時間領域分光データのfitting計算上の留意点

【研究ノート】

時間領域分光データのfitting計算上の留意点

森川 治[1], 藤田 正実[2], 萩行 正憲[3]

Notes on Fitting Calculations Using Time-Domain Spectroscopic Data

Osamu Morikawa[1], Masami Fujita[2], and Masanori Hangyo[3]

Abstract

The electromagnetic (EM) responses of the free carriers in Si wafers are known to have characteristic dispersion in the sub-THz region and to be well described by the Cole-Davidson (C-D) model. The EM responses of a Si wafer in the sub-THz region are experimentally measured by the time-domain spectroscopic method (TDS). From the EM response, the model parameters are determined by the fitting calculation, which can be performed both in the time domain and the frequency domain because the data in these two domains can easily be transformed into each other by the Fourier (inverse-Fourier) transformation. In this report we investigate whether the calculation should be performed in the time domain or the frequency domain for the data obtained by the TDS employing a multimode laser diode (MLD-TDS) and show that the frequency-domain calculation is preferable.

Keywords: MLD-TDS, fitting calculation, Fourier transformation, Cole-Davidson model

1 はじめに

Siは半導体材料としてひろく使われており、その特性評価は重要である。Si中の自由キャリアの電磁応答は1THz(10^{12}Hz)近辺または数百GHz程度の領域に特徴的な分散を持つことが分かっており、近似的にはDrudeモデル[1)]、より精密にはCole-Davidson (C-D)モデル[2)]により良く記述されることが分かっている。Cole-Davidsonモデルの場合、比誘電率は

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_\infty + i\frac{ne^2}{m\omega\varepsilon_0}\frac{\tau}{(1-i\omega\tau)^\beta} \tag{1}$$

のように計算される。ここで$\varepsilon_\infty = 11.7$は束縛電子からの比誘電率への寄与[2)]、$n$はキャリア濃度、$e$は素電荷、$m$はキャリアの有効質量(n型Siの場合、電子の真空中の静止質量の0.26倍)[1)]、ωは角周波数、ε_0は真空の誘電率、τはキャリアの散乱時間、βはC-D分数指数であり、$\beta = 1$の場合にC-DモデルはDrudeモデルに一致する。10^{16}cm^{-3}以下のキャリア濃度のn型Siでは電子移動度がμ = 1500cm^2/V・s (一定値)[3)]であることからτ = 0.2 ps (一定値)となるので、低濃度n型Siに関して試料に固有のパラメタはDrudeモデルの場合にはnのみ、C-Dモデルの場合はn、βの2つである。これらのパラメタが決定できればDC付近から1THz以上の広い周波数域にわたってSiの電磁応答を予測することができる。特にDrudeモデルを適用した場合には、たとえば四端子測定法により抵抗率を測定すればキャリア濃度nを求めることができる。しかし、金属探針を接触させると金属汚染の可能性があるため、非接触的な測定が望ましい。周波数が1THz前後の電磁波(THz波)を用いた分光的な測定法を用いれば、非接触的にパラメタを求めることができるはずである。

THz波の分光装置としては、短パルスレーザ光を用いたテラヘルツ時間領域分光法(THz-TDS)が有力な手法である[1),4),5),6)]。しかし、短パルスレーザは高価格の装置であり、装置のコストを押し上げてしまうことから、著者

Received November 15, 2012
[1] 海上保安大学校　morikawa@jcga.ac.jp
[2] 海上保安大学校　fujita@jcga.ac.jp
[3] 大阪大学レーザーエネルギー学研究センター　hangyo@ile.osaka-u.ac.jp

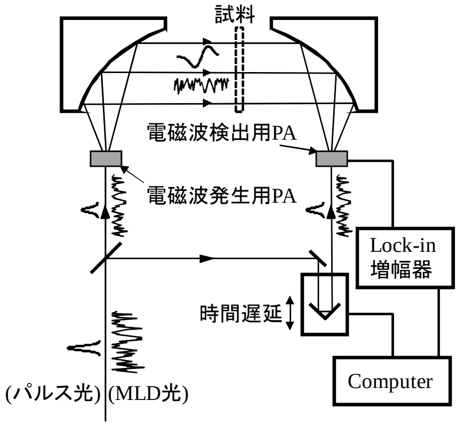

図1 レーザ光と光伝導アンテナ(**PA**)を用いた**THz**電磁波分光器。レーザ光としてパルス光を用いた場合が**THz-TDS**、マルチモード半導体レーザ(**MLD**)の強度雑音を含む光を用いた場合が**MLD-TDS**に対応。

