



α -乳糖水溶液太赫兹吸收光谱实验研究及模拟分析

侯磊 王俊喃 王磊 施卫

Experimental study and simulation analysis of terahertz absorption spectra of α -lactose aqueous solution

Hou Lei Wang Jun-Nan Wang Lei Shi Wei

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 70, 243202 (2021) DOI: 10.7498/aps.70.20211716

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.70.20211716>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

专题: 太赫兹生物物理

α -乳糖水溶液太赫兹吸收光谱 实验研究及模拟分析*

侯磊 王俊喃 王磊 施卫†

(西安理工大学应用物理系, 西安 710048)

(2021年9月15日收到; 2021年11月6日收到修改稿)

水对太赫兹 (terahertz, THz) 波有强烈的吸收, 所以利用 THz 技术研究含水样品特性一直是本领域的难题. 本文在 THz 时域光谱系统中通过使用工作于高倍增模式的光电导天线和喇叭形渐变平行平板波导提高了样品所在位置处的 THz 波电场强度, 实现了在 0.1—1.6 THz 范围对 α -乳糖溶液 THz 吸收光谱的直接检测. 进而, 运用密度泛函理论对水环境下 α -乳糖单分子模型的 THz 吸收光谱进行模拟仿真研究, 模拟结果与实验测试结果符合较好. 本文对直接检测含水样品在 THz 波段的光谱特性具有重要参考价值.

关键词: 太赫兹波, 太赫兹时域光谱系统, 密度泛函理论, α -乳糖**PACS:** 32.30.Bv, 31.15.E-, 33.20.Tp**DOI:** 10.7498/aps.70.20211716

1 引言

太赫兹波 (terahertz wave, THz wave) 是频率在 0.1—10 THz, 处于远红外和微波之间的一段电磁辐射^[1], 具有瞬态性、相干性、宽带性、穿透性、低能性等很多优异的性能, 在分子生物学^[2,3]、医药学^[4-6]等诸多领域具有广阔的应用前景. 特别是由于 THz 波的光子能量只有毫电子伏特量级, 不会对生物组织产生有害的光电离, 与大多数有机分子的振动和转动能级相当, 表现出特有的指纹谱, 因此利用 THz 波检测有机分子具有独特的优势.

乳糖 (Lactose, $C_{12}H_{22}O_{11}$) 是 D-葡萄糖与 D-半乳糖以 β -1, 4 键结合的二糖, 它作为人类和哺乳动物乳汁中特有的碳水化合物, 是维持人和动物生命所需的主要能源物质. 乳糖有 α -乳糖和 β -乳糖两种异构体, α -乳糖容易与一分子结晶水结合, 变为 α -乳糖一水合物, 所以乳糖共有 α -乳糖一水合

物、 α -乳糖无水物和 β -乳糖 3 种构型. 目前, 国内外已经有多个关于利用太赫兹时域光谱 (terahertz time-domain spectroscopy, THz-TDS) 技术研究固态乳糖样品的报道. 2007 年, Brown 等^[7] 实验测得乳糖一水合物在 0.53 THz 处出现窄带强吸收, 通过高分辨率光谱技术和洛伦兹函数拟合确定了其半峰全宽为 23 GHz. 2013 年, McIntosh 等^[8] 利用 THz-TDS 系统研究了高湿度条件下的乳糖结晶, 获得了有关结晶速率及其动力学的数据. 2015 年, 黄瑞瑞等^[9] 实验得到 4 种乳糖在 0.2—2.6 THz 范围内的吸收谱并模拟分析得出吸收峰主要来源于分子内或分子间的氢键振动. 同年, 鹿文亮等^[10] 对乳糖和氨基苯甲酸在 0.1—1 THz 波段内进行了伪彩 THz 成像实验, 通过两种物质的 THz 图像的颜色差别来区分两种物质及其分布, 并得到乳糖在 0.53 THz 的吸收峰. 2019 年, 陈涛等^[11] 利用 THz-TDS 系统得到了乳糖一水合物和 D-葡萄糖在 0.3—1.7 THz 频段的特征吸收峰并进行了理论

