

Fizikai kutatások és virtuális világok

Molekulák kvantumos világa

Legeza Örs

Erősen korrelált rendszerek "Lendület" kutatócsoport

Wigner Fizikai Kutatóközpont, Szilárdtestfizikai és Optikai Intézet

Csoportunk kutatói

Barcza Gergely, Hagymási Imre, Mosoni Tamás
Sólyom Jenő, Szalay Szilárd, Timár Máté

Magyar Tudomány Ünnepe 2015
MTA, 2015.11.11, Budapest

Érintett témák

1. Kvantumfizika a mindennapokban?
2. Motiváció, cél, kihívások
3. Egy kis kvantumfizika
4. Matematikai algoritmusok kidolgozása és a kvantuminformáció szerepe
5. Néhány kiválasztott eredmény
6. Szimulációk szuperszámítógépeken: pl. a K-Computer
7. A virtuális világok egyszer csak életre kelhetnek

Kvantumfizika a mindennapokban?

- ▶ Az első megépített tranzisztor bemutatására 1947. december 16-án került sor a Bell Laboratórium három kutatója, Walter Brattain, John Bardeen és William Shockley révén.



- ▶ Ez a mondat elhangozhatott volna akkor:
Tranzisztor a mindennapokban.
- ▶ Talán mindenki őrültnek gondolta volna Őket. És ma?
- ▶ Életünk ma szinte elképzelhetetlen a számítástechnológia nélkül.

Tranzisztor a mindennapokban!

- ▶ Vákuumcsövek 1907 óta léteztek, azonban „ház” méretű számítógépeket építettek belőlük.
- ▶ Az 1980-as évektől megjelentek a számítógépek a háztartásokban is.
- ▶ Jelenlegi processzorokban több millió tranzisztor van és egyre gyorsabbak. Meddig fokozható mindez?
- ▶ Egyre kisebb méretskálákon új fizikai effektusok lépnek fel: **kvantumfizikai leírásmód szükséges.**
- ▶ A nanotechnológia térhódítása hamarosan mindannyiunk számára érezhetővé válik.
- ▶ Kvantumos effektusokra épülő eszközök megoldást jelenthetnek: **kvantumszámítógépek.**
- ▶ 2100-ban kvantumszámítógépek otthon?

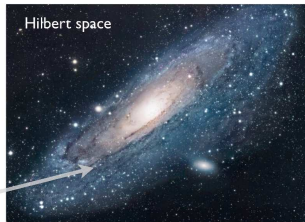
Cél, motiváció: Kvantum AutoCad !?

Motiváció és célkitűzés: A mérnöki világban nem építenek minden egyes alkalommal drága modelleket, hanem számítógépes programokkal tervezik és szimulálják a rendszereket.

R. P. Feynman (1985): Kvantumrendszerek szimulációja klasszikus számítógépeken exponenciálisan skálázódik a rendszer méretével, míg kvatumszámítógépen ez polinomiális skálázódású lenne.

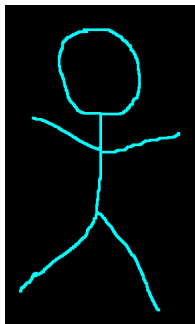
Közbenső megoldás: megfelelő matematikai algoritmusok (tenzorfaktorizáció) kifejlesztése.

A feladat nehézsége olyan, mint egy csillag megtalálása az univerzumban.

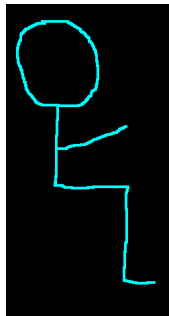


Egy kis kvantumfizika

Világról alkotott képünk megfigyeléseinken alapszik.