らは代わりに安価な市販の連続波(continuous wave、CW)マルチモード半導体レーザ(MLD)を使用することを提案した(MLD-TDS、poor mans' TDS)[6),7),8),9)]。図1に光伝導アンテナ(photoconductive antenna、PA)を用いたTHz-TDSやMLD-TDSの構成を示す。短パルスレーザ光やMLD光を分割し、一方を電磁波発生用PAに照射してTHz電磁波を発生させる。分割された他方のレーザ光は時間遅延を通過後に電磁波検出用PAに照射される。検出用PAには同時にTHz電磁波も照射される。これにより検出用PAに電流が生じるので、これをモニターしながら時間遅延を走査することによって時間波形信号が得られる。このような信号を、電磁波経路に試料を入れた場合と入れない場合で測定し(透過データと参照データ)、Fourier成分を比較すれば試料の透過率・位相シフトを調べることができる。

図2にMLD-TDSによる参照データの時間波形の測定例とその振幅スペクトルを示す。図2(a)の横軸は遅延時間である。MLD-TDSによる時間領域の信号では、相似形の構造がほぼ一様の振幅でくりかえされ、スペクトルは離散的な線スペクトルのみからなる。PA照射に用いる光をシングルモード光ファイバやスペイシャルフィルタに通すことによりスペクトルは連続化できるものの[6),10),11)]、Siウェハのように透過係数に急峻な構造を持たない試料の評価には離散的なスペクトルでも問題ないと考えられる。以下では離散的なスペクトルのMLD-TDSによるSiウェハのパラメタの決定法について考察する。

分光的な手法でパラメタを決定する場合、試料の厚さも透過係数に大きな影響を与えるので試料厚さも決定される。試料の厚さの評価のアルゴリズムについてはパルス光を用いたTHz-TDSに関する報告[12),13),14)]があるものの、透過データの時間波形に生じる離散的なピークを

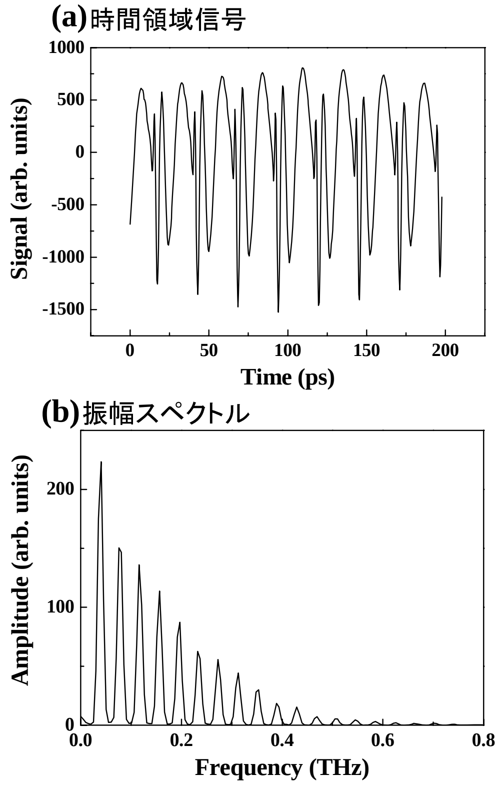

図2 MLD-TDSによる**(a)**時間領域信号と**(b)**振幅スペクトルの実測例。図**1**にて**MLD**光を使用し試料なしとした配置で測定したもの。信号が存在する周波数域のみを示している。スペクトルの計算には窓関数を用いた。

切り出して比較する過程が含まれている。MLD-TDS信号の場合には、図2(a)に示されるように信号はパルスではなく測定された信号の全域に広がっているため、ピークを切り出すようなことはできずこのような方法は適用できない。MLD-TDSを用いたパラメタの決定は、実験的に求められたsub-THz域の電磁波透過率・位相シフトと、さまざまなパラメタ値に基づいてC-Dモデルから計算された電磁応答を比較し、もっともよく一致するようなパラメタの値を求めるという作業になる(fitting計算)。fitting計算の際に必要となる一致度の評価法にはいくつかのやり方が考えられる。本稿ではそれらを比較し、MLD-TDSによるSiウェハ評価に最も適した方法はどれかを考察する。

