

油气光学系列丛书



太赫兹光谱分析技术

赵 昆 詹洪磊/著

Terahertz Spectrum Analysis Technology



科学出版社

油气光学系列丛书

太赫兹光谱分析技术

Terahertz Spectrum Analysis Technology

赵 昆 詹洪磊 著



科学出版社

北 京

内 容 简 介

本书是《油气光学系列丛书》之一,以油气资源太赫兹表征与评价过程中的光谱解析为基础,简要介绍太赫兹光谱相关知识及 MATLAB 软件与编程;并从原理、数学算法和实际应用等方面分别介绍线性回归分析、主成分分析、聚类分析、人工神经网络、支持向量机及二维相关光谱等方法;最后讲述如何针对太赫兹光谱应用过程中的具体特点选择多种方法联用来解决实际问题。

本书可作为理工科专业的高年级本科生、研究生的光谱分析学习教材,也可以作为从事该领域研究的科技工作者的参考书。

图书在版编目(CIP)数据

太赫兹光谱分析技术 / 赵昆, 詹洪磊著. —北京: 科学出版社, 2017.6
(油气光学系列丛书)

ISBN 978-7-03-053573-3

I. ①太… II. ①赵… ②詹… III. ①电磁辐射—光谱—研究 IV. ①O441.4

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2017) 第 121626 号

责任编辑: 万群霞 崔慧娴 / 责任校对: 桂伟利

责任印制: 张 伟 / 封面设计: 无极书装

科 学 出 版 社 出 版

北京东黄城根北街 16 号

邮政编码: 100717

<http://www.sciencep.com>

北京厚诚则铭印刷科技有限公司 印刷

科学出版社发行 各地新华书店经销

*

2017 年 6 月第 一 版 开本: 720×1000 B5

2017 年 6 月第一次印刷 印张: 13 1/4

字数: 256 000

定价: 88.00 元

(如有印装质量问题, 我社负责调换)

前 言

自笔者 2011 年提出油气光学(oil and gas optics)概念以来,就一直致力于将最新的光学技术与油气资源勘探相结合,解决光与油气物质相互作用及光学新技术在油气领域应用的基础科学问题。太赫兹光谱在电磁波频率上位于微波和红外光谱之间,由于大分子的振动和转动能级大多处于太赫兹波段,许多有机物在太赫兹光谱波段具有明显的特征响应,因此,太赫兹光谱是检测油气物质行之有效的方法之一。但太赫兹光谱在油气领域的应用过程中由于研究检测对象成分众多、结构较复杂,其太赫兹光学参数谱反映了样品中物质的综合信息,油气物质的太赫兹光学参数有时很难直观地反映部分重要物性和指标,给油气资源的表征和评价带来了一定的困难。发展适合的太赫兹光谱分析技术是解决这一难题的有效方法。针对油气资源太赫兹表征评价的实际特点,笔者进行了长期的探索和研究,发展了几种解决油气物质太赫兹光谱解析难题的方法,并将这些方法编写成此书。

本书是《油气光学系列丛书》中的一册,是基于笔者多年研究的经验总结,且书中大部分实例为笔者本人的科研成果。本书是一本综合介绍太赫兹光谱解析的著作,在编写过程中注意理论学习和实际操作相结合,一方面详细推导从数据输入到结果输出的运算过程,给出大部分算法的实施程序和操作方案;另一方面通过大量的实例为读者讲述每种算法的应用条件和效果。因此,本书的内容描述生动形象、图文并茂、脉络清晰、可读性强。希望读者通过认真阅读本书,可以快速掌握太赫兹光谱分析及其相关方法。

全书共 8 章,第 1 章为太赫兹光谱技术及 MATLAB 编程简介;第 2 章为线性回归分析方法及应用;第 3 章为主成分分析方法介绍和应用实例;第 4 章为聚类分析方法、MATLAB 实现及应用实例;第 5 章为人工神经网络原理、MATLAB 工具箱及其应用;第 6 章为支持向量机分类和回归理论及其应用实例;第 7 章为二维相关光谱原理、解析及应用;第 8 章为前述光谱分析方法联用的条件及具体的案例分析。这样编排是为了使读者既充分了解和学习各种方法的原理及使用,

