

國立清華大學 電機工程學系

實作專題研究成果摘要

Simultaneous Estimation of Thickness  
and Optical Constant in Time Resolved  
Terahertz Spectroscopy

藉由時域上的太赫茲光譜學同時估計

厚度與折射率

專題領域：電子領域

組 別：B362

指導教授：楊尚樺

組員姓名：王宜蕙

研究期間：111年7月1日至112年10月1日止，共15個月

## **Abstract**

**In this work, we propose an algorithm for simultaneous determination of optical constant and sample thickness in transmissive time-resolved terahertz spectroscopic measurements. Based on Fresnel equation and Fabry-Pérot Effect, we construct the transfer function of the unknown sample in terms of sample thickness and its optical constant. Through an iterative fitting procedure, one can come to the optimal results. Our results show that under certain reasonable restrictions, the derived outcomes are in good agreements with published results. [ 1 ] Such formulation can be further expanded to multilayer structure, which may contribute to non-destructive characterization of functional devices and packaged ICs.**

## 摘要

在這份專題報告中，我們提出了一種在透射時間分辨太赫茲光譜測量中同時估計光學常數和樣品厚度的演算法。基於菲涅耳方程式(Fresnel equation)和法布里-博羅效應(Fabry-Pérot Effect)，我們根據樣品厚度及其光學常數建構了未知樣品的傳遞函數。透過迭代擬合過程，可以得出最佳結果。我們的結果顯示，在某些合理的限制下，所得出的結果與已發表的結果非常吻合。[1]這種演算法可以進一步擴展到多層結構，可能有助於功能元件和封裝 IC 的非破壞性檢測。

## 目錄

一、 研究動機與目的 .....	1
二、 研究方法.....	1
(一) 實驗系統架設.....	1
(二) 物理模型建立.....	2
(三) 訊號處理 .....	4
三、 實驗結果.....	5
四、 結論 .....	6
五、 參考資料.....	7
六、 計畫管理和團隊合作.....	7

## 圖目錄

圖 ( 一 ) Terahertz time domain spectrometer (TDS)示意圖 .....	1
圖 ( 二 ) 太赫茲波行進路線上擺放樣品及不擺放樣品的時域訊號 .....	3
圖 ( 三 ) 太赫茲波穿透樣品的路徑示意圖.....	3
圖 ( 四 ) 模擬厚度 500 微米、折射率 3.42 的矽晶圓的誤差函數作圖.....	5
圖 ( 五 ) (a) 實驗和演算法的遞移函數比較(b)(c)演算法估計各頻率下矽晶圓的 折射率與厚度結果 (d) 太赫茲波行進路線上擺放樣品及不擺放樣品的頻域訊號...	6

# 本文

## 一、研究動機與目的

由於光學常數能夠描述材料的光學特性，在設計透鏡、波片、波導等光學元件時，需要得知材料的光學常數，因此快速且精準的光學常數的量測，在各個領域中扮演著舉足輕重的角色[2]。同時，由於太赫茲波位於微波與紅外線波段當中，不僅太赫茲波的光子能量小，所以不具有足夠的能量游離電子，能夠做到非破壞性檢測；太赫茲波和許多分子震動與運動模式的交互作用也不強，所以太赫茲波能夠穿透許多光學不透明的材料，如生物組織、紙張等等。

在此專題研究中，我們想利用太赫茲波的光學特性達到非破壞性的光學常數量測。然而，現今許多光學常數的量測都仰賴精確的樣品厚度量測，而樣品厚度量測方法多為機械性的量測[3]，和我們想要達到的非破壞性檢測相違背。此外，相關的研究所使用的方法需要計算出每個頻率下、每組折射率與厚度和實驗值的誤差[4]，不僅耗時，也較難推廣至多層結構的樣品。綜上所述，此專題報告提出一個演算法，利用最佳化的方法同時估計樣品的厚度與折射率，以此方法不僅可以達到非破壞性檢測，同時計算速度相較於遍歷(traverse)的做法也較快。