2 パラメタ決定(fitting計算)の方法

fittingの具体的な計算は以下のようになる。Siウェハの比透磁率はほぼ1と見なせるので複素屈折率$n_C(n,\beta,\omega)$は

$$n_C(n,\beta,\omega)=\sqrt{\varepsilon(n,\beta,\omega)} \tag{2}$$

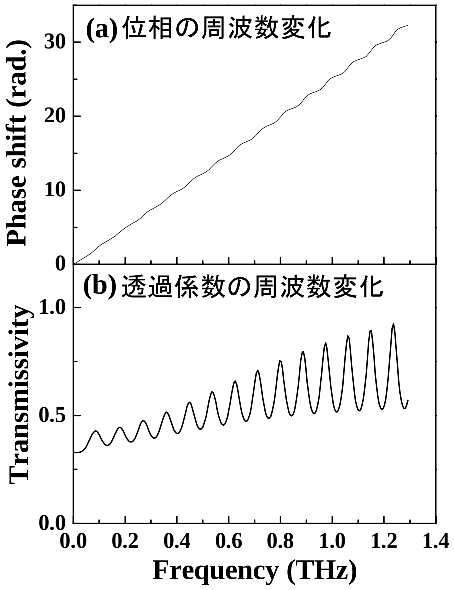

図3 $(d, n, \beta) = (0.5\mathrm{mm}, 10^{15}\ \mathrm{cm}^{-3}, 1.4)$ として(3)式から計算された、複素透過係数の(a)位相と(b)振幅。

のように表される。ここで$\varepsilon(n,\beta,\omega)$は(1)式で表される比誘電率であり、$\omega$だけでなく$n$、$\beta$にもよるので引数を増やして表記した。Siウェハの厚さをdとすると、複素透過係数$t_C(d,n,\beta,\omega)$は

$$t_C(d,n,\beta,\omega)=\frac{\dfrac{4n_C(n,\beta,\omega)}{\{1+n_C(n,\beta,\omega)\}^2}\exp\left[i\{n_C(n,\beta,\omega)-1\}\dfrac{\omega}{c}d\right]}{1-\left\{\dfrac{1-n_C(n,\beta,\omega)}{1+n_C(n,\beta,\omega)}\right\}^2\exp\left[2in_C(n,\beta,\omega)\dfrac{\omega}{c}d\right]} \tag{3}$$

のように、n、βに加えて厚さdもパラメタとする表式となる(cは光速)[15]。$(d, n, \beta) = (0.5\mathrm{mm}, 10^{15}\ \mathrm{cm}^{-3}, 1.4)$とした場合の複素透過係数を図3に示す。これに対して実験的に複素透過率を求めるには図1にてMLD光を使用し電磁波経路に試料を入れないで測定した時間波形$R_t(t_i)$ (参照データ)と試料を入れて測定した時間波形$S_t(t_i)$ (透過データ)とを比較して計算される。$R_t(t_i)$、$S_t(t_i)$のFouier変換結果を$R_\omega(\omega_j)$、$S_\omega(\omega_j)$と書くと、実験的に求めた複素透過係数は$S_\omega(\omega_j)/R_\omega(\omega_j)$と書ける。また、実験的に求めたインパルス応答を$a_{RS}(t_i)$と書くと、

$$S_t(t_i)=\sum_{i_0}R_t(t_i-t_{i_0})a_{RS}(t_{i_0}) \tag{4}$$

という関係がある。これに対して(3)式をFourier逆変換して求められるインパルス応答を$a_{C\text{-}D}(d, n, \beta, t)$と書くことにする。(3)式と$S_\omega(\omega_j)/R_\omega(\omega_j)$、または$a_{C\text{-}D}(d, n, \beta, t)$と$a_{RS}(t_i)$が一致するように各パラメタを決定すれば(fitting計算)、キャリア濃度n、C-D分数指数βに加えて厚さdも非接触的に求められることになる。前者は周波数領域での、後者は時間領域でのfitting計算である。

このようにfitting計算は時間領域データを用いても周波数領域データを用いても計算できる。ただし、計算機上で行われるFourier変換(逆変換)の計算には注意が必要である。計算機上で行われる離散Fourier変換・逆変換では有限の長さの離散的なデータに対しての計算になるため、同じデータが周期的に繰り返されるという仮定に基づいた計算になっており、データの両端の値に食い違いがあれば変換結果にノイズ(以下、「変換ノイズ」)が生じる。MLD-TDSでは時間領域データの端まで信号が0ではないので[図2(a)]、これをFourier変換するとこの変換ノイズが生じる。また、$t_C(d, n, \beta, \omega)$も高周波に至るまで有限の値をとるため、離散Fourier逆変換の際に変換ノイズが生じる。対策としては、窓関数(データ列の中心で値が大きく、両端で0に漸近する関数)をデータに乗じて両端付近の値をほぼ0にしてから変換することにより変換ノイズを抑えるという方法が知られている。

fitting計算ではC-Dモデルを基にd、n、βの関数として計算されたデータと実験データを比較する。それらの一致度を評価するため、各周波数または各時間における差の2乗の合計(残差の2乗和)を求め、これをなるべく小さくするようにd、n、βを決定することになる。