又可以根据实际问题灵活选择多种方法联用来解决难题。需要说明的是, 尽管书中许多介绍是源于油气资源的需求和特点, 且列举的大部分实例为油气物质的太赫兹光谱表征与评价, 但所述的部分太赫兹光谱分析方法亦可适用于其他领域的太赫兹光谱应用研究, 读者只需根据自身要求, 对数据输入形式、程序相关参数、数据输出形式及作图方式作适当调整即可。

本书得到了国家自然科学基金、国家重大科学仪器设备开发专项、国家重点基础研究计划(973计划)、中国石油和化学工业联合会科技指导计划, 以及油气资源与探测国家重点实验室、中关村示范区重点产业开放实验室、首都科技创新券开放实验室、中国光学工程学会科技创新平台的大力支持。

本书在写作过程中得到了许多专家学者的支持, 感谢中国石油大学(北京)油气光学探测技术北京市重点实验室、全国石油和化工行业油气太赫兹波谱和光电检测重点实验室的全体教师和学生, 感谢首都师范大学的张存林教授、张卓勇教授和张振伟副教授, 感谢中央民族大学的杨玉平副教授, 他们在本书的编校过程中给予了极大的关注和支持。

由于作者水平有限, 书中不妥之处在所难免, 恳请广大读者批评指正。

赵 昆

2017年1月9日于北京

目 录

前言

第 1 章 概述	1
1.1 太赫兹光谱	1
1.1.1 太赫兹技术简介	1
1.1.2 太赫兹时域光谱 (THz—TDS)	3
1.1.3 傅里叶变换红外光谱 3~10THz	7
1.1.4 太赫兹光学参数获取	8
1.2 MATLAB 编程简介	9
1.2.1 MATLAB 简介	9
1.2.2 变量、常量及常用函数	16
1.2.3 数组运算	20
1.2.4 循环结构	28
1.2.5 MATLAB 绘图	29
1.2.6 数据的导入与导出	31
1.2.7 M 代码的编写和调试	34
1.2.8 MATLAB 帮助系统	35
第 2 章 线性回归分析	38
2.1 方法概述	38
2.1.1 一元线性回归	38
2.1.2 多元线性回归	44
2.2 线性回归的 MATLAB 分析流程	47
2.2.1 一元线性回归的分析	47

2.2.2 多元线性回归分析	51
2.3 一元线性回归分析实例	52
2.4 多元线性回归分析实例	57
第 3 章 主成分分析	63
3.1 引论	63
3.2 主成分分析原理	64
3.2.1 主成分分析的几何意义	64
3.2.2 主成分分析的代数模型	65
3.2.3 总体的主成分	66
3.2.4 样本的主成分	70
3.3 主成分分析的 MATLAB 实现	71
3.3.1 主成分分析的 MATLAB 函数	72
3.3.2 主成分分析的编程	74
3.4 主成分分析应用实例	76
3.4.1 吸附动力学过程研究	76
3.4.2 孔隙形状识别	80
3.4.3 原油油头识别	82
第 4 章 聚类分析	85
4.1 聚类分析简介	85
4.1.1 聚类分析的概念	85
4.1.2 聚类距离与相似系数	86
4.2 聚类分析方法	88
4.2.1 系统聚类法	88
4.2.2 K 均值聚类法	93
4.2.3 模糊 C 均值聚类法	93
4.3 聚类分析的 MATLAB 函数	94
4.3.1 系统聚类	94
4.3.2 K 均值聚类	101
4.3.3 模糊 C 均值聚类	103
4.4 聚类分析的 MATLAB 实现及应用举例	104
4.4.1 聚类分析的 MATLAB 实现	104

