

# 光电工程

## Opto-Electronic Engineering

中文核心期刊 中国科技核心期刊  
Scopus CSCD

### 利用太赫兹圆二色性识别手性物质

纪旭洋, 孙爽, 张岩

#### 引用本文:

纪旭洋, 孙爽, 张岩. 利用太赫兹圆二色性识别手性物质[J]. *光电工程*, 2024, 51(5): 240005.

Ji X Y, Sun S, Zhang Y. Recognition of chiral substances by terahertz circular dichroism[J]. *Opto-Electron Eng*, 2024, 51(5): 240005.

<https://doi.org/10.12086/oe.2024.240005>

收稿日期: 2024-01-05; 修改日期: 2024-02-28; 录用日期: 2024-03-01

### 相关论文

#### Chiral detection of biomolecules based on reinforcement learning

Yuxiang Chen, Fengyu Zhang, Zhibo Dang, Xiao He, Chunxiong Luo, Zhengchang Liu, Pu Peng, Yuchen Dai, Yijing Huang, Yu Li, Zheyu Fang

*Opto-Electronic Science* 2023, 2(1): 220019 doi: [10.29026/oes.2023.220019](https://doi.org/10.29026/oes.2023.220019)

#### 基于扭转悬链线结构的高效手性吸波器

蓝翔, 邓钦荣, 张汶婷, 唐紫依, 胡杰, 黄奕嘉, 李玲

*光电工程* 2022, 49(10): 220157 doi: [10.12086/oe.2022.220157](https://doi.org/10.12086/oe.2022.220157)

#### Terahertz generation from laser-induced plasma

Wenfeng Sun, Xinke Wang, Yan Zhang

*Opto-Electronic Science* 2022, 1(8): 220003 doi: [10.29026/oes.2022.220003](https://doi.org/10.29026/oes.2022.220003)

#### Highly efficient vectorial field manipulation using a transmitted tri-layer metasurface in the terahertz band

Huan Zhao, Xinke Wang, Shutian Liu, Yan Zhang

*Opto-Electronic Advances* 2023, 6(2): 220012 doi: [10.29026/oea.2023.220012](https://doi.org/10.29026/oea.2023.220012)

更多相关论文见光电期刊集群网站 



光电工程  
Opto-Electronic Engineering

<http://cn.ojournal.org/oe>



OE\_Journal

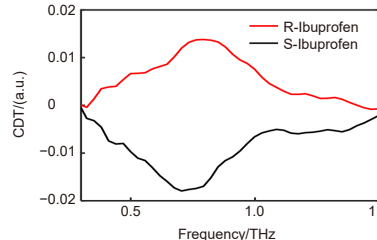


Website

DOI: 10.12086/oe.2024.240005

## 利用太赫兹圆二色性识别手性物质

纪旭洋, 孙爽, 张岩\*

首都师范大学物理系, 北京市超材料与器件重点实验室,  
太赫兹光电子学教育部重点实验室, 北京 100048

**摘要:** 不同手性的生物分子具有不同甚至相反的生物和药理活性。由于很多生物大分子的振动和转动能级分布在太赫兹波段, 使得太赫兹波谱技术成为生物大分子识别的有效手段, 但是太赫兹时域光谱系统都采用线偏振光源, 无法对手性分子进行有效识别。我们在理论上利用线偏振的琼斯矩阵模型合成圆偏振下的琼斯矩阵, 根据圆偏光的透射率差异性进一步计算样品的透射圆二色光谱, 为表征不同手性分子提供了一种有效方法。基于透射式太赫兹时域光谱系统, 对(R)-(-)-Ibuprofen和(S)-(+)-Ibuprofen的光谱进行测试, 计算了(R)-(-)-Ibuprofen和(S)-(+)-Ibuprofen的线偏透过率和圆偏透过率; 并计算出透射性圆二色光谱, 两种手性物质的圆二色性值达到0.015, 有效地实现了对(R)-(-)-Ibuprofen和(S)-(+)-Ibuprofen的识别效果。这一方法为利用太赫兹光谱技术检测和识别手性分子提供了参考。

**关键词:** 琼斯矩阵; 圆二色性; 太赫兹; 手性识别

**中图分类号:** O431

**文献标志码:** A

纪旭洋, 孙爽, 张岩. 利用太赫兹圆二色性识别手性物质[J]. 光电工程, 2024, 51(5): 240005

Ji X Y, Sun S, Zhang Y. Recognition of chiral substances by terahertz circular dichroism[J]. *Opto-Electron Eng*, 2024, 51(5): 240005

## Recognition of chiral substances by terahertz circular dichroism

Ji Xuyang, Sun Shuang, Zhang Yan\*

Beijing Key Laboratory of Metamaterials and Devices, Key Laboratory of Terahertz Optoelectronics of Ministry of Education, Department of Physics, Capital Normal University, Beijing 100048, China

**Abstract:** Biomolecules with different chirality have different or even opposite biological and pharmacological activities. Since vibration and rotation energy levels of many biomolecules lie within the terahertz range, terahertz spectroscopy has emerged as a useful tool for biomolecular identification. Nevertheless, linearly polarized light sources are used in terahertz time-domain spectroscopy, which is ineffective for identifying chiral compounds. We theoretically constructed a circularly polarized Jones matrix using a linearly polarized Jones matrix model. We also calculated the transmission circular dichroism spectrum of the sample based on the difference in transmittance of circularly polarized light, offering a useful technique for describing various chiral compounds. The spectra of (R)-(-)-Ibuprofen and (S)-(+)-Ibuprofen were investigated using a transmission terahertz time-domain spectroscopy system, and the linear polarization biased transmittance and circular polarization transmittance of (R)-(-)-Ibuprofen

收稿日期: 2024-01-05; 修回日期: 2024-02-28; 录用日期: 2024-03-01

基金项目: 北京市教委科技重点资助项目 (KZ20231123226)

\*通信作者: 张岩, yzhang@cnu.edu.cn.