áll



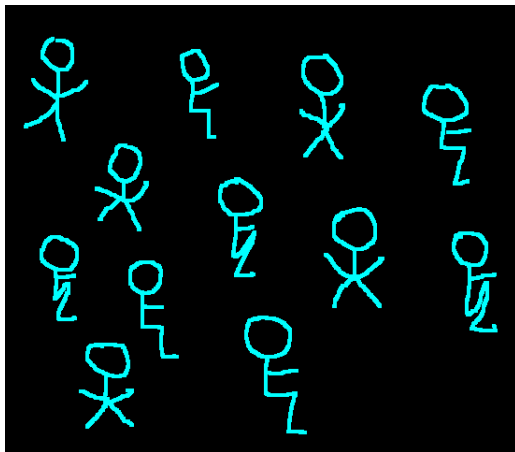
ül



guggol

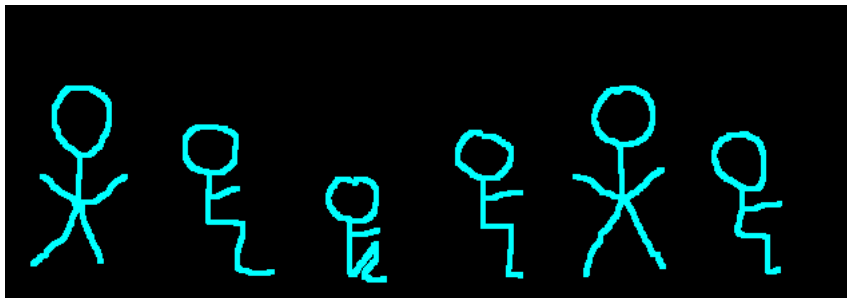
- ▶ Lokális tér dimenziója $d = 3$

Konfigurációs tér



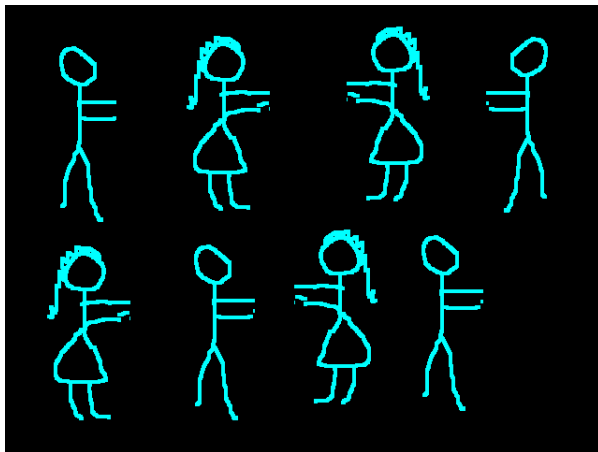
- ▶ Konfigurációs tér dimenziója: 3^N , ahol N az emberek száma
- ▶ Ez egy példa rendezetlen eloszlásra: véletlenszerűen vannak az egyének az egyes lokális állapotaikban
- ▶ Konfigurációs tér exponenciálisan skálázódik

Rendeződés kölcsönhatások/külső behatás révén



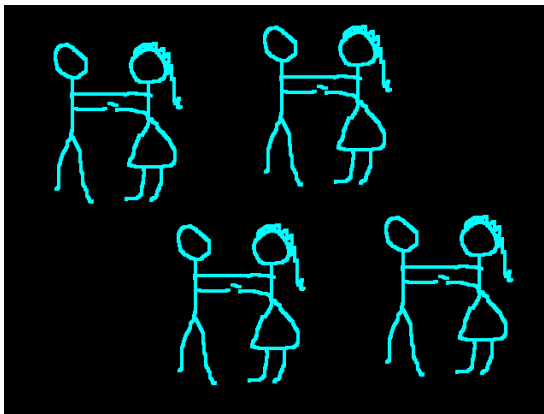
- ▶ Ez egy példa rendezett eloszlásra: egyének egyes lokális állapotai egyfajta rendet mutatnak
- ▶ Rendezettség mérhető korrelációkkal, rendparaméterekkel, stb.
- ▶ A kölcsönhatásokat leíró operátort Hamilton-operátornak hívjuk