## 二、研究方法

### (一) 實驗系統

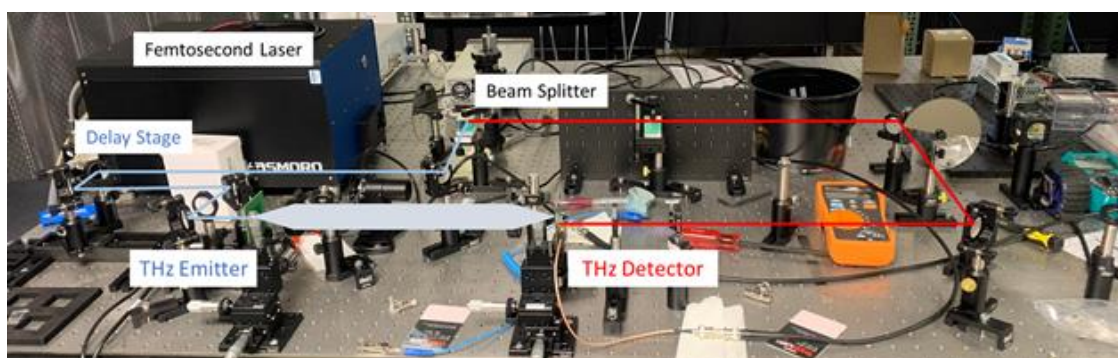


圖 (一) Terahertz time domain spectrometer (THz-TDS)

由於太赫茲波獨特的光學特性，THz-TDS 已成為一個極具潛力的工具，可以廣泛應用於多個領域，如生醫影像、安全檢測、材料特性量測等等。此外，我們提出的演算法是利用 Fabry-Pérot Effect，藉由觀察時域上訊號的變化來估算出樣品厚度與折射率，因此選擇使用 THz-TDS。

此專題研究的實驗系統使用馬達製造出發射端和接收端的光程差，以達到時域上採樣太赫茲脈衝的功能。以下是圖（一）內相關元件的工作原理。

#### (1) 分束鏡(Beam Splitter)

由於本系統對於光程差敏感，所以選擇採用立體分光鏡，而非平板分光鏡，以確保反射與穿透的路徑等長。其原理為司乃爾定律(Snell's Law)，兩個密介質中夾一層疏介質，並藉由調整疏介質厚度，能夠使特定頻率的光束一半穿透、一半反射，以達到分束的效果。

#### (2) 發射端(Emitter)

在實驗系統的太赫茲光是由光導天線(Photoconductive antenna)所產生，其物理結構為兩個相近的金屬接點，兩金屬接點之間的距離遠小於被輻射出來的電磁波波長。當飛秒雷射照在金屬接點時，其能量大於能帶間隙，所以會發生光電效應。此時產生的光電子被施以直流的偏壓，光電子發生加速度，輻射出電磁波。因為光電流的變化尺度在皮秒等級，所以輻射出來的電磁波為太赫茲波。

#### (3) 接收端(Detector)

接收端和發射端同為光導天線，差別只在接收端並無施加偏壓，而是利用接收到的太赫茲波提供電場，來加速金屬接點間的光電子，因此接收端的光電流會和接收到的太赫茲波成正相關。光電子的產生和發射端一樣由飛秒雷射照射在金屬接點產生，所以只有在飛秒雷射和太赫茲波同時抵達接收端時，接收端才能接收訊號，因此可以藉由馬達平行移動鏡片改變圖（一）中，藍色和紅色的光程差，已對太赫茲脈衝進行時域上的採樣。

#### (4) 鎖相放大器(Lock-in amplifier)

鎖相放大器的功能為在雜訊中提取所需訊號。其原理為給定一個正弦波，其頻率稱為參考頻率 $f_{ref}$ ，將此正弦波和接收端收到的訊號相乘，會將訊號移頻至基頻和二倍頻，之後藉由將其通過低通濾波器，提取我們感興趣的訊號。

### (二) 物理模型建立

為簡化模型，我們假設樣品為平面且均質(homogeneous)的材料，並且太赫茲波垂直入射樣品。當電磁波遇到空氣與樣品之間的介面時，太赫茲波會發生穿透與反射。由於樣品折射率大於空氣折射率，所以當太赫茲波照射到樣品時，會在內部形成多重反射。可以由圖（二），太赫茲波行徑路線上擺放樣品及不擺放樣品的時域上的訊號中看出，太赫茲波通過樣品時會產生許多強度隨指數遞減並發生延遲的小波，此現象為法布里-博羅效應(Fabry-Pérot Effect)。圖（三）為太赫茲波穿透樣品的路徑示意圖。由此我們可以利用菲涅耳方程式(Fresnel equations)和傳播函數

