

多重解像度多重ウェーブレット基底による動的物性算定

(豊橋技術科学大学) 関野秀男

緒言

ナノスケール技術開発は厳密シミュレーションへの期待を高めている。マクロスケールでの物性はミクロ事象での構成要素の完全粗視化によるクラシカル描像により算定されるが、メソスコピック領域での物性測定がその構成要素であるサブナノ粒子の属性を鋭敏に反映するであろうことは容易に予想される。単体あるいは少数複合体である分子系の電子物性予測にたいする定性的及び定量的要求を満たすということにおいてガウシアン基底関数を用いたLCAO (Linear Combination of Atomic Orbital) 理論の貢献は測り知れない。然し空間表現の完全性(用いる基底関数の L_2 ノルム空間としての)がクリティカルになるような場合には注意を要し、その名(*ab-initio*)にかかわらず多くの経験則や know how が存在する。電子系が定常的(static)であるときと動的(dynamic)である時ではその物理的表現が大きくことなる場合が多く、それに伴ってその物性を表現する関数空間(ヒルベルト空間)への要求が大きく変動する。

多くの物性測定は時間周期的あるいは非周期的(パルス)な外摂動に対する系の応答を見ることに対応しその意味で完全にstaticな物性量は存在せず、むしろ理論との対応のために行われた実測の外そうとみなされるべきであるが、厳密な量子力学計算が可能な定常状態からの弱摂動状態は真の動的状況を記述するうえでの大きな足がかりとなることも事実である。

関数解析の技術的發展に伴い、複雑な現象の解析が可能となってきた。ウェーブレット解析は比較的最近開発された解析手法の一つであり、空間、時間をその解像度の階層としてとらえ、解像度を上げることによる変化をウェーブレット基底で張られた空間で表現する。

$$\begin{bmatrix} T & C \\ B & A \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} S \\ d \end{bmatrix}$$

ここに S, x は V_{n-1} に属し y, d は $W_n = V_n - V_{n-1}$ に属する。

解像度 $n-1$ での解 x はより高い解像度 n と $n-1$ の差空間による表現

$$y = A^{-1}(d - Bx)$$

により

$$(T - CA^{-1}B)x = s - A^{-1}d$$

のように補正される。

本発表では全空間を逐次 2 等分割することによって得られる階層空間を表現する基底としてそれぞれの空間に対して Legendre 多項式をシフトすることによって得られるスケーリング関数をアサインし、差空間はそれから定義される多重ウェーブレットを基底として表現した。

実際の応用例として

1) 分子の光物性である動的分極率の算定を行った [Multiresolution Multiwavelet Basis による分子分極率の計算 (ポスター # 1P061)]。レーザー光などの強い光照射により分子内の電子は分極する。レーザー光の周波数が分子の励起電子状態から離れている時はその分極は静電場に対する応答で近似され、従来の量子化学手法でも分極率が得られるが、定量予想のためには完全系に近い大きな基底を使用する必要がある。一般に diffuse 基底などを付け足すことにより実測を再現することが知られているがその数学的根拠は明白ではない。本発表では Hartree-Fock 及び Density Functional 理論を用いた動的物性計算の収束性をしらべるため Multiresolution Multiwavelet Basis を用いる理論とその実装、応用を発表する。いくつかの例により完全系への収束が自動的に保障されていることが明らかになった。次に

2) 電子電導のように本質的に電子の動的性質を扱う手段として時間領域での多電子問題の解析を行った [ウェーブレットを用いた時間依存 HF/KS 方程式の時間依存解析 (ポスター # 2P062)]。電子電導ではその波動関数が定常状態とは異なる束縛条件下で表現されるため、ほとんど線形方程式とみなされる従来の型の微分方程式の解法と異なった解法が要求される可能性がある。我々は線形部分を厳密解の形式で扱う方法を Multiresolution Multiwavelet 表現により算定することにより、簡単な電子の波動関数の時間発展の解析を行った。

現在のところ電子の時間依存方程式解法は初期的段階であり、その空間表現と解析には細心の注意が必要と思われるが、ウェーブレット展開法はその解像度解析の数学的厳密性のため多様な状況に対応できることが予測される。