4.4.2 聚类分析的应用实例	105
第 5 章 人工神经网络	111
5.1 人工神经网络基础	111
5.1.1 人工神经网络的概念	111
5.1.2 人工神经网络的发展史	112
5.1.3 人工神经网络的特点	114
5.1.4 人工神经元模型	114
5.1.5 M-P 模型	117
5.1.6 人工神经网络的学习	120
5.2 神经网络 MATLAB 工具箱函数	123
5.2.1 神经网络通用函数	123
5.2.2 感知器的神经网络函数	129
5.3 误差反向传播神经网络	132
5.3.1 BP 网络结构	133
5.3.2 BP 网络学习算法	134
5.3.3 BP 网络的 MATLAB 工具箱函数	137
5.3.4 BP 网络应用举例	145
5.4 线性神经网络	154
5.4.1 线性神经网络的结构	154
5.4.2 线性神经网络的学习算法	155
5.4.3 线性神经网络的 MATLAB 工具箱函数	156
5.4.4 线性神经网络的应用举例	159
第 6 章 支持向量机	162
6.1 引论	162
6.2 支持向量机分类	162
6.2.1 最优超平面	163
6.2.2 非线性支持向量机	166
6.2.3 核函数	168
6.2.4 支持向量机的学习算法	169
6.3 支持向量机回归	169
6.3.1 线性支持向量机回归	169

6.3.2 非线性支持向量机回归	172
6.4 支持向量机的应用实例	173
6.4.1 油品的支持向量机分类	173
6.4.2 PM2.5 的支持向量机回归	174
第 7 章 二维相关光谱	175
7.1 二维相关光谱的提出	175
7.2 二维相关方程	176
7.3 二维相关光谱性质	178
7.3.1 同步光谱性质	178
7.3.2 异步光谱性质	179
7.4 二维相关光谱读谱规则	180
7.4.1 同步光谱读谱规则	180
7.4.2 异步光谱读谱规则	181
7.4.3 二维相关光谱的优势	181
7.5 二维相关光谱应用举例	181
第 8 章 太赫兹光谱分析方法的联用及实例	185
8.1 成品油及其添加剂检测	185
8.1.1 主成分分析	186
8.1.2 线性回归分析	187
8.1.3 人工神经网络与支持向量机	187
8.1.4 二维相关光谱	189
8.2 煤炭的元素和关键指标分析	192
8.2.1 聚类分析	192
8.2.2 主成分分析	194
8.3 地沟油的鉴别	196
8.3.1 聚类分析鉴别	196
8.3.2 主成分分析鉴别	197
8.3.3 支持向量机	198
参考文献	200

第 1 章 概 述

太赫兹光谱技术在石油勘探、油气储运、石油化工及油气污染监测的应用过程中体现出在线、无损、快速等优越性的同时,也表现了其在油气资源关键指标和应用科学问题方面所亟需的有效光谱分析方法的特点。利用数学分析方法对研究对象的太赫兹光学参数进行进一步处理,并通过软件编程实现,以此提高太赫兹光谱表征评价的效率和精度,是本书讨论的主要问题。本章主要介绍太赫兹光谱和 MATLAB 软件的一些基础知识,以使读者对太赫兹光谱分析技术有一个初步的认识。

1.1 太赫兹光谱

本书所介绍的方法都是用于对太赫兹光谱进行解析,因此本节将简要介绍太赫兹光谱技术的概念、太赫兹时域光谱装备及光学参数的提取。

1.1.1 太赫兹技术简介

太赫兹(terahertz, THz)波通常是指电磁波谱上位于微波和红外线之间的电磁波辐射,这一频段的电磁波在历史上也经常被称为亚毫米波或远红外波。通常所说的太赫兹波的频率一般为 $0.1\sim 10\text{THz}$ ($1\text{THz}=10^{12}\text{Hz}$),其在电磁波谱上的位置如图 1-1 所示。历史上,无论是从低频的微波往高频方向发展,还是从高频的可见光往低频方向发展,在这一频段的辐射源和检测方法由于原理或技术上的困难而难以实现,很长一段时间内太赫兹波段的相关研究曾一度处于停滞状态,被称为太赫兹空隙。在 20 世纪 80 年代中期以前,由于缺乏有效的产生方法和检测手段,科学家对于该波段电磁辐射性质的了解非常有限。