版权所有©2024 中国科学院光电技术研究所

and (S)-(+)-Ibuprofen were computed. Additionally, the transmittance circular dichroic spectra were calculated, and the two chiral compounds' circular dichroic values reached 0.015, successfully achieving the (R)-(-)-Ibuprofen and (S)-(+)-Ibuprofen recognition effect. This technique serves as a guide for chiral molecule identification and detection using terahertz spectroscopy technology.

**Keywords:** Jones matrix; circular dichroism; terahertz; chiral recognition

## 1 引言

“手性”是自然界中的一种本质属性, 最容易理解的一种手性就是人类的双手: 镜像对称但无法完全重合。手性分子的分子结构中具有手性中心或者不对称中心<sup>[1]</sup>, 它们具有相同的结构基团, 但是其在空间中对于不同偏振光的旋转方向不同, 称为光学异构体, 又称为对映体<sup>[2]</sup>。手性物质的对映体具有相同的组成元素和官能团, 表现出许多相同的物理化学性质。然而, 它们在生物和药理活性上可能具有不同甚至相反的性能<sup>[3]</sup>。在现代生物科学中, 蛋白质、DNA 等大多数物质都与手性分子密不可分。在药物研发领域, 典型的手性药品沙利度胺, 其右旋化合物(R-构型)抑制妊娠反应, 而其左旋化合物(S-构型)可能导致胎儿畸形<sup>[4]</sup>。甲状腺素的左旋化合物可以产生甲状腺激素, 用于甲状腺的治疗, 而其右旋甲状腺素却具有降低血脂的作用。在日常生活中广泛使用的止痛药和有效的抗炎药布洛芬(ibuprofen, 4-异丁基-2-苯基丙酸,  $C_{13}H_{18}O_2$ )也是一种手性分子。(S)-(+)-Ibuprofen 具有抗炎和镇痛作用, (R)-(-)-Ibuprofen 几乎没有抗炎作用, 还会增加代谢负担。因此, 对手性物质对映体的鉴定一直是生命科学等领域的重要问题之一<sup>[5]</sup>。

平面偏振光通过具有旋光活性的物质时, 不同的手性分子对平面偏振光分解成的左旋、右旋圆偏振光吸收不同, 从而造成透过的不同旋向的圆偏光的振幅不同, 产生圆二色性, 为手性物质的识别提供了途径。目前关于手性药物检测的方法有旋光仪检测、核磁共振波谱技术、手性拉曼光谱法、高效液相色谱法等。旋光仪主要是由光源和尼科尔棱镜以及一个盛有手性样品的盛液管组成, 当偏振光经过旋光物质时其振动面会发生偏转, 从而实现对手性物质的定性分析。在偏振光通过盛液管之后, 由可转动的检偏镜来检验偏振光的振动方向和旋转角度。旋光仪法操作简单, 通用性好, 但是测量受到诸多因素影响, 比如偏振光的波长以及溶液的浓度、温度等<sup>[6]</sup>。核磁共振技术是直接或者间接地使手性对映异构体的化学环境不同, 根

据核磁共振谱上不同的化学位移以及峰面积来鉴别手性, 该方法分析速度快, 测试费用低<sup>[7]</sup>。拉曼光谱使用不同频率的散射光来表征手性样品, 检测样品中与化学键相关的振动模式, 获得独特的光谱指纹来进行手性鉴别<sup>[8]</sup>。2020年, 上海师范大学的杨海峰教授团队与日本神奈川大学的金仁华教授团队展开合作研究, 利用二氧化硅设计出一系列具有手性选择特性的功能材料, 诱导一对对映体产生差异化拉曼散射信号, 从而在拉曼光谱上实现了对映体选择性识别<sup>[9]</sup>。高效液相色谱法是使用的最广泛的手性物质分离方法, 在手性分析方面中具有重要位置, 但是受到手性固定相的种类跟数量的限制, 需要纯度比较高的手性衍生化试剂, 衍生化的过程比较繁琐, 而且成本较高<sup>[10]</sup>。

太赫兹(Terahertz, THz)辐射作为一种有前途的生物和医学研究工具, 近年来受到了广泛关注<sup>[11-12]</sup>。太赫兹光谱可以显示分子的三维排列及其低频吸收特性<sup>[13-14]</sup>, 分子骨架弯曲振动和集体振动模态的构型又与其结构和构象密切相关<sup>[15]</sup>。因此, 利用太赫兹探测可以对生物分子有更准确的认知。太赫兹光谱技术与其他探测方式相比具有独特的优点。第一个是能量低, 太赫兹辐射的光子能量仅有毫电子伏, 远小于X射线的辐射能量, 对生物分子没有电离损伤; 第二个是频带较宽, 传输信息量大, 能够采集到更多的信息<sup>[15]</sup>。太赫兹光谱技术利用时域中扫描透射或反射的超短太赫兹脉冲来探测电磁场的变化, 在不同的生物分子研究方法中有其独特的优势<sup>[16]</sup>。2020年, Zhao等人利用太赫兹时域光谱技术(THz-TDS)对L-福多司坦和DL-福多司坦进行了测量, 发现两者在太赫兹波段都有特征吸收峰, 且吸收谱具有明显差异, 可以区分出手性分子和其消旋体<sup>[17-18]</sup>。2021年, Wang等人从特征峰频率、峰幅差和峰下面积差三个方面提出了手性药物的定性鉴别和定量分析方法<sup>[19]</sup>。2023年, Liu等人利用一种超构表面分离光束法来提高手性氨基酸的太赫兹响应, 实现了对同一氨基酸的手性对映体的鉴别<sup>[20]</sup>。2023年, Shi等人设计了一种由不对称

