Doktori beszámoló

1. félév

Veszeli Máté Tibor

2018. január 14.

1. Kutatási tevékenységek

A kvantumszámítástechnikának a két legismertebb ága a kapu alapú, és az adiabatikus. Előbbi a hagyományos számítógépek mintájára logikai kapukból építkezik, azonban ezek a kapuk unitér operátoroknak felelnek meg, az állapotok pedig ennek megfelelően egy Hilbert-téren vannak. Utóbbi pedig a feladatot egy magasdimenziós Hamilton-operátor alapállapotának megtalálására vezeti vissza. Ehhez egy időfüggő Hamilton-operátort használ, ami a nulladik időpillanatban egy könnyen megkonstruálható operátor, aminek az alapállapotából indul a rendszer, és T idő elteltével eljutunk a kívánt operátorhoz. Az adiabatikus tétel szerint, ha kellően nagy T, akkor a rendszer végig alapállapotban marad. Ideális esetben mindkét módszernél zérus hőmérsékletet feltételezünk. A valóságban ez a feltétel természetesen nem teljesül. A véges hőmérséklet hosszú időkre Boltzmann-eloszlásba viszi a rendszert. Ehhez tartozik egy karakterisztikus idő, tehát a számításainkat bőven ezen időn belül kell elvégeznünk, különben minden információ elvész. Felmerül a kérdés, hogy előfordulhat-e, hogy a külső zaj segíti a rendszert, hogy az eljusson az alapállapotba. Ahhoz, hogy véges hőmérsékletű kvantumrendszereket tudjunk vizsgálni, a Schrödinger-egyenlet helyett egyéb, a sűrűségmátrixszal operáló egyenleteket kell használni. Kutatásom során ilyen, úgynevezett nyílt kvantumrendszereket vizsgáltam.

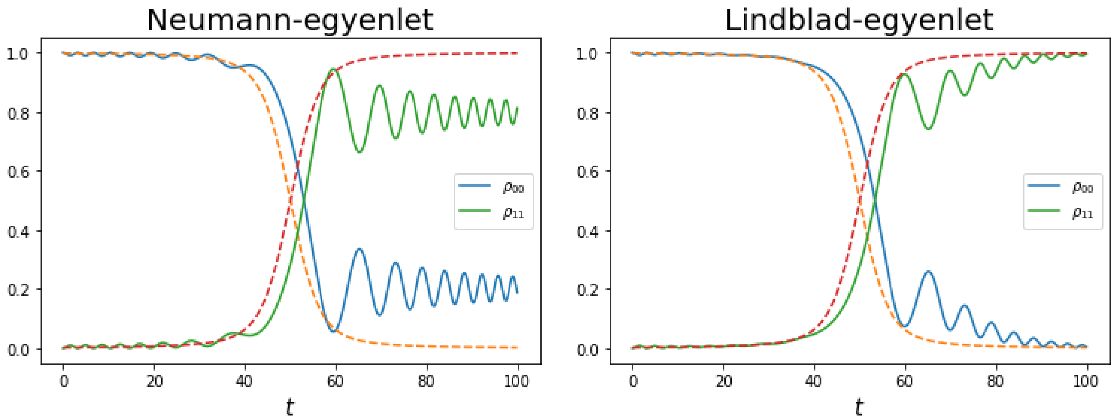
Az irodalomban három kedvelt egyenlet van, amikkel nyílt rendszereket lehet vizsgálni. A Redfield-egyenlet, valamint az ebből származtatott gyenge csatolású[1] és szinguláris csatolású[2] Lindblad-egyenlet. Először a gyenge csatolású Lindblad-egyenlettel dolgoztam, mivel ezt az irodalomban már használták adiabatikus kvantumszámítógépek modellezésére [1]. Az 1. ábra egy kétállapotú, időfüggő rendszer sűrűségmátrixának diagonális elemeit mutatja az idő függvényében. Kezdetben az alapállapot a $|0\rangle$ vektor, ami egyben a kezdőállapot is. A folyamat végére az $|1\rangle$ állapot lesz az alapállapot. Az ábrán látszik, hogy a folyamat túl gyors, így a környezetet figyelembe nem vevő Neumann-egyenlet nem tudja alapállapotban tartani a rendszert. A Lindblad-egyenlet azonban a Boltzmann-eloszláshoz konvergál, ami alacsony hőmérsékleten az alapállapotot preferálja, így végül az alapállapotba tud jutni a rendszer.

Az adiabatikus kvantumszámítógépet egy spinrendszerrel szokták gyakran modellezni. Legegyszerűbb esetben ez egy Ising-modell, azonban elviekben megengedhetünk magasabb rendű kölcsönhatásokat is.

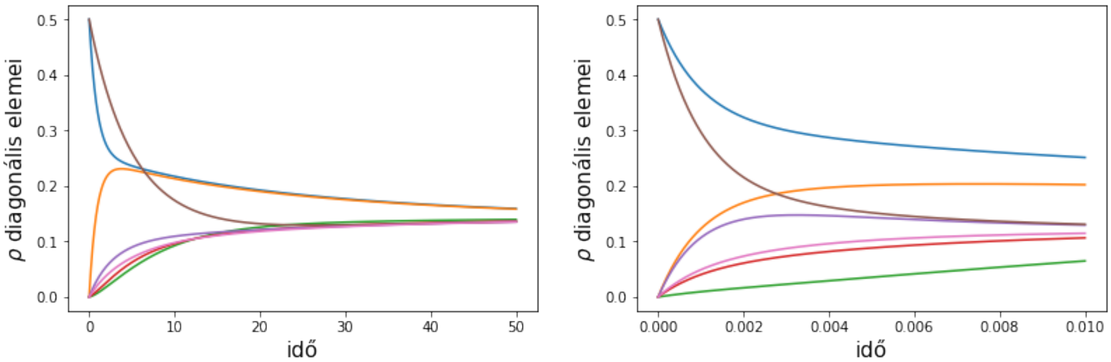
$$E[\mathbf{S}] = \sum_{p=0}^{p_{\max}} \sum_{i_1, i_2, \ldots i_p} F_{i_1 i_2 \ldots i_{p_{\max}}} S_{i_1} S_{i_2} \ldots S_{i_{p_{\max}}} \tag{1}$$

