
量子多体理论研究获进展

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/27256.html>

本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！

量子多体理论研究获进展。为解决量子多体计算中处理复杂相互作用的困难，国际原子核格点有效场论合作组提出一套全新的理论方法，并使用该方法进行了核物理的第一性原理（ab initio）计算。由于此方法的创新性、广泛的应用以及对核理论方法的推动，相关成果5月15日发表于《自然》杂志。

记者获悉，华南师范大学量子物质研究院特聘副研究员马远卓为国际原子核格点有效场论合作组主要成员之一。马远卓依托南方核科学计算中心的优质计算资源，开发出大规模高性能GPU格点计算程序，为此项工作的理论计算提供了强有力支撑。

从强相关费米体系到量子化学，从原子和分子系统到核物理，第一性原理（ab initio）计算在深入理解量子多体系统的许多子领域中起着至关重要的作用。由于真实量子系统相互作用的复杂性，高精度的第一性原理计算往往充满挑战。在这项工作中，研究者提出一套解决该问题的全新方案，波函数匹配（wave function matching）方法。

波函数匹配方法的核心是构建一组粒子间相互作用的幺正变换。这样的幺正变换能够在 $r < R$ 区间，将原初的、使用高精度哈密顿量 H 的两粒子波函数与使用容易求解哈密顿量 H_S 的两粒子波函数相匹配。通过这样的幺正变换，能够得到高精度的、与 H_S 相近的全新哈密顿量 H' 。对多体系统，使用 H_S 计算将非常容易，而较小 $H' - H_S$ 的贡献可以通过多体微扰论来考虑。此方法的一个直接应用是解决量子蒙特卡洛方法中符号震荡的困难。

在这项工作中，研究者将波函数匹配方法应用于格点量子蒙特卡洛计算中，采用高精度的手征核力，对轻质量原子核、中等质量原子核、中子物质与核物质的相关性质进行了第一性原理计算，计算结果与实验数据吻合良好。这些结果不仅为核力的研究提供了新的见解，更能帮助解决原子核第一性原理计算中，长久以来的，对原子核能量、电荷半径和核物质性质高精度计算这一挑战。

据了解，论文通讯作者为密西根州立大学教授Dean Lee，其合作者来自于美国密歇根州立大学，德国波恩大学，华南师范大学，于利希研究中心，中国工程物理研究院研究生院、中山大学等。（来源：中国科学报朱汉斌）

相关论文信息：<https://doi.org/10.1038/s41586-024-07422-z>

作者：马远卓等 来源：《自然》

更多 科学进展 请访问 <https://www.iikx.com/news/progress/>

本文版权归原作者所有，请勿用于商业用途，[爱科学iikx.com](https://www.iikx.com)转发