残差の2乗和を時間領域で計算する場合には、以下に記述するように離散Fourier逆変換において生じるノイズの影響が現れる可能性がある。まず、$R_t(t_i)$と$S_t(t_i)$からインパルス応答$a_{RS}(t_i)$を求め、C-Dモデルによるインパルス応答$a_{C\text{-}D}(d, n, \beta, t_i)$と比較するという方法が考えられる。しかし、$a_{RS}(t_i)$を求める計算は、計算機の負荷が大きく、$a_{RS}(t_i)$にも大きなノイズが入ってしまう。そこで代わりに$R_t(t_i)$と$a_{C\text{-}D}(d, n, \beta, t_i)$のたたみこみ

$$S_{calc}(d,n,\beta,t_i)=\sum_{i_0}R_t(t_i-t_{i_0})a_{C-D}(d,n,\beta,t_{i_0}) \tag{5}$$

と$S_t(t_i)$を比較し、残差の2乗和

$$\Delta_t(d,n,\beta)=\sum_i\left|S_{calc}(t_i)-S_t(d,n,\beta,t_i)\right|^2 \tag{6}$$

を最小とするようなd、n、βを決定すればよい。(5)式の計算の際には負のt_iに対する$R_t(t_i)$の値が必要になるので、$R_t(t_i)$のデータセットを周期的に並べて使用する。$a_{C\text{-}D}(d, n, \beta, t_i)$は$t_C(d, n, \beta, \omega_j)$ [(3)式]を離散Fourier逆変換することによって得られる。ここで、$t_C(d, n, \beta, \omega_j)$ [(3)式]は実部・虚部とも高周波域まで0ではないため、周期的にデータを並べると高周波端において食い違いが生じ、離散Fourier逆

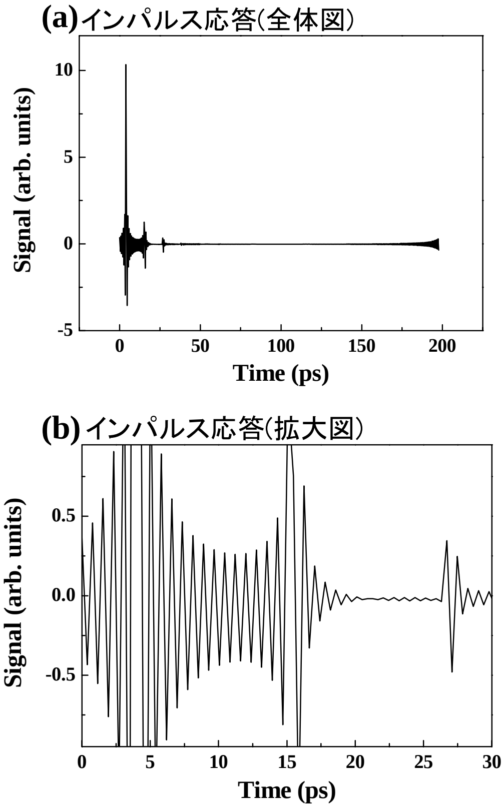

図4 インパルス応答(図3のデータを離散Fourier逆変換したもの)。(a)全体図、(b)拡大図。

変換によって求めた$a_{C\text{-}D}(d, n, \beta, t_i)$には変換ノイズが生じる。図4に$(d, n, \beta)$ = (0.5mm, 10^{15} cm^{-3}, 1.4)とした場合の計算例を示す。パルス状のピークの足元付近に、一点ごとに正負が入れ替わるノイズ状の構造が生じていることが分かる[図4(b)]。窓関数を使用すれば変換ノイズを避けることができるものの、透過係数の周波数依存性を大きくひずませてしまうことから使用は不適当であり、変換ノイズは避けられない。この問題は、実験データ$R_t(t_i)$を取得する際に時間ピッチを小さめに設定し、ナイキスト周波数を信号に含まれる最高周波数成分の2倍以上にすることによって避けることができる。つまり$R_t(t_i)$には比較的低周波成分しか含まれていないので、(6)式のたたみこみ計算の際に「変換ノイズ」は滑らかにされ、問題にならなくなる。

他方、残差の2乗和を周波数領域で計算する場合には、以下に記述するようにノイズが増幅されない計算法を採用するべきである。また、窓関数の使用により計算結果に影響が生じる可能性がある。まず、実験的に求めた複素透過係数$S_\omega(\omega_j)/R_\omega(\omega_j)$を$t_C(d, n, \beta, \omega_j)$と比較するという方法が考えられる。しかし、信号が弱いスペクトル域では$R_\omega(\omega_j)$も$S_\omega(\omega_j)$もほとんどノイズだけとなってしまい、$S_\omega(\omega_j)/R_\omega(\omega_j)$はノイズの比となり、特に$R_\omega(\omega_j)$がほぼ0の領域ではノイズが大きく増幅されてしまう。そこで代わりに$R_\omega(\omega_j)$と$t_C(d, n, \beta, \omega_j)$の積と$S_\omega(\omega_j)$とを比較し残差の2乗和

$$\Delta_f(d,n,\beta) = \sum_j \left| R_\omega(\omega_j) t_C(d,n,\beta,\omega_j) - S_\omega(\omega_j) \right|^2 \quad (7)$$

