

Második 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 renormálásicsoport-algoritmus (DMRG-algoritmus), illetve az eljárás mátrixszorzat-állapotos (MPS) reprezentációja áll. Időm jelentős részében a DMRG és molekulafizikai numerikus módszerek ötvözésével foglalkoztam. Ezen kívül a szemeszterben részben az előző félév végén megkezdett periodikus Anderson-modell DMRG alapú tanulmányozásával foglalkoztam, részben sokrész-korrelációk osztályozásának elméletéről tanultam.

Az aktuális félévben elvégzett kutatások ismertetése

A periodikus Anderson-modellt és a topologikus Kondo-szigetelőket leíró DMRG-ben implementált modelfájlokat módosítottam, hogy *létraszerű* modellekre is lehessen számításokat végezni. Ellenőriztem, hogy a számítások a létra paramétereinek triviális beállítása mellett az egy dimenziós eredményeket mutatják. Elkezdtem a modellben szereplő együtthatók hangolásával a fázistér feltérképezését.

Az MSc-kutatómunkám keretein belül a *sokrész-korreláció* elméleti alapjaival foglalkoztam, és az ehhez kapcsolódó implementációkat elvégeztem. A félévben a sokrész-korrelációk osztályozásáról tanultam Szalay Szilárd publikációjának [[arXiv:1806.04392](https://arxiv.org/abs/1806.04392) [[quant-ph \(2018\)](#)]] vonalát követve.

Az elmúlt év során a Jiri Pittner által vezetett prágai kutatócsoport és a Wigner Fizikai Kutatóközpontban Legeza Örs által vezetett kutatócsoport egy forradalmian új módszert dolgozott ki a *molekulafizikai rendszerek* – mind statikus, mind dinamikus – korrelációk hatékony kiszámítására DMRG és molekulafizikai programok segítségével [[J. Phys. Chem. Lett.](#) **7**, 4072 (2016), [J. Chem. Theory Comput.](#) **14** (5) 2439 (2018)]. A DMRG által előállított MPS alakú hullámfüggvényből meghatározhatók az egyszeres (S) és kétszeres (D) gerjesztések együtthatói, amiket a coupled cluster (CC) módszer hullámfüggvényének parametrizálásához lehet használni, amit külsőleg korrigált („tailored”) CC módszernek neveznek. A Legeza Örs

által fejlesztett DMRG algoritmus, illetve az ORCA program (CC) interfészeltése révén az új módszerrel (DMRG-TCCSD) olyan problémák megoldása vált lehetővé, melyekre korábban nem volt kilátás. A módszer lehetővé teszi olyan nagy aktív terek kezelését, melyekben pl. 50 elektron korrelációja jelenik meg 50 molekulapályán. Az igen biztató eredmények tükrében szükség van a DMRG és MPS módszerek továbbfejlesztésére, illetve a CC oldalról újabb hullámfüggvény parametrizációk kidolgozására. A DMRG felől szükség van az MPS-re épülő algoritmusok továbbfejlesztésére és optimalizálására, hogy a megfelelő tenzorkomponenseket (hullámfüggvény együtthatóit) minél hatékonyabban lehessen előállítani.

Az ehhez kapcsolódó munkát március 19-23. között Pittner csoportjánál (Prága) tett látogatás keretében kezdtem el. Ennek során megismertem a molekulafizikai problémafelvetést és formalizmust, majd ennek függvényében megkezdtem a CC együtthatók hatékony kiszámítását. A optimalizálás azért is kiemelt fontosságú, mert a számítás során használt MPS alakú hullámfüggvényben megjelenő mátrixok mérete 10000-es nagyságrendű.

A kutatócsoportban Jiri Pittner (Prága) és Simen Kvaal (Oslo) csoportjainak külföldi kutatói is eltöltöttek, illetve a nyár folyamán el fognak tölteni egy-egy hetet. Így ennek során részt vettem és részt fogok venni szakmai megbeszéléseken és konzultációkon is, elősegítve ezzel a DMRG-TCCSD projekt haladását.

E molekulafizikával kapcsolatos projekt előkészítése azért is kiemelt fontosságú, mert a 2018/2019. tanévre beadott ÚNKP pályázatom pozitív elbírálása esetén ehhez kapcsolódó, ám PhD-témámat tekintve extra munkát fogok vállalni.

Publikációk

A DMRG-TCCSD témában készülő kézirat a befejezési stádiumba érkezett. Az eddigi eredmények az [International Congress of Quantum Chemistry](#) (2018. június 18-23., Menton, Franciaország) bemutatásra kerültek Legeza Örs által poszter formájában.

Tanulmányi tevékenység az aktuális félévben

A félévben két tárgyat hallgattam a BME-n vendéghallgatóként, melyek szorosan kapcsolódnak a kutatómunkám elméleti háttéréhez. A Matematikai Intézet Analízis Tanszékén meghirdetett *Fejezetek a modern kvantum-információelméletből* c. tárgy (2 × 2 óra) a témakör alapvető összefüggéseinek matematikailag precíz megfogalmazását tárgyalta. A *Kvantum-összefonódás* c. tárgy (2 óra) a fizikai rendszerek összefonódásának – mint nem klasszikus viselkedésének – jellemzésére helyezte a hangsúlyt.

A nagy óraszámok miatt, és a rendszeres beadandó feladatok megoldása során hasznos gyakorlati tudást is szereztem.

Ezen kívül rendszeresen látogatom a Wigner FK Szilárdtest-fizikai Intézet szemináriumait.

Konferenciák az aktuális félévben

Február 19-23. között Marburgban a [Numerical Methods for Strongly Correlated Quantum Systems](#) téli iskolán vettem részt, mely költségeit részben az ELTE Tehetséggondozási Tanács támogatta, részben a Wigner FK utazási pályázata fedezte. A konferencia keretei között poszterrel (*Investigation of multipartite correlations in spin chains with matrix product state approach*) mutattam be a kutatási eredményeimet.

Június 14-17. között részt vettem a [Doktoranduszok Országos Konferenciáján](#) egy angolul tartott előadással (*Simulation of strongly correlated systems with tensor network state methods*), melyben a PhD-témámat ismertettem, és megismerkedtem az ország különböző egyetemien dolgozó kollégák kutatásaival.

A 2019. február 23. - március 1. között Mariapfarrban (Ausztria) megrendezendő [Workshop on Theoretical Chemistry](#) eseményen a molekulafizikai kutatásommal (DMRG-TCCSD) kapcsolatos eredményeimet tervezem bemutatni.

Szakmai közéleti tevékenység

Az ELTE Bolyai Kollégiumában heti rendszerességgel veszek részt interdiszciplináris előadásokon, valamint szakmai szemináriumon.

Ösztöndíjak

- Wigner Konferencia Utazási Pályázat, elbírálás alatt
- ÚNKP, elbírálás alatt

Máté Mihály

Budapest, 2018. június 20.