Thesisonderwerp 2012-2013 / **MM_12_FUND_05**

VARIATIONELE BEPALING VAN DE TWEEDEELTJESDICHTHEIDSMATRIX

In de kwantumfysica zijn er verschillende technieken om een interagerend veeldeeltjessysteem te beschrijven. Een veelgebruikte techniek is het variationeel principe. Hierbij probeert men volgende functionaal te minimaliseren naar de golffunctie:

$$E(\Psi) = \frac{\langle\Psi|\hat{H}|\Psi\rangle}{\langle\Psi|\Psi\rangle}$$

Als de energie minimaal is dit de grondtoestandsenergie en de bijbehorende golffunctie de exacte grondtoestand. Een manier om dit te doen is een basis te kiezen in de veeldeeltjesruimte en te variëren naar de coëfficienten. Het probleem hierbij is dat de dimensies van de ruimte waarin je variëert al gauw onwerkbaar groot worden. Als in een fysisch systeem de deeltjes enkel paarsgewijs (V(1,2,3) = V(1,2) + V(1,3) + V(2,3)) interageren dan kan de verwachtingswaarde van de energie geschreven worden in functie van de tweedeeltjesdichtheidsmatrix (2DM):

$$\Gamma_{\alpha\beta;\gamma\delta} = \langle\Psi|a^\dagger_\alpha a^\dagger_\beta a_\delta a_\gamma|\Psi\rangle$$

Als er bij de energieminimalisatie enkel gevarieerd moet worden over de 2DM, dan heb je het veeldeeltjesprobleem in feite herleid tot een tweedeeltjesprobleem. Eenmaal de grondtoestandsenergie bepaald is hebben we ook de dichtheidsmatrix van de exacte grondtoestand gevonden en kunnen we alle observabelen hiermee uitrekenen! Dit is natuurlijk te mooi om waar te zijn. Het probleem is dat tijdens het variëren ervoor gezorgd moet worden dat de dichtheidsmatrix geschreven kan worden zoals hierboven, dus dat hij afleidbaar moet zijn uit een fysische golffunctie. Deze voorwaarden worden N-representabiliteitsvoorwaarden genoemd. Evidente voorwaarden zijn dat de dichtheidsmatrix positief definiet en Hermitisch moet zijn. Er zijn echter veel meer en complexere voorwaarden nodig om een betrouwbare benadering te vinden voor de 2DM. Het algemene probleem is ontzettend ingewikkeld, en een algemene oplossing is nog niet gevonden. Er zijn wel een aantal praktisch bruikbaar nodige voorwaarden afgeleid. Deze nodige voorwaarden kunnen worden uitgedrukt als matrixfuncties van de 2DM, die tijdens het variëren positief semidefiniet moet zijn. Het variationeel probleem onder deze voorwaarden kan geformuleerd worden als een semidefiniet programma, wat een standaard optimalizatietechniek is in de numerieke analyse en waar tal van algoritmes voor bestaan.

Wie dit onderwerp kiest kan veel verschillende kanten uit. Als je graag programmeert kan je je bezig houden met de optimalizatiecode van het semidefiniet programma, nieuwe algoritmes uitproberen. Je kan ook zelf nieuwe N-representabiliteitsvoorwaarden bedenken en implementeren.

Je kan je ook meer toeleggen op de fysica, interessante mogelijkheden zijn het 2D-Hubbard model, het homogeen elektron gas, quantum Hall systemen of kernen. Kortom, er zijn veel verschillende mogelijkheden en het is een veld dat nog in zijn kinderschoenen staat. Er dus moet nog heel veel geprobeerd worden.

Promotoren: Prof. Dr. D. Van Neck – dimitri.vanneck@ugent.be (09/264.65.57) / **Begeleiding**: M.Sc. B. Vertichel – brecht.verstichel@ugent.be (09/264.66.41), Ward Poelmans – ward.poelmans@ugent.be (09/264.65.76) / **http://molmod.ugent.be/student-corner**