(propagation function)描述太赫茲波從發射端到接收端的訊號能量變化，並且推導出太赫茲光通過樣品的遞移函數(transfer function)。

Fresnel equations:  $t_{ab}(\omega) = \frac{2\tilde{n}_a(\omega)}{\tilde{n}_a(\omega)+\tilde{n}_b(\omega)}$ ,  $r_{ab}(\omega) = \frac{\tilde{n}_b(\omega)-\tilde{n}_a(\omega)}{\tilde{n}_a(\omega)+\tilde{n}_b(\omega)}$ , 其中,  $t_{ab}(\omega)$  為電磁波由介質 a 進入介質 b 的穿透係數,  $r_{ab}(\omega)$  為電磁波由介質 a 碰到介質 b 時反射的反射係數,  $\tilde{n}_a(\omega)$  為介質 a 的折射率,  $\tilde{n}_b(\omega)$  為介質 b 的折射率。

Propagation function:  $p_a(\omega, d) = e^{\frac{-j\tilde{n}_a(\omega)\omega d}{c}}$ , 其中 d 為電磁波在介質 a 行進的路徑長, c 為光速。

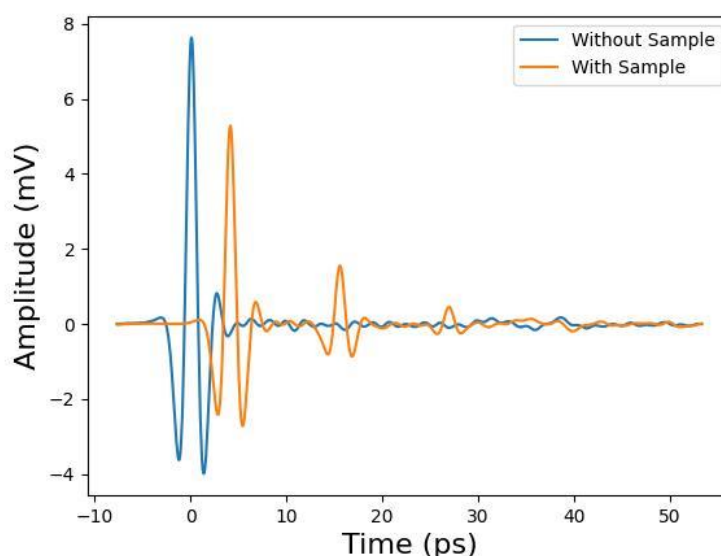


圖 ( 二 ) 太赫茲波行進路線上擺放樣品及不擺放樣品的時域訊號

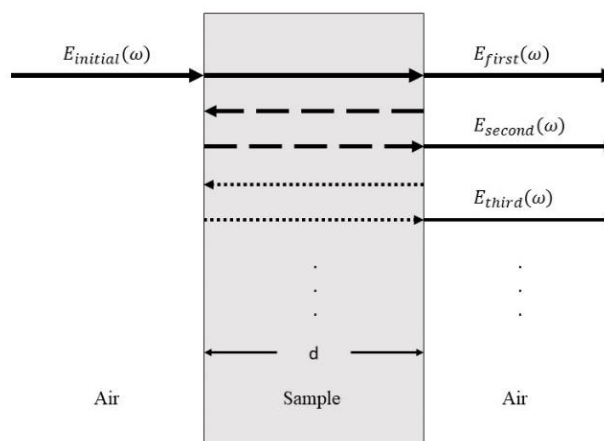


圖 ( 三 ) 太赫茲波穿透樣品的路徑示意圖

以下是理論轉移函數的推導，其中下標0表示介質為空氣，下標1表示介質為樣品，

$$E_{first}(\omega) = E_{initial}(\omega)p_0[\omega, (x-d)]t_{01}p_1(\omega, d)t_{10} \quad (1)$$