を最小とするようなd、n、βを決定すればよい。ここで、$R_\omega(\omega_j)$と$S_\omega(\omega_j)$を計算する際には上述のように変換ノイズが入るので窓関数を使用することになり、スペクトル線の幅が広がる。しかし後述するように、窓関数により$R_\omega(\omega_j)$、$S_\omega(\omega_j)$の中のスペクトル線の幅が幾分か太くなっても、d、n、βの値に大きな影響は出ない。このことは、C-Dモデルから得られる透過係数のスペクトルはなだらかであり、さほど急峻な構造はない(図3)ことが原因と考えられる。

このように、残差の2乗和を時間領域や周波数領域で評価することについてはそれぞれに事情があるものの、信号やノイズの生じ方について以下のような2つの事情を考慮すると周波数領域で残差の2乗和を見積もる方がd、n、βの評価に有利と期待されることがわかる。第一に、時間領域データの測定の際に生じるノイズ(測定ノイズ)については、信号強度にはほとんどよらないことが分かっており[16]、測定ノイズは検出用光伝導アンテナの中で生じているものと考えられる。このことから測定ノイズは時間領域データでも周波数領域データでも全域に一様に広がっているものと考えられる。これに対して信号は、時間領域では全域にわたって広がっているものの、周波数領域では低周波域に離散的な線スペクトルが存在するのみである(図2)[9),10),11)]。第二に、離散Fourier変換については、

$$\frac{1}{N} \sum_j \exp\{ i\omega_j (t_i - t_{i'}) \} = \delta_{i,i'} \quad (8a)$$

$$\frac{1}{N} \sum_i \exp\{ i(\omega_j - \omega_{j'}) t_i \} = \delta_{j,j'} \quad (8b)$$

という関係がある。ここでNはデータ点数、$\delta_{i,i'}$と$\delta_{j,j'}$はクロネッカーのδである。このことに注意して計算すると

$$\begin{aligned} &\sum_i \left| S_{calc}(t_i) - S_t(d,n,\beta,t_i) \right|^2 \\ &= \sum_j \left| R_\omega(\omega_j) t_C(d,n,\beta,\omega_j) - S_\omega(\omega_j) \right|^2 \end{aligned} \quad (9)$$

であることを示すことができる。つまり、残差の2乗和は時間領域全域で計算しても周波数領域全域で計算しても同じ値になる。これら2つのことから、信号の存在する周波数域のみで和をとれば、残差の2乗和の信号対雑音

