

漸近的な領域での物理量の推定誤差に関する考察

実際には測定できない漸近的な領域における物理量を求めるときに、どのような方法を用いるでしょうか？ 測定値を温度 T の逆数に対してプロットし、 y 切片から $T \rightarrow \infty$ のときの値を求めるといった、外挿によって漸近的な領域における物理量を求める手法はよく用いられます。しかしながら、この方法で得られる量は、予想以上に大きな誤差を含みます¹⁾。

複数回この方法を繰り返したために、大きな誤差が生じた例を紹介し、電荷輸送能を持つ分子がアモルファス状態で存在する分子無秩序系では、サイト間をホッピングで電荷が輸送され、その移動度は温度や電場に依存することが知られています。この系の電荷輸送が、どのような物理的描像により記述されるのか現在でも議論のあるところですが、最も広く用いられているのが、Gaussian disorder モデルです²⁾。このモデルは、ホッピングサイトがエネルギー的および空間的に Gaussian に広がっていると考えるもので、これに基づいたモンテカルロシミュレーションから導かれる経験式、

$$\mu(E, T) = \mu_0 \exp\left[-\left(\frac{2\sigma_E}{3kT}\right)^2\right] \times \exp\left[C\left\{\left(\frac{\sigma_E}{kT}\right)^2 - \Sigma^2\right\}\sqrt{E}\right] \quad (1)$$

は、多くの系で観測される移動度の温度・電場依存

性を記述することで知られています。ここで、 μ_0 は $E=0$, $T \rightarrow \infty$ での移動度、 E は電場、 T は温度、 σ_E は状態密度の幅、 Σ は空間的なディスオーダーを表すパラメーター、 C は定数です。現在は式(1)よりも移動度の振る舞いをよく記述する式がいくつか提案されていますが³⁾、ここでは式(1)で測定値を近似した場合を紹介します。

E と T を変化させたときの移動度の測定値が式(1)で記述できるかどうか、いいかえると式(1)を満たすような σ_E と Σ が存在しかつそのときの式(1)と測定値との分散が十分に小さいかどうかは、次のような外挿による方法で調べられてきました。まず、移動度の対数を \sqrt{E} に対してプロットします。多くの場合、各温度の測定値は直線で近似できます(図1)。このグラフから、 y 切片 $\ln \mu(0, T)$ と勾配 $\partial \ln \mu / \partial \sqrt{E}$ を得ます。次に、得られた $\ln \mu(0, T)$ を T^{-2} に対してプロットします。この場合も、線形近似可能なプロットが得られ(図2)、勾配から σ_E が、切片から μ_0 が得られます。最後に求めた σ_E と、 $\partial \ln \mu / \partial \sqrt{E}$ の T^{-2} に対するプロットから C と Σ を求めます。図2は誤差解析の必要性を感じないほど、みごとに線形近似できています。多くの系で同様の結果が得られてきたため、このような解析が長い間にわたり数多くなされてきました。そして、パラメーターの信憑性は疑われることなく、得られたパラメーターの値についての議論

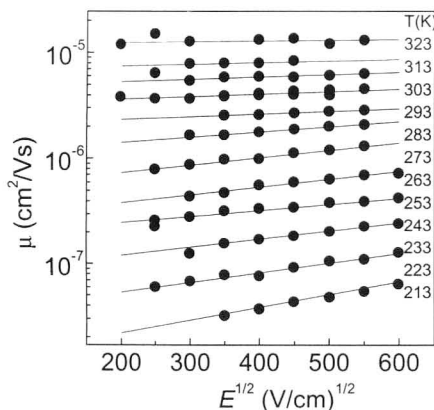


図1 μ vs. \sqrt{E} , 実線は各温度での直線近似。

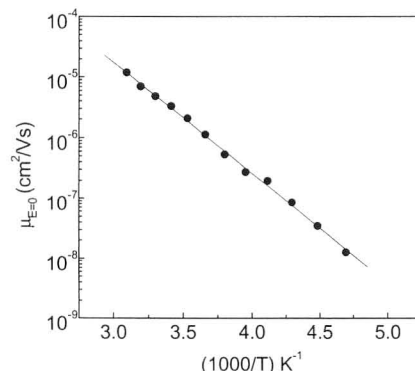


図2 $\ln \mu(0, T)$ vs. $(1000/T)^2$.

