

Beszámoló workshopon való részvételről

A február 19-23. között Marburgban (Németország) megrendezett [Numerical Methods for Strongly Correlated Quantum Systems](#) téli iskolán vettem részt az ELTE Tehetséggondozási Tanács résztámogatásával. Ennek az eseménynek az eredményeit ismertetem.

A kvantumos statisztikus fizikában, a szilárdtest-fizikában, valamint a kvantumkémiaiban az erősen korrelált rendszerek új matematikai és numerikus eljárások kidolgozását idézték elő, melyekben fontos szerepet kapott a kvantumrendszerekben megjelenő különleges korrelációtípus, az *összefonódás*. Napjainkban az alacsony dimenziós erősen korrelált rendszereket numerikusan leghatékonyabban a *sűrűségmátrixos renormálás csoport-algoritmussal* (DMRG-algoritmus) lehet vizsgálni, amely módszer egy *mátrix-szorzat* alakú hullámfüggvény-reprezentációt (MPS) ad, ahol a megjelenő mátrixok mérete a rendszerben lévő összefonódás erősségétől függ.

MTA Wigner Fizikai Kutatóközpont Legeza Örs által vezetett [Erősen Korrelált Rendszerek](#) „Lendület” csoportban dolgozom mint elsőéves PhD-hallgató. Az elmúlt másfél évben az csoport által alkalmazott és kutatott elméletekkel foglalkoztam, úgymint kvantuminformáció-elmélet [[Phys. Rev. A 92, 042329 \(2015\)](#)], tenzorfaktorizáció [[Int. J. Quant. Chem. 115, 1342 \(2015\)](#)], illetve vizsgáltam számos *erősen korrelált spinrendszer* sokrész-korrelációs tulajdonságait (entrópia, kölcsönös információ, korrelációs függvények, ...). Az eredményeimből OTDK elméleti fizika tagozatában első hellyel és különdíjjal jutalmazott Tudományos Diákköri dolgozatot, valamint 2017 májusában [diplomamunkát](#) készítettem. Tudományos folyóiratban való publikáció folyamatban van.

A rendezvényen a szakmában elismert meghívott [előadók](#) ismertettek különböző eljárásokat az erősen korrelált rendszerek numerikus vizsgálatára. Munkám szempontjából MPS alapú megközelítések és a véges hőmérsékletű rendszerek DMRG-vizsgálatainak technikai részleteit találtam a leghasznosabbaknak. Ám, mivel nem létezik univerzális eljárás – ami minden rendszer szimulációjára alkalmas – ezért fontosnak érzem, hogy az általam használt és fejlesztett algoritmusok mellett, például, a kvantumos Monte-Carlo-szimulációk technikai részleteibe is betekintést nyerhettem. Ezen kívül érdekesnek találtam, hogy ezen a területen is alkalmazhatónak tűnik a *gépi tanulás*, például a fázishatárok feltérképezésére.

A további kutatómunkámat tekintve szintén kiemelkedő szerepe van az DMRG-algoritmusnak és a MPS alakú reprezentációnak a hatékony alkalmazására. Az $SU(N)$ *Hubbard-modellben* például a különböző esetekben a kétrácshely-korrelációk klasztereződést mutatnak, itt az adekvát elemzéshez a sokrácshely-korrelációkat tervezem vizsgálni. Ezt követően a kétdimenziós elektronrendszerek összefonódottsági struktúráit szeretném tanulmányozni. Ilyenek például a *grafén nanoszalagok* és *nanopelyhek*, melyekre vonatkozóan az elmúlt évben csoportunk végezte el eddig a világon a legnagyobb DMRG-számításokat a dópolás és a különféle geometriai effektusok függvé-

nyében [[Phys. Rev. B 94, 165147 \(2016\)](#)]. A pontos sokrész-korrelációs kép meghatározása az én feladataim közé fog tartozni.

A november 6-10. között megrendezett [European Tensor Network School](#) szakmai esemény a terület elméleti alapjainak elmélyítésében segített. Ez előkészítette a pályázatomban megjelölt téli iskolát, ahol az eddigi eredményeimet [poszter](#) formájában mutattam be. A konferencia során kutatócsoportunk külföldi kollégáival frissítettem fel a kapcsolatot, valamint új embereket ismerkedtem meg, akiktől tájékoztam a legújabb kutatási projektekről.

A pályázatomban elnyert összeget regisztrációs díjra (120 EUR), poszter nyomtatására (1020 HUF) és szállítására alkalmas tartó vásárlására (2470 HUF), valamint utazási költségek (57350 HUF) fedezésére használtam fel. A fennmaradó költségeket – szállás, biztosítás, napidíj – MTA Wigner FK pályázatából finanszíroztam.

Tisztelettel,
Máté Mihály.

Budapest, 2018. március 06.