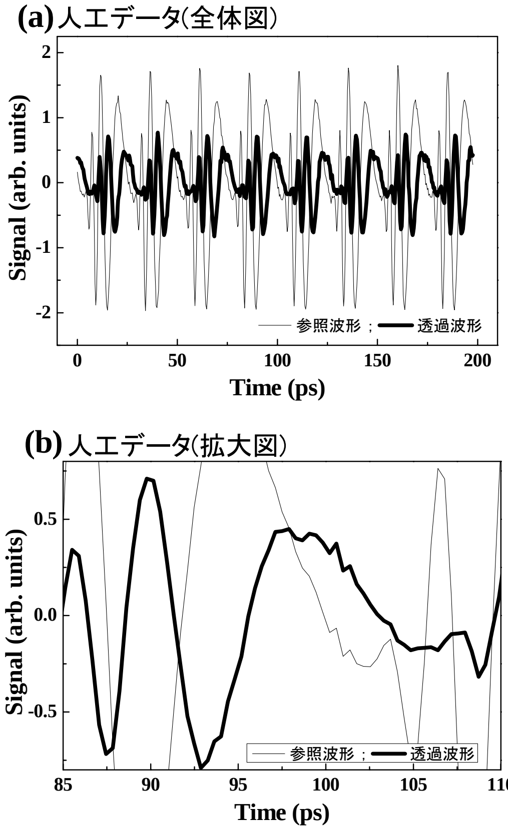

図5 計算に用いたノイズ入りの人工データ$R_t(t_i)$および$S_t(t_i)$。(a)全体図,(b)拡大図。

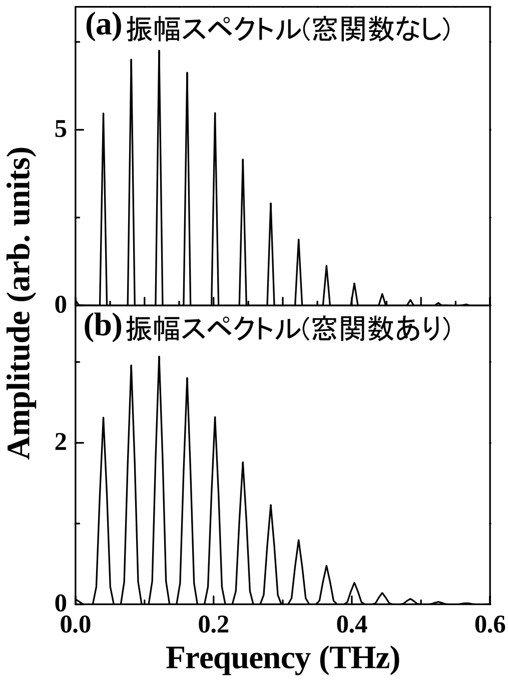

図6 (a)窓関数を用いずに求めた参照データ(ノイズなし)$R_{t0}(t_i)$の振幅スペクトル、(b)窓関数を用いて求めた振幅スペクトル。

比を高められることが分かる。つまり、和をとる範囲を信号の存在する周波数域のみに限定しても残差の2乗和に対する信号の影響は変わらないのに対し、雑音の影響は小さくなる(雑音しか存在しない高周波数領域が計算に入らない)。これにより、d、n、βの推定の信頼性を高めることができると予測される。

3　計算機による実験

以下では、残差の2乗和の計算は時間領域で行うよりも、周波数領域のうち信号が存在する領域に限定して行った方がd、n、βの推定の信頼性が本当に高まるのかどうかを確認する。そのために、MLD-TDSのデータのように同じ構造が周期的に繰り返される人工の参照データの時間波形を作成し、さらにd、n、βの値を定めて人工の透過データの時間波形を作成する。これら2つの時間波形に乱数によるノイズを付加してからfitting計算を行い、決定されるd、n、βの値がデータ作成に用いた値とどの程度一致するのかを確認する。なお、以下では時間領域の人工データを「時間波形」と呼び、これを離散Fourier変換して周波数領域のデータとしたものを「複素スペクトル」と呼ぶことにする。

計算には図5のようなデータを用いた。まず、現実のMLD-TDS (図2)のように時間領域(0~198ps、時間刻みは0.387ps、512点)で周期的に同じ構造が繰り返される形状の参照データの時間波形(ノイズなし)$R_{t0}(t_i)$を作成した。このとき繰り返し周期はデータの全長のちょうど1/8とした。仮想的な試料として厚さ$d = 0.5$mm、キャリア濃度$n = 10^{15}$ cm^{-3}、C-D分数指数$\beta = 1.4$として透過係数$t_{CD}(\omega_j)$を計算した(図3、図4；0~1.29THzの範囲で周波数刻みは5.05GHz、256点)。透過データ$S_{t0}(t_i)$は次のようにして作成した。参照データの時間波形$R_{t0}(t_i)$を離散Fourier変換して複素スペクトル$R_{\omega 0}(\omega_j)$に直し、透過係数$t_C(\omega_j)$を乗じて透過データの複素スペクトル(ノイズなし) $S_{\omega 0}(\omega_j) = t_C(\omega_j)R_{\omega 0}(\omega_j)$を作成し、さらにこれを離散Fourier逆変換して透過データの時間波形(ノイズなし) $S_{t0}(t_i)$を作成した。このようにして作成した参照データ(ノイズなし)$R_{t0}(t_i)$、透過データ(ノイズなし)$S_{t0}(t_i)$に対し、平均0、標準偏差0.03の正規分布乱数をノイズとして加えて参照データの時間波形$R_t(t_i)$および透過データの時間波形$S_t(t_i)$を作成し、fitting計算に用いた(図5)。なお、透過データ作成の計算の際、離散Fourier変換・逆変換には窓関数は用いなかった。参照データの時間波形$R_{t0}(t_i)$や透過データの時間波形$S_{t0}(t_i)$のデータ長は周期の整数倍なので、データの端まで信号が存在するとはいえ例外的に窓関数を用いなくても変換ノイズは生じなかった。図6(a)に参照データの時間波形$R_{t0}(t_i)$を窓関数なしで離散Fourier変換することによって求めた振幅スペクトルを示す。スペクトル線は単一の周波数点のみを含み、変換ノイズは見られない。なお、図6(b)に窓関数を用いた場合の振幅スペクトルを示