* 国家自然科学基金 (批准号: 62075179, 61575161)、陕西省自然科学基金重点项目 (批准号: 2019JZ04)、陕西省超快光电与太赫兹科学重点实验室 (批准号: 2018SZS06) 和西安市超快光电器件技术重点实验室 (批准号: 201805055ZD6CG39) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: swshi@mail.xaut.edu.cn

分析, 结果表明 THz 波对结构相似的单糖和二糖的结构差异十分敏感. 2020 年, Wang 等^[12] 实验测得 *L*-组氨酸在 0.77 THz 和 α -乳糖在 0.53 THz 的特征吸收峰并利用特征吸收峰实现了对两种物质的快速指认. 上述研究结果表明, THz 波在有机物的检测与识别方面有其独特的优势, 然而由于水对 THz 波的强烈吸收^[13], 检测含水样品及生物样品的 THz 吸收特性非常困难. 为了实现对含水样品的 THz 检测, 2015 年, Grognot 和 Gallot^[14] 使用 THz 时域衰减全反射 (ATR) 技术实现了对上皮细胞的无损检测, 但是 ATR 系统比较复杂. 2018 年, Shig 等^[15] 利用微流控芯片测得了 THz 波在 3 种不同浓度酒精溶液和三磷酸腺苷溶液中的透过率, 但是微流控芯片的测量灵敏度会因为所使用液体量的减少而降低. 2019 年, Keshavarz 和 Vafapour^[16] 利用超材料传感器对 H1N1, H5N2 和 H9N2 这 3 种病毒进行了测试, 得出了 3 种病毒分别在 1.668, 1.665 和 1.641 THz 处有特征吸收峰. 但是超材料一般只对特定频率表现出较高的 Q 值, 并且测试结果会受到其表面样品均匀性的影响.

本文提出了一种操作简便、准确度高的对含水样品进行直接检测的方法. 利用光电导天线的高倍增模式提高了 THz 波的辐射功率, 使用喇叭形渐变平行平板波导 (horn shaped tapered parallel plate waveguide, HSTPPW) 进一步增强 THz 电场, 从而实现对乳糖水溶液 THz 光谱信息的直接检测. 为了进一步验证实验测得的乳糖水溶液的 THz 光谱信息并分析其与分子结构之间的关系, 运用密度泛函理论 (density functional theory, DFT) 对水环境下 α -乳糖—水合物单分子模型进行了模拟仿真研究, 根据仿真结果对实验结果在 0.1—1.6 THz 范围内特征峰的振动模式进行了分析和归属.

2 高倍增 THz 光电导天线

由于水对 THz 波有强烈的吸收, 因此提高 THz 源的辐射功率是有效检测含水样品在 THz 波段的吸收特性的关键. 光电导天线是一种常用的 THz 辐射源, 通常情况下, 光电导天线工作于线性工作模式, 即 1 个光子至多产生 1 个电子空穴对, 这些电子和空穴在偏置电场的作用下加速运动, 产生 THz 辐射, 由于电子质量小, 它对 THz 辐射起

主要作用. GaAs 光电导天线在满足一定的电场阈值和光能阈值的条件下可以工作在高倍增模式, 此时 GaAs 材料吸收光子后, 产生的电子在强偏置电场作用下加速运动, 通过级联碰撞过程使载流子的数目发生雪崩倍增, 此时 1 个光子可等效产生 10^3 — 10^5 个电子空穴对, 因此辐射 THz 波的功率可大幅提高. 但是, 由于高倍增模式下电流存在锁定效应, 在此阶段天线不会辐射 THz 波, 并且由于电流的热效应还会对天线的耐压和寿命带来不利影响, 因此需要在光激发电荷畴形成后破坏其维持条件导致其迅速猝灭, 天线关断, 获得具有载流子倍增效应但是不具有锁定效应的电流脉冲, 从而使光电导天线辐射出高功率 THz 波. 实验中, 使用的光电导天线间隙为 0.927 mm, 当偏置电压为 3100 V 时, 光电导天线工作于线性模式和高倍增模式的临界状态; 偏置电压为 3200 V 时, 光电导天线出现明显的高倍增现象. 图 1 是偏置电压为 3100 和 3200 V 时, 天线在线性模式和高倍增模式下辐射 THz 波的时域波形. 此时, 两种工作模式的偏置电压仅差 100 V, 高倍增模式下天线辐射 THz 波的电场强度的峰峰值比线性模式提高了 4.4 倍, 对应的 THz 波功率提高了 19.36 倍.