[1] weak coupling limit

[2] singular coupling limit



1. ábra. Neumann és Lindblad-egyenlet összehasonlítása



(a) szinguláris csatolású Lindblad-egyenlet (b) gyenge csatolású Lindblad-egyenlet

2. ábra. FMO-komplexben keletkező exciton időfejlődése

Az így kapott modell ekvivalens Stuart Kaufmann NK-modelljével. Ismert $E[\mathbf{S}]$-nél meghatároztam az $F_{i_1 i_2 \ldots i_{p_{\max}}}$ együtthatókat. Random energiáknál N spin esetén $p_{\max} = N$-nél kapom vissza egzaktul az 1 egyenletet, valódi rendszerben azonban a távoli spinek nem érzik egymást, így viszonylag kicsi számnál már meg lehet állni. A gyenge csatolású Lindblad-egyenlethez tartozik master egyenlet, amit ennél a spinrendszernél sikerült rendkívül egyszerű alakra hozni. A master egyenlet $W_{\mathbf{SS}'}$ mátrixeleme arányos $\mathbf{S}$ és $\mathbf{S}'$ Hamming-távolságával.

A másik modell amit vizsgáltam a Fenna–Matthews–Olson-komplex (FMO-komplex) volt, ami egy excitont ír le tight bind módszerrel. Ez összességében egy 7 állapotú rendszer, aminél az exciton 2 site-on jön be a rendszerbe, és 1-en távozik. Korábban ezt a rendszert szinguláris csatolás limeszben vizsgálták [2], és azt tapasztalták, hogy túl alacsony hőmérsékleten az exciton lokalizálódik, túl magason hamar elbomlik, és létezik egy optimális hőmérséklet, ahol nagy valószínűséggel átér. Az ott kapott eredményeket sikerült reprodukálnom, majd megvizsgáltam, hogy a gyenge csatolás limeszben hogyan változnak az eredmények. A gyenge csatolásnak az az előnye a szingulárissal szemben, hogy a Boltzmann-eloszláshoz konvergál, és nem az uniform eloszláshoz, ami a végtelen hőmérsékletet jelenti. A kapott eredmények teljesen mások voltak. A két egyenletből számolt időfejlődés látszik a 2. ábrán. Bár formára hasonlóak, a karakterisztikus időskálák nagyon eltérnek. Gyenge csatolásnál sokkal gyorsabban áll be az egyensúly.

Szinguláris csatolás közelítésnél a Lindblad-egyenletből némi közelítések árán sikerült levezetnem egy koordináta bázison értelmezett master egyenletet, aminek a megoldása a szimulációk szerint nagyon jól átfed az eredeti Lindblad-egyenlettel. Gyenge csatolásnál energiabázison létezik egy egzakt master egyenlet, és magas hőmérsékletre levezettem egy koordináta bázison értelmezett effektív master egyenletet. A két master egyenletnek van ugyanolyan része, ami a hőmérséklet növelésével lassítja az egyensúly beálltát, azonban a gyenge csatolásúnál megjelenik plusz egy tag, ami fordítottan viselkedik.

Jelenleg a Redfield-egyenlettel foglalkozom, és azt keresem, hogy mikor melyik Lindblad-egyenletet érdemes használni. A nevük némileg becsapós, mert létezik olyan levezetésük, ahol nem az fontos, hogy a mekkora a csatolás erőssége. Egyes irodalmak szerint a karakterisztikus időskálákból meg lehet határozni, hogy melyik esetben vagyunk, ezért cél, hogy ezeket az időket meghatározzam.

2. Publikációk

A korábbi témám elektromosan gerjesztett spinrezonancia vizsgálata volt, amiből egy nagyjából kész cikk már van. Remélhetőleg azt hamarosan el lehet küldeni egy folyóiratba. Itt egy olyan jelenséget sikerült elméleti úton megmagyarázni, hogy egy spin átfordítást erős külső elektromos mező mellett több nagyságrenddel gyorsabban meg lehet valósítani, mint a hagyományos módszerekkel, amik egyszerű perturbációszámításon alapszanak. A kapott eredményeket a numerikus szimulációk is alátámasztják.

3. Tanulmányi tevékenységek

A félév során három tárgyam volt:

1. A káoszelmélet alkalmazása
2. Infokommunikációs hálózatok modelljei
3. Biológiai rendszerek statisztikus fizikája

Mindhárom tárgyból jelesre teljesítettem.

Hivatkozások

[1] T. Albash and D. A. Lidar, „Decoherence in adiabatic quantum computation," *Phys. Rev. A*, vol. 91, p. 062320, Jun 2015.

[2] P. Rebentrost, M. Mohseni, I. Kassal, S. Lloyd, and A. Aspuru-Guzik, „Environment-assisted quantum transport," *New Journal of Physics*, vol. 11, no. 3, p. 033003, 2009.