双开环和金纳米颗粒构成的元表面, 显著提高了超构表面和生物分子近场相互作用引起的频移, 提高了检测的灵敏度<sup>[21]</sup>。

然而, 目前的太赫兹光源产生的都是线偏光, 利用波片等技术无法产生宽频太赫兹圆偏振脉冲, 这为手性样品的二色性测量带来了困难。本文提出了一种利用太赫兹线偏振时域光谱探测方法, 合成求解手性样品的圆二色性识别问题, 并实现了对手性布洛芬药品的手性区分。该方法通过 4 次测量, 获得样品在线偏振空间的琼斯矩阵, 通过理论推导, 将其转换到圆偏振空间, 并利用圆偏振空间的琼斯矩阵分量计算样品的圆二色性 (CD) 光谱。利用该方法成功实现了布洛芬药品的手性识别, 对利用太赫兹技术检测手性样品, 鉴别化学物质具有重要的参考意义。

## 2 理论推导

琼斯矩阵描述了光学系统中入射和透射电磁波复振幅的联系, 它可以描述光与物质的相互作用, 包括吸收、相位延迟以及偏振转换。线性偏振空间中的琼斯矩阵可以表示为

$$\mathbf{T}_{\text{line}} = \begin{bmatrix} t_{xx} & t_{xy} \\ t_{yx} & t_{yy} \end{bmatrix}, \quad (1)$$

其中:  $\mathbf{T}_{\text{line}}$  是传输矩阵,  $t_{xx}$ 、 $t_{xy}$ 、 $t_{yx}$ 、 $t_{yy}$  均是复透过率系数, 第一个下标是入射光的偏振方向, 第二个下标是透射光的偏振方向。传输矩阵元素的绝对值表示入

射光和透射光的振幅之比; 复分量的辐角表示光通过介质时的相位延迟。圆偏振空间中的琼斯矩阵可以通过线性空间的琼斯矩阵计算得到<sup>[22]</sup>:

$$\mathbf{T}_{\text{cir}} = \begin{bmatrix} t_{ll} & t_{lr} \\ t_{rl} & t_{rr} \end{bmatrix} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} t_{xx} + t_{yy} + i(t_{xy} - t_{yx}) & t_{xx} - t_{yy} - i(t_{xy} + t_{yx}) \\ t_{xx} - t_{yy} + i(t_{xy} + t_{yx}) & t_{xx} + t_{yy} - i(t_{xy} - t_{yx}) \end{bmatrix}, \quad (2)$$

其中:  $\mathbf{T}_{\text{cir}}$  为传输矩阵;  $t_{ll}$ 、 $t_{lr}$ 、 $t_{rl}$ 、 $t_{rr}$  为圆偏振空间中的复透过率系数。下标顺序和上述线偏振空间一样。

对于手性分子来说, 左旋圆偏振光 (LCP) 和右旋圆偏振光 (RCP) 的吸收率存在差异, 差异性体现为圆二色性谱。为了表征手性分子对于不同圆偏振光吸收的差异性, 定义透过率的 CD 值 (CDT) 为<sup>[22]</sup>

$$CDT = \frac{(t_{lr} + t_{ll}) - (t_{rl} + t_{rr})}{(t_{lr} + t_{ll}) + (t_{rl} + t_{rr})}. \quad (3)$$

因此, 可以利用传统的 THz-TDS 进行手性样品的圆二色性表征。

## 3 实验结果

### 3.1 实验准备

实验采用透射式太赫兹时域光谱系统。如图 1(a) 所示, 飞秒激光放大器产生的 800 nm 红光经过分束镜被分成两路光, 其中一路光经过斩波器的调制聚焦于产生晶体 ZnTe 上, 以光整流的方式产生太赫兹辐射, 随后由抛物面镜收集变为平行光, 平行的太赫兹光束经过第二个抛物面镜后变为聚焦光束, 样品放置

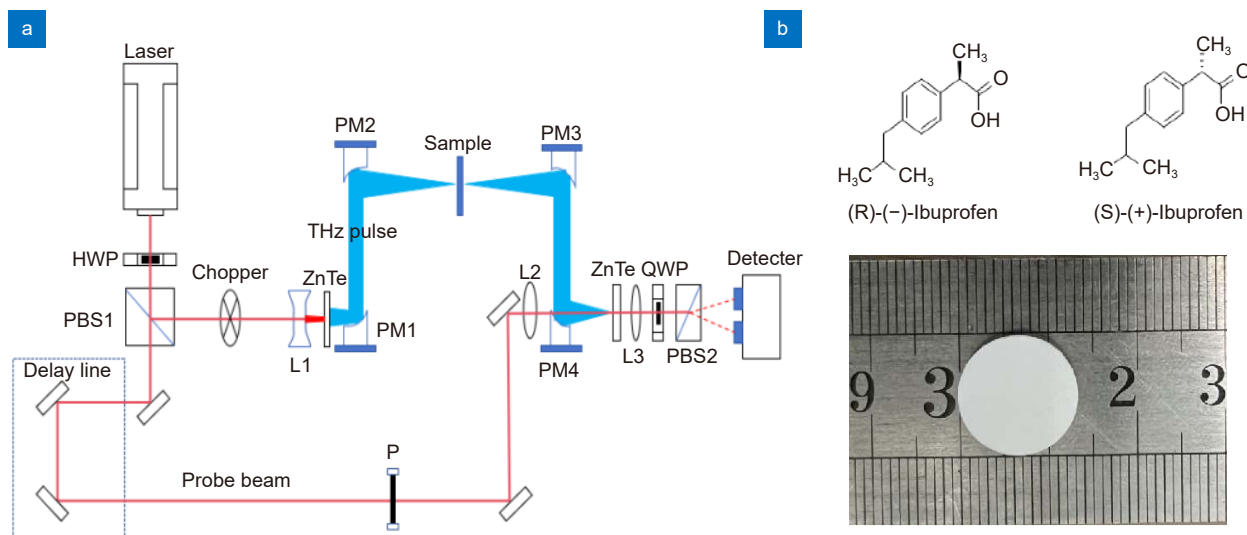


图 1 (a) 透射式太赫兹时域光谱系统示意图。其中 HWP 表示半波片, PBS 表示偏振分光棱镜, L 表示透镜, PM 表示抛物面镜, QWP 表示四分之一波片, P 表示偏振片。(b) 实验压片样品及其分子式