表1 fitting計算によるパラメタ推定値。Aは時間領域、B～Eは周波数領域での計算。「点数」は残差の2乗和の合計の計算に用いたデータ点の数。

残差の2乗和の計算領域	点数	d[mm]	n[$\times10^{14}$cm^{-3}]	β
A. 時間領域全域(0~198ps)	512	0.49442	9.871	0.9809
B. 周波数領域全域(0~1.29THz)・窓関数なし	256	0.49437	9.870	0.9777
C. スペクトル線位置のみ・窓関数なし(※1)	12	0.49946	9.979	1.3567
D. 低周波領域のみ(25.2~505GHz)・窓関数なし	96	0.49939	9.980	1.3481
E. 低周波領域のみ(25.2~505GHz)・窓関数あり	96	0.49900	10.174	1.3371

※1 スペクトル線の位置(12か所、{1~12}×40.4 GHz)についてのみ残差の2乗和を計算。

す。窓関数により、スペクトル線幅が広がっていることが示されている。

fitting計算ではパラメタの値の組(d, n, β)を少しずつ変化させ、残差の2乗和をなるべく小さくする(d, n, β)を求めた(simplex法)。また残差の2乗和の計算は、時間波形を用いる場合は時間領域全体(0~198ps)について、複素スペクトルを用いる場合には周波数領域全体(0~1.29THz)もしくは一部について行った。

4 結果と考察

表1にfitting計算により求めたパラメタ値の一覧を示す。前述のように残差の2乗和の合計は時間領域全体で計算しても周波数領域全体で計算しても同じであることを反映し、時間領域全域または周波数領域全域で残差の2乗和を計算した場合は両方とも求められたパラメタはほぼ同じ値となっている(表1-A、B)。ただし、小さいとはいえ両者の間には差があるため、(9)式が成り立ってはいないことになる。これは、時間領域での残差の2乗和の計算にはたたみこみ計算の際に多数の「和の計算」が入るため[(5)式、(6)式]、情報落ちが生じていることが原因と考えられる。

次に、周波数領域での計算において、残差の2乗和をとる範囲を限定することにより生じる効果を確認した。まず周波数領域全域で残差の2乗和を計算した場合(表1-B)は、求められたパラメタ値は(d, n, β) ≈ (0.4944mm, 9.871×10^{14} cm^{-3}, 0.98)となっており、データ作成で設定した値(d, n, β) = (0.5mm, 10^{15} cm^{-3}, 1.4)に対して異なる値が得られている。特にβは約0.98と、データ作成で設定した値1.4と比較して大きく異なっている。これに対して、周波数領域のうちスペクトル成分が存在する領域(25.2~505GHzの低周波域全体、または25.2~505GHzのうちスペクトル線が存在する12個の周波数点)に限って残差の2乗和の計算を計算した場合には(表1-C、D、E)、求められたパラメタ値は(d, n, β) ≈ (0.499mm, $(9.98\sim10.17)\times10^{14}$ cm^{-3}, 1.34~1.36)と、データ作成で設定した値により近い値が求められている(特にβ)。中でもスペクトル線の位置のみで残差の2乗和を計算した場合に最も好ましい結果が出ている(表1-C)。このことは、信号対雑音比を高くするため残差の2乗和の計算は周波数領域データを用い、スペクトル成分の存在する領域のみで行う方が好ましいことを示している。なお、MLD-TDSとは異なり、Siウェハのような試料の透過を、パルス光によるTHz-TDSで測定した場合には時間領域での信号波形は短い区間に納まる。よって、周波数領域の信号は広いスペクトル域に分布することになる。このことから、THz-TDSの場合には時間領域の、信号が存在する短い時間区間のみで残差の2乗和を計算するのが好ましいようにも見える。しかし、THz-TDSの場合にはノイズが信号強度にほぼ比例することが報告されているので[16)]、短い時間区間でのみ残差の2乗和を計算しても信号対雑音比が改善されない可能性もあり、さらなる検討が必要である。

またスペクトル成分の存在する低周波領域のみで残差の2乗和を計算する場合、窓関数を使用しなかった場合(表1-D)と使用した場合(表1-E)とでは、求められたパラメタの値には大差はない。このことは、(d, n, β) = (0.5mm, 10^{15} cm^{-3}, 1.4)のように設定した場合の透過係数はsub-THz領域では比較的なだらかな変化しか示さないため(図3)、窓関数を使用することによってスペクトル線が若干太くなったとしても(図6)、fitting計算への影響は小さいものと考えることができる。とはいえ、窓関数を使用した場合(表1-E)よりも、窓関数を使用せずにスペクトル線幅を狭め、残差の2乗和を計算する周波数領域を限定したほうが(d, n, β) = (0.5mm, 10^{15} cm^{-3}, 1.4)に近いパラメタ値が得られている(表1-C)。このことはスペクトル成分の存在領域をなるべく狭めた方が信号対雑音比を高められることが原因であると考えられる。MLD-TDSの測定データについて窓関数なしでも変換ノイズが出ないようにするには、MLD-TDSの時間波形を測定する際に、波形全体の時間幅が周期構造の整数倍となるように設定すればよい。また、スペクトルの存在領域を狭める方が有利ということから、ファイバやSFによりスペクトルを連続化させない方がよいと考えられる。

