

Последни научни постижения на д-р Ж.М.Селие

Въведение

Вигнеровото уравнение в квантовата механика винаги е представлявало атрактивен модел за научната общност от раждането му през 1932 г. В този подход, квантова система е описана по отношение на функции квази-дистрибуционни функции, понятие, което е много добре познато на експериментатори и дори може да бъде измерено (квантова томография).

Функцията за квази-дистрибуция, известна също като Вигнерова функция, се използва като функция за надлежно разпределение за вземане прогнози (основно макроскопски средни стойности) и нейната динамика се описва с частичен интегро-диференциално уравнение, чието неизвестно е квази-дистрибуционна функция, определена над (много висока пространствена) фазово-пространство. Това представлява едно невероятно математическо предизвикателство, считано за едно от най-трудните в приложна физика, дори и от числения перспектива.

Вигнеровото уравнение е, очевидно, математически еквивалент на по-стандартни формулировки като време-зависимото уравнение на Шрьодингер. В този случай, обратимо Вигнер-Weyl трансформиране съществува, което свързва пространството за вълнова функции и пространството на функцията квази-дистрибуцията, т.е. биективна кореспонденция между двете уравнения. Въпреки големия интерес на общността към тази формулировка на квантовата механика, е било възможно да се използва Вигнеровото уравнение в практически ситуации **едва наскоро, или около 70 години след първата си публикация.**

В интерес на истината, в последните две години, важни постижения са направени по отношение на този проблем в контекста на single body [1], [2] и many-body частици [3], [4]. Тези скорошни постижения са базирани на появата на нов Вигнеров Монте Карло метод базиран на концепцията за signed particles [1], [2]. Преди появата на този метод, не съществуваше никакъв начин да се реши това уравнение по надежден и количествен начин. Добре известно е, че метода на крайните елементи и метода на крайните разлики са обречени на провал, поради наличието на т.нар. дифузия, пространствен производно на високо вибрираща функция. Ето защо, след безброй неуспешни опити за решаване на Вигнеровото уравнение с една частица през 80-те години, няма голям интерес да се показва по-дълго. Освен това няколко статии се появяват през 80-те и 90-те години относно невъзможността за надеждно решаване на това уравнение с помощта на краен подход. Съвсем наскоро, в началото на века, има подновен интерес за Вигнеровия формализъм, както и появата на първи Монте Карло метод, основан на концепцията на quantum affinity - разработен, главно в САЩ (Shifren, Ferry, и т.н.) и Франция (Dollfus, Querlioz).

Докато първоначално имамного вълнение около концепцията за квантовия афинитет, доста бързо стана ясно, че не само този метод е само качествен, но също така не може лесно да бъде удължен до многомерни ситуации. Накрая, методът на афинитет работи само за Вигнеровото single-body.

Новият Вигнеров-Монте Карло метод, основаващ се на signed particles [1-4] е количествен подход и може да се прилага както single-body и many-body проблеми. Така че, не е изненадващо да се знае, че това буквално отваря пътя за решаване на квантови проблеми, които преди са били извън обсега на достижимото. Това се възприема като важно постижение от научната общност, тъй като много от проблемите, решавани в днешно време (особено за развитието на нови технологии за обработка на информацията) включва използването на квантовите ефекти.

Благодарение на Вигнеровия-Монте Карло метод на signed particles, сега е възможно да се симулира във време-зависим начин квантови проблеми, свързани с една или повече (взаимодействащи си) квантови частици, разпознаваеми и неразличими (като фермиони и Бозоните). Това постижение има дълбоки последствия. Както досега, единственият начин да се подходи квантовия много-частици проблем е с помощта на независим от времето Шрьодингерово уравнение, което е трудно да бъде осъществено чрез паралелна обработка и което дава само един поглед върху проблема, тъй като зависим от времето явления не могат да бъдат изучавани в този контекст. **Това е първият път, в който метод е в състояние да симулира напълно квантови, многоизмерни и зависими от времето проблеми в ab-initio начин.**

В интерес на истината, поради важността на проблема, методът се разпространява по целия свят и успява да създаде изцяло нова международна научна общност, с учени от различни области - като mesoscopic физика, полупроводникови физика, физика на твърдото тяло, non-equilibrium quantum physics, квантова химия, и т.н., чиито обхват е решаването на значителни квантови проблеми чрез Вигнерова формулировка на квантовата механика.