近十几年来,超快激光技术的迅速发展,为太赫兹脉冲的产生提供了稳定、可靠的激发光源,使太赫兹辐射的产生和应用得到了蓬勃发展。在电磁波谱中,

太赫兹波段是电磁波谱中最后一个有待全面研究的重要频段。同时，太赫兹

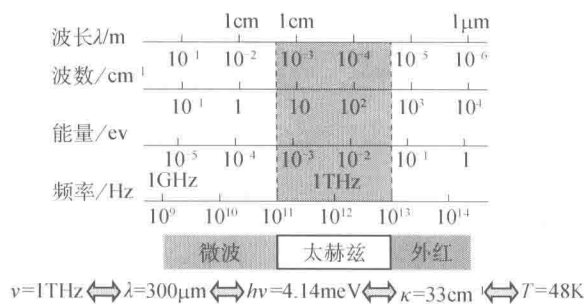


图 1-1 太赫兹波段在电磁波谱中的位置

波在电磁波谱中又处于非常特殊的位置：从长波方向看，它与微波毫米波有重叠；从短波方向看，它与红外光有重叠。同时，太赫兹波段也是电磁波谱上由电子学领域向光子学领域过渡的区域，对太赫兹波段的研究具有重要的科学研究价值和实际应用价值^[1]。

近年来太赫兹技术的研究逐渐呈现出两种趋势：第一是继续研究太赫兹波的产生或探测新方法，第二是进行太赫兹技术推广和实际应用的研究。太赫兹辐射所具有的独特性质决定了它可以与傅里叶变换红外光谱技术、X 射线技术及近红外光谱技术相互补充。随着太赫兹技术的快速发展，可以预见太赫兹技术将在基础研究领域、工业应用和军事应用领域有相当广阔的应用前景。近些年，随着太赫兹辐射源和太赫兹检测技术的发展，太赫兹技术已经在生物学、医学、环境科学和通信等领域显示出巨大的应用潜力。最近几年，太赫兹技术用于开展油气领域上、中、下游的研究，已取得实质性的效果和进展，如地质晶体包裹体演化模拟、油气储层有机质的生烃演化过程表征、油页岩热解过程及生成的油气表征、常规和非常规天然气主成分的测定、油气储运及管道腐蚀检测、管道中不同地区原油的快速识别、上百种成品油数据库的建立以及大气污染物 PM2.5 污染程度和污染源的实时监测等，部分结果已具有实用的参考价值。

与传统的电磁波辐射源相比，太赫兹辐射具有很多独特的性质^[2]。

(1) 穿透性：太赫兹波对于很多非极性的介电材料和非极性的液体具有良好的穿透性。对如塑料袋、布料、纸箱等材料有很强的穿透能力，可以用来对包装的物品进行质量检测或者用于对危险品的安全检查。

(2) 瞬态性：太赫兹脉冲的典型脉宽在皮秒量级，不但可以方便地对各种材料(包括液体、半导体、超导体、生物样品等)进行时间分辨的研究，而且通过取样测量技术，能够有效地抑制背景辐射噪声的干扰。目前，辐射强度测量的信噪

比可以大于 10^4 ，远高于傅里叶变换红外光谱技术。

(3) 宽带性：太赫兹脉冲源通常只包含若干个周期的电磁振荡，单个脉冲的频带可以覆盖从吉赫兹至几十太赫兹的范围，可实现在大的频率范围中进行物质的太赫兹吸收光谱的研究。

(4) 相干性：太赫兹波的相干性源于其产生机制。它是由相干电流驱动的偶极子振荡产生的，或是由相干的激光脉冲通过非线性光学差频效应产生的。太赫兹技术的相干测量技术能够直接测量电场振幅和相位，可以方便地提取样品的折射率、吸收系数，与利用 Kramers-Kronig 关系的方法相比，大大减少了计算和不确定性。

(5) 安全性：太赫兹波的光子能量较低，频率为 1THz 的光子对应的能量大约只有 4meV。这个数值约为 X 射线光子能量的 $1/10^6$ ，因此太赫兹辐射的能量不会对生物组织产生有害的光电离和破坏，非常适合于对生物组织和生物活性物质（如蛋白质、DNA 等）进行检查。由于太赫兹辐射非常安全，所以它不会对人体造成损害，可以应用于旅客安检的人体成像系统。