Fig. 1 (a) Schematic diagram of transmissive terahertz time-domain spectroscopy. HWP: half-wave plate, PBS: polarization splitting prism, L: lens, PM: parabolic mirror, QWP: quarter wave plate, and P: polarizer; (b) Experimental tablet sample and corresponding molecular formula

于太赫兹焦点处。经过样品的太赫兹光束由第三个抛物镜收集, 并由第四个抛物面镜聚焦在探测晶体 ZnTe 上。另一束光作为探测光, 经过由反射镜组成的光学平移台后, 与太赫兹波一起聚焦在探测晶体上。太赫兹辐射会使探测晶体 ZnTe 的折射率椭球发生变化, 场致双折射使得探测脉冲产生了一个轻微的椭圆极化。随后探测光被沃拉斯棱镜分成两束极化相互垂直的分量, 并利用差分探头接收信号。在小信号近似下, 探测到的两垂直分量的电流差正比于电光晶体处太赫兹电场的强度<sup>[23]</sup>。整个测量环境经过干燥处理, 湿度在 3% 以下。

实验所用的化学药品 (R)-(-)-Ibuprofen 和 (S)-(+)-Ibuprofen 来自上海麦克林生化科技股份有限公司, 纯度均大于 98%, 使用前未经过进一步纯化处理。实验时分别将两种手性的布洛芬与聚乙烯粉末以 4: 11 的质量比进行充分的研磨混合均匀, 用 10 Mpa 的压力持续压制 4 分钟成直径 13 mm, 厚度为 1.0~1.2 mm 的圆片。样品的分子式及实验压片如图 1(b) 所示, (R)-(-)-Ibuprofen 分子中最上面的 CH<sub>3</sub>-垂直直面向外, (S)-(+)-Ibuprofen 分子中的 CH<sub>3</sub>-垂直直面向内。

### 3.2 实验步骤

首先调整光束准直、激光脉宽来使系统达到最好的状态。将不同手性的布洛芬样品通过样品架放置于太赫兹波焦点处, 通过改变时间延迟线长度探测太赫兹时域谱。系统产生的太赫兹辐射为  $x$  偏振, 实验过程中需要改变太赫兹波的偏振态来得到样品对于不同偏振光的透过率差异, 利用线偏振状态下的透过率系数合成得到圆偏振光下的透过率系数。将每一组布洛芬样品做好标记, 进行产生路和探测路同偏振状态下的  $t_{xx}$  透过率测量; 然后将样品旋转 90° 进行  $t_{yy}$  透过率测量, 每组实验重复三次。对于产生路和探测路不

同偏振状态下的透过率测量, 在上述实验的基础上将探测晶体旋转 90°, 使得探测光的偏振状态发生改变来测量交叉偏振下的实验数据, 重复上述实验步骤并记录样品的太赫兹时域谱。

## 4 数据分析

将 THz-TDS 装置测到的时域谱进行傅里叶变换就可以得到对应的频率谱。系统的时域谱与频域谱如图 2 所示, 系统的频谱分辨率由测量窗口宽度的倒数决定, 实验测量的时间窗口是 20 ps, 对应的频谱分辨率为 50 GHz。系统的信噪比定义为信号峰峰值除以噪声峰峰值, 实验系统的信噪比达到 1050, 系统的有效谱宽为 0.1~2.6 THz。

通过将样品的频域谱与参考信号的频域谱相除得到线偏振态下的复透过率系数, 如图 3 所示。在同线偏振态下, R-Ibuprofen 的复透过率系数  $t_{yy}$  较  $t_{xx}$  高, 而 S-Ibuprofen 的复透过率系数  $t_{yy}$  较  $t_{xx}$  低, 两者呈现出不同的趋势, 但根据透射谱中吸收峰的位置并无法区分两种手性分子。虽然不同手性样品的线偏振透过率 ( $t_{yy}$  和  $t_{xx}$ ) 有些差异, 但是两者的区别比较小, 容易被样品制备的偶然性和系统无法避免的波动所影响, 极易混淆识别效果, 因此通过线偏振透过率直接达到的识别效果并不理想。

进一步再将线偏复透过率系数按照式 (2) 推导得到圆偏光下的透过率系数, 如图 4 所示, 与线偏振状态下不同, 同圆偏振状态下的两种手性分子之间透过率相差很小,  $t_{ll}$  和  $t_{rr}$  几乎重合, 无法识别; 而在交叉偏振状态下, 由于两种手性分子交叉偏振的透过率数值较小, 差异性得以明显地体现。R-Ibuprofen 的  $t_{rl}$  透过率具有较大数值, 而 S-Ibuprofen 的  $t_{lr}$  透过率具有较大的数值, 体现出明显的差异。