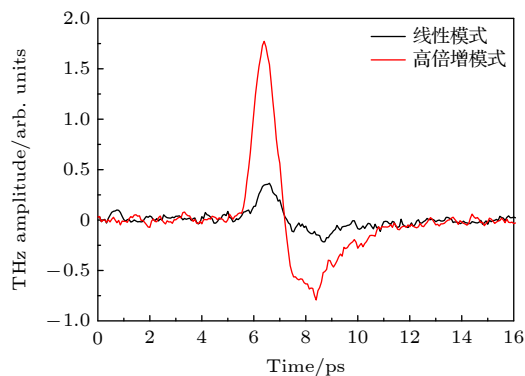


图 1 GaAs 光电导天线在线性模式和高倍增模式辐射 THz 波的时域波形

Fig. 1. THz time domain waveforms radiated by GaAs photoconductive antenna in linear mode and high multiplication mode.

3 实验

3.1 实验装置

含水样品测试系统是一种带有 HSTPPW 的 THz-TDS 系统, 光路示意图如图 2(a) 所示. 采用飞秒激光器 (MaiTai XF-1, Spectra-Physics) 作为

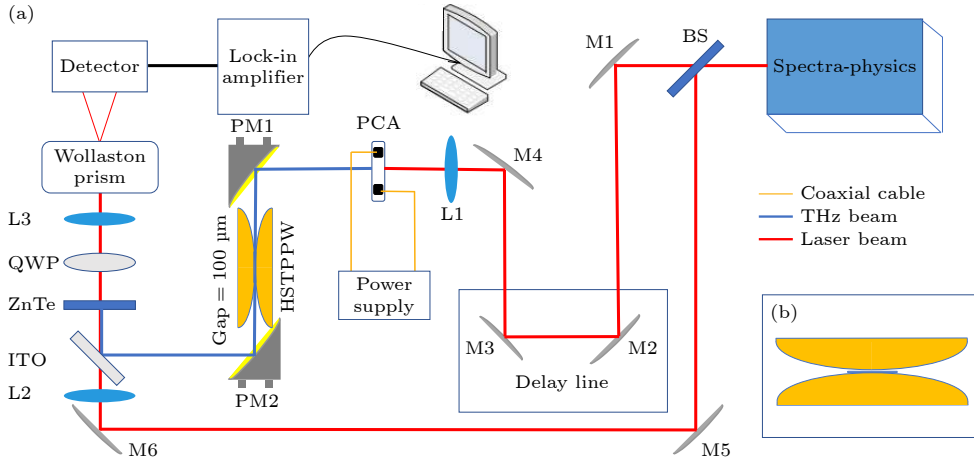


图 2 (a) 带有喇叭形渐变平行平板波导的 THz-TDS 系统; (b) 喇叭形渐变平行平板波导结构示意图

Fig. 2. (a) Schematic of homemade THz-TDS system with a horn shaped tapered parallel plate waveguide; (b) structural diagram of horn shaped tapered parallel plate wave.

光源, 激光波长为 800 nm, 重复频率为 1 kHz, 平均功率为 5 W, 脉宽为 100 fs. 飞秒激光束经过一个 70/30 分束器 (BS) 后分为两束, 较强的作为泵浦光, 较弱的作为探测光. 泵浦光束经过由多层介质膜反射镜 M2, M3, M4 组成的延迟系统后被焦距为 100 mm 的透镜 (L1) 聚焦在光电导天线上. 天线中产生光生载流子, 在两端所加载的偏置电场作用下加速运动辐射 THz 波. 产生的 THz 波通过焦距为 4 in (1 in = 2.54 cm) 的离轴抛物面镜 (PM1) 准直后耦合到 HSTPPW 中, HSTPPW 的间隙为 100 μm, 待测样品放置于 HSTPPW 的中心, 如图 2(b) 所示. THz 波在波导内传输过程中, 样品厚度很薄, 较强的 THz 电场可穿透样品, 因此从 HSTPPW 出射的 THz 波携带了样品信息. THz 波被另一个焦距为 4 in 的离轴抛物面镜 (PM2) 收集汇聚, 经过氧化铟锡 (ITO) 玻璃反射聚焦到 ZnTe 晶体上, 引起 ZnTe 的偏振态改变. 探测光经反射镜 M5 和 M6 反射后由透镜 (L2) 聚焦在 ZnTe 晶体上, 透射光携带了 THz 波的信息. 探测光束经过 1/4 波片 (QWP)、透镜 (L3) 和渥拉斯顿棱镜 (Wollaston prism) 后分成偏振方向相互垂直的两束光, 汇聚于平衡探测器的两个探头上, 经过差分运算后的信号输入锁相放大器. 该系统最大的特点是, 使用了高倍增工作模式的光电导天线和 HSTPPW 增强了样品所在位置处 THz 波的电场强度.