(6) 光谱的特征吸收：太赫兹波段包含了丰富的光谱信息，大量分子的转动和振动（包括集体振动）的跃迁都发生在太赫兹波段。此外，凝聚态体系的声子吸收很多也位于太赫兹波段，自由电子对太赫兹波也有很强的吸收和散射。可以根据分子在太赫兹波段的特有光谱信息识别出不同的分子，从而实现对不同分子的指纹识别。

太赫兹成像技术与其他波段的成像技术相比，所得到的探测图像的图像分辨率和景深都有明显的增加（超声、红外、X 射线技术也能提高图像分辨率，但是毫米波技术却没有明显的提高）。另外，太赫兹技术还有许多独特的性质，如非均匀的物质中有较少的散射，能够探测和测量水汽含量等^[3]。

1.1.2 太赫兹时域光谱（THz—TDS）

太赫兹时域光谱是太赫兹技术大家庭中最典型的一类光谱技术，它是一种相干探测技术，测试得到的光谱能反映太赫兹脉冲的振幅信息和相位信息。太赫兹时域光谱技术是 20 世纪 80 年代由 Bell 实验室和 IBM 公司 T.J.Watson 研究中心发展起来的，它是利用飞秒激光技术获得宽波段太赫兹脉冲的一种技术。这种脉冲是单周期的电磁辐射脉冲，周期小于 1ps，频谱范围为 0.1GHz~5THz。

典型的太赫兹时域光谱系统主要由飞秒激光器、太赫兹辐射产生装置、太赫兹辐射探测装置和时间延迟控制系统组成^[4]。飞秒激光器产生的激光脉冲经过分束镜后被分为两束，一束激光脉冲（泵浦脉冲）经过时间延迟系统后入射到太赫兹

辐射源上产生太赫兹辐射,另一束激光脉冲(探测脉冲)和太赫兹脉冲一同入射到太赫兹探测器件上,通过调节探测脉冲和太赫兹脉冲之间的时间延迟可以探测出太赫兹脉冲的整个波形。

如图 1-2 所示,太赫兹时域光谱的光源产生于美国光谱物理公司(Spectral Physics)的自锁模 Maitai 钛-蓝宝石激光器,该激光器的脉宽为 80fs,波长范围为 710~990nm,重复频率为 80MHz,激光器工作时将飞秒脉冲的中心波长设置为 800nm。飞秒激光首先经过分光棱镜 PBS1,得到功率相同相互垂直的两束激光,分别作为两套太赫兹时域光谱系统 Z1 和 Z2 的光源。Z1 和 Z2 是中国石油大学(北京)油气光学探测技术北京市重点实验室常用的两套太赫兹时域光谱仪,它们的光源来自于同一激光器,且工作原理相同,区别在于其光路有所差别,使得 Z2 的样品测试区更大而 Z1 的信号更强,因此,这里以 Z1 为例介绍该时域光谱系统的工作原理。第一束飞秒激光由反射镜 M1、M2 反射后,经过可调中性密度衰减片,衰减后得到平均功率约等于 100mW 的飞秒脉冲。此低功率脉冲激光经过分光棱镜 PBS2 后分成两束光,此处放置沃拉斯顿棱镜,使得这两束光功率不同,一束功率较大,作为泵浦光,另一束功率较小,作为探测光。泵浦光经过 M4 反射,再由透镜 L1 聚焦后入射到偏置电压为 100V 的低温生长砷化镓(GaAs)晶体上,通过光电导天线机制产生电磁脉冲,该脉冲的持续时间在皮秒(ps)量级,频率为太赫兹量级,即太赫兹脉冲。发散的太赫兹脉冲由半球透镜聚焦到抛物面镜 PM1 上并反射到铟钛氧化物晶体(indium titanium oxide)ITO1 上。为便于在实验中确认太赫兹光束的位置,此处设置了 LED 所产生的可见光红光与太赫兹脉冲共线传播,随后被透镜 L2 聚焦到 M9 反射镜,光束经过用于放置样品的焦点位置后,到达透镜 L3,经聚焦后获得太赫兹平行脉冲,经 M10 反射后进入探测器(THz Detector)。将上述的另一束光作为探测光,经过 PBS2 后进入延迟系统(时间延迟系统用来改变太赫兹脉冲与探测脉冲之间的时间延迟,从而探测到太赫兹电场随时间变化的时域光谱),经 M5、M6、M7、M8 反射和 L4 聚焦,由 M11 反射后达到 ITO2 晶体上。当太赫兹脉冲和探测激光共线经过超球透镜并聚焦到碲化锌(ZnTe)晶体中传播时,太赫兹脉冲电场将改变 ZnTe 的折射率椭球,促使线偏振探测光经过 ZnTe 电光晶体后的偏振态发生变化,偏振态变化的探测脉冲经过 1/4 波片和沃拉斯顿棱镜后,被分成偏振方向相互垂直的 s 偏振和 p 偏振,两束光通过硅材料的差分探测器后,探测到的光强差被转换为电流差,电流差正比于太赫兹脉冲电场^[5, 6]。ZnTe 晶体后的蓝宝石晶体(Al₂O₃)被用来延迟太赫兹脉冲经过多次反射后的时间,来