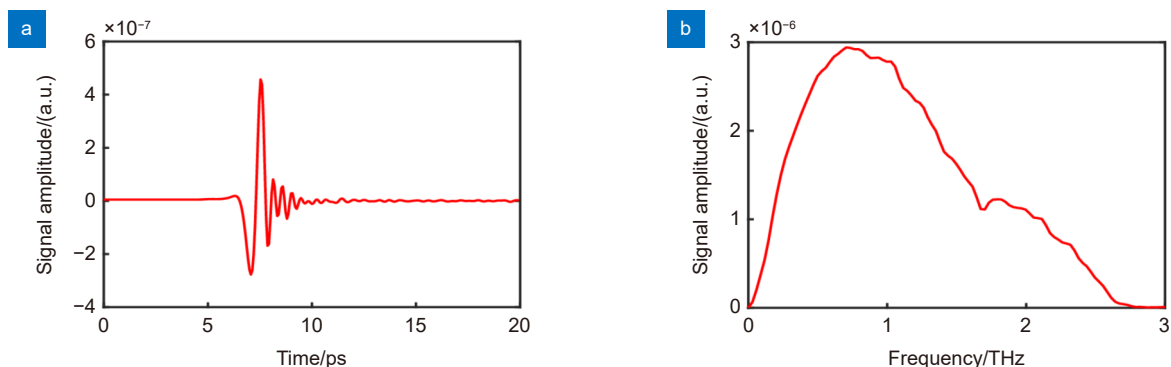


图 2 太赫兹时域光谱系统的 (a) 时域信号和 (b) 频域谱

Fig. 2 (a) Time domain signal and (b) frequency domain spectrum of the THz-TDS

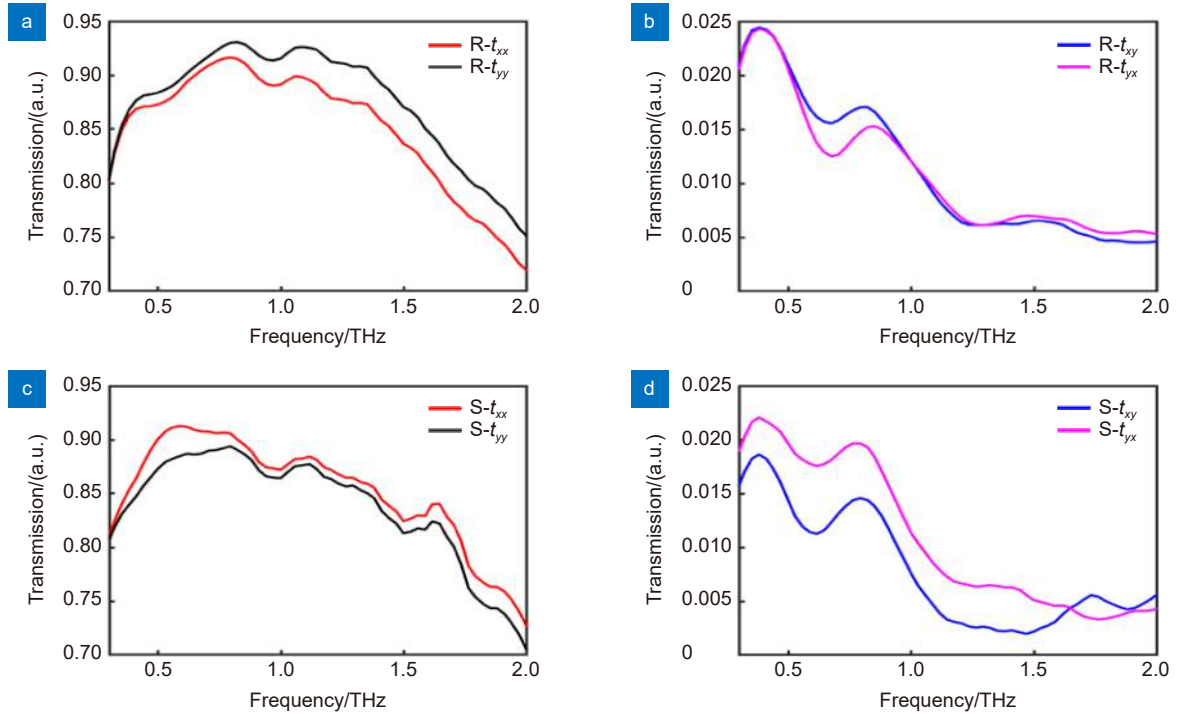


图 3 (R)-(-)-Ibuprofen 和 (S)-(+)-Ibuprofen 的线偏振透过率。(a) (R)-(-)-Ibuprofen 的同线偏透过率；(b) (R)-(-)-Ibuprofen 的交叉线偏透过率；(c) (S)-(+)-Ibuprofen 的同线偏透过率；(d) (S)-(+)-Ibuprofen 的交叉线偏透过率

Fig. 3 Transmittances of (R)-(-)-ibuprofen and (S)-(+)-ibuprofen for linear polarized terahertz wave. (a) Transmittances of (R)-(-)-ibuprofen for same linear polarization; (b) Transmittances of (R)-(-)-ibuprofen for cross linear polarization; (c) Transmittances of (S)-(+)-ibuprofen for same linear polarization; (d) Transmittance of (S)-(+)-ibuprofen for cross linear polarization

