

## HET ONTRAFELN VAN CHEMISCHE SYSTEMEN

*Keywords: veeldeeltjesfysica, matrix product states, quantum entanglement, holographic principle*

Kwantummechanica onderscheidt zich van klassieke mechanica door het superpositieprincipe. Klassiek neemt de faseruimte lineair toe met het aantal deeltjes  $L$ . In kwantummechanica is de meest algemene toestand echter een superpositie van alle klassieke toestanden. Dit zorgt ervoor dat de dimensie van de Hilbertruimte exponentieel stijgt met het aantal deeltjes. Exacte berekeningen worden daardoor snel onmogelijk en men moet een beroep doen op benaderingsmethoden.

Eén welgekende benaderingsmethode is het vooropstellen van een Ansatz (denk bvb. aan een Slater determinant). Met een Ansatz wordt niet de hele Hilbertruimte doorzocht, maar slechts een kleiner deel. Zo kunnen grotere systemen aangepakt worden. Uiteraard wordt een benaderende oplossing gevonden, maar die benadering kan heel goed zijn.

Een mogelijke Ansatz is de matrix product state (MPS). Deze Ansatz wordt bepaald door een truncatiedimensie  $D$ . Kiest men deze groot genoeg ( $2^L$ ), dan kan de hele Hilbertruimte afgescand worden, kiest men deze gelijk aan 1, dan krijgt men een Slater determinant. Vaak is echter een relatief kleine keuze van  $D$  reeds voldoende om quasi-exacte resultaten te bekomen.

De mate waarin de orbitalen gecorreleerd zijn wordt weerspiegeld in de nodige grootte van  $D$ . Concepten uit de kwantuminformatietheorie zoals kwantumverstreming (quantum entanglement) helpen om dit effect kwalitatief en kwantitatief te begrijpen. Zo is er een oppervlaktewet voor de kwantumverstreming (holographic principle), net zoals voor de entropie van zwarte gaten. Dit heeft een belangrijke consequentie voor ééndimensionale systemen: een constante  $D$ , onafhankelijk van  $L$ , volstaat om quasi-exacte resultaten te bekomen.

### Doelstelling

De begeleider van deze thesis heeft een programma ontwikkeld in **C++** om een MPS te optimaliseren voor een gegeven chemisch systeem en keuze van de orbitalen. Aan de MPS worden vaste totale spin en deeltjesaantal opgelegd. Tot nu toe werd het programma vooral gebruikt om ééndimensionale chemische systemen te bestuderen wegens de evidente keuze van de ééndeeltjestoestanden. De chemische orbitalen worden dan best zo lokaal mogelijk gekozen. Voor moleculen zonder ééndimensionale structuur, is de optimale keuze van basis niet meteen duidelijk. Voor een gegeven initiële basis  $|\phi_i\rangle$ , kan een optimale orthogonale transformatie  $\hat{O}_{ij}$  gevonden worden, die de verstreming tussen de orbitalen  $|\Psi_j\rangle = \sum_i |\phi_i\rangle \hat{O}_{ij}$  zoveel mogelijk reduceert. Dit levert inzicht in de elektronische structuur van een systeem. In deze thesis is het de bedoeling om het MPS programma als black box te gebruiken en voor een set van chemische systemen de optimale basiskeuze  $|\Psi_j\rangle$  te bepalen en te analyseren. Deze thesis is heel divers in zijn bereik:

- Een grondige kennis van kwantummechanica zal de student toelaten zich in te werken in de veeldeeltjesfysica en het concept van kwantumverstrengeling.
- De student zal zelf een programma schrijven om de optimale orthogonale transformatie  $\hat{O}_{ij}$  te vinden. Alle MPS berekeningen worden gedaan door het bestaand MPS programma.
- De bekomen resultaten zullen toelaten om inzicht te krijgen in de elektronische structuur van een aantal systemen. Deze worden door de student geanalyseerd.

#### Extra informatie

- Er zijn slides op <http://users.ugent.be/~shwouter/qcb10.pdf>
- En/of stuur een mail naar [sebastian.wouters@ugent.be](mailto:sebastian.wouters@ugent.be) om verder over het thesisonderwerp te praten.

---

**Promotoren:** Prof. Dr. D. Van Neck – [dimitri.vanneck@ugent.be](mailto:dimitri.vanneck@ugent.be) (09/264.65.57) / **Begeleiding:**  
ir. S. Wouters – [sebastian.wouters@ugent.be](mailto:sebastian.wouters@ugent.be) (09/264.66.41) / <http://molmod.ugent.be/student-corner>