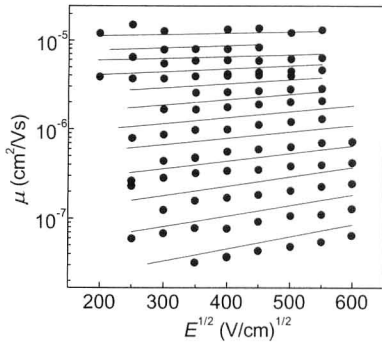


図3 実線はパラメーターを代入した式(1).

が長く行われてきました。

著者らは、上記の方法によって得られたパラメーターがどの程度測定値を再現しているのか調べるために、パラメーターを代入した式(1)と図1の測定値を重ねてプロットしてみました(図3)⁴⁾。予測に反して、測定値はほとんど再現されていませんでした。そこで、過去の数多くの報告について同様に調べてみましたが、どれも信じがたいほどずれていました。

上記方法による解析結果が測定値をよく記述しないのは、考えてみれば当たり前のことです。実際には測定できない漸近的な領域における物理量である、 $\ln \mu(0, T)$ 、 μ_0 、 σ_E 、 Σ を求めるため、同じ測定値に対して3回も直線近似を行い、外挿によって値を得るからです。移動度の測定値 $\mu(E, T)$ の対数を \sqrt{E} に対してプロットした図のy切片である $\ln \mu(0, T)$ は、

$$\sigma_{\ln \mu(0, T)}^2 = \sum_{j=1}^n \left[(\ln \mu(E, T)_j - \ln \mu_{m_j})^2 + \left(\frac{\partial \ln \mu(0, T)}{\partial \sqrt{E_j}} \right)^2 \sigma_{\sqrt{E_j}}^2 \right] \quad (2)$$

の分散を持ちます⁵⁾。ここで $\sigma_{\sqrt{E}}$ は、 $\sqrt{E} = \sqrt{V/d}$ (V は印加電圧、 d は試料の膜厚)の分散です。このような誤差をもつ $\ln \mu(0, T)$ の温度依存性から $\ln \mu_0$ は算出されるので、 $\ln \mu_0$ の分散は、

$$\sigma_{\ln \mu_0}^2 = \sum_{j=1}^m \left[\left(\frac{\partial \ln \mu_0}{\partial T_j^{-2}} \right)^2 \sigma_{T_j^{-2}}^2 + \sigma_{\ln \mu(0, T_j)}^2 \right] \quad (3)$$

となり、式(2)を加えたものになります。ここで得た σ_E と $\partial \ln \mu / \partial \sqrt{E}$ vs. T^{-2} のプロットから算出される Σ と C の分散はさらに大きくなります。

では、実際には測定できない漸近的な領域における物理量はどのようにして求めるべきなのでしょうか。方法のひとつに、乱数を使ったパラメーターフィッティング法があります。これは、式(1)のパラメーターをある範囲の中でランダムにふりながら計算し、式(1)と測定値との分散が小さくなるようにパラメーターを決めていくという手法です。この方法ですと、一度の近似で式(1)のパラメーターがすべて決まり、分散は最小になります。この手法で求めたパラメーターを代入した式(1)は、図3に比較して測定データをよく再現します。

以上、分子無秩序系の移動度を経験式で近似する場合に用いられてきた方法を例に、漸近的な領域での物理量を外挿で求めると大きな誤差を含むことについて紹介しました。似たような方法によるデータ解析を行っている場合には、一度検証することが必要であると考えています。

この記事に関してのご意見は、itoh@bk.tsukuba.ac.jpあるいは、optics@kobe-u.ac.jpまでお寄せください。

文 献

- 1) D. スタウファー (小田垣孝訳)：浸透理論の基礎 (吉岡書店、京都、1988)。
- 2) H. Bäessler: Phys. Status Solidi B, **175** (1993) 15.
- 3) D. H. Dunlap, P. E. Parris, and V. M. Kenkre: Phys. Rev. Lett., **77** (1996) 542.
- 4) A. Hirao, H. Nishizawa, T. Tsukamoto and K. Matsumoto: Proceedings of the 44th Annual Meeting of the International Society for Optical Engineering, ed. S. Ducharme, D. H. Dunlap and R. A. Norwood, **3799** (Denver, July 1999) p. 114.
- 5) 吉沢康和：新しい誤差論 (共立出版、東京、1989)。