$$E_{second}(\omega) = E_{initial}(\omega)p_0[\omega, (x-d)]t_{01}p_1(\omega, d)t_{10}r_{10}^2p_1^2(\omega, d) \quad (2)$$

$$E_{third}(\omega) = E_{initial}(\omega)p_0[\omega, (x-d)] \times t_{01}p_1(\omega, d)t_{10}r_{10}^4p_1^4(\omega, d) \quad (3)$$

$$E_{total}(\omega) = E_{initial}(\omega)p_0[\omega, (x-d)]t_{01}p_1(\omega, d)t_{10} \left\{ 1 + \sum_{k=1}^2 [r_{10}^2p_1^2(\omega, d)]^k \right\} \quad (4)$$

$$E_{ref}(\omega) = E_{initial}(\omega)p_0[\omega, (x-d)] \quad (5)$$

$$H_{mod}(\omega) = \frac{E_{total}(\omega)}{E_{ref}(\omega)} = \frac{\frac{4n_1(\omega)}{[1+n_1(\omega)]^2} e^{-\frac{j\omega d[n_1(\omega)-1]}{c}}}{1 - \left[ \frac{n_1(\omega)-1}{n_1(\omega)+1} \right]^2 e^{-\frac{j\omega d n_1(\omega)}{c}}} \quad (6)$$

### (三) 訊號處理

首先，由實驗我們可以得到 $E_{total}(t)$ 和 $E_{ref}(t)$ ，如圖(二)，分別為太赫茲光由發射端到接收端的行進路線中不擺放樣品以及擺放樣品。再來，對 $E_{total}(t)$ 和 $E_{ref}(t)$ 分別做快速傅立葉轉換得到 $E_{total}(\omega)$ 和 $E_{ref}(\omega)$ ，並將 $E_{total}(\omega)$ 和 $E_{ref}(\omega)$ 相除得到實驗的轉移矩陣：

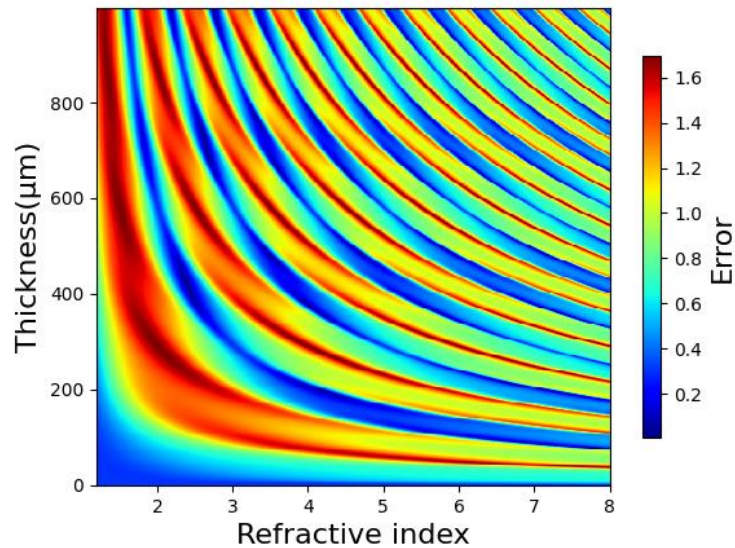
$$H_{exp}(\omega) = \frac{E_{total}(\omega)}{E_{ref}(\omega)} \quad (7)$$

接下來，用理論的轉移函數去擬和實驗的轉移矩陣，定義誤差函數(error function)如下，

$$J(\omega) = \|H_{mod}(\omega) - H_{exp}(\omega)\|_2 \quad (8)$$

由於 THz-TDS 系統在0.3THz 到0.8THz 有較高的訊噪比(signal-to-noise ratio)，因此我們只考慮這個頻率範圍內的實驗數據。另外，因為未摻雜的半導體材料在太赫茲波段的折射率通常介於2到5之間，所以我將折射率的下界設為2，上界設為5；市售的晶圓厚度通常介於300微米到750微米[1]，所以將樣品厚度的下界設為300微米，上界設為750微米。由圖(四)的模擬結果是將誤差函數中的 $H_{exp}(\omega)$ 以 $H_{mod}(\omega)$ 帶入樣品折射率為3.42及厚度為500微米去模擬實驗的轉移函數，並計算座標範圍內所有可能的折射率和厚度解帶入誤差函數得到的值，並依據此作圖。圖(四)顯示在合理的限制下，誤差函數在理論值具有明顯的最小值。然而，由於此誤差函數的梯度(gradient)較難計算，所以我選擇使用下山單體法(Nelder-Mead method)去迭代找出在每個頻率下使誤差函數最小的一組折射率和樣品厚度。並且因為每個頻