Нов пакет се разпространява под GNU Public License (GPL) и се **подкрепя активно от Фондацията за свободен софтуер (ФСС)**, поради важността си в приложнитенауки. Освен това, една активна общност наскоро започна да дискутира възможността за организиране на ежегодното събитие (конференция и / или уъркшоп) посветен на Вигнеровия формализъм, главно благодарение на резултатите, описани в този документ. Част от тази общност са важни учени като проф Дейвид Фери (САЩ) и проф Зигфрид Зелберхер (Австрия).

Докато статиите, които се занимават с тази тема вече са със сравнително голям брой, тук ние се фокусираме само върху тези, които представят важни постижения в областта. По-долу ви представяме основните статии и описваме тяхното значение за научната общност.

Single-body Вигнеров Монте Карло методи базиран на signed particles

Първата статия [1], която бе важен пробив в областта на квантовата електронен транспорт бе представена (и скоро публикувана) в научното списание „**Monte Carlo Methods and Applications**“ през 2012 г. Това списание е считано за един от най-важните и влиятелни в областта на Монте Карло и квази-Монте Карло методите (с нормализиран импакт фактор: 0,545). Тези резултати бяха

също така представени на конференциите LSSC 2013 и IMACS 2013 г. , като участниците показаха голям ентузиазъм (получихме много покани за провеждане на семинари и / или сътрудничество, първоначално от различни части на Европа).

Статията "A benchmark study of the Wigner Monte Carlo method" е първият количествено зависим от времето Монте Карло подход за Вигнеровото уравнение, базирани на концепцията за signed particles. Представени бяха за пръв път резултати с еднакви резултати от симулации, получени от уравнението на Шрьодингер, въпреки много различни числови свойства на използваните стохастични и детерминистични подходи (по-специално, уравнението на Шрьодингер е решено с помощта на time-implicit метод на крайните разлики). Това приближение беше първата и най-напредналото една по това време (и все още е в момента).

Отваряне на приложения

В крайна сметка, стана съвсем ясно, че този подход може да се използва успешно за симулация на пост-CMOS полупроводникови устройства. В интерес на истината, през 2013 г. три статии [5], [6], [7] бяха предоставени в списанието Physica A, Elsevier. Physica A е международно списание с импакт фактор, равен на 1,722, което е с висока видимост в областта на статистическата механика.

Първата статия от тази серия [5] представлява **първи опит да се приложи двумерно Вигнерово уравнение в съответната технологична ситуация**. Преди това не е съществувал двуизмерен решител за решаване на Вигнеровото уравнение. Благодарение на този иновативен Монте Карло подход, може да се обясни защо случайни dopant позиции в CMOS устройства се отразяват сериозно върху надеждността на нанометрови мащабиранни полупроводникови устройства.

Втората статия [6], вместо това, беше приложение на двуизмерни Вигнеровифункции за зависим от времето симулация на вълнови пакети, движещи се в подредени и не подредени масиви от добавки в силициева подложка, т.е. **след-CMOS дизайн**. По-специално, този подход е успешен при обяснението на експериментални данни, идващи от много скъпи mesoscopic и ниско-температурни експерименти (Япония).

Вигнеровия-Монте Карло метод буквално представлява **практически TCAD (Technology Computer Aided Design) инструмент за solotronics** приложения. Тази тема се превърна в предмет на проучване за трета статия [7]. Това е първият път, в който Вигнеровата формулировка се изтласква към практическите приложения както в CMOS, така и след-CMOS технологии. Това е и първият път, в който квантов симулатор може да осигури такова количество подробности на сравнително малки изчислителни ресурси.

Част от тези резултати се представени на SISPAD 2013 г. в Глазгоу. Огромен ентузиазъм беше показан от публиката и невероятен брой учени изразиха воля да сътрудничат и/или използват този нов подход за решаване на техните проблеми при квантовата симулация.

Удължаване на теорията за функционалната плътност

Single-body Вигнеров-Монте Карло подход със сигурност може да се прилага и към други области, свързани с квантовия електронен транспорт. В интерес на истината, Вигнеровото уравнение е основополагащо уравнение на квантовата механика и като такъв, може да се прилага във всяка област, в която се изучават квантовите ефекти.

По-специално, областта на квантовите симулации на many-body никога не е бил разглеждан от гледна точка на Вигнер формулировка, до публикуването на изследванията, описани в [3] в the Journal of Computational Physics, Elsevier (импакт фактор 3,184), много влиятелно международно списание в общността за приложна физика. В тази статия, **за първи път, квантовия many body проблем е бил съотнесен от Вигнеровата формулировка, носеща важни предимства.**

Това представлява първото удължаване на Вигнеровия формализъм в контекста на теорията за функционалната плътност (DFT). Този резултат е от голямо значение, тъй като е не само **изчислително постижения**, но също така **теоретично постижение**, тъй като въвежда за първи път формулировка на квантовата механика, която никога не е била използвана в този контекст.