3.2 实验及结果分析

实验中所使用的 α-乳糖-水合物样品购自中国天津市红岩化学试剂厂, 将 α-乳糖-水合物溶

解在去离子水中制备浓度为 $5 \times 10^{-4}\%$ 的乳糖稀溶液. 由于水在 THz 波段也有吸收峰, 因此为了减少水的吸收峰对乳糖吸收峰的影响, 用去离子水作为参考. 用移液枪将 20 μL 去离子水滴入 HSTPPW 下半片的中心位置, 放上上半片, 中间形成 100 μm 厚的水膜, 利用 THz-TDS 系统检测 THz 波经过水后的时域波形, 经傅里叶变换得到频谱, 作为参考. 把水擦干, 用移液枪取 20 μL α-乳糖水溶液滴到 HSTPPW 的中心位置, 用同样的方法形成 100 μm 厚的溶液膜, 测试乳糖水溶液的 THz 时域波形和频谱. 将乳糖水溶液的 THz 谱除以去离子水的 THz 谱获得乳糖水溶液在 THz 波段的特征波形.

室温情况下, 频率为 1 THz 的 THz 波经过厚度为 d 的水膜后, 出射光子数 N_{out} 和入射光子数 N_{in} 的关系为

$$N_{out} = e^{-\alpha d} N_{in}, \quad (1)$$

其中水的吸收系数 $\alpha = 220 \text{ cm}^{-1}$ [17]. 当 $d = 100 \mu\text{m}$ 时, 由 (1) 式计算可得每有 9 个太赫兹光子入射, 有 1 个太赫兹光子出射. 文中增强了 THz 电场强度, 增加了入射含水样品的 THz 光子数目, 从而实现利用 THz 波对含水样品的直接探测.

图 3 是通过实验测试获得的 α-乳糖水溶液在 0.1—1.6 THz 范围内的吸收光谱曲线. 可以看出, 在 0.50, 1.17, 1.38 THz 处存在 3 个吸收峰, 与参考文献 [8] 中报道的 0.53, 1.20 和 1.38 THz; 参考文献 [11] 中报道的 0.53, 1.19 和 1.38 THz; 参考文献 [18] 中报道的 0.53, 1.20 和 1.38 THz 吸收峰相符合. 但是, 由于本文测试的是乳糖水溶液, 而文

献 [8, 11, 17] 测试的是固态乳糖, 因此上述数据不可能完全一致. 一方面是由于所使用测试仪器的频谱分辨率导致的, 另一方面是在水环境下受到水中氢键的影响乳糖的分子结构与固态时不同.

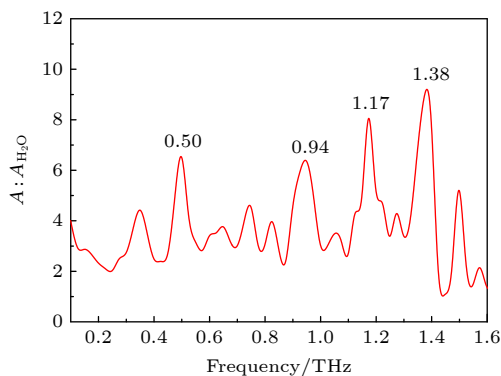


图 3 α -乳糖水溶液的 THz 吸收光谱

Fig. 3. THz absorption spectrum for α -lactose aqueous solutions, which was measured by the homemade THz-TDS system with parallel planar waveguide.