率下的折射率具有連續性，所以將前一個頻率得到的一組折射率和厚度作為下一個頻率演算法的起始點。



圖（四）模擬厚度 500 微米、折射率 3.42 的矽晶圓的誤差函數作圖

### 三、實驗結果

#### （一）樣品選擇

此專題選擇的樣品是矽晶圓，因為矽晶圓不僅被廣泛應用在半導體產業，同時他也是平面且均質的材料，符合物理模型對材料的假設。已知該材料在太赫茲波段的折射率為3.42，而樣品的厚度經過量測為500微米，以此數據做為演算法的基準真相(Ground truth)。

#### （二）實驗結果與誤差分析

由圖（五）(a) 我們可以看出實驗得出的遞移函數和演算法得出的結果非常相近，同時折射率和樣品厚度的誤差皆在10%以內。再仔細地看圖（四）(b)(c)，發現在0.53THz 附近，折射率和樣品厚度皆有較大的誤差，這是因為在這個頻率下，水分子的震動與轉動頻率和太赫茲波相似，所以水對太赫茲波有較大的吸收，太赫茲波的穿透率下降，如圖（四）(d)。此外，從圖（四）(d) 中也可以從紅色的線條觀察到 Fabry-Pérot Effect，由於太赫茲波在樣品內會發生多重反射，因而產生相位差，導致建設性干涉及破壞性的干涉的發生，所以紅色線條在特定頻率下會有低谷。