5 結論

fitting計算における残差の2乗和の計算は時間領域全域で行っても周波数領域全域で行っても同じである。MLD-TDSにおいて、ノイズは時間領域でも周波数領域でも一様に分布するのに対し、信号は時間領域では全体に分布し、周波数領域では低周波域のみに離散的に分布する。よって、残差の2乗和計算は、周波数領域のうちスペクトルの存在する領域でのみ行えば、信号対雑音比を高めることができる。

MLD-TDSで測定された時間波形を複素スペクトルに離散Fourier変換する際、窓関数を用いるとスペクトル線幅は広がる。しかし、Siウェハ透過のようななだらかな変化をする透過のパラメタをfitting計算で求める場合には大きな影響を及ぼさない。それでも、スペクトル線幅を狭めることにより周波数領域のデータの存在領域を狭め、その領域だけで残差の2乗和を計算したほうが信号対雑音比をより高めることができる。時間領域信号のデータ幅は周期構造の整数倍とし、窓関数を使用せずに離散Fourier変換できるようにしておけば、ノイズの影響を抑えることができる。

参考文献

1) M. van Exter and D. Grischkowsky, Carrier dynamics of electrons and holes in moderately doped silicon, Phys. Rev. **B41** (1990), 12140–12149.
2) T.-I. Jeon and D. Grischkowsky, Nature of Conduction in Doped Silicon, Phys. Rev. Lett. **78** (1997), 1106–1109.
3) S. M. Sze, *Semiconductor Devices: Physics and Technology*, John Wiley, New York, 1985.
4) M. Hangyo, T. Nagashima, and S. Nashima, Spectroscopy by pulsed terahertz radiation, Meas. Sci. Technol. **13** (2002), 1727-1738.
5) M. Hangyo, M. Tani, and T. Nagashima, Terahertz Time-Domain Spectroscopy of Solids: A Review, Int. J. Infrared and Millimeter Waves **26** (2005), 1661-1690.
6) 森川 治，藤田正実，萩行正憲，ブロードエリアレーザによるSub-THz電磁波信号スペクトル中の連続成分強度の定量的見積もり，海上保安大学校研究報告 第2部 第55巻(2012), 1-15.
7) M. Tani, S. Matsuura, K. Sakai, and M. Hangyo, Multiple-frequency generation of sub-terahertz radiation by multimode LD excitation of photoconductive antenna, IEEE Microwave Guid. Wave Lett. **7** (1997), 282 - 284.
8) O. Morikawa, M. Tonouchi, and M. Hangyo, Sub-THz spectroscopic system using a multimode laser diode and photoconductive antenna, Appl. Phys. Lett. **75** (1999), 3772-3774.
9) O. Morikawa, M. Tonouchi, and M. Hangyo, A cross-correlation spectroscopy in subterahertz region using an incoherent light source, Appl. Phys. Lett. **76** (2000), 1519-1521.
10) O. Morikawa, M. Fujita, and M. Hangyo, Improvement of signal-to-noise ratio of a subterahertz spectrometer using a continuous-wave multimode laser diode by single-mode fiber optics, Appl. Phys. Lett. **85** (2004), 881-883.
11) O. Morikawa, M. Fujita, K. Takano, and M. Hangyo, Sub-terahertz spectroscopic system using a continuous-wave broad-area laser diode and a spatial filter, J. Appl. Phys. **110** (2011), 063107:1-5.
12) L. Duvillaret, F. Garet, and J.-L. Coutaz, Highly Precise Determination of Optical Constants and Sample Thickness in Terahertz Time-Domain Spectroscopy, Appl. Opt. **38** (1999), 409-415.
13) T. D. Dorney, R. G. Baraniuk, and D. M. Mittleman, Material parameter estimation with terahertz time-domain spectroscopy, J. Opt. Soc. Am. **A18** (2001), 1562-1571.
14) M. Scheller, Real-time terahertz material characterization by numerical three-dimensional optimization, Opt. Exp. **19** (2011), 10647-10655.
15) K. Sakai (ed.), *Terahertz Optoelectronics*, Springer Verlag, Berlin, 2005, 203-270.
16)森川 治, 谷 正彦, 藤田 正実, 萩行 正憲, マルチモード半導体レーザを用いたサブテラヘルツ分光器のノイズ，第65回応用物理学会学術講演会3p-ZD-16, 講演予稿集 No.3, (2004) 990-990.