虽然本文使用水的信号作为参考信号, 但是纯水与 α -乳糖水溶液中水分子的特性也不完全相同, 采用水的信号作为参考信号可以明显减弱 α -乳糖水溶液中大多数水峰的影响, 从而使 α -乳糖的吸收峰凸显出来, 但不能完全消除水峰的影响, 因此还会在图中看到水的吸收峰, 如 0.35, 0.64, 1.04 和 1.49 THz. 图 3 中其他的峰可能是由于 α -乳糖在水溶液中产生端基异构体 β -乳糖的吸收峰, 以及溶液中水和乳糖形成新的化学键形成的吸收峰.

4 数值模拟及结果分析

4.1 分子模型与计算方法

为了进一步分析实验结果, 了解乳糖水溶液在 THz 波段吸收峰的产生机理, 利用 Gaussian16 软件对 α -乳糖一水合物单分子模型在水环境下的特性进行了仿真模拟. 单个 α -乳糖一水合物分子结构模型从剑桥数据库系统 [19] (Cambridge structural database system, CCDC) 中提取, 如图 4 所示. 计算时选用包含梯度修正的泛函 B3LYP [20,21], 基组选用 6-31G(d), 同时为了减小在计算单个分子时 DFT 不能很好地模拟范德瓦耳斯力而引起的误差 [22], 引入 Grimme [23] 提出的色散校正项 (B3LYP-D3BJ). 考虑到实验中样品处于水溶剂的情况, 模拟研究中使用隐式溶剂模型, 这种溶剂模

型不具体描述溶质附近的溶剂分子的具体结构和分布, 而是把溶剂环境简单地当成可极化的连续介质来考虑, 使用隐式溶剂模型可以在计算中表现出溶剂的平均效应. 采用隐式溶剂模型中的 SMD 溶剂模型, 以水为溶剂. 计算结果没有出现虚频, 说明对 α -乳糖一水合物分子几何优化至分子势能面极小点.

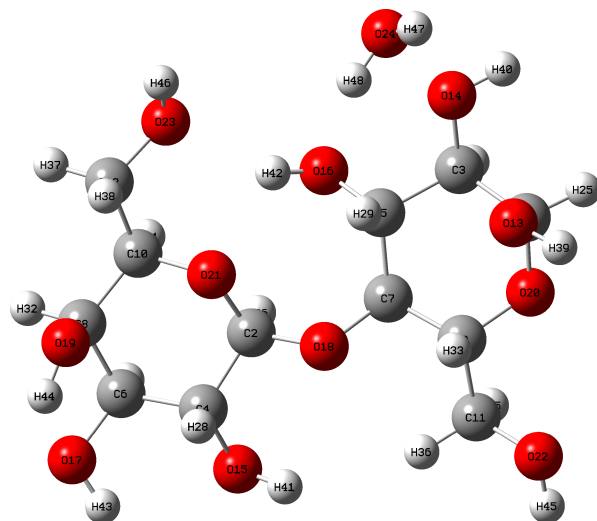


图 4 α -乳糖一水合物分子结构

Fig. 4. Molecular of α -lactose monohydrate.

4.2 振动分析

结合计算结果的输出文件和 GaussView6.0 可以得到 α -乳糖一水合物水溶液在不同频率下的振动模式. 图 5 给出了 α -乳糖一水合物在 0.55, 0.98, 1.16, 1.43 THz 峰值所对应的振动模式, 图中蓝色箭头表示原子振动方向.

分子在 THz 频段的振动主要是源于多个原子参与的变形振动、扭转振动和弯曲振动 [24]. 为了定性解释模拟结果, 通过 GaussView6.0 和输出文件对 α -乳糖一水合物的振动模式进行简正振动 (potential energy distributions, PED) 分析, 得到不同频率下主要基团和原子振动模式对简正振动的贡献百分比, 结果见表 1. α -乳糖一水合物在 0.58 THz 处的吸收峰主要是 C2-O18-C7 带动 C1-C3-C5-C7-C9-O20 和 C2-C4-C6-C8-C10-O21 两个六圆环做反对称扭转振动, 同时带动 C3-C5-C7-C9 与之连接的羟基和氢原子做面内摇摆振动; 1.01 THz 处是以 C2-O18-C7 带动 C1-C3-C5-C7-C9-O20 和 C2-C4-C6-C8-C10-O21 两个六圆环做剪式振动, 同时带动水分子做面内弯曲振动;

