

最大エントロピー法による発光吸収スペクトルの解析の応用

○遠越 光輝, 加藤 舞, 狩野 覚, 善甫 康成

法政大学情報科学部 (〒184-8584 東京都小金井市梶野町 3-7-2)

1. はじめに

最近の計算技術の進歩により, 光の発光吸収スペクトルなどは, 外部からの摂動に対する応答として時間依存密度汎関数法(Time Dependent Density Functional Theory : TDDFT)を用いることで精度良く求めることができるようになってきた. 特に, 我々は基底を用いず実空間・実時間で電子状態を計算する方法を用いており, この手法は精度が全時間ステップ数によるという特徴がある. 光の発光吸収スペクトルを求めるには, 双極子モーメントの時間発展で得られるデータを Fourier 変換するため, バンドギャップ付近の興味のあるデータほど長く時間発展させる必要がある.

一方, 情報処理の分野では自己相関性のある時系列データを効率的に取り扱う手法として, 最大エントロピー法が用いられる[1]. これまでに実時間実空間の TDDFT による吸収スペクトルの算出に最大エントロピー法が短いステップ数で Fourier 変換と同等の結果が得られることを報告した. 今回は実験値が揃っている C_{60} などを中心に, スペクトルの形状に変化を与えるパラメーターの効果について報告する.

2. 手法

今回の報告で用いた MEM は Burg 法と呼ばれる方法である. この方法はスペクトルの算出に要する前方誤差と後方誤差の 2 乗平均 P_M やフィルタ係数 $a_{M,k}$ など未知数を漸化式によって求められるため計算処理に向けた手法である. 通常, MEM で得られるスペクトルは, MEM と自己回帰過程の計算過程が等価ということから, MEM によるスペクトルの導出に線形予測フィルタを用いる[2,3]. 線形予測フィルタの次数 M は, 赤池の FPE(Final Prediction Error)に基づいて決定した.

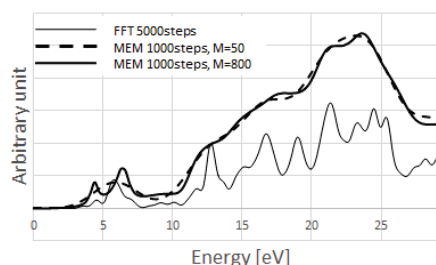


図 1 MEM による C_{60} 全振動子強度

3. 解析結果

C_{60} の振動子強度の計算結果を図 1 に示す. MEM の $M=50$, $M=800$ の結果を比較すると, 5eV 付近のピークの形状が異なっていることがわかる. このピークの変化はフィルタ次数 M の違いによるものである. FFT では 5000 steps 程で見られた, 5eV 付近のピークも低エネルギー側では長周期の時間 Step が必要であるため step 数の違いでずれてはいるが, MEM では 1000 steps で確認することができる. 報告では他の物質の解析に適用した等も述べる予定である.

参考文献

- [1] 日野幹夫, 「スペクトル解析」 朝倉書店, pp83
- [2] A. van den Bos, IEEE Trans. Inf. Theory **IT17**, 493-494 (1971)
- [3] E. M. Vartiainen et al, J. Opt. Soc. Am. **B13**, 2106-2114 (1996)