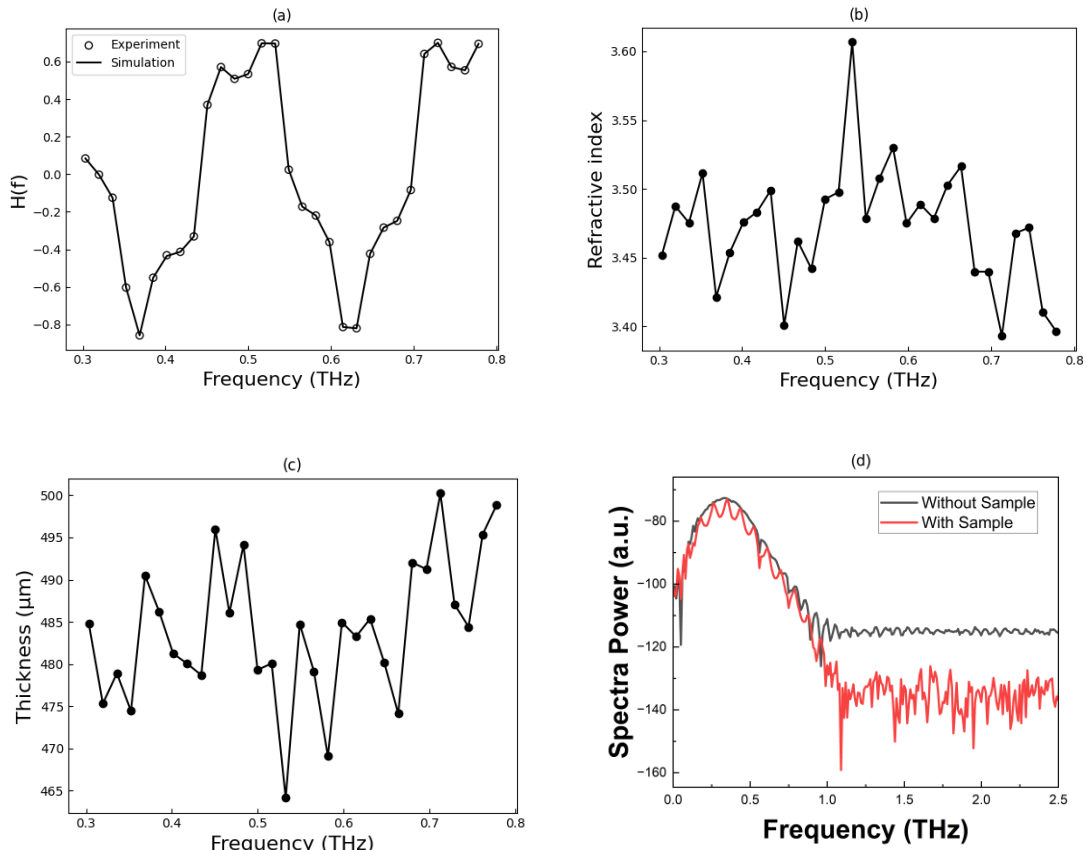


圖 ( 五 ) (a) 實驗和演算法的遞移函數比較(b)(c)演算法估計各頻率下矽晶圓的折射率與厚度結果 (d) 太赫茲波行進路線上擺放樣品及不擺放樣品的頻域訊號

#### 四、 結論

在此份報告中我們首先根據 Fabry-Pérot Effect 建立出物理模型，並提出了一個演算法，能夠同時估算出未知樣品的折射率及厚度。根據實驗結果，此演算法得出的結果和文獻及量測數據誤差僅在10%以內。而初步的誤差分析認為是水對太赫茲波段的電磁波有較高的吸收，因此接下來將會進行實驗的改良。首先，減少量測環境中的水氣，以排除水吸收的因素，再來量測多組不同折射率、相同厚度的樣品，以及相同折射率、不同厚度的樣品，以驗證此演算法。最後由於本專題報告使用的物理模型建立在多層結構分析上太過於複雜，因此在未來我們將嘗試利用 Transfer Matrix Method[ 5 ]建立模型，並將此演算法推廣至多層結構的樣品。

## 五、參考資料

- [ 1 ] D.Grischkowsky, S.Keiding, M.vanExter, and C.Fattinger, “Far-infrared time-domain spectroscopy with terahertz beams of dielectrics and semiconductors,” *J. Opt. Soc. Am. B*, vol. 7, no. 10, p. 2006, 1990.
- [ 2 ] S.Singh, “Refractive Index Measurement and its Applications,” *Phys. Scr.*, vol. 65, no. 2, pp. 167–180, 2002
- [ 3 ] V. D.Antsygin, A. A.Mamrashev, N. A.Nikolaev, and O. I.Potaturkin, “Small-size terahertz spectrometer using the second harmonic of a femtosecond fiber laser,” *Optoelectron. Instrum. Data Process.*, vol. 46, no. 3, pp. 294–300, 2010
- [ 4 ] T. D.Dorney, R. G.Baraniuk, and D. M.Mittleman, “Material parameter estimation with terahertz time-domain spectroscopy,” *J. Opt. Soc. Am. A*, vol. 18, no. 7, p. 1562, 2001.
- [ 5 ] T.Makino, “Transfer Matrix Method with Applications to Distributed Feedback Optical Devices,” *Prog. Electromagn. Res.*, vol. 10, pp. 271–319, 1995.

## 六、計畫管理和團隊合作

在加入楊尚樺教授所指導的 Yang Research Group 的第一個暑假，參與實驗室所舉辦的 summer camp，在其中探索自己感興趣的領域，最後選擇加入影像組，並同時參與影像組的會議。

在第一個學期當中，閱讀影像組相關期刊、文獻資料，以獲取相關背景知識，並且和高浚育學長學習架設光路的技巧，考取實驗儀器的 license，同時每週參與實驗室的 journal club，讓自己對太赫茲的應用有更多元的認識。

第二學期開始，有了自己的專題題目，一步步從小題目練習處理太赫茲時域和頻域上的訊號、模擬測試實驗方法的可行性到真正使用量測到的數據做實驗，最後完成專題報告。

在專題研究期間，我受到許多學長的幫助，其中特別感謝麥家銘學長，在每週和學長的固定開會中，可以學到學長做研究時遇到困難時的思路以及當遇到實驗結果和預期不符時，如何分析問題並解決。