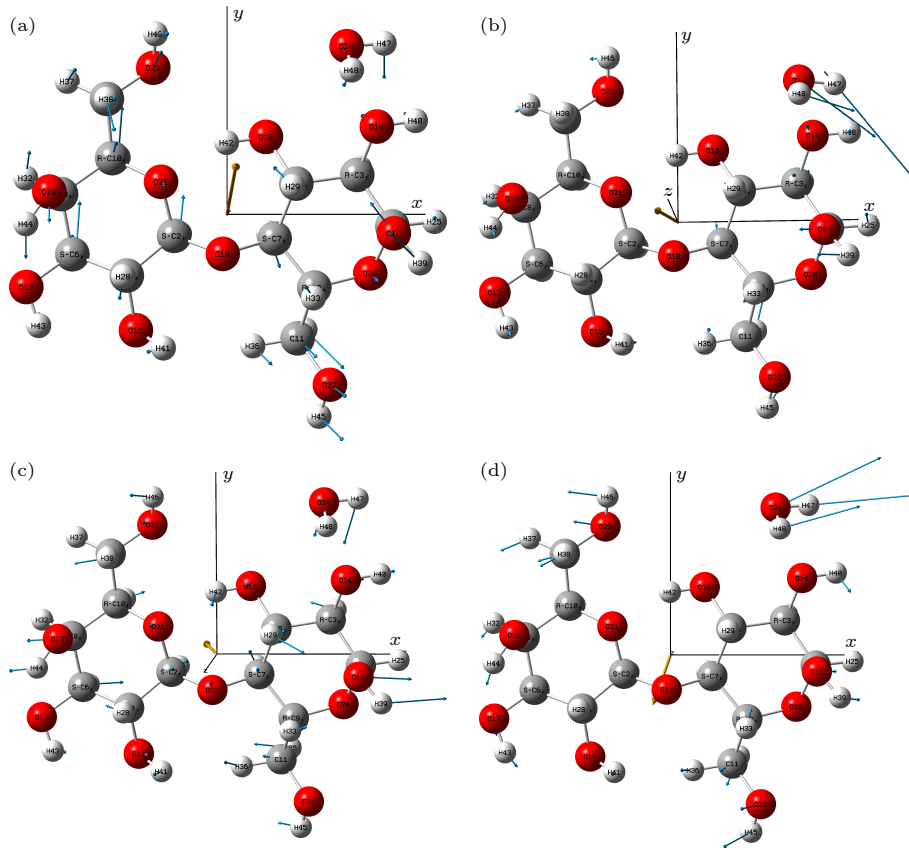


图 5 乳糖的振动模式 (a) 0.58 THz; (b) 1.01 THz (c) 1.19 THz; (d) 1.47 THz

Fig. 5. Vibrational modes of α -lactose monohydrate at different frequencies: (a) 0.58 THz; (b) 1.01 THz; (c) 1.19 THz; (d) 1.47 THz.

1.19 THz 处是以 C2-O18-C7 带动 C1-C3-C5-C7-C9-O20 和 C2-C4-C6-C8-C10-O21 两个六圆环做对称扭绞振动, C1-C3-C5-C9 与之连接的羟基和氢原子做扭绞振动同时带动水分子做面内弯曲振动; 1.47 THz 处 C2-O18-C7 带动 C1-C3-C5-C7-C9-O20 和 C2-C4-C6-C8-C10-O21 两个六圆环做弯曲振动, 同时 C13 上的羟基带动水分子做弯曲振动.

表 1 乳糖-水合物振动频率的 PED 分析
Table 1. Assignments of vibration frequencies for lactose monohydrate by PED.