Tánc terem: diszkó



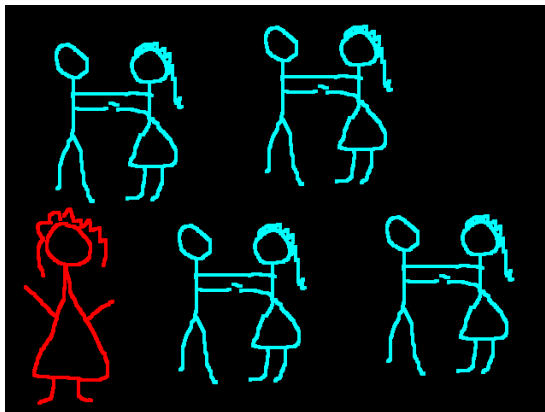
- Például diszkóban a táncosok szinte egymástól függetlenül táncolnak

Táncterem: társastánc



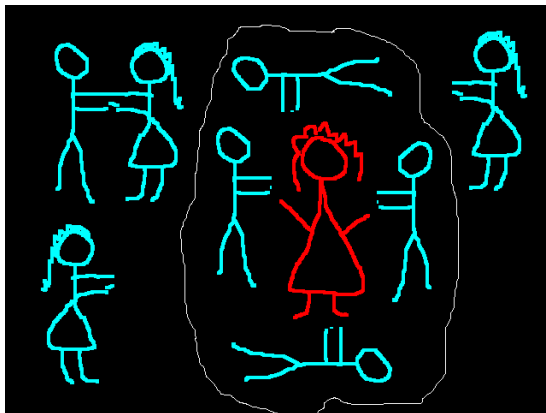
- ▶ Kötött párok alakulhatnak ki, egészen más tulajdonságokkal rendelkeznek
- ▶ Erős korreláció két egyén között
- ▶ Többi párral is lehetnek erős korrlációban: egyszerre lép minden páros: kollektív módusok

Tánc terem: "Bomba nő" megjelenése



- ▶ Vonzó kölcsönhatás és perturbáció
- ▶ Párok felszakadhatnak
- ▶ Gerjesztett állapotok, amíg a rendszer nem relaxálódik

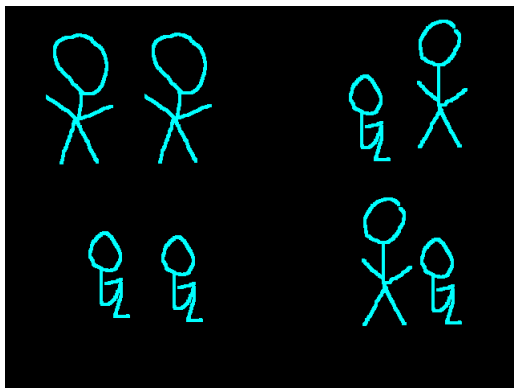
Táncterem: "Bomba nő" megjelenése



- ▶ Felszakadt párok
- ▶ "Bomba nő" körülötte az öt ostromló férfiakkal: mint egy megnövekedett tömegű részecske
- ▶ Például jóval lassabban tud haladni

Klasszikus eset

- ▶ Például lokális tér $d=2$ dimenziós (két állapot van csak)
- ▶ Két egyén (A és B helyen)
- ▶ Négyféle konfiguráció lehet
- ▶ A helyen egyén vagy áll, vagy guggol
- ▶ B helyen egyén vagy áll, vagy guggol



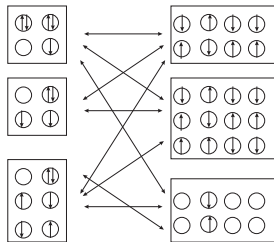
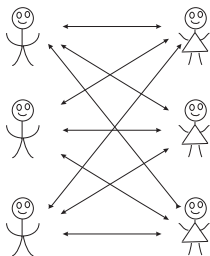
Kvantumfizikában mindez:

- ▶ Például lokális tér $d=2$ dimenziós (két állapot van csak)
- ▶ Két egyén (A és B helyen)
- ▶ Négyféle konfiguráció lehet
- ▶ A helyen egyén 50%-os valószínűséggel vagy áll, vagy guggol
- ▶ B helyen egyén 50%-os valószínűséggel vagy áll, vagy guggol
- ▶ **Összefonódott állapot $\rightarrow$ kvantuminformáció (q-dits)**

