

Obliczenia dla kwantowych układów, w których obecne są korelacje pomiędzy cząstkami, są jednymi z najtrudniejszych w fizyce. Z jednej strony obliczenia analityczne – właśnie z powodu obecności owych korelacji – są praktycznie niemożliwe. Brak małego parametru uniemożliwia przeprowadzenie rachunku zaburzeń, a przybliżenia typu średniego pola – które z definicji nie uwzględniają korelacji – wprowadzają trudne do oszacowania błędy. Z drugiej zaś strony, gwałtownie rosnący wraz z liczbą cząstek rozmiar przestrzeni Hilberta bardzo utrudnia wszelkie obliczenia numeryczne. Dokładna diagonalizacja ograniczona jest do bardzo małych układów, kwantowe metody Monte Carlo dla układów fermionowych w niskich temperaturach napotykają (nie)sławny *problem znaku*, metody oparte o Grupę Renormalizacyjną często ograniczone są do układów jednowymiarowych, Teoria Dynamicznego Pola Średniego staje się dokładna z kolei jedynie w przestrzeni nieskończeniowymiarowej. Inne dostępne metody także mają swoje poważne ograniczenia.

Okazuje się jednak, że właśnie konkurencja pomiędzy energią oddziaływań a energią kinetyczną – która tak bardzo utrudnia obliczenia – jest źródłem mnóstwa niesłychanie ciekawych, także z praktycznego punktu widzenia, zjawisk. Nadprzewodnictwo wysokotemperaturowe, kwantowy efekt Halla czy stan izolatora Motta to tylko niektóre z przykładów zjawisk obserwowanych w silnie skorelowanych układach. Dlatego też tak ważne jest opracowanie metod obliczeniowych, które podołałyby wyzwaniom stawianym przez te układy. I to właśnie jest jednym z celów niniejszego projektu. W szczególności planujemy opracować i zaimplementować metody numeryczne, które pozwolą na prowadzenie efektywnych obliczeń dla pewnej klasy kwantowych układów wielociałowych – dla układów, w których występują szybkie i wolne stopnie swobody. Jeśli szybkość dynamiki tych stopni jest znacząco różna, wolne stopnie w ścisłym adiabaticznym przybliżeniu mogą być zapisane przy pomocy zmiennych klasycznych. Ogromną zaletą takiego podejścia jest możliwość mapowania oddziałującego układu kwantowego na układ swobodnych fermionów sprzężonych klasycznym fluktuującym polem. Pomimo że fermiony są nieoddziałujące, odcałkowanie ich w obliczeniach może stanowić nie lada wyzwanie, co znacząco spowalnia obliczenia. W opisywanym projekcie proponujemy niestandardowe podejście do tego problemu, a mianowicie użycie *sieci neuronowych*. W ciągu ostatniego roku ukazały się prace, w których sugeruje się możliwość wykorzystania tego podejścia do reprezentacji skomplikowanych wielociałowych funkcji falowych, których tradycyjny zapis byłby niemożliwy ze względu na ogromny rozmiar przestrzeni Hilberta. W naszym projekcie planujemy użycie jednej z technik, opartej o *Restricted Boltzmann Machines* (RBM). RBM jest rodzajem statystycznej sieci neuronowej zdolnej do adaptacji swojej wewnętrznej struktury w procesie optymalizacji (albo „uczenia”, w terminologii używanej dla sieci neuronowych). Liczymy, że po odpowiednim „szkoleniu” RBM będzie mogła być użyta do reprezentacji efektywnego klasycznego hamiltonianu, który jest efektem odcałkowania fermionowych stopni swobody. Następnie tak „nauczona” RBM mogłaby być użyta do prowadzenia bardzo efektywnych klasycznych symulacji Monte Carlo. Użycie technik nauczania maszynowego jest pomysłem nowatorskim, który z jednej strony może przynieść ogromny postęp w metodach obliczeniowych, ale z drugiej niestety wiąże się ze sporym ryzykiem porażki. Dlatego też w projekcie przewidujemy, że do badania wspomnianych wyżej kwantowo–klasycznych układów użyjemy także innych, bardziej „tradycyjnych” metod numerycznych. Układy, w stosunku do których planujemy zastosować opracowane czy zaimplementowane metody, obejmują złożone kwantowe systemy, w których kwantowo–klasyczne sprzężenie prowadzi do nietrywialnych zjawisk. Wśród nich można wymienić elektrony oddziałujące z wolnozmiennymi strukturami spinowymi, gdzie oddziaływanie to prowadzi np. do niezerowej krzywizny Berry’ego, funkcjonalizowany grafen, w którym oddziaływanie pomiędzy atomami a elektronami prowadzi do dalekozasięgowego porządku i otwarcia – bardzo potrzebnej z punktu widzenia zastosowań w elektronice – szczeliny energetycznej, czy wreszcie nanodrut, w których oddziaływanie zlokalizowanych momentów z elektronami w obecności sprzężenia spin–orbita i bliskości nadprzewodnika prowadzi do pojawienia się helikalnej struktury magnetycznej i egzotycznych modów zerowych Majorany.