

Harmadik féléves PhD-beszámoló

Máté Mihály

ELTE Fizika Doktori Iskola
Anyagtudomány és szilárdtestfizika program

témavezető: Legeza Örs DSc
MTA Wigner Fizikai Kutatóközpont

Bevezetés

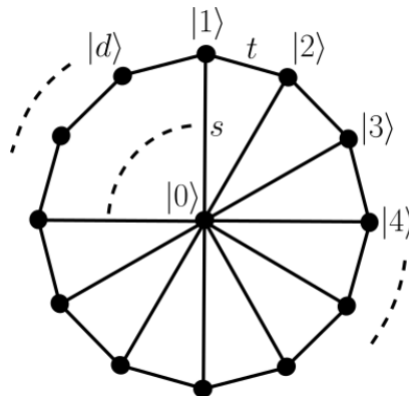
A PhD-kutatómunkám középpontjában továbbra is a sűrűségmátrixos renormálás csoport-algoritmus (DMRG-algoritmus), illetve az eljárás mátrixszorzat-állapotos (MPS) reprezentációja áll. Időm jelentős részében az MPS alapú algoritmusok optimalizálásával foglalkoztam. Ezen kívül egy érdekes rácsmodell numerikus analízisét kezdtem el.

Az aktuális félévben elvégzett kutatások ismertetése

Az elmúlt félévben megkezdett DMRG-algoritmus és a külsőleg korrigált („tailored”) Coupled Cluster algoritmus ötvözését megcélzó projekt a befejezési fázisba érkezett; az eljárás elméleti és numerikus letisztázását végeztük el. A módszer numerikus hibaanalízisét a N_2 molekulán keresztül mutattuk be [1], a kézirat a *Journal of Chemical Theory and Computation* folyóiratban elbírálás alatt van. Ebben a munkában a DMRG által előállított MPS alakú hullámfüggvényből csak az egyszeres és kétszeres gerjesztések együtthatóit használtuk fel. A további vizsgálatok céljából implementáltam a tetszőleges rangú gerjesztések együtthatóinak kiszámítását. Ezt a *prekontrakciók*, azaz a különböző konfigurációkhoz tartozó mátrixszorzatokban megjelenő közös részszerkezetek, letárolásával értem el. Ez az optimalizálási eljárás a tenzorhálózat alapú algoritmusok szempontjából alapvető fontosságú, így nagyban hozzájárul a programcsomag fejlesztéséhez. A DMRG-TCC módszerről, és a csoportunk által fejlesztett más molekulafizikai eljárásokról egy összefoglaló cikk fog megjelenni a *Magyar Kémiai Folyóiratban* [2].

Október 8-12. között Jiří Pittner által vezetett prágai kutatócsoportnál tett látogatás keretében a DMRG egy másik kvantumkémiai módszerben, *DMRG-CASSCF* való alkalmazásáról tanultam. Ebben egy szűkített aktív téren (CAS) a molekulapályák optimalizációja DMRG és önkonzisztens módszer (SCF) segítségével történik meg. A programok interfészelésében és dokumentációjában is részt vettem.

Az Christian Schilling oxfordi kutatóval új közös munkát kezdtünk. A vizsgált rendszer az 1. ábrán látható *Hubbard-kerék* (*Hubbard wheel*), amit szemléletesen úgy kaphatunk meg, ha egy gyűrűt kapcsolatba hozunk egy központi rácsponttal. Így a két amplitúdó (s , t) han-



1. ábra. Hubbard-kerék: s „csillag-” és t „gyűrűamplitúdóval”

golásával interpolálhatunk az egy- és a végtelen dimenziós modell között. Ez, például, azért is érdekes, mert hard-core bozonok esetében az egy dimenziós rendszerben nincs Bose–Einstein kondenzáció (BEC), míg a végtelen dimenziósban van [Phys. Rev. B 96, 064502 (2017)], illetve egy dimenzióban a fermionok és a hard-core bozonok hasonlóan viselkednek. Fermionokra és hard-core bozonokra implementáltam a modellt DMRG-algoritmusban, reprodukáltam a határesetekben az ismert eredményeket. Jelenleg a amplitúdók hangolásának hatását a BEC-ra, a termodinamikai határesetre való extrapolációt, és a DMRG-algoritmusban a vágási hiba szerepét vizsgálom.

Tanulmányi tevékenység az aktuális félévben

A félévben két tárgyat hallgattam. A *Makromolekulák*, valamint BME-n vendéghallgatóként a *Bevezetés a kvantum-információelméletbe* tárgyat melyek szorosan kapcsolódnak kutatómunkámhoz.

Konferenciák az aktuális félévben

Szeptember 20-23. között *Quantum Information Theory and Mathematical Physics* (Budapest) workshop eladásain vettem részt. Szeptember 26-28. között részt vettem az *Entanglement Days* (Budapest) konferencián, ahol poszterrel mutattam be a kutatási eredményeimet.

Szakmai közéleti tevékenység

Az ELTE Bolyai Kollégiumában heti rendszerességgel veszek részt interdiszciplináris előadásokon, valamint szakmai szemináriumon. November 16-án a Náboj középiskolásoknak

szervezett fizikaverseny rendezésében vettem részt.

Ösztöndíjak

- Wigner Konferencia Utazási Pályázat
- ELTE Anyagfizikai Kiválósági Program

Hivatkozások

- [1] F. M. Faulstich, **M. Máté**, A. Laestadius, M. A. Csirik, L. Veis, A. Antalik, J. Brabec, R. Schneider, J. Pittner, S. Kvaal, Ö. Legeza, *Numerical and Theoretical Aspects of the DMRG-TCC Method Exemplified by the Nitrogen Dimer*, Submitted to JCTC, [arXiv:1809.07732](https://arxiv.org/abs/1809.07732) [[physics.chem-ph](https://arxiv.org/archive/physics)] (2018)
- [2] **Máté Mihály**, Barcza Gergely, Szalay Szilárd, Legeza Örs, *Molekulákba kódolt kvantuminformáció: átmenetifém-klaszterek elektronszerkezete*, Magyar Kémiai Folyóirat – szerkesztés alatt

Máté Mihály

Budapest, 2019. január 21.