

ハイゼンベルグモデルスピクラスターの最安定状態探索

小田彰史、北河康隆、奥村光隆、山口兆

大阪大学大学院理学研究科(〒560-0043 豊中市待兼山町 1-1)

【緒言】

スピンサイト同士が磁氣的相互作用によって結ばれたスピンネットワークの挙動を調べることは、スピクラスターの磁氣的性質を研究する際に重要である。これまで我々は様々な系に対してスピンサイト間の磁氣的相互作用を量子化学計算によって算出してきた。また、そうして求められた磁氣的相互作用を用いて、イジングモデルスピクラスターの最安定状態探索および熱力学的性質を求めるための計算手法も開発した。そこで本研究では、スピクラスターをハイゼンベルグモデルで記述した際の最安定状態を探索するための方法について取り扱う。イジングモデルスピクラスターの最安定状態探索においては離散値を扱う遺伝的アルゴリズムを用いて計算を行ったが、ハイゼンベルグモデルではスピンを表現する際に連続値を使用する必要があるため、今回我々は連続最適化手法を用いてスピクラスターの最安定状態を探索した。

【手法】

ハイゼンベルグスピクラスターのハミルトニアンは

$$H = -\sum J_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j$$

と表すことができる。ここで J_{ij} はスピンサイト i と j の磁氣的相互作用を表す有効交換相互作用であり、 \mathbf{S}_i 、 \mathbf{S}_j はそれぞれ i および j の電子スピンベクトルである。イジングモデルスピクラスターと異なり、ハイゼンベルグモデルではこの \mathbf{S}_i 、 \mathbf{S}_j 中に連続値を使用する。また、本研究では $S = 1/2$ の系のみを考慮したが、それ以外の系への拡張も容易である。 J_{ij} は量子化学計算によって算出することが可能であり、我々は様々な系に対してそれを行ってきたが、本研究ではプログラムの能力評価を主目的としているため、計算機資源的に高価な量子化学計算を省略してランダムに割り当てた J_{ij} 値を使用した。

使用した連続最適化手法としては、連続値を扱う遺伝的アルゴリズム (GA)、アニーリング法 (SA)、particle swarm optimization (PSO) などである。GA で連続値を扱うためには、それぞれの変数値を2進ビット列で表現する方法があり、そのためのコーディング等も研究されているが、今回我々は連続値をそのまま遺伝子とすることでこの問題を解くプログラムを作成した。

【結果】

上記に示したようないくつかの手法について、スピクラスターの最安定状態を探索する能力の比較を行った。また、いくつかのパラメータを変化させ、それに伴って探索能力がどのように変化していくかについても検討を行った。このような検討の結果、設定する必要のあるパラメータの最も少ないSAでも、多くの系に対して良好な結果が得られることがわかった。一方で PSO では複数のパラメータを調整する必要があるものの、SA よりも良好な結果が得られる場合もあった。さらに、PSO では解が一点に収束するため収束判定が容易であるという利点もある。これらの比較結果およびパラメータ調整の詳細については、当日ポスターにて発表を行う予定である。