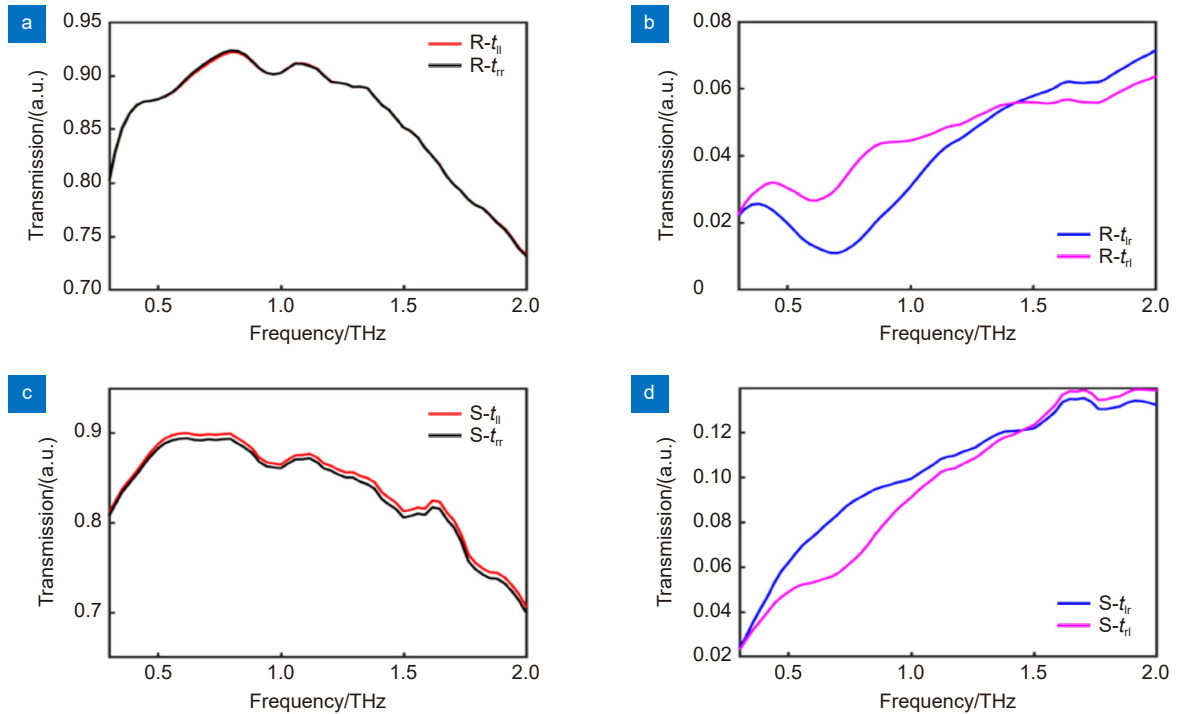


图 4 (R)-(-)-Ibuprofen 和 (S)-(+)-Ibuprofen 的圆偏振透过率。(a) (R)-(-)-Ibuprofen 的同圆偏透过率；(b) (R)-(-)-Ibuprofen 的交叉圆偏透过率；(c) (S)-(+)-Ibuprofen 的同圆偏透过率；(d) (S)-(+)-Ibuprofen 的交叉圆偏透过率

Fig. 4 Transmittances of (R)-(-)-ibuprofen and (S)-(+)-ibuprofen for circular polarized wave. (a) Transmittances of (R)-(-)-ibuprofen for same circular polarization; (b) Transmittance of (R)-(-)-ibuprofen for cross circular polarization; (c) Transmittance of (S)-(+)-ibuprofen for same circular polarization; (d) Transmittance of (S)-(+)-ibuprofen for cross circular polarization

将合成的圆偏振复透率代入式 (3), 就可以得到样品的圆二色性谱曲线。如图 5 所示, 两种手性分子的圆二色性曲线以 0 刻度线划分开来, 可以清晰地识别布洛芬分子手性。样品压片的过程中布洛芬的比例发生变化时, 压片的透过率整体会发生相同的变化, 在计算 CDT 值时由于透过率是等比例改变, 最后得到的 CDT 值不变。但是如果样品比例较小, 光谱测量的信噪比将变低, 会影响后续的数据处理。实验均重复多次测量, 重复性较好。

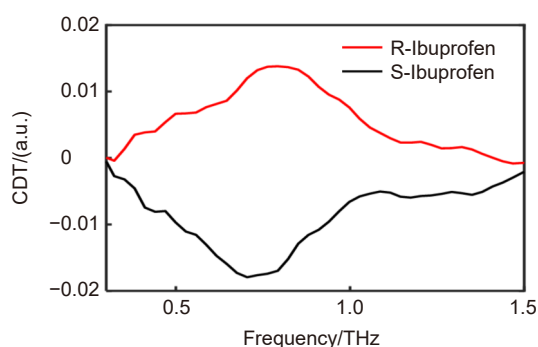


图 5 (R)-(-)-Ibuprofen 和 (S)-(+)-Ibuprofen 的太赫兹圆二色性光谱

Fig. 5 Terahertz CD spectra of (R)-(-)-Ibuprofen and (S)-(+)-Ibuprofen

实验中需要旋转样品和探测晶体来获得不同偏振下的光谱信息, 会带来一些误差。除了利用精确调整系统和多次测量的方法来减小误差外, 还可以结合超构表面设计, 进一步简化实验步骤或提高对手性物质的检测效果<sup>[24-25]</sup>。超构表面可以通过法诺共振和表面等离子体共振的激发, 增强结构的手性光学响应, 尤其是增强光与手性分子之间的相互作用。目前手性识别在可见和红外波段已有一些成熟的应用, Chen 等人在可见光波段引入了一个涉及手性的哈密顿量来定量评估两个共振态之间手性诱导的耦合强度, 并设计了一种结构来增强这种耦合, 可以大大增强圆二色性的信号<sup>[26]</sup>。Ali Asif 等人基于双原子策略设计和优化介电手性超纳米表面, 以增强近红外区的巨大手性效应, 并将其应用于 CD 光谱<sup>[27]</sup>。在太赫兹波段也可以利用超构表面进行手性识别, 通过高品质法诺共振和准连续域束缚态<sup>[28]</sup>的激发, 极大提高光场的局域强度, 提高手性识别的精度和灵敏度。此外, 还可以利用超构表面的调控功能, 实现左旋和右旋光的分离, 进一步简化实验步骤, 提高测试精度。