По-специално, за да се симулират квантови many-body системи, стационарни и зависими от времето стандартните теории за функционалната плътност използват капацитета на изчисляване на едноелектронни вълнови функции на система, от която човек получава общата плътност на електрона (Kohn-Sham системи). Въвеждането на Вигнер-Монте Карло в DFT позволява зависими от времето симулации на химически системи в присъствието на рефлективни и усвояващи гранични условия. Също така позволява интуитивно разбиране на химически системи по отношение на Вигнеровата формулировка на квантовата механика, основани на концепцията за фазово-пространството.

И накрая, основавайки се на Монте Карло метод, се скалира драстично и на паралелни машини, отварящи пътя за зависима от времето симулация на много сложни молекули. Тези предимства са от интерес за приложните физици и химици, поради важните предимства, които са просто невъзможни в други формулировки.

Време-зависещи ab-initio симулации

Появата на статия [4] в Journal of Computational Physics, Elsevier, представлява друг важен крайъгълен камък в областта на ab-initio симулации. **Това е първият път, където зависим от времето метод ab-initio, базирани на Вигнеровия формализъм, е представен на научната общност, и който е в състояние да се справи с квантовия зависим от времето many-body проблем, без да въвежда някаква физическа апроксимация.** Към настоящия момент, цяла общност от физици и химици се интересуват от използване на този нов подход за решаване на проблеми, които не могат да бъдат решени по друг начин.

Действително, традиционните ab-initio методи са обикновено базирани на време-независим many-body Шрьодингерово уравнение. Въвеждането на Вигнеровия формализъм в рамките на ab-initio е доказано, че има няколко важни предимства. На първо място, както вече бе посочено, Вигнеровия формализъм е интуитивен, като по този начин позволява разбирането на квантовите

ефекти в many-body контекст. На второ място, цифровата подход Монте Карло позволява мащабируемост на паралелни машини, което на практика непостижимо чрез други техники, основани на крайна разлика или методи на крайните елементи. И накрая, този метод позволява **зависими от времето ab-initio симулации на силно взаимосвързани квантови системи** - нещо, което е буквално извън обсега когато други формализми са взети под внимание. В интерес на истината, **many-body Вигнеровия-Монте Карло метод е единственият метод, в настоящия момент, в състояние да симулира зависим от времето many-body квантов проблем на ab-initio ниво.**

Системи за неразличими частици

По-късно, трета статия беше публикувана [9] в the journal of computational physics, в която към проблема с идентични частици, по-специално Fermions, се подхожда чрез използване на many-body ab-initio Вигнеров-Монте Карло метод. Симулацията на квантовите системи, състоящи се от взаимодействащи, неразличими Fermions е невероятна математическа задача, която поставя огромни цифрови (и теоретични) предизвикателства. Много сложни методи, насочени към този проблем са достъпни в днешно време, които се основават на независим от времето many-body Шрьодингеров формализъм.

В тази статия е показано за първи път как Fermions могат да бъдат практически инкорпорирани в Вигнеровия формализъм за целите на many-body симулации, като е доказано, че принципа на Паули е присъщ на формализма. Излишно е да се каже, че това е важно постижение. На първо място, това е първият път, в който Вигнеровата формулировка на квантовата механика се използва в този контекст, и второ, това е първият път, в който принципът на забраната е доказан, че е естествено вграден във Вигнеровата формулировка. Това са важни резултати едновременно от цифрова и теоретична гледна точка.

В интерес на истината, цифрова симулация на два силно взаимодействащи Fermions (електрони) се извършва, която ясно показва появата на Fermi (или замяна-корелация) дупка, ясен израз на присъствието на принципа на Паули. Трябва да се отбележи, че принципът на изключване не се налага (както това се случва в други форми). Това естествено се достига от първоначалните условия на квантовата система. Накрая система от 4, 8 и 16 невзаимодействащите Fermions, изолирани в затворена кутия, са били симулирани, които показват, че при увеличение на броя Fermions, постепенно има възстановяване на Fermi-Dirac статистиката - ясна индикация, че предложението many-body модел (удължаване на работата на Вигнер) е правилно и може да се използва за практически химични изчисления.