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \left(\begin{array}{c} \text{standing} \\ \text{sitting} \end{array} \otimes \begin{array}{c} \text{sitting} \\ \text{standing} \end{array} \pm \begin{array}{c} \text{sitting} \\ \text{standing} \end{array} \otimes \begin{array}{c} \text{standing} \\ \text{sitting} \end{array} \right)$$
$$\frac{1}{\sqrt{2}} \left(\uparrow \otimes \downarrow \pm \downarrow \otimes \uparrow \right)$$

Matematikai algoritmusok kidolgozása

- ▶ A rendszert két vagy több részrendszerre osztjuk fel.
- ▶ A részrendszer állapotainak súlya mindig függ a környezettől, amennyiben közöttük kölcsönhatás van.
- ▶ Tulajdonságokhoz egy ω_α súlyfaktort rendelünk, ahol $0 \leq \omega_\alpha \leq 1$ és $\sum_\alpha \omega_\alpha = 1$.
- ▶ Szükség van **kiválasztási szabályokra**: (pl. párválasztás) fiúk esetében: **|sportos**⟩, **|okos**⟩, **|gazdag**⟩; lányok esetében a **|csinos**⟩, **|házas**⟩, stb.



Tensor product approximation

Approximation of a single tensor, or even an ensemble of tensors $\mathbf{u}_y$, $y = 1, \dots, m$, in tensor product spaces,

$$|\mathbf{u}_y\rangle = \sum_{x_1=1}^{n_1} \dots \sum_{x_d=1}^{n_d} U(x_1, \dots, x_d, y) |x_1\rangle \otimes \dots \otimes |x_d\rangle \in \bigotimes_{i=1}^d V_i := \bigotimes_{i=1}^d \mathbf{C}^{n_i}$$

where $\text{span}\{|x_i\rangle : x_i = 1, \dots, n_i\} = V_i = \mathbf{C}^{n_i}$. If there is no ambiguity with respect to the basis vectors $|x_i\rangle$, $x_i = 1, \dots, n_i$, we can identify $(|\mathbf{u}_y\rangle)_{y=1}^m$, with the discrete function

$$\left((x_1, \dots, x_d) \mapsto U(x_1, \dots, x_d, y) \right)$$

i.e. $x_i = 1, \dots, n_i$, $y = 1, \dots, m$.

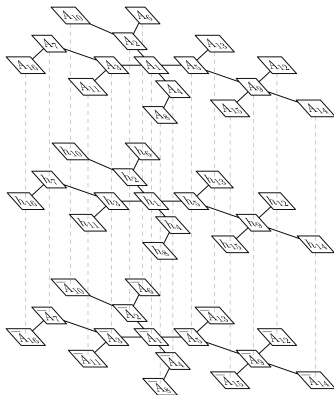
Tenzor hálózat alapú szimulációk

A kvantumfizikai egyenletrendszerek megoldását szimuláljuk
különbéféle tenzor hálózatokon:

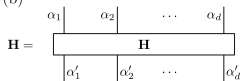
QCDMRG-Budapest programcsomag

(a)

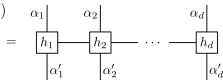
$$\langle \Psi | \mathbf{H} | \Psi \rangle = \vec{\mathbf{A}}_l^\dagger \mathbf{H}_t \vec{\mathbf{A}}_r =$$



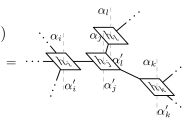
(b)



(b1)

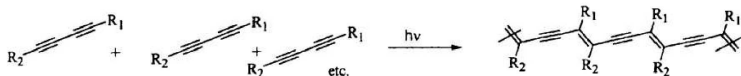


(b2)



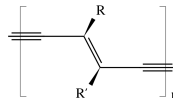
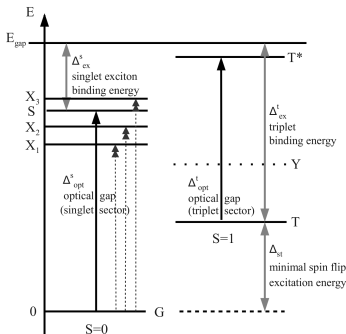
A vezető polimerek lehetnek az elektronika eszközök alapjai

Polimerizáció hőmérséklet vagy fény hatására:



