
PhD téziszfüzet

Összefonódás nyílt kvantum
rendszerekben és soktest szimulációk
tenzorhálókkal

Nagy Ádám

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi
Egyetem

2011

Előzmények

A nyílt kvantumrendszerek elméletének alkalmazása megkerülhetetlen a kvantum kémiában, kvantum optikában vagy a legújabb kvantum biológiában, ahol a kiszemelt (általában nem-egyensúlyi) rendszer és a környezete közti kölcsönhatások fontos szerepet játszanak. Az ún. gyenge kötésű közelítés egy Markov félcsoporttal írja le a nyílt rendszer dinamikáját. Ez a közelítés durván abból a feltevésből vezethető le, hogy a kölcsönhatás gyenge és a rendszerünk állapota jóval lassabban változik, mint a környezeté. A kvantum információ-elméletben, kvantum kommunikációban és kvantum számítástechnikában ezek fontos szerephez jutnak, hiszen le kívánjuk írni egy rendszer állapotának szétesését, ill. alapvető feladat, hogy több részrendszer között összefonódott állapotot hozunk létre, a rendszert pedig a gyakorlatban lehetetlen teljesen elszigetelni a környezetétől. Megkerülhetetlen tehát a környezettel való kölcsönhatás összefonódott állapotokra gyakorolt hatásának analízise.

Soktest rendszerek szimulációjával is foglalkoztam a disszertációmban. A közelmúltban új, hatékony numerikus módszereket dolgoztak ki rövid hatótávolságon kölcsönható spinrendszerek alapállapotának szimulálására. E módszerek azon alapszanak, hogy a fenti rendszerek alapállapotai gyengén összefonódtak és ezért kevés paraméterrel leírható, mivel ezek száma a rendszer méretének csak polinomiális függvénye.

Kiderül, hogy ezen állapotok osztályára egy numerikusan jól kezelhető karakterizáció adható meg, 1 dimenziós spinláncok esetében ezek a mátrix szorzat állapotok (MPS).

A módszerek igazoltan működnek egy dimenziós rendszereknél, de magasabb dimenziós kiterjesztések is léteznek. A polinomiális számítási igény mellett alkalmazhatók frusztrált spinrendszerek és fermionok szimulálására is, ahol a kvantum Monte Carlo a híres előjel probléma miatt csődöt mond. Emiatt ígéretesnek tűnnek, de sok helyen szorulnak még fejlesztésre illetve számos nyitott kérdés létezik, ami nem meglepő, hiszen egynél magasabb dimenziós kvantum spinrendszerek esetében az egzakt módszerek használata általában csak nagyon korlátozottan lehetséges.

Célkitűzések

A nyílt rendszerekkel kapcsolatban a környezet által generálható összefonódás nagysága érdekelt. A kérdés gyakorlati fontossága egyértelmű, hiszen egy valós rendszert sosem lehet tetszőlegesen elszigetelni a környezettől. Emellett, a dinamika stacionárius állapotait is meg akartam keresni, hiszen csak 1 és 2 kvantum bite volt egzakt megoldás. Ezek nem csak matematikai szempontból érdekesek, hanem kvantum információban alapvető gyakorlati kérdésekre is válaszokat adhatnak.

Az új soktest szimulációk sikereitől motiválva először is szerettem volna alkalmazni a meglévő algoritmusokat komplikált fázisátalakulások elemzésére. Szükség volt például annak vizsgálatára, hogy az új módszerek teljesítménye valóban lényegesen felülmúlja-e a régebbieket, ha komplex kölcsönható rendszereket részletesen szeretnénk tanulmányozni.

Mivel a (térbeli kiterjedésükben) egynél nagyobb dimenziójú kvantum spinrendszerek szimulálása jelenti a legnagyobb kihívást, e téren is szerettem volna új megoldásokat, esetleg új megközelítést

kifejleszteni. Habár sok javaslat született, és az ún. PEPS, iPEPS (MPS kiterjesztései véges ill végtelen, négyzetrácsra) MERA stb. bevezetésén alapuló algoritmusok ígéretesek, de a széleskörű alkalmazhatóságukat nagyon erősen korlátozza a magas számítás igénye. Ezen kívül, a közelítés pontosságával felmerülő kérdéseket is nehéz megválaszolni. Éppen ezért nyújt nagy kihívást ez a terület, és jelentős fejlesztése hallatlanul fontos előrelépés lenne a kvantum soktest rendszerek fizikájában.

