莫特相变的经典对应研究获进展

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/8501.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！

在量子多体系统的研究中，基于配分函数建立量子到经典的对应，有时能够简化对复杂量子问题的理解，但因为解析处理量子作用量的困难，这一方法往往受到很大限制。最近，中国科学院物理研究所/北京凝聚态物理国家研究中心研究员杨义峰指导博士研究生胡丹青、董建军，与物理所研究员王磊、中国工程物理研究院材料研究所研究员黄理合作，结合机器学习方法处理量子作用量，为建立量子到经典对应提供了新的思路。

莫特相变是强关联物理中最重要的基础概念之一，但理论上还缺乏充分理解。人们相信莫特相变与经典气液相变类似，但一直没有能建立起详细的理论对应。杨义峰等人在动力学平均场理论（DMFT）的框架下，基于杂化展开的连续时间量子蒙特卡洛（CT-HYB）方法，结合机器学习将量子杂质模型的有效作用量映射到一个经典的双原子分子系统，发现分子间的相互作用随间距呈简单的指数形式。在此映射下，量子模型的莫特转变对应于经典分子气体的气液转变，并受到相互作用力程的控制。

以上初步结果为理解莫特转变提供了新的视角，扩展了传统的量子—经典对应方法的应用范围。相关文章发表于*Phys. Rev. B* 101, 075111 (2020)，被选为编辑推荐。该工作得到了基金委（11974397、11874329）和科技部重点研发计划（2017YFA0303103）的支持。

论文链接

图1：半满单带Hubbard模型的典型相图，莫特转变为一级相变，阴影为回滞区。

图2：有效杂质模型的CT-HYB量子位形到经典分子气体位形的映射。

图3：利用假设的经典分子气体能量函数拟合量子位形权重，得到分子间相互作用随两者距离的函数形式。

图4：经典参数空间（V_0 、(xi)）中的莫特转变过程，受相互作用力程(xi)控制，V_0 只在莫特相变时出现跃变，或类似于气液转变中的体积。

研究团队单位：物理研究所

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转发