Nobel Díj 2000-ben (Heeger, MacDiarmid, Shirakawa)

Kísérleti eredményeket numerikus szimulációkkal reprodukáltuk.
Megbízható elméleti leírást adtunk egy 25 éve nyitott kérdésre.



$$r_t = 1.20 \text{ \AA}, (1.239)$$

$$r_d = 1.36 \text{ \AA}, (1.373)$$

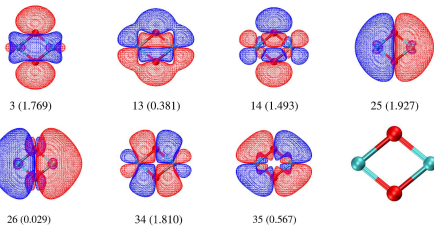
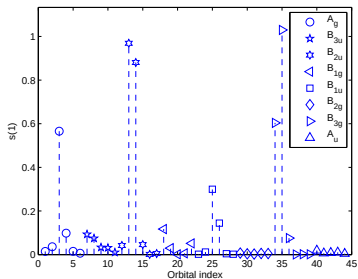
$$r_s = 1.43 \text{ \AA}, (1.425)$$

Energy/eV	3BCMU	4BCMU
E_{X_1}	1.5	1.4
E_{X_2}	1.7	1.6
$E_S = \Delta_{\text{opt}}^s$	1.896	1.810
E_{X_3}	2.0	1.9
E_{gap}	2.482	2.378
$\Delta_{\text{ex}} = E_{\text{gap}} - E_S$	0.586	0.568
$E_T = \Delta_{\text{st}}$	1.0 ± 0.05	0.95 ± 0.05
$E_{T^*} = \Delta_{\text{st}} + \Delta_{\text{opt}}^t$	2.36 ± 0.05	2.30 ± 0.05
Δ_{opt}^t	1.360	1.345
$\Delta_{\text{ex}}^t = E_{\text{gap}} - E_T$	1.5 ± 0.05	1.4 ± 0.05

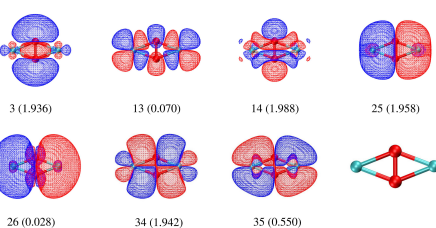
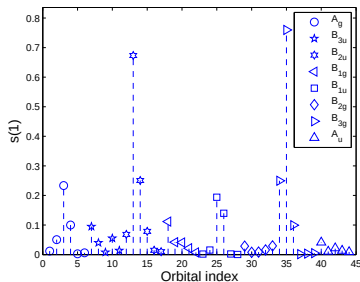
directly measured data, approximated

Erősen összefonódott molekulapályák (Cu_2O_2)

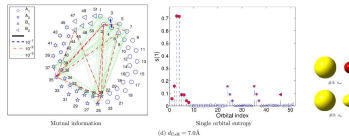
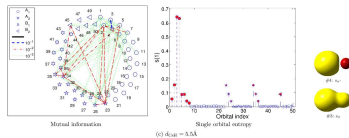
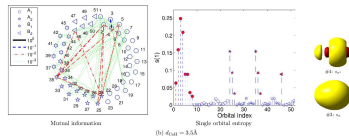
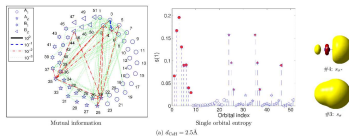
bis(μ -oxo)



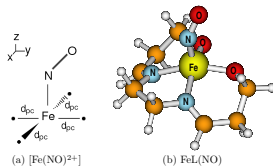
$\mu - \eta^2 : \eta^2$ peroxo



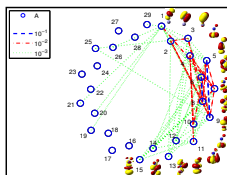
Kémiai kötések kialakulása és összefonódottság



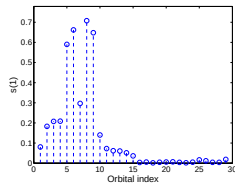
Összefonódottság és környezeti hatások



[Fe(NO)²⁺]