Tézispontok

1. Egy elégséges feltétel már létezett a Kossakowski-Lindblad mester egyenlet alakjára, ami mellett 2 qubit összefonódik zaj hatására. Az első cikkünkben megmutattuk, hogy ez mikor elégséges is. Ezenkívül konkrét példát mutattam olyan hőfürdőre, ami nem generál összefonódást 2 kvantum bit közt, de két pár között már igen. Ref. 1.
2. Három, a környezettel azonos módon kölcsönható kétállapotú rendszer dinamikáját vizsgáltuk, Markov közelítésben. Megadtam az egyensúlyi állapotok sokaságát generáló operátoralgebrát és megmutattam, hogy általában nem tudunk megadni egy leképezést a kezdeti és egyensúlyi állapotok közt, ahogy azt 2 qubit esetében. Konkrét állapot osztályt mutattam viszont, melyekre ez mégis megtehető. Ref. 2.
3. Egy két részből álló, nyílt rendszert vizsgáltunk Lindblad dinamikával. Perturbációszámítással tanulmányoztuk, hogy az egyensúlyi állapotok mikor válnak összefonódottá, a generátor kis perturbációjának hatására. Példát mutattam arra,

hogy létezik olyan dinamika, melynek széparábilis egyensúlyi állapotai összefonódottá válnak, ha egy gyenge disszipációt adunk a rendszerhez. Ref. 3.

4. Véges entanglement-skálázást használtam iMPS alapú szimulációhoz, 1 dimenziós rendszer fázisdiagramjának kiértékeléséhez. Egy ansatzot javasoltam a korrelációs hossz skálázásához, amivel végtelen rendű fázisátalakulást is vizsgáltam. Összességében kiderült, hogy a módszer jóval kevesebb számításigényű lehet, mint a hagyományos véges méret skálázás. A módszert az ún. ANNNI modell 1 dimenziós változatán próbáltam ki, és az eddigiekkel jól egyező eredményeket kaptam, sőt nagyobb frusztrációs paramétereket is tudtam vizsgálni. Ref. 4.
5. Egy új algoritmust konstruáltam Bethe rácsokon értelmezett első szomszéd kölcsönhatású kvantum spin modellek imaginárius időfejlődésének szimulációjára. Az állapotot transláció invariáns iPEPS tenzorokkal írtam le, amiket minden időlépésben egyszerre módosítok, így a szimmetria végig megmarad. Ez egy már meglévő, de csak 1D-re kifejlesztett algoritmus általánosítása. Kiderül, hogy a módszer lényegesen gyorsabb, mint az iTEBD alkalmazása Bethe rácsra: előbbi $O(D^4)$, utóbbi $O(D^8)$ számításigényű, ha a koordinációs szám 3. Ising modell esetében a korábbi eredményekkel jó egyezést kapunk. A numerikus eredmények az Ising-spinláncéhoz hasonló fázisátmenetet sugallnak, de meglepő módon a korrelációs hossz az átmeneti (kritikus) pontban is véges marad. Ref. 5.

Irodalom

-
- H.-P. Breuer, F. Petruccione:
The Theory of Open Quantum Systems
Oxford University Press, Oxford, (2002)
 - Fabio Benatti, Roberto Floreanini:
Open Quantum Dynamics: Complete Positivity and Entanglement, *Journal-ref: Int.J.Mod.Phys. B19* (2005) 3063
 - F. Verstraete, J.I. Cirac, V. Murg:
Matrix Product States, Projected Entangled Pair States, and variational renormalization group methods for quantum spin systems,
Adv. Phys. 57,143 (2008), arXiv:0907.2796v1

Publikációs lista

1. F. Benatti, A. Liguori, A. Nagy :
Environment induced bipartite entanglement
J. Math. Phys. 49, 042103 (2008)
2. F. Benatti, A. Nagy:
Three qubits in a symmetric environment: Dissipatively generated asymptotic entanglement
Annals of Physics, Vol. 326, Issue 3, (2011), Pages 740-753
3. F. Benatti, A. Nagy, H. Narnhoffer:

Asymptotic entanglement and Lindblad dynamics: a perturbative approach,

J. Phys. A: Math. Theor. *44* 155303 (2011)

4. Adam Nagy:

Exploring phase transitions by finite-entanglement scaling of MPS in the 1D ANNNI model,

New J. Phys. *13* 023015 (2011)

5. Adam Nagy:

Simulating quantum systems on the Bethe lattice by translationally invariant infinite-Tree Tensor Network,

Annals of Physics doi:10.1016/j.aop.2011.11.012 (2011)