减小多次反射对信号噪声的影响。利用锁相探测技术来提高信噪比,锁相及控制器件均集成在控制器(Controller)中。控制器与电脑相连接,可通过电脑来控制控制器,从而进行设备参数的设定、信号的采集和存储。Z2 的太赫兹产生及探测原理与 Z1 系统相同,图中所示的镜片、控制器电脑也均与 Z1 相同,其不同之处在于获得平行的太赫兹脉冲后并未放置透镜获得聚焦光,而是以平行光的形式由 M23 反射,并一直以平行光的形式进入探测器。由于光路与 Z1 不同,Z2 的样品放置区域更大,但也由于其光路变长(测试区域的光程为 1m,而 Z1 的测试区域光程约为 20cm),其信号比 Z1 小,信噪比更小,光谱分辨率也更低。因此,Z1 和 Z2 各有优点,Z1 适合于测试体积不大的固体、液体样本,Z2 适合测试体积较大的、需要使用特制样品池的固、液样本或气体样本。

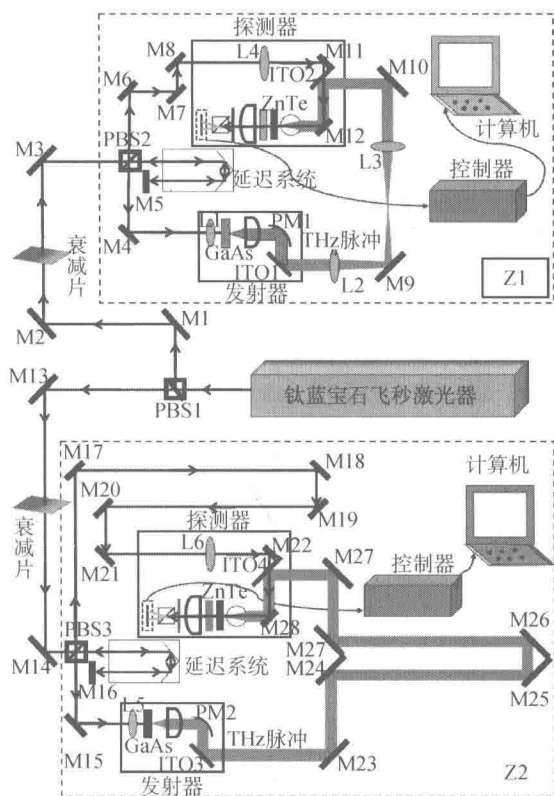


图 1-2 典型的太赫兹时域光谱系统

为帮助读者更好地了解和掌握太赫兹光谱分析技术,本书在介绍光谱分析技术时列举了大量的分析实例,这些例子中样本的太赫兹时域光谱多由 Z1 和 Z2