## 5 结论

利用太赫兹时域光谱系统在室温下测量了 (R)-(-)-Ibuprofen 和 (S)-(+)-Ibuprofen 的线偏振态下的太赫兹透射光谱, 利用线性琼斯矩阵元素合成了圆偏振下的琼斯矩阵, 并得到了两种样品在圆偏振下的复透率系数, 计算了两种样品的圆二色性光谱。实验结果表明, 在线偏振态下获得 (R)-(-)-Ibuprofen 和 (S)-(+)-Ibuprofen 的透射光谱区分度较低, 不利于样品手性的识别, 而样品的圆二色性曲线具有很好的区分度, 可以用于样品手性的区分。这一方法为利用太赫兹时域光谱技术检测和识别手性分子提供了参考。

## 参考文献

- [1] Wagnière G H. *On Chirality and the Universal Asymmetry: Reflections on Image and Mirror Image*[M]. Zürich: Verlag Helvetica Chimica Acta, 2007: 1–247.
- [2] Lan X, Deng Q R, Zhang W T, et al. Efficient chiral absorber based on twisted catenary structure[J]. *Opto-Electron Eng*, 2022, 49(10): 220157.  
蓝翔, 邓钦荣, 张汶婷, 等. 基于扭转悬链线结构的高效手性吸波器[J]. *光电工程*, 2022, 49(10): 220157.
- [3] Mason S F. *Optical Activity and Chiral Discrimination*[M]. Berlin: Springer, 2013: 1–372.
- [4] Blakemore C, Jennett S. *The Oxford Companion to the Body*[M]. Oxford: Oxford University Press, 2001: 76–78.
- [5] Shi W N, Fan F, Zhang Z Y, et al. Terahertz sensing for r/s chiral ibuprofen via all-dielectric metasurface with higher-order resonance[J]. *Appl Sci*, 2021, 11(19): 8892.
- [6] Zhang L Q, Li Y, Yang X H. Comparison of specific rotation detection of chiral medicine between circular dichroism spectrometer and polarimeter[J]. *Anal Instrument*, 2014, (6): 64–68.  
张林群, 李颖, 杨红晓. 圆二色光谱仪和旋光仪对手性药物比旋度测定的比较[J]. *分析仪器*, 2014, (6): 64–68.
- [7] Kumar P, Simon A, Kotov N A. Enantiomeric discrimination by chiral electromagnetic resonance enhancement[J]. *Chirality*, 2023, 35(10): 732–738.
- [8] Fan M K, Andrade G F S, Brolo A G. A review on the fabrication of substrates for surface enhanced Raman spectroscopy and their applications in analytical chemistry[J]. *Anal Chim Acta*, 2011, 693(1-2): 7–25.
- [9] Kong H J, Sun X P, Yang L, et al. Chirality detection by Raman spectroscopy: the case of enantioselective interactions between amino acids and polymer-modified chiral silica[J]. *Anal Chem*, 2020, 92(21): 14292–14296.
- [10] Lv C G, Zhou Z Q. Chiral HPLC separation and absolute configuration assignment of a series of new triazole compounds[J]. *J Sep Science*, 2011, 34(4): 363–370.
- [11] Yang X, Zhao X, Yang K, et al. Biomedical applications of terahertz spectroscopy and imaging[J]. *Trends Biotechnol*, 2016, 34(10): 810–824.
- [12] Chen Y X, Zhang F Y, Dang Z B, et al. Chiral detection of biomolecules based on reinforcement learning[J]. *Opto-Electron Sci*, 2023, 2(1): 220019.

- [13] Xu W T, Xie L J, Ying Y B. Mechanisms and applications of terahertz metamaterial sensing: a review[J]. *Nanoscale*, 2017, **9**(37): 13864–13878.
- [14] Seo M, Park H R. Terahertz biochemical molecule-specific sensors[J]. *Adv Opt Mater*, 2020, **8**(3): 1900662.
- [15] Li K X, Li D, Zhang Y. Terahertz spectral properties of 5-substituted uracils[J]. *Sensors*, 2021, **21**(24): 8292.
- [16] Zhang Z Y, Zhong C Z, Fan F, et al. Terahertz polarization and chirality sensing for amino acid solution based on chiral metasurface sensor[J]. *Sens Actuat B Chem*, 2020, **330**: 129315.
- [17] Wu Z P, Zhu Z J, Cheng C, et al. Terahertz spectroscopy of enantiomeric and racemic pyroglutamic acid[J]. *Spectrochim Acta Part A Mol Biomol Spectrosc*, 2020, **225**: 117509.
- [18] Bian Y J, Zhu Z Q, Zhang X, et al. Terahertz spectroscopy for quantitatively elucidating the crystal transformation of chiral histidine enantiomers to racemic compounds[J]. *Food Chem*, 2023, **406**: 135043.
- [19] Wang Z F, Peng Y, Shi C J, et al. Qualitative and quantitative recognition of chiral drugs based on terahertz spectroscopy[J]. *Analyst*, 2021, **146**(12): 3888–3898.
- [20] Liu J Y, Zhang T R, Tan Z Y, et al. Chiral enantiomer recognition of amino acids enhanced by terahertz spin beam separation based on a Pancharatnam-Berry metasurface[J]. *Opt Lett*, 2023, **48**(2): 440–443.
- [21] Shi W N, Wang Y M, Fan F, et al. THz enantiomers of drugs recognized by the polarization enhancement of gold nanoparticles on an asymmetric metasurface[J]. *Nanoscale*, 2023, **15**(34): 14146–14154.
- [22] Kim J, Yang Y, Badloe T, et al. Geometric and physical configurations of meta-atoms for advanced metasurface holography[J]. *InfoMat*, 2021, **3**(7): 739–754.
- [23] Hou C H, Zhu Y D, Li L J, et al. Optical parameter extraction and error analysis of terahertz time domain spectrum detection[J]. *Opto-Electron Eng*, 2018, **45**(2): 170534.  
侯春鹤, 朱运东, 李丽娟, 等. 太赫兹时域光谱技术的参数提取及其误差分析[J]. *光电工程*, 2018, **45**(2): 170534.
- [24] Li J T, Wang G C, Yue Z, et al. Dynamic phase assembled terahertz metalens for reversible conversion between linear polarization and arbitrary circular polarization[J]. *Opto-Electron Adv*, 2022, **5**(1): 210062.
- [25] Shi Z L, He J L, Wang J J, et al. Design of tunable circular dichroism extrinsic chiral metasurface based on phase change material GST[J]. *Opto-Electron Eng*, 2022, **49**(10): 220092.  
史卓琳, 贺景琳, 王金全, 等. 基于相变材料GST的圆二色性可调谐外在手征超表面设计[J]. *光电工程*, 2022, **49**(10): 220092.
- [26] Chen Y, Chen W J, Kong X H, et al. Can weak chirality induce strong coupling between resonant states?[J]. *Phys Rev Lett*, 2022, **128**(14): 146102.
- [27] Ali A, Khaliq H S, Asad A, et al. Dielectric chiral metasurfaces for enhanced circular dichroism spectroscopy at near infrared regime[J]. *RSC Adv*, 2023, **13**(30): 20958–20965.
- [28] Hu W D, Du X, Liu S Y, et al. Optofluidic refractometric sensor based on quasi-bound states in the continuum in all-dielectric metasurface[J]. *Opto-Electron Eng*, 2023, **50**(9): 230124.  
胡维东, 杜响, 刘思玉, 等. 基于准连续域束缚态介质超表面的光微流折射率传感研究[J]. *光电工程*, 2023, **50**(9): 230124.

