

普遍ランダム位相状態を用いた量子スピン系の有限温度計算

理研計算科学
飯高敏晃

Finite temperature calculation of quantum spin systems using universal random phase states

RIKEN Center for Computational Science

Toshiaki IITAKA

全ヒルベルト空間中のランダム状態 $|\Phi\rangle$ による有限温度計算法[1, 2]では物理量 A のカノニカル集団平均を $\langle A \rangle = \frac{\langle \langle \langle \Phi | e^{-\beta H/2} A e^{-\beta H/2} | \Phi \rangle \rangle \rangle}{\langle \langle \langle \Phi | e^{-\beta H} | \Phi \rangle \rangle \rangle}$ のように、ランダム状態 $|\Phi\rangle$ による期待値の統計平均 $\langle \langle \dots \rangle \rangle$ として計算する。

この計算法はランダム位相積状態を使って一般変分関数に拡張されたが[3]、全ヒルベルト空間の場合に比べて統計的収束性が著しく低いため多数のランダム初期状態について平均する必要があった[4-6]。

本講演では、一般変分関数においても高い収束性を示す普遍ランダム状態を紹介する。図に 3×3 正方格子上的反強磁性ハイゼンベルクモデルのエネルギーを4本の初期状態（左図：ランダム位相積状態、右図：普遍ランダム位相状態）およびRBM変分波動関数を使って計算した結果を示す。

- [1] T. Iitaka, and T. Ebisuzaki, Phys. Rev. Lett. **90**, 047203 (2003).
- [2] T. Iitaka, and T. Ebisuzaki, Phys. Rev. E **69**, 057701 (2004).
- [3] T. Iitaka, arXiv:2006.14459 (2020).
- [4] A. Iwaki, A. Shimizu, and C. Hotta, Phys. Rev. Res. **3**, L022015 (2021).
- [5] S. Goto, R. Kaneko, and I. Danshita, Phys. Rev. B **104**, 045133 (2021).
- [6] D. Hendry, H. Chen, and A. Feiguin, Phys. Rev. B **106**, 165111 (2022).