测得，其中固体和液体的时域光谱主要由 Z1 测得，气体的时域光谱由 Z2 测得。由图 1-3 可知，在有效频段内空气的频域幅值在多个频率处出现极小值，说明该频率处的水蒸气对太赫兹波具有特征吸收，即水蒸气在太赫兹波段的吸收特性可被所述系统灵敏地探测到。同时，为了进一步分析太赫兹光谱仪的分辨能力，随机提取了两个特征频率(Z1 为 1.414THz；Z2 为 1.166THz)处的半高宽(full width at half maximum, FWHM)，并将半高宽与对应的扫描范围对应起来。图 1-4 为 Z1、Z2 系统中空气频域半高宽随扫描范围的变化关系，由图可以看出，Z1 的光谱分辨率可达 6GHz 以下，Z2 的光谱分辨率可达 8GHz 以下，很好地满足样本太赫兹时域光谱测试的要求。

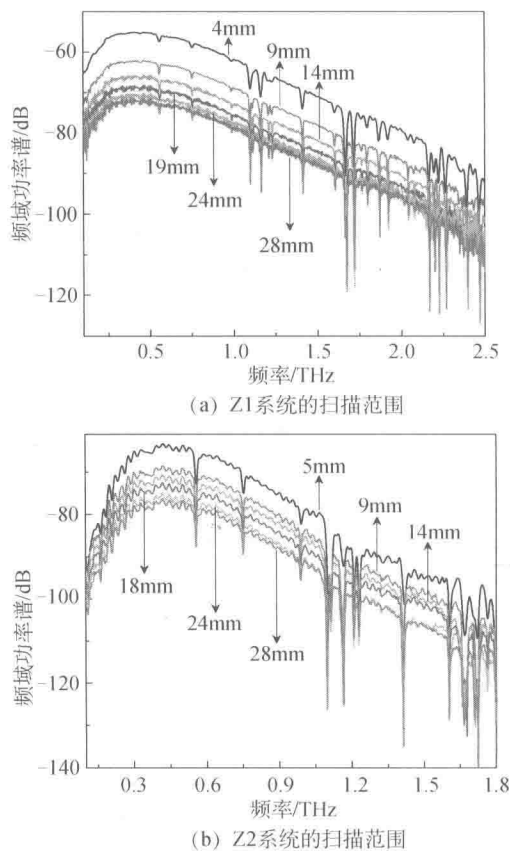


图 1-3 Z1、Z2 系统中空气在不同扫描范围下的太赫兹频域谱

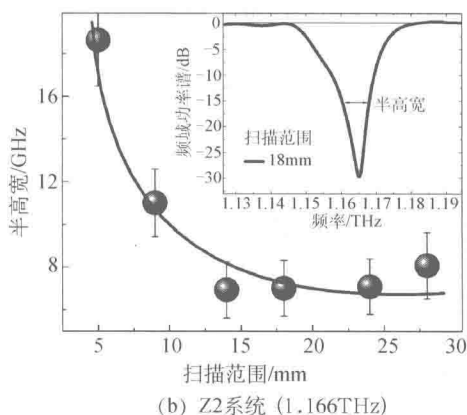
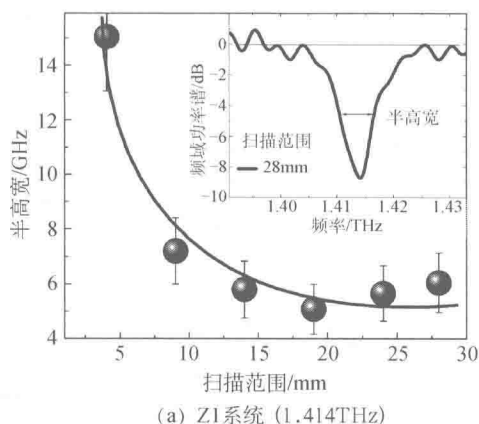


图 1-4 Z1、Z2 系统中空气频域半高宽随扫描范围的变化关系

1.1.3 傅里叶变换红外光谱 (3~10THz)

