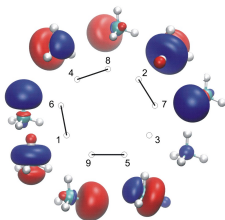


Kvantuminformáció-elmélet a kémiában



Barcza Gergely

barcza.gergely@wigner.mta.hu

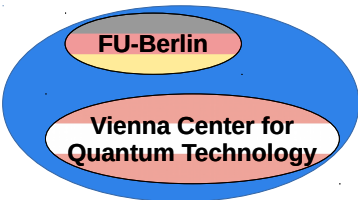
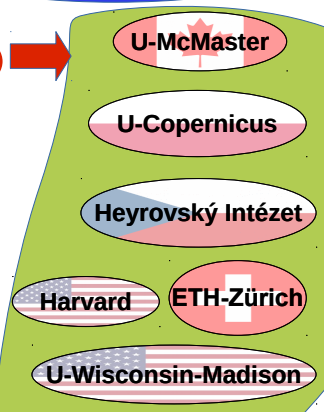
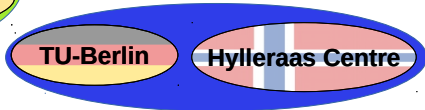
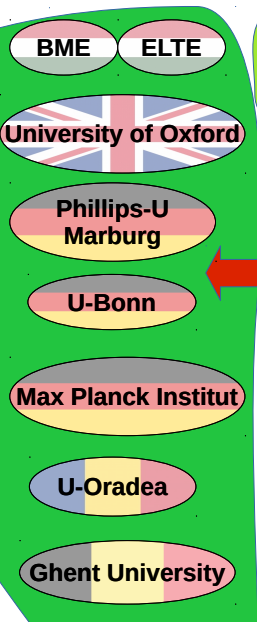


"Erősen Korrelált Rendszerek" csoport
Csoport vezető: Legeza Örs

TDK és Szakdolgozat Hét

Budapest, 2018.11.15.

fizika, magfizika, kémia,
IT, kvantuminformáció, matematika



Matematika és programozás

DMRG alapú programcsomagunk képes kölcsönható kvantumrendszerek:

- ▶ alapállapotú és alacsonyenergiás gerjesztések tulajdonságait $T = t = 0$ -nál megadni
- ▶ a korreláció pontos figyelembevételével, ahol
- ▶ a "részecskék" (spin/fermion/bozon) között
- ▶ tetszőleges az egy- és kétrészecskés kölcsönhatási topológia


Matematikai témák:

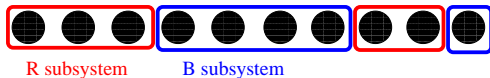
- ▶ kvantuminformáció-elmélet (FU-Berlin)
- ▶ tenzorfaktorizáció alapú és hibrid módszerek (TU-Berlin, Hylleraas)

Programozási témák:

- ▶ időfüggő, quench problémák (BME, LMU-München)
- ▶ véges hőmérsékletű problémák (U-Bonn)
- ▶ a kód párhuzamosítása CPU és GPU klaszteren (Prága, PNNL-USA)
- ▶ postprocesszálást, klaszter karbantartást segítő fejlesztések

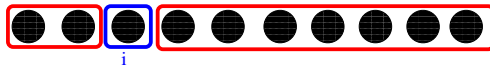
Kölcsönös információ mint a korreláció mértéke


$$|\psi\rangle = \sum_i \psi_i |c_i\rangle \rightarrow \rho = |\psi\rangle \langle\psi|$$



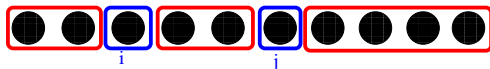
$$\rho_B = \text{Tr}_R \rho$$

$$S_B = -\text{Tr}(\rho_B \ln \rho_B)$$



$$\rho_i \Rightarrow S_i$$

S_i , Neumann entrópia, méri i rácspont összefonódottságát a környezetével



$$\rho_{i,j} \Rightarrow S_{i,j}$$

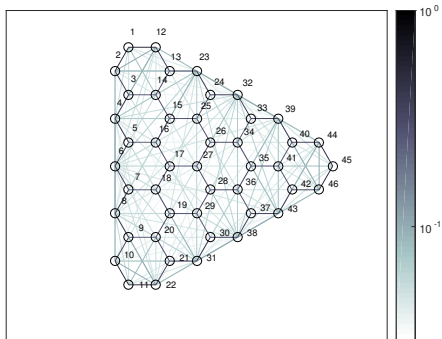
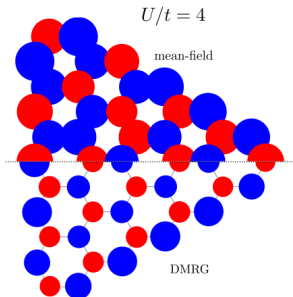
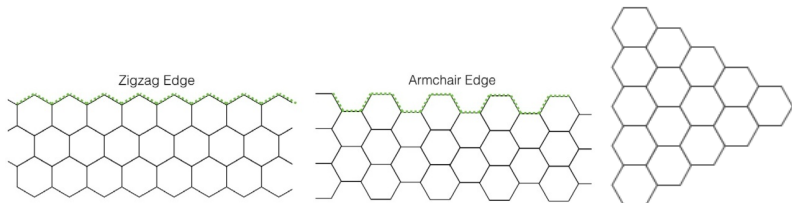
$S_{i,j}$, Neumann entrópia, méri i és j rácspontok összefonódottságát a környezetükkel



$$I_{i,j} = (S_i + S_j - S_{i,j})(1 - \delta_{i,j})$$

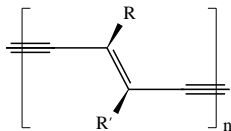
$I_{i,j}$ (kölcsönös információ) méri i és j rácspontok összefonódottságát

