

## Válasz Földi Péter bírálata

Mindenekelőtt köszönöm a bíráló befektetett munkáját és az értő olvasást. Nagyra értékelem az eredmények minőségét és fajsúlyát méltató megjegyzéseit. Különösen elismerőnek tartom azt a mondatát, miszerint „a türelmes módszerfejlesztés meghozta a gyümölcsét”.

Köszönöm továbbá az érdekes kérdéseket is.

### 1. Az „intimitási zóna” mérete

Az intimitási zóna mérete meghatározza, hogy a regularizált elektromosdipól-képben (RED) a  $P^2$ -tagból mekkora perturbáció származik a Schrödinger-atomhoz képest: minél kisebbre választjuk, annál nagyobb lesz a perturbáció. Fizikailag az indokolható, hogy a perturbáció a Lamb-féle eltolódás nagyságrendjébe essen, hiszen a kísérletek szerint a sugárzási térrel való kölcsönhatásból egy ekkora eltolódás mutatkozik a „meztelen” atomhoz képest. A (3.15) képlet alapján a hidrogén alapállapotára nézve már a Bohr-sugár néhányszorosa mint intimitási zóna a megfelelő nagyságrendet adja. Ez a méret lehetővé teszi, hogy megközelítsük a Dicke-fázisátalakulás kritikus sűrűségét anélkül, hogy az atomok intimitási zónája átfedésbe kerüljön.

A kérdés ugyanakkor egy fontos nyitott irányra világít rá, mert teljesen pontosan csak akkor lehetne megválaszolni, ha ismernénk az RED-képbeli sugárzással való kölcsönhatásból (a [3.4] Hamilton-operátor utolsó tagjából) adódó járulékot, mert ez utóbbi és a  $P^2$ -tagból származó perturbáció *összegének* kell a Lamb-eltolódást kiadnia. Feltételezem, hogy ezt másodrendű perturbációs számítással lehetne vizsgálni. Korábban el is kezdtem erőfeszítéseket ebbe az irányba, azonban a feladat nagyon nehéz, mert a perturbációs számításban fellépő virtuális állapotoknál a hidrogén elektronjának a kontinumba tartozó állapotait is figyelembe kell venni. Ezeket a konfluens hipergeometrikus függvény adja meg, melynek annak idején nem találtam megfelelő numerikus implementációját, ami eltántorított a feladattól.

### 2. Az egyes dipólok mibenléte (atom – molekula – klaszter)

A módszer olyan értelemben teljesen általános, hogy atomokon és molekulákon kívül tetszőleges klaszter is definiálható mint egyedi dipól, vagyis intimitási zónával bíró részeske. Mivel az intimitási zónán belül az *a priori* (Coulomb-)kép marad érvényben, így az egy, az elektromágneses mezővel való kölcsönhatástól független része a feladatnak, hogy a klaszteren belül a Coulomb-kölcsönhatás által definiált kvantummechanikai problémát megoldjuk, és meghatározzuk a klaszter energiaszintjeit.

Ez egy érdekes renormálás csoport-transzformációs módszert adhat, amellyel elvben a 4. fejezetben bemutatott átlagtér-módszernél pontosabban meghatározható lenne a

kritikus pont. Az intimitási zóna mérete lenne a renormálási paraméter, és egyetlen atomból kiindulva minden lépésben megdupláznánk a klaszter (és az intimitási zóna) méretét, perturbatíván határozva meg az új klaszter legalsó két energiaszintje közötti átmeneti energiát és dipól-mátrixelemet. A módszer limitációja, hogy a klaszterméret növekedésével nő a magasabb multipól-momentumok súlya, amelyeknek kezelése nagyon megnehezítené a feladatot (gyakorlatilag egy végtelen dimenziós paramétertérben kellene meghatározni a renormálásicsoport-transzformációt). Elképzelhető azonban, hogy pusztán a dipólrend figyelembe vételével is releváns eredményre lehetne jutni.

### 3. Kvantumugrás Monte-Carlo hatékonysága

A hivatkozott cikk állítása egész pontosan az, hogy a masteregyenlet integrálásának CPU-idő igénye mindig eggyel nagyobb kitevővel skálázik a rendszermérettel (a teljes Hilbert-tér dimenziószáma), mint a kvantumtrajektória-módszeré. Tehát mindig van egy olyan  $N_{\otimes}$  rendszerméret, amikor a masteregyenlet időigénye leelőzi a kvantumtrajektóriáét. Az utóbbi évtizedekben megjelenő GPU és FPGA alapú számítási architektúrák bizonyos rendszerek esetében növelhették  $N_{\otimes}$  értékét, de nem gondolom, hogy a skálázást megváltoztatták volna.

Véleményem szerint a kvantumtrajektória-módszer jelentősége csak növekedett a cikk írása óta eltelt negyed évszázadban. Ennek fő oka azonban nem a számítási előnyökben keresendő, hanem abban, hogy a második kvantumforradalomban felbukkanó rendszerekben lehetséges egyedi megvalósítások időfejlődését nyomon követni, ami épp a kvantumtrajektóriát jelenti. Ez különösen eklatáns ioncsapdás kísérletekben (ld. például az egyedi kvantumugrások kísérleti megfigyelését), de a disszertációban megjelenő áramkör-kvantumelektrodinamikai kísérletekben is látszik, hogy egy futtatás nagyon hasonlóan viselkedik, mint a kvantumtrajektória (ld. a 7.4[e-g] és 7.6[c] ábrákat, amik voltaképpen a rezonátormódus fotonkiszökési eseményeinek – melyek egyedi kvantumugrások – integráló szűrőn áteresztett időbeli hisztogramjai).

### 4. Forgóhullámú közelítés a numerikában

A forgóhullámú közelítésnek (RWA) numerikus szempontból is nagy jelentősége van. Enélkül ugyanis nem lehetne megszabadulni az időfüggéstől a Hamilton-operátorban, sőt, az a szabad alrendszerek sajátfrekvenciájának nagyságrendjébe eső karakterisztikus frekvenciájú explicit időfejlődéssel rendelkezne. Márpedig differenciálegyenletek numerikus integrálásakor (akár a masteregyenlet-, akár a kvantumtrajektória-módszerben) az időlépés nagysága a rendszer időfejlődésének legkisebb karakterisztikus időskálájával, vagyis a legnagyobb frekvencia inverzével skálázik. Nagy frekvenciák jelenléte tehát drasztikusan lelassítja a szimulációt a szükséges nagyon kicsi időlépés miatt.

Konkrétan a fotonblokádtörés-jelenségkör esetében az RWA-val a rendszer legnagyobb frekvenciája a csatolási állandó, ez a transzmonnál  $\sim 300$  MHz, nanofotonikus rezonátorhoz csatolt kvantumpötty esetében  $\sim 15$  GHz. Az előbbi esetben a szabad frekvencia  $\sim 10$  GHz, tehát 30-szor nagyobb; az utóbbi esetben, az optikai tartományban pedig legalább 4 nagyságrenddel nagyobb lenne. Ennyivel növekedne tehát a szimulációs idő RWA nélkül.

A bíráló által idézett margójegyzetben hivatkozott cikk esetében az RWA-n túli fizikát perturbatíván, a Bloch–Siegert-eltolódás formájában vették figyelembe, ez a gyakorlatban használható módszer.

Budapest, 2024. február 12.

Vukics András