

# Negyedik 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. A félév során a müncheni Ludwig–Maximilians-Universität-en Erasmus program keretében dolgozok tenzorfaktorizációs eljárások fejlesztésén és numerikus implementálásán Prof. Ulrich Schollwöck diákjaival együttműködésben.

## Az aktuális félévben elvégzett kutatások ismertetése

Az időm jelentős részében a müncheni csoporttal dolgoztam, aminek a célja egy hosszú-távú együttműködés megalapozása volt. Az első két hónapban témavezetőm is Münchenben tartózkodott így a közös munka hatékonyabbá vált. Különösen arra fókuszálunk, hogy a két csoport függetlenül implementált programcsomagja ([SyTen](#), illetve [Budapest QC-DMRG](#)) közötti hasonlóságokat és különbségeket tisztázzuk (egy-/kétrácpontos DMRG-optimalizálás [Ann. Phys. \(NY\) 326, 96 \(2011\)](#), fatopológia [J. Chem. Theory Comput. 2018, 14, 4, 2026-2033](#), memória optimalizációja, ...), ezáltal további fejlesztési lehetőségek nyílnak mindkét csoport számára. Különös tekintettel egy újszerű numerikus eljárás, a *módustranzformáció* algoritmusával foglalkoztam ([Phys. Rev. Lett. 117, 210402](#)). Ennek során az algoritmus lokális (két rácspontos) unitér tranzformációkkal az entrópia minimalizálásán keresztül optimalizálja a teljes rendszer bázisát. Ezáltal az MPS-reprezentációban megjelenő mátrixok mérete ( $D \times D$ ) lejjebb szorítható, ezzel jelentősen csökkentve az  $\mathcal{O}(D^3)$  futási sebességet, így lehetővé válik nagyobb rendszerek vizsgálata is. Például, fermionok tight-binding modellje esetén az algoritmus ideális esetben megtalálja az impulzustér-bázist, melyben az állapot szorzat alakú, tehát a mátrixok mérete  $1 \times 1$ . Az iterációk során a releváns mennyiségek változását (hullámfüggvény átfedések, Schmidt-spektrum változása, blokkentrópia fejlődése) és ezáltal a algoritmus stabilitását elemeztem.

Februárban megjelent a *Journal of Chemical Theory and Computation* folyóiratban az előző félév során beküldött *DMRG-TCCSD* módszer hibaanalíziséről szóló cikk [1].

Május 13-17. között Jiří Pittner által vezetett prágai kutatócsoportnál tett látogatás keretében a csoportunk által fejlesztett DMRG program további kvantumkémia alkalmazásáról konzultáltunk. Például, a DMRG-TCCSD relativisztikus kvantumkémiai alkalmazása során a hullámfüggvény Coupled Cluster paraméterezésében spint nem-őrző tagok is megjelennek, amihez a meglévő algoritmus bővítése szükséges.

Továbbá, a fermionok és hard-core bozonok *Hubbard-kerék (Hubbard wheel)* modelljének analizését folytattam: Entropikus mennyiségeket számoltam DMRG-vel, valamint a hard-core bozonok egyrészesekes redukált sűrűségmátrixának spektrumát vizsgáltam a hopping paraméterek függvényében. A következtetéseket Christian Schilling oxfordi csoportjának analitikus eredményeivel megerősítve a publikáció kéziratán dolgozunk.

## Tanulmányi tevékenység az aktuális félévben

A félévben két tárgyból fogok vizsgázni: *Topologikus szigetelők II* és *Fizikai Anyagtudomány I*.

## Konferenciák az aktuális félévben

Február 26 - március 1. között a *Workshop on Theoretical Chemistry* (Mariapfarr, Ausztria) rendezvényen vettem részt, amit a Wigner Konferenciautazási Pályázatból fedeztem. Március 2-9. között az *Entanglement in Strongly Correlated Systems* workshopon vettem részt, aminek költségeit az Anyagfizikai Kiválósági Program fedezte.

## Szakmai közéleti tevékenység

Rendszeresen látogatom a müncheni csoport szemináriumait.

## Ösztöndíjak

- Erasmus+ / Campus Mundi ösztöndíj (5 hónapos szakmai gyakorlat)
- 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*

telefon: +36-30/325-6105  
web: [matemihaly.web.elte.hu](http://matemihaly.web.elte.hu)

e-mail: [mate.mihaly@wigner.mta.hu](mailto:mate.mihaly@wigner.mta.hu)  
[matemihaly@caesar.elte.hu](mailto:matemihaly@caesar.elte.hu)

---

*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 – beküldve, elfogadva

Máté Mihály

München, 2019. június 04.