Квантовите изчисления във Вигнеровата формулировка

Квантовите изчисления представляват една много интересна област, която обещава скок към невероятни изчислителни ресурси. Докато, от теоретична гледна точка, детайлите на парадигмата са повече от ясни, големи проблеми все още остават от експериментална гледна точка. Все още не е ясно как всъщност да се изградят тези устройства. По-специално, не съществува симулатор, който може да се справи с положението, при което квантовите ефекти трябва да съществуват заедно с

phonon разсейване, идващо от вибрацията на кристална решетка. Неотдавна беше публикувана статия в the journal Computer Physics Communications, Elsevier (impact factor ???) [8], в която се дава конкретен отговор на този проблем.Обяснението се основава на резолюцията на Вигнер-Болцмановото уравнение, чрез интерпретация на Вигнеровия-Монте Карло метод, където Вигнеровотоуравнение се изменя от колизионни условия, идващи от уравнението на Болцман.

Това е първият път, в който Вигнер-Болцмановото уравнение е решено в триизмерна геометрия и във време-зависим начин.

По-специално, този подход позволява отнасянето на **време-зависима квантова декохерентност**, едно от най-важните квантови явления, появявайки се на квантово ниво, когато става въпрос за прилагане на квантовите изчисления (като пречи на експлоатацията на квантовите изчисления в gate paradigm).

Чрез използването на този метод, може да се наблюдава за първи път как температурата на решетката в крайна сметка се отразява на динамиката на напълно квантов вълнови пакет. Това на практика позволява разбирането (и в крайна сметка дизайна) на квантовите изчислителни машини.

Заклучения и бъдещи работа

В момента, благодарение на начините, открити по Вигнер-Монте Карло метода и неговите разширения към проблема на quantum many-body, две статии са в процес на публикация, предлагащи квантов компютърен дизайн за машина в състояние да реши линейни системи на (сравнително) високо температури (избягване на проблема с квантова декохерентност), както и предложения за цялостно преформулиране на квантовата механика по отношение на signed particles (много интуитивен и способен да включват общи релативистични ефекти).Това са със сигурност по-нататъчни постижения, показващи реалистична приложимост на методите, прилагани досега, за достигане до нови технологични открития.Освен това, в този период, трета статия (написана по покана) преминава през review процеса на списание Physics Reports, Elsevier (импакт фактор 22.4).

В интерес на истината, **ние сме свидетели на раждането на нов клон на квантовата физика и химия**, рядко и скъпоценно събитие в историята на науката.

Забележка: За ваше удобство, основните конкретни постижения са с удебелен шрифт стил.

- [1] J.M. Sellier, M. Nedjalkov, I. Dimov, S. Selberherr, "A benchmark study of the Wigner Monte Carlo method", *Monte Carlo Methods Appl.*, De Gruyter, DOI 10.1515/mcma-2013-0018, (2014).
- [2] M. Nedjalkov, P. Schwaha, S. Selberherr, J.M. Sellier, D. Vasileska, "Wigner Quasi-Particle Attributes: An Asymptotic Perspective", *Appl. Phys. Lett.*, 102, 163113, (2013).
- [3] J.M. Sellier, I. Dimov, "A Wigner Monte Carlo Approach to Density Functional Theory", <http://dx.doi.org/10.1016/j.jcp.2014.03.065>, *Journal of Computational Physics*, (2014).
- [4] J.M. Sellier, I. Dimov, "The many-body Wigner Monte Carlo Method for time-dependent Ab-initio quantum simulations", <http://dx.doi.org/10.1016/j.jcp.2014.05.039>, *Journal of Computational Physics*, (2014).
- [5] J.M. Sellier, S.M. Amoroso, M. Nedjalkov, S. Selberherr, A. Asenov, I. Dimov, "Electron Dynamics in Nanoscale Transistors by Means of Wigner and Boltzmann Approaches", *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, (2014), doi: 10.1016/j.physa.2013.12.045.
- [6] J.M. Sellier, I. Dimov, "A Wigner approach to the study of wave packets in ordered and disordered arrays of dopants", *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, doi: <http://dx.doi.org/10.1016/j.physa.2014.03.065>, (2014).
- [7] J.M. Sellier, I. Dimov, "Toward Solotronics Design in the Wigner Formalism", *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, pp. 287-296, (2015).
- [8] J.M. Sellier, I. Dimov, "The Wigner-Boltzmann Monte Carlo method applied to electron transport in the presence of a single dopant", <http://dx.doi.org/10.1016/j.cpc.2014.05.013>, *Computer Physics Communications*, (2014).
- [9] J.M. Sellier, I. Dimov, "On the simulation of indistinguishable fermions in the many-body Wigner formalism", *Journal of Computational Physics*, DOI: 10.1016/j.jcp.2014.09.026, (2014).