物质	频率 /THz	振动模式
α -乳糖-水合物	0.58	C2-O18-C7&C3-C5-C7-C9 (35.5%)
	1.01	C2-O18-C7&C1-C3-C5-C7 (34.5%)
	1.19	C2-O18-C7&C1-C3-C5-C7 (44.6%)
	1.47	C2-O18-C7&C1-C3-C5-C7 (35.7%)

4.3 结果分析

α -乳糖-水合物水溶液的模拟结果如图 6 所示. 在 0.1—1.6 THz 范围内有 0.58, 1.01, 1.19 和

1.47 THz 四个特征峰, 分别与实验结果中的 0.50, 0.94, 1.17 和 1.38 THz 四个特征峰相对应. 根据 3.2 节的分析可知, 1.01 THz 处的特征峰与溶液中的水分子有关, 因此在之前的文献报道中, 乳糖固体的 THz 吸收光谱中此处没有吸收峰.

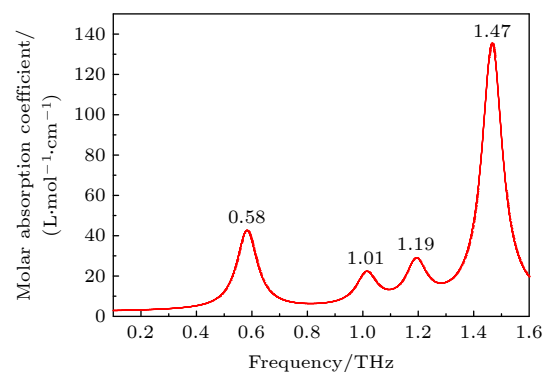


图 6 α -乳糖-水合物水溶液计算光谱图

Fig. 6. Theoretical spectrum for α -lactose monohydrate.

仿真结果和实验结果符合较好, 说明实验所测结果是乳糖溶液的吸收峰, 也说明了所建仿真模型是合理的. 但是, 实验结果和仿真结果还出现了一

些偏差, 原因如下: 第一, 与实际实验中的多分子体系不同, 仿真中采用的是 α -乳糖—水合物的单分子模型, 计算中没有考虑分子间的相互作用; 第二, 仿真模拟中使用的隐式溶剂模型也会引起误差, 该模型无法表现出溶剂和溶质之间氢键等近程强相互作用, 而且隐式溶剂模型还会改变体系的势能面, 从而影响到体系的几何优化和振动频率的计算.

5 结 论

针对利用 THz 技术检测含水样品的难题, 本文利用非线性模式的光电导天线产生高功率 THz 波, 并利用 HSTPPW 进一步增强 THz 电场的场强, 从而检测得到了 α -乳糖的水溶液在 0.1—1.6 THz 范围内的特征吸收峰, 分别为 0.50, 0.94, 1.17 和 1.38 THz. 运用密度泛函理论对水环境下的 α -乳糖—水合物进行仿真模拟, 并得到了与实验结果符合度较高的仿真结果. 通过 GaussView6.0 和计算输出文件对 0.58, 1.01, 1.19 和 1.47 THz 太赫兹吸收峰的振动模式进行了归属和分析, 较好地解释了该有机物太赫兹光谱的形成机理. 本文为研究含水物质在 THz 波段的特性提供了实验手段和分析方法.