Grafén darabkák – határfeltétel szerepe

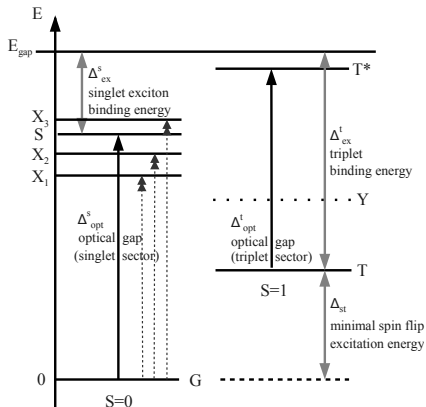


Transz-polidiacetilén kísérleti adatainak modellezése

π elektronokra felírt Hubbard-jellegű modell paramétereit fononszámítási projektekben is felhasználtuk



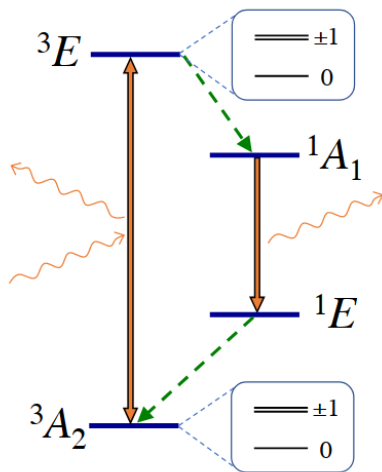
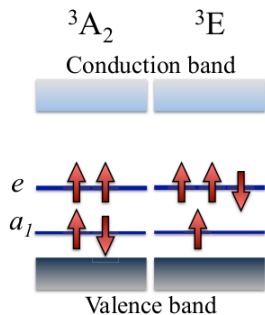
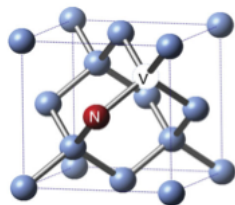
r/r_A	kísérlet	elmélet
r_s	1.428	1.419
r_d	1.356	1.362
r_t	1.191	1.202



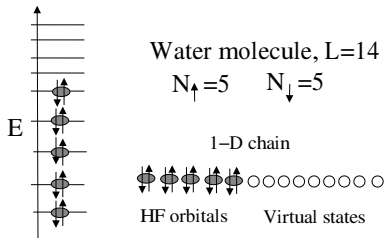
Energia/eV	kísérlet	elmélet
E_{X_1}	1.5	1.74
E_{X_2}	1.7	1.85
$E_S = \Delta_{opt}^s$	1.896	2.00
E_{X_3}	2.0	
E_{gap}	2.482	2.45
$\Delta_{ex}^s = E_{gap} - E_S$	0.586	0.45
$E_T = \Delta_{st}$	1.0	1.00
$E_{T^*} = \Delta_{st} + \Delta_{opt}^t$	2.36	2.25
Δ_{opt}^t	1.360	1.25

közvetlen mérési adat, becsült adat

Nitrogén-vakancia centrum gyémántban (Gali Ádám)



Kvantumkémia betöltésszám-reprezentációban



$$h(\mathbf{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \sum_{\mu, \mathbf{R}} \hat{V}^{\mu}(\mathbf{r} - \mathbf{d}_{\mu} - \mathbf{R})$$

$$T_{ij} = \int d\mathbf{r} \phi_i^*(\mathbf{r}) h(\mathbf{r}) \phi_j(\mathbf{r})$$

$$V_{ijkl} = \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \frac{\phi_i^*(\mathbf{r}) \phi_j^*(\mathbf{r}') \phi_k(\mathbf{r}') \phi_l(\mathbf{r})}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}$$

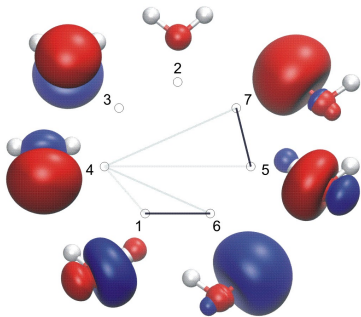
T_{ij}, V_{ijkl} : adott molekulát jellemzi

$$H = \sum_{ij\sigma} T_{ij} c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{ijkl\sigma\sigma'} V_{ijkl} c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma'}^{\dagger} c_{k\sigma'} c_{l\sigma}$$

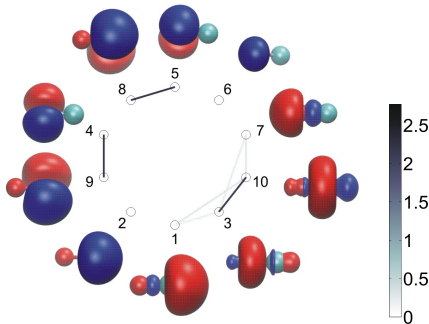
STO-3G **minimális lokalizált** pályakészlet $\{\phi_i(\mathbf{r})\}$:

- ▶ STO-3G: 3 Gauss-típusú pálya lineárkombinációja \rightarrow Slater-bázis
- ▶ minimális: a core és vegyérték pályákat egy-egy bázissal jellemezzük
- ▶ lokalizált: a pálya adott atommagra centrálisan tölti ki (kanonikus pályákból unitér trafóval kapható)

Kovalens kötések



H₂O: kovalens kötések
+ hiperkonjugáció



CO: háromszoros (poláros) kötések

Köszönöm a figyelmet!

barcza.gergely@wigner.mta.hu

<https://wigner.mta.hu/erosen-korrelalt-rendszerek>