## 作者简介



纪旭洋(2000-), 男, 硕士研究生, 主要从事太赫兹技术和超材料方向研究。

E-mail: jxy15630932309@163.com



【通信作者】张岩(1972-), 男, 首都师范大学物理系教授, 博士生导师, 主要研究方向为太赫兹光电子学、微纳光学、光学信息处理等, 在 *Nature Photonics*、*Light: Science & Application* 等期刊上发表论文 300 余篇。

E-mail: yzhang@cnu.edu.cn

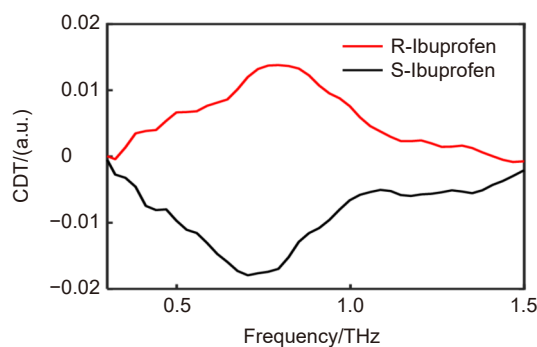


扫描二维码, 获取PDF全文



# Recognition of chiral substances by terahertz circular dichroism

Ji Xuyang, Sun Shuang, Zhang Yan\*



CD spectra of (R)-(-)-ibuprofen and (S)-(+)-ibuprofen

**Overview:** Chiral molecules are defined as materials that have chiral centers, also referred to as asymmetric centers in chemical structure. Biomolecules with different chirality exhibit distinct or even opposing biological and pharmacological effects, even when their structural groups are the same. Chirality detection and recognition have long been a significant issue in the realm of life sciences. Circular dichroism, a method of identifying chiral substances, is produced when left- and right-handed circularly polarized light are absorbed differently by different chiral molecules. This results in different amplitudes of circularly polarized light passing through different rotations. Currently, available techniques for detecting chiral drugs include high performance liquid chromatography, chiral Raman spectroscopy, nuclear magnetic resonance spectroscopy, and polarimeter detection; nevertheless, there are drawbacks, such as costly and difficult-to-use procedures. The terahertz spectroscopy technique becomes an excellent way to identify biological macromolecules since many of them have vibrational and rotational energy levels that fall in the terahertz range. Currently, linearly polarized light sources are used in the terahertz time-domain spectroscopy system, which is unable to detect chiral compounds. Theoretically, we can synthesize the Jones matrix under circular polarization using the Jones matrix model of linear polarization. We can then determine the circular dichroism spectrum of the sample based on the transmission difference of circular polarization light. This approach offers a useful way to characterize various chiral molecules. By rotating the crystal and the experimental sample through four measurements, the time-domain spectra under various polarization states are obtained based on the transmitted-terahertz time-domain spectroscopy system. The Jones matrix of the sample online polarization space is obtained, which is then converted into the circular polarization space. The circular polarization space's Jones matrix component is utilized to compute the sample's circular dichroism (CD) spectrum. This study presents the measurement of the spectra of (R)-(-)-Ibuprofen and (S)-(+)-Ibuprofen, together with the calculation of their linear and circular bias transmittances. The circular dichroism spectra of the two chiral substances are calculated, and the circular dichroism values of the two chiral substances reach 0.015, which effectively realizes the recognition effect of (R)-(-)-Ibuprofen and (S)-(+)-Ibuprofen. This work provides a reference for the following chiral recognition in the terahertz band by using the superstructure surface and improving the local intensity of the light field through high-quality resonance to improve the accuracy and sensitivity of chiral recognition.

Ji X Y, Sun S, Zhang Y. Recognition of chiral substances by terahertz circular dichroism[J]. *Opto-Electron Eng*, 2024, 51(5): 240005; DOI: 10.12086/oe.2024.240005

Foundation item: Project supported by R&D Program of Beijing Municipal Education Commission (KZ20231123226)

Beijing Key Laboratory of Metamaterials and Devices, Key Laboratory of Terahertz Optoelectronics of Ministry of Education, Department of Physics, Capital Normal University, Beijing 100048, China

\* E-mail: yzhang@cnu.edu.cn