利用太赫兹时域光谱和傅里叶变换红外光谱 (FTIR) 均可获得样品在太赫兹频段内的光学参数谱, 根据两者在辐射、探测器、信噪比、带宽、稳定性和应用等方面的对比情况, 得出了如下结论: 在信噪比方面, THz-TDS 在低于 3THz 时占有优势, 而 FTIR 在 3~10THz 频段内更具有优势^[7]。样品可能在太赫兹低频段内具有较多吸收特征, 亦可能在太赫兹高频段内具有更多特征。

如图 1-5 所示, 典型的傅里叶变换红外光谱仪主要由光源、干涉仪、样品腔、探测器、电源控制腔组成。该仪器的光源为碳硅棒, 可发出稳定能量强、发射强度高的连续波长的红外光, 红外光经过凹面反射镜 CM1 和 CM2 后变为平行光, 然后进入迈克耳孙 (Michelson) 干涉仪, 经相干干涉后变为干涉光, 入射到可摆动的反射镜 M1, 再经凹面反射镜 CM3 反射后以聚焦光的形式进入样品腔, 聚焦光

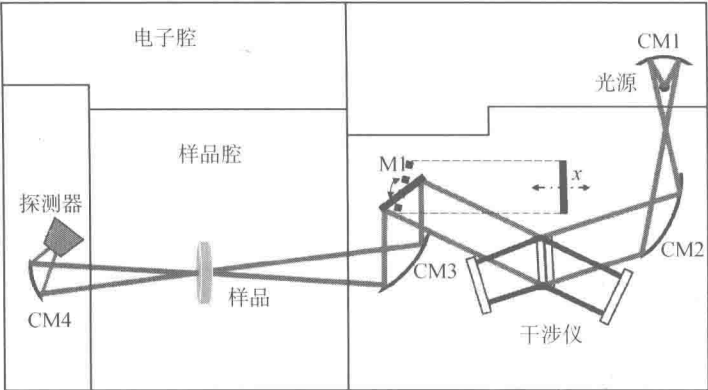


图 1-5 傅里叶变换红外光谱仪的测试原理图

的焦点在样品腔的中心，在此固定样品架，即测试样品始终处于太赫兹波的焦点位置。透过样品的太赫兹波经 CM4 反射后进入探测器，再将信号数据传输至电脑。上述傅里叶变换红外光谱仪具有全铸铝光学底座和全真空型光学平台，一方面稳定了光路，保持了仪器的稳定性，另一方面消除了空气中水蒸气对太赫兹波的吸收，灵敏度得到提高。此外，光谱仪的波谱范围广，可覆盖太赫兹全波段和远红外部分频率。

1.1.4 太赫兹光学参数获取

太赫兹时域光谱系统对样本进行测试时，读取和保存的信号为样本的太赫兹时域谱数据。对太赫兹时域谱作快速傅里叶变换，得到太赫兹脉冲随频率变化的波形，即太赫兹频域幅值谱。以 $E_{\text{ref}}(\omega)$ 和 $E_{\text{sam}}(\omega)$ 分别代表参考和样品的频域谱数据，则被测样本的吸光度谱可由下式计算：

$$A(\omega) = -\lg[E_{\text{sam}}(\omega) / E_{\text{ref}}(\omega)] \tag{1-1}$$

此外，对于无样品池的片状样本，根据 Dorney 和 Duvillaret 提出的太赫兹时域光谱技术提取光学常数的模型，可计算得到基于太赫兹频率的吸收系数和折射率谱。样品的折射率 $n(\omega)$ 和吸收系数 $\alpha(\omega)$ 分别由式 (1-2) 和式 (1-3) 计算：

$$n(\omega) = \varphi(\omega) \frac{c}{\omega d} + 1 \tag{1-2}$$

$$\alpha(\omega) = \frac{2\kappa(\omega)\omega}{c} = \frac{2}{d} \ln \left[\frac{4n(\omega)}{\rho(\omega)(n(\omega) + 1)^2} \right] \tag{1-3}$$

式中， d 为样品厚度； c 为真空中光速； $\varphi(\omega)$ 为样品信号与参考信号比值的相位； $\rho(\omega)$ 为样品信号与参考信号比值的模^[8, 9]。