe (17) bestimmt wird, als Funktion der Frequenz f, mit folgenden Schritten:

• Berechnung der Phase $\varphi(f) = \arctan\left(\frac{\tilde{I}(f)}{I(f)}\right)$ für alle Frequenzpunkte der Größen I(f) und Ĩ(f), bestimmt mit Probe (17);

• Berechnung der Phase $\varphi_0(f) = \arctan\left(\frac{\tilde{I}_0(f)}{I_0(f)}\right)$ für alle Frequenzpunkte der Größen $I_0(f)$ und $\tilde{I}_0(f)$,

bestimmt ohne Probe (17);

 \circ Berechnung der Phasendifferenz $\Delta \varphi(f) = \varphi(f) - \varphi_0(f)$ für alle Frequenzen f, und anschließende Berechnung des Realteils des Brechungsindex n(f) durch Anwendung folgender Formel:

$$n(f) = \frac{\Delta \varphi(f) \cdot c}{2\pi df}$$

mit der Lichtgeschwindigkeit c.

10. Verfahren nach einem der Ansprüche 1 bis 6, dadurch gekennzeichnet, dass

- $I_0(f)$ und $\tilde{I}_0(f)$ analog zu den Schritten a) bis e) gemessen und bestimmt werden, jedoch ohne Probe (17); - und bei bekanntem Realteil n(f) des Brechungsindex der Probe (17) die Probendicke d bestimmt wird, mit folgenden Schritten:

• Berechnung der Phase $\varphi(f) = \arctan\left(\frac{\tilde{I}(f)}{I(f)}\right)$ für alle Frequenzpunkte der Größen I(f) und Ĩ(f), bestimmt

mit Probe (17);

• Berechnung der Phase $\varphi_0(f) = \arctan\left(\frac{\tilde{I}_0(f)}{I_0(f)}\right)$ für alle Frequenzpunkte der Größen I₀(f) und $\tilde{I}_0(f)$,

bestimmt ohne Probe (17);

 \circ Berechnung der Phasendifferenz $\Delta \phi(f) = \phi(f) - \phi_0(f)$ für alle Frequenzen f;

• Anwenden der Formel

$$d(f) = \frac{\Delta \varphi(f) \cdot c}{2\pi n(f) f}$$

an den Frequenzstellen f, und Mittelung der Größe d(f) über alle Frequenzen f zum Erhalten der Probendicke $d = \overline{d(f)}$.

11. Verfahren nach einem der vorhergehenden Ansprüche, **dadurch gekennzeichnet**, dass aus dem THz-Spektrum S(f) der Probe (17) und/oder aus dem Transmissionsspektum T(f) und/oder aus der Absorbanz Abs(f) Informationen über eine qualitative und/oder quantitative Zusammensetzung der Probe (17) bestimmt werden.

12. Verfahren nach einem der vorhergehenden Ansprüche, **dadurch gekennzeichnet**, dass in Schritt d) das diskrete frequenzabhängige Messsignal I(f) bei den Schwebungsfrequenzen $f[k] = k \cdot \delta f + f_0$, mit k= 1,...,n und f_0 : Startfrequenz und δf : Schrittweite, erhalten wird.

Es folgen 11 Seiten Zeichnungen

Anhängende Zeichnungen











12



(An) (t) (net of the temperature of temperatur











