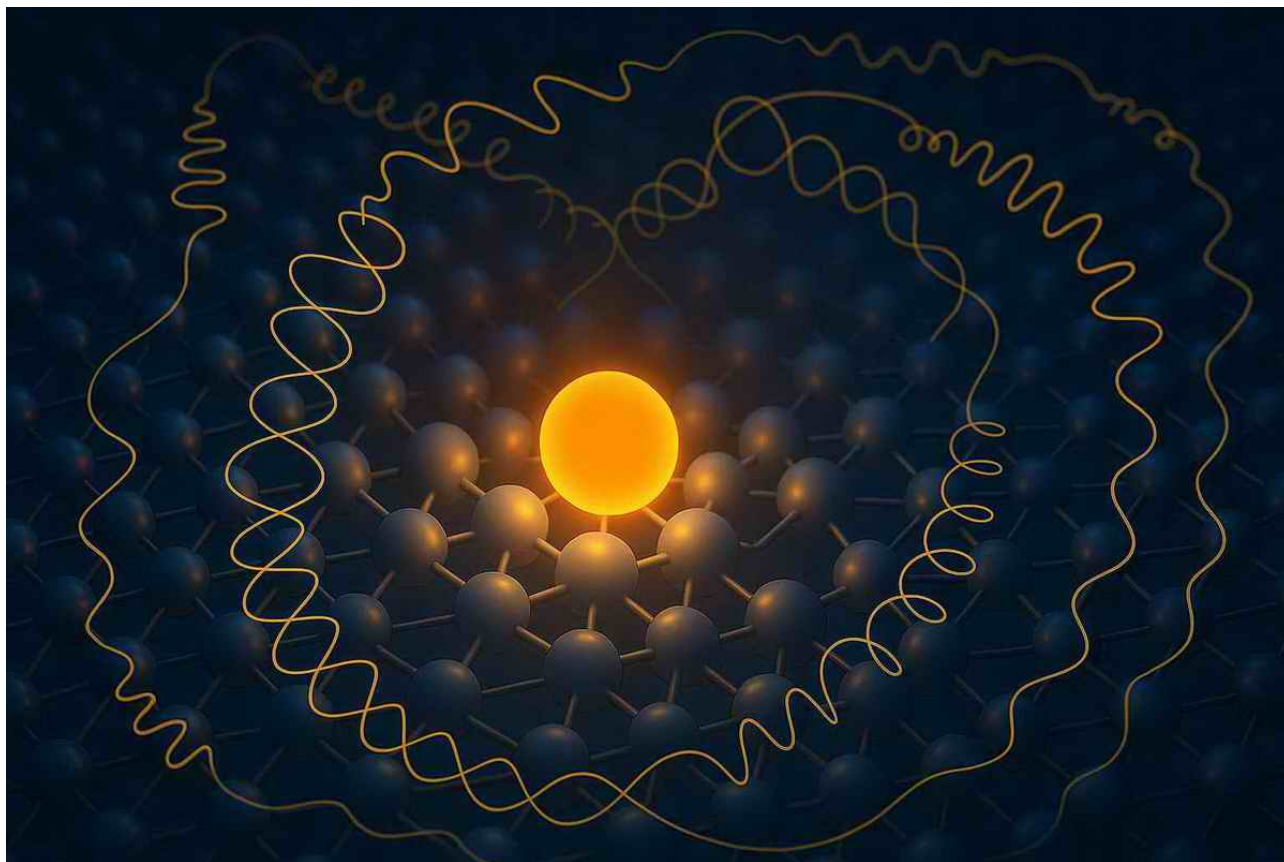


Как суммирование диаграмм Фейнмана помогает раскрывать свойства реальных материалов



Дата публикации: 11.07.2025

Физики Калифорнийского технологического института совершили значительный прорыв в квантовой теории взаимодействующих частиц, решив одну из наиболее сложных задач современной теоретической физики — суммирование диаграмм Фейнмана до произвольного порядка. Это открытие позволяет вычислять свойства материалов с высокой точностью, начиная с первых принципов квантовой механики. Особое внимание в их исследовании уделено проблеме полярона — фундаментальному эффекту, который наблюдается в материалах с сильной связью между электронами и фононами.

Диаграммы Фейнмана — это графическое представление возможных взаимодействий между частицами, таких как электроны и фононы, в рамках квантовой теории поля. Каждая диаграмма соответствует определённому математическому выражению, описывающему вероятность конкретного процесса рассеяния. В простых системах можно ограничиться несколькими диаграммами низшего порядка. Однако в более сложных материалах, особенно тех, где наблюдаются сильные взаимодействия, необходимо учитывать

диаграммы вплоть до высоких порядков, что делает прямой расчёт практически невозможным из-за лавинообразного роста количества комбинаций.

Особую сложность представляет описание поляронов — состояний, в которых электрон, двигаясь по кристаллической решётке, искажает её и тем самым сам же себя «связывает» с этим искажением. Это взаимодействие между электрическим зарядом и колебаниями решётки (фононами) приводит к изменению массы и подвижности электрона. Поляроны играют важную роль в таких материалах, как диоксид титана, литий-фторид и титанат стронция, и напрямую влияют на проводимость, оптические свойства, теплопередачу и даже сверхпроводимость.

Обычные подходы, основанные на теории возмущений, теряют свою применимость в случае поляронов, так как каждый последующий порядок диаграмм Фейнмана становится всё более значимым. Учёные из Caltech предложили новый подход, сочетающий методы диаграммного Монте-Карло (DMC) с интеллектуальной системой выборки и сжатием данных. Метод DMC позволяет проводить случайную, но управляемую выборку диаграмм, наиболее значимых для конечного результата. Вместо прямого перебора всех возможных конфигураций, исследователи фокусируются на наиболее информативных частях пространства диаграмм.

Одной из ключевых проблем в подобных расчётах долгое время оставалась так называемая «проблема знаков» — флуктуации в знаке суммируемых вкладов, приводящие к нестабильности результатов. Группа Марко Бернарди разработала способ представить диаграммы в виде произведений тензоров — многомерных матриц, — что позволяет эффективно учитывать вклад высоких порядков и значительно ослабляет эту проблему. Дополнительно, они применили метод компрессии электронно-фоонных матриц, что позволило радикально сократить вычислительные затраты.

Используя полученный алгоритм, исследователи рассчитали параметры поляронов для нескольких реальных материалов, что позволило получить данные, совпадающие с результатами спектроскопии, теплопроводности и электронного транспорта. Работа демонстрирует, что подход, основанный на первых принципах, даёт возможность предсказывать макроскопические свойства материалов, начиная с фундаментальных уравнений квантовой механики и без подгонки под экспериментальные данные.

Этот метод открывает путь к новой эпохе в физике твёрдого тела, позволяя с высокой точностью описывать сложные эффекты в квантовых и классических материалах. Более того, предложенный алгоритм может быть адаптирован для других областей физики, включая сильное взаимодействие света с веществом,

анализ неравновесных состояний и даже разработку новых интерпретаций диаграмм в рамках альтернативных физических теорий.

Таким образом, учёные не только преодолели барьер, ограничивавший точность расчётов электронно-фоонных взаимодействий, но и открыли универсальный инструмент, который можно применять в широком спектре задач — от проектирования квантовых устройств до создания новых поколений материалов с заранее заданными свойствами.

Ссылка: «Диаграммный метод Монте-Карло из первых шагов для электрон-фоонных взаимодействий и полярона» DOI: [10.1038/s41567-025-02954-1](https://doi.org/10.1038/s41567-025-02954-1).