

複素屈折率解析のための共役勾配法

Conjugate gradient method for complex refractive index analysis

日邦プレシジョン株式会社 ○澤田 健, 岩本 敏志, 佐藤 幸徳

Nippo Precision Co. Ltd., ○Takeshi Sawada, Toshiyuki Iwamoto, Yukinori Sato

E-mail: takeshi.sawada@pnp.co.jp

テラヘルツ時間領域分光法(THz-TDS)は、測定対象の複素屈折率を直接的に求めることができる有力な手法である。このときのデータ解析には、これまでニュートン法やシンプレックス法などの最適化手法が用いられてきた。一般的にこれらの手法は、変数の規模が小規模、または、中規模な無制約最適化問題に対する非常に有効な方法であるが、問題が大規模な場合、記憶容量と計算量の関係上、直接適用できないことがある。近年のパーソナルコンピュータの高性能化と CPU のマルチコア化に伴う並列処理の一般化という環境的観点、及び解析の高効率化という実用的観点から、複素屈折率解析における任意規模行列の並列処理は、将来適用が望まれると考えられる。このような背景から、並列処理化に対応した大規模行列にも適用可能な複素屈折率解析アルゴリズムの検討を始めた。

現在、代表的な大規模疎行列の解法は、共役勾配法に類した反復解法の一環である。その代表格である共役勾配法は、行列の条件が整えば大規模疎行列の反復解法として、もっとも有効な解法であると広く認知されている。そこで、系として単層膜を設定し、その単位規模行列に対する共役勾配法による複素屈折率解析アルゴリズムの検討を行った。

基本となる線形方程式は、解析を複雑にする多重反射項をアルゴリズム上、簡単な演算で除外できるようにし、複素屈折率を $n - ik$ とした多重反射項を含まないモデル関数、 $\rho(\omega)\exp[-i\varphi(\omega)]$ を用いて、次式とした。

$$\mathbf{a}(\mathbf{n}, \mathbf{k}, \omega)^T \mathbf{a}(\mathbf{n}, \mathbf{k}, \omega) \begin{pmatrix} n - n_{\text{true}} \\ k - k_{\text{true}} \end{pmatrix} = \mathbf{a}(\mathbf{n}, \mathbf{k}, \omega)^T \mathbf{r}(\mathbf{n}, \mathbf{k}, \omega)$$

ここで、上付きの T は、行列の転置を示し、 $\mathbf{r}(\mathbf{n}, \mathbf{k}, \omega)$ は、測定値からある時点での近似値を用いた多重反射を含むモデル関数値を引いた残差行列を示している。また、 $\mathbf{a}(\mathbf{n}, \mathbf{k}, \omega)$ は多重反射を含まないモデル関数の微分行列で

$$\mathbf{a}(\mathbf{n}, \mathbf{k}, \omega) = \begin{pmatrix} \frac{\partial \ln[\rho(\mathbf{n}, \mathbf{k}, \omega)]}{\partial n} & \frac{\partial \ln[\rho(\mathbf{n}, \mathbf{k}, \omega)]}{\partial k} \\ \frac{\partial \varphi(\mathbf{n}, \mathbf{k}, \omega)}{\partial n} & \frac{\partial \varphi(\mathbf{n}, \mathbf{k}, \omega)}{\partial k} \end{pmatrix}$$

を示している。この式より、共役勾配法による複素屈折率解析の基本アルゴリズムを構築した。実データに対する構築したアルゴリズムのテストは、従来どおりの走査型の解析プログラムを作成し実行した。Si wafer の測定データに対する解析結果を図 1 に示す。

講演では、その他の物質データに対する解析結果についても合わせて報告する予定である。

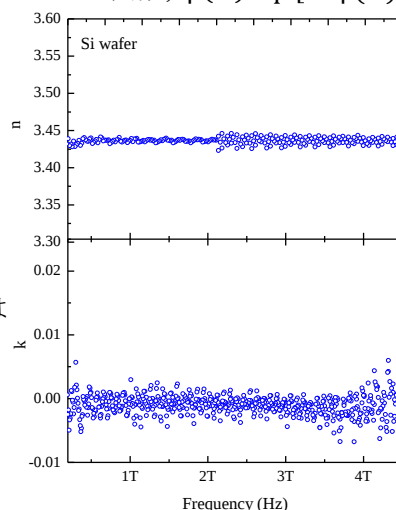


図1 テストプログラムによる解析結果