

Title	Theoretical Studies of Exchange-Coupled Network Systems and Development of Genetic Algorithms for Ising Model
Author(s)	Oda, Akifumi
Citation	大阪大学, 2000, 博士論文
Version Type	VoR
URL	<a href="https://doi.org/10.11501/3169125">https://doi.org/10.11501/3169125</a>
rights	
Note	

*Osaka University Knowledge Archive : OUKA*

<https://ir.library.osaka-u.ac.jp/>

Osaka University

氏名	お だ あき ぶみ 小 田 彰 史
博士の専攻分野の名称	博 士 (理 学)
学位記番号	第 1 5 1 6 4 号
学位授与年月日	平成12年3月24日
学位授与の要件	学位規則第4条第1項該当 理学研究科化学専攻
学位論文名	Theoretical Studies of Exchange-Coupled Network Systems and Development of Genetic Algorithms for Ising Model (交換相互作用によって結ばれたネットワークに関する理論的研究お よびイジングモデルに対する遺伝的アルゴリズムの開発)
論文審査委員	(主査) 教授 山口 兆  (副査) 教授 徂徠 道夫 教授 鈴木 直

### 論 文 内 容 の 要 旨

#### 【序】

本研究では、有機強磁性体として期待されているニトロニルニトロキシド (NN) 誘導体結晶の分子間磁氣的相互作用について、量子化学計算を用いて議論した。また、二サイト間を相互作用で結ばれたネットワークの磁氣的挙動について、遺伝的アルゴリズム (GA) を Ising model に適用させて議論した。GA は生物進化のメカニズムを模擬する人工モデルであり、最適化、適応、学習の手法として重要視されている。特に、GA は広範囲に及ぶ探索が可能であるため、通常最適化手法では局所解に陥るような大規模最適化問題に対しても、優れた成果を挙げている。そのため、スピクラスタの磁氣的性質を、量子化学計算によって得られた磁氣的相互作用の値を用いて解明する場合、GA を用いることによって局所解に陥ることなく実行できるのではないかと期待できる。

#### 【計算】

本研究では、まず NN 誘導体結晶 ( $\alpha$  相の HNN、 $p$ -CNPNN、 $\alpha$  相及び  $\beta$  相の HQNN、RSNN) の磁氣的相互作用を求めた。また、同様の手法を用いて求められた相互作用を用いて、ランダムに生成されたスピクラスタの最安定状態を求める最適化計算と、系の磁化及び磁化率の温度依存性を求める計算を行った。磁化及び磁化率計算については、 $Mn_{12}$  クラスタと、有機強磁性体結晶として知られる  $\alpha$ -HQNN 結晶についても実行した。用いられた磁氣的相互作用は、 $Mn_{12}$  クラスタのみ実験から仮定された相互作用であり、ランダムに生成されたクラスタ及び  $\alpha$ -HQNN については非経験的 MO 法によって算出した。サイト数としては、ランダムクラスタでは15サイトから100サイト、 $Mn_{12}$  は12サイトであり、 $\alpha$ -HQNN については4000サイトの系を取り扱った。

#### 【結果】

まず、NN 誘導体の分子間磁氣的相互作用については、すべての化合物に対して、DFT 法で得られた相互作用の値は定性的に実験値を再現しており、DFT 法が NN 誘導体の磁氣的挙動を再現する際に有用であることがわかった。また、水素結合を有する系では、水素結合が磁氣的相互作用に対して重要な役割を果たす場合があることがわかった。

一方、遺伝子アルゴリズムによる計算について記す。まず、系の最安定状態を求める計算については、解の安定性はサイト数の増加に伴って指数関数的に悪くなり、通常の GA のみでは実用に適さないことがわかる。一方、GA に局所探索を組み合わせた hybrid GA を用いた場合、サイト数が増加してもより適した解が迅速に得られる。GA は広域探索に強い一方、局所探索が不十分な場合が多いため、その欠点を補うことによって探索能力が向上したと考え

られる。一方で、系の磁気的挙動の温度依存性の計算では、通常の個体の他に up-spin と down-spin を入れ換えた個体も考慮に入れた交叉を導入することによって、妥当な結果を得ることができた。また、分子間に水素結合を持つ有機強磁性体結晶である  $\alpha$ -HQNN では、DFT 法によって得られた相互作用の値を用いた GA によって、磁気的挙動を定性的に再現した。これは DFT 法の有効性を示すとともに、この種の計算に対する GA の有効性も示している。

#### 論文審査の結果の要旨

小田彰史君は、有機磁性体結晶中の有効交換相互作用 ( $J_{\text{eff}}$ ) を第一原理計算により求め、実験をよく再現する結果を得た。さらに計算によって得られた分子間相互作用から遺伝的アルゴリズムを用いて大規模な系の性質を解明する研究を行い、実験による磁化、磁化率とよく一致する結果を得た。本研究は有機磁性体の置換基を介した分子間磁気的相互作用に関する新しい知見を多く含んでおり、また遺伝的アルゴリズムを用いた磁性体に関する研究として先駆的である。同君の研究は、磁性体の研究全般に対して広く貢献する発見がなされており、博士（理学）の学位論文として十分価値あるものと認める。