参考文献

- [1] Ferguson B, Zhang X C 2002 *Nat. Mater.* **1** 26
- [2] Menikh A, Michkan P S, Liu H B, MacColl R, Zhang X C 2016 *Biosens. Bioelectron.* **20** 658
- [3] Penkov N V, Yashin V A, Belosludtsev K N 2021 *Appl. Spectrosc.* **75** 189
- [4] Cherkasova O, Nazarov M, Shkurinov A 2016 *Opt. Quantum Electron.* **48** 217
- [5] Pickwell E, Wallace V P 2006 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **39** R301
- [6] Strachan C J, Rades T, Newnham D A, Gordon K C, Pepper M, Taday P F 2004 *Chem. Phys. Lett.* **390** 20
- [7] Brown E R, Bjarnason J E, Fedor A M, Kortner T M 2007 *Appl. Phys. Lett.* **90** 061908
- [8] McIntosh A I, Yang B, Goldup S M, Watkinson M, Donnan R S 2013 *Chem. Phys. Lett.* **558** 104
- [9] Huang R R, Zhao G Z, Liu Y, Kou K, Gu C 2015 *Acta Opt. Sin.* **35** s230001 (in Chinese) [黄瑞瑞, 赵国忠, 刘影, 寇宽, 顾畅 2015 光学学报 **35** s230001]
- [10] Lu W L, Lou S Q, Wang X, Shen Y, Sheng X Z 2015 *Acta Phys. Sin.* **64** 114206 (in Chinese) [鹿文亮, 娄淑琴, 王鑫, 申艳, 盛新志 2015 物理学报 **64** 114206]
- [11] Chen T, Cai Z H, Hu F R, Yin X H, Xu C P 2019 *Spectrosc. Spect. Anal.* **39** 686 (in Chinese) [陈涛, 蔡治华, 胡放荣, 殷贤华, 许川佩 2019 光谱学与光谱分析 **39** 686]
- [12] Wang Y M, Zhao Z S, Qin J Y, Liu H, Liu A F, Xu M M 2020 *Talanta* **208** 120469
- [13] Yang Y H, Shutler A, Grischkowsky D 2011 *Opt. Express* **19** 8830
- [14] Grognot M, Gallot G 2015 *Appl. Phys. Lett.* **107** 103702
- [15] Shih K L, Pitchappa P, Jin L, Chen C H, Singh R, Lee C 2018 *Appl. Phys. Lett.* **113** 071105
- [16] Keshavarz A, Vafapour Z 2019 *IEEE Sens. J.* **19** 5161
- [17] Kindt J T, Schmuttenmaer C A 1996 *J. Phys. Chem.* **100** 10373
- [18] Yamauchi S, Hatakeyama S, Imai Y, Tonouchi M 2014 *Opt. Eng.* **53** 031203
- [19] The Cambridge Crystallographic Data Centre <https://www.ccdc.cam.ac.uk/structures/> [2021-11-8]
- [20] Vallet V, Macak P, Wahlgren U, Grenthe I 2006 *Theor. Chem. Acc.* **115** 145
- [21] Zheng Y Y, Ren G M, Chen R, Wang X M, Chen X H, Wang L, Yuan L, Huang X F 2014 *Acta Phys. Sin.* **63** 213101 (in Chinese) [郑圆圆, 任桂明, 陈锐, 王兴明, 谌晓洪, 王玲, 袁丽, 黄晓凤 2014 物理学报 **63** 213101]
- [22] Takahashi M 2014 *Crystals* **4** 74
- [23] Grimme S 2004 *Comput. Chem.* **25** 1463
- [24] Yu B, Zeng F, Yang Y, Xing Q, Chechin A, Xin X, Zeylikovich I, Alfano R R 2004 *Biophys. J.* **86** 1649

SPECIAL TOPIC—Terahertz biophysics

Experimental study and simulation analysis of terahertz absorption spectra of α -lactose aqueous solution^{*}

Hou Lei Wang Jun-Nan Wang Lei Shi Wei[†]

(*Department of Applied Physics, Xi'an University of Technology, Xi'an 710048, China*)

(Received 15 September 2021; revised manuscript received 6 November 2021)

Abstract

Water has the strong absorption of terahertz (THz) wave, so it always a difficult problem to study the characteristics of aqueous samples by THz technology. In this paper, THz waves with high field strength are obtained at the position of sample by using photoconductive antenna working in high-gain mode and horn shaped graded parallel plate waveguide in THz time-domain spectrum system, and the THz spectrum of α -lactose solution in a range of 0.1–1.5 THz is directly detected. Furthermore, the absorption spectrum of α -lactose single molecule model in water environment is simulated by the density functional theory, and the simulation results are in good agreement with the experimental results. This work has important reference value for directly detecting the spectral characteristics of water samples in THz band.

Keywords: terahertz waves, terahertz time-domain spectroscopy system, density functional theory, α -lactose

PACS: 32.30.Bv, 31.15.E-, 33.20.Tp

DOI: [10.7498/aps.70.20211716](https://doi.org/10.7498/aps.70.20211716)

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 62075179, 61575161), the Natural Science Foundation of Shaanxi Province, China (Grant No. 2019JZ04), the Shaanxi Key Laboratory of Ultrafast Photoelectronic Technology and Terahertz Science, China (Grant No. 2018SSZS06), and the Xi'an Key Laboratory of Ultrafast Photoelectronic Device Technology, China (Grant No. 201805055ZD6CG39).

[†] Corresponding author. E-mail: swshi@mail.xaut.edu.cn