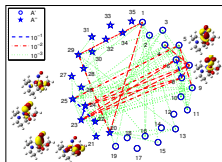


(a) Mutual information

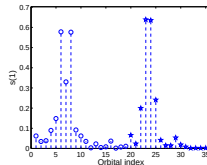


(b) Single orbital entropy

FeLNO

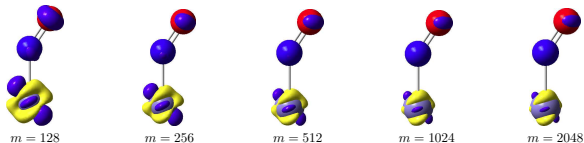


(a) Mutual information

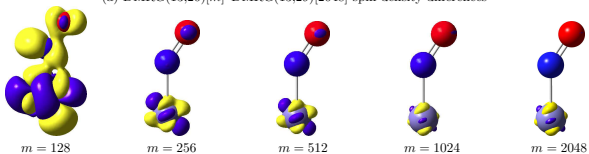


(b) Single orbital entropy

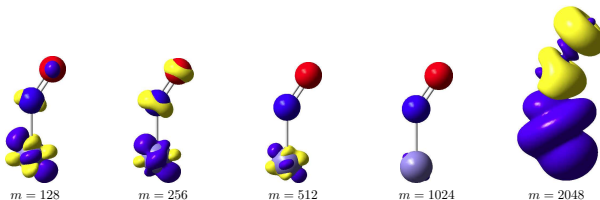
Spin sűrűség eloszlás - kísérleti mérésekkel összevethető



(a) DMRG(13,20)[m]-DMRG(13,29)[2048] spin density differences



(b) DMRG(13,24)[m]-DMRG(13,29)[2048] spin density differences



(c) DMRG(13,29)[m]-DMRG(13,29)[2048] spin density differences

(d) DMRG(13,29)

Fujitsu: K számítógép 10.51 petaflops



- ▶ DDMRG szimulációk: ACM Gordon Bell Díj 2012-ben
- ▶ Processzorok száma: 88.128
- ▶ Teljes memória kapacitás: több mint 1 petabyte
- ▶ Számítási kapacitás: 10,51 petaflops

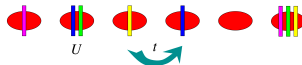
Ultrahideg atomok: a modellek kísérletileg is megépíthetők!

$$\mathcal{H} = t \sum_{i,\sigma} [c_{i+1,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma} + h.c.] + \frac{U}{2} \sum_{\sigma \neq \sigma'} \sum_i n_{i,\sigma} n_{i,\sigma'}.$$

on-site interaction U , nearest-neighbour hopping t , $\sigma = 1, \dots, n$,

fermionic anticommutation relations

SU(4) lattice
1/3-filling



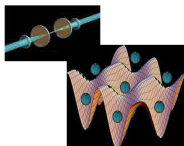
SU(n) Hubbard model
with integer No. of e^- on each site

$U \rightarrow \infty$
 $\longrightarrow$

Heisenberg model

- d and f band electron systems: to take into account the band (orbital) degeneracy
- Multiband systems

Honerkamp, Hofstetter PRL **92** 170403



- Kóka János: "Az MTA-nak azon területeit, amelyek nem szolgálják közvetlenül a versenyképességet, a földdel kell egyenlővé tenni, mert csak porosodó iratokat gyártanak." Az MTA szerepéről, 2006. május 30.

- ▶ A kvantumfizikára épülő rendszerekben számos összefüggés még nem ismert, vagy éppen látszólag egymásnak ellentmondó megfigyeléssel állunk szemben.
- ▶ A kísérleti berendezések megépítése, valamint az elméleti számítások és szimulációk együtt mintegy szétválaszthatatlan egységet képeznek.
- ▶ A virtuális világok bármikor életre kelhetnek!

Támogatók:

Lendület program, OTKA-K100908, OTKA-NN110360

European Research Area (ERA)-Chemistry

DFG(Németország), FWF(Ausztria), SNF(Svájc)

Köszönöm megtisztelő figyelmüket!