arXiv:2302.02328v1 [cond-mat.str-el] 5 Feb 2023

通过电荷涨落产生的近藤挫折：通向莫特局域化的途径

Abhirup Mukherjee[1], N. S. Vidhyadhiraja[2],A. Taraphder[3] 和 Siddhartha Lal [1]

电子邮箱： am18ip014@iiserkol.ac.in, raja@jncasr.ac.in, arghya@phy.iitkgp.ernet.in, slal@iiserkol.ac.in[1]
印度科学教育与研究学院加尔各答分校物理科学系，印度西孟加拉邦 741246[2]贾瓦哈拉尔·尼赫鲁高级科学研究中心理论科学部，贾库尔，班加罗尔 560064，印度[3]

印度理工学院克勒格布尔分校物理系，印度克勒格布尔 721302

摘要。 我们提出了一种最简有效杂质模型，可再现动力学平均场理论（动力学平均场理论）所揭示的无限维贝特晶格上半填充哈伯德模型的莫特-哈伯德金属-绝缘体转变（MIT）的现象学特征。该模型通过扩展标准安德森杂质模型的哈密顿量，引入显式的近藤耦合 J，并在与杂质直接相连的导电浴格点上加入局域位点内关联 U_b 。对于局域浴关联为吸引性（$U_b < 0$）的情形，扩展安德森杂质模型（e-SIAM）为动力学平均场理论相图的若干方面带来了新的认识。例如，$T = 0$ 金属到绝缘体的量子相变（QPT）之前会出现激发态量子相变（ESQPT），此时局域磁矩本征态在低能谱中涌现。在量子相变和激发态量子相变附近都观察到长程涨落，这表明它们可能是近期在动力学平均场理论模拟中高温条件下观测到的量子临界标度的根源。量子临界点处的 $T = 0$ 无能隙激发呈现粒子-空穴转换过程，并且自能和双粒子关联表现出幂律行为。这些特征表明，近藤屏蔽部分破缺后会涌现非费米液体行为。

1. 引言

强关联系统中金属-绝缘体转变所呈现的丰富物理，长期以来一直是研究热点 [1–3], ，但仍有许多问题有待理解。这一领域涉及诸多方面，例如自旋和电荷涨落、准粒子重整化效应、反常金属相和非常规超导性；研究方法同样多种多样，包括平均场理论、重整化群方法、精确对角化等数值技术、量子蒙特卡洛和动力学平均场理论等。尤其是，动力学平均场理论（动力学平均场理论） [4–12] 通过安德森杂质模型，精确求解半填充哈伯德模型的莫特金属-绝缘体转变（MIT） [13–17] ；该模型位于无限配位数的贝特晶格上，其浴通过自洽方式确定，具体做法是迭代要求浴的局域格林函数与杂质位点的局域格林函数相等。前述转变可通过局域谱函数来刻画，其特征为：（i）莫特能隙连续出现，随后（ii）中央近藤共振逐渐变尖并最终消失。这两个特征分别常被称为莫特金属-绝缘体转变中的莫特-哈伯德 [16] 和 Brinkman-Rice [17] 情景。该解之所以精确，是因为当晶格模型的配位数趋于无穷时，所有非局域晶格自能贡献均会消失。因此，模型得以简化：晶格上任一局域格点的动力学完全由一个量子杂质问题 [8,18] 决定。还需指出，这一精确解排除了系统中的任何长程有序，对应于最大挫折的哈伯德模型，其中存在长程且具有挫折效应的位点间跃迁，使金属相和绝缘相均保持顺磁性 [19]。由于动力学平均场理论对 $d=\infty$中的金属-绝缘体转变给出了精确且非微扰的解，该方法已扩展至有限空间维度下的强关联电子模型 [10,20,21],，并用于研究各种关联材料的电子性质[22–24]。

尽管取得了这些进展， $d=\infty$ 中哈伯德模型的动力学平均场理论解仍有一个关键方面有待理解。在寻找自洽杂质模型的过程中，传导浴会被大幅改造，从而产生关联 [25]。然而，自洽性的数值实现阻碍了我们深入理解杂质模型传导浴中关联的确切性质，以及这些关联对相应体晶格（哈伯德）模型电子动力学的影响。下文将阐述我们所探讨的具体问题，并在本节末总结研究结果。

i. 是否存在一种精简而有效的量子杂质模型哈密顿量，能够描述 $d=\infty$ 中贝特晶格上 $1/2$ 填充的哈伯德模型的莫特金属-绝缘体转变?

ii. 哪些涨落会破坏金属态并导致绝缘相？我们能否为这些相互竞争的趋势建立一种普适理论?

iii. $T=0$ 在动力学平均场理论（DMFT）中，金属相与绝缘相的共存表明，绝缘解存在于金属相的多体谱中。与之对应的杂质模型哈密顿量能否展现绝缘态在相变发生前的出现?

iv. 这能否解释 $T>0$ 在动力学平均场理论（DMFT）中得到的旋节线和一阶线？最近在有限温度二阶临界点 [19,26]之上观察到的量子临界涨落源自何处?

v. 能否为金属濒临瓦解时、恰处于金属-绝缘体转变（MIT）处的局域无能隙激发建立低能理论？这些激发与局域费米液体的激发有何异同，例如在自能和二粒子关联函数方面?

我们方法的核心，是在扩展安德森杂质模型中，将动力学平均场理论得到的晶格自能唯象地建模为额外的浴关联。除了安德森杂质模型中杂质与传导浴之间通常的位点内排斥作用（U）和单粒子杂化（V）（式（1））之外，我们还引入了：（i）杂质与之耦合的浴格点上的额外位点内关联（U_b）；以及（ii）杂质与传导浴之间的反铁磁近藤耦合（J）（式（2））。值得一提的是，几年前，Si 和 Kotliar 也曾采用类似的基于杂质模型的方法来理解重费米子的物理性质 [27,28]。我们将在讨论部分再比较我们的工作与他们的研究。本文其余部分安排如下：第（2.1）节介绍我们将要研究的扩展模型，第（2.2）节介绍我们用来研究该模型的幺正重整化群（URG）方法。第（3）节和第（4）节介绍相图以及杂质相变的各种特征。在第（6）节，我们用扩展模型解释动力学平均场理论中观察到的共存区域的各种特征。在第（7）节，我们介绍相变附近及相变处杂质对浴低能激发的影响。最后，第（8）节总结讨论并展望未来可能的研究方向。为便于

读者阅读，下面先简要概述我们的主要结果。

主要结果总结

- 局域金属-绝缘体转变的存在：当参数 $r = -U_b/J$ 取某一临界值时，有效杂质模型会从近藤屏蔽相转变为未屏蔽的局域磁矩相。该量子临界点（QCP）涉及近藤单态与局域磁矩态的简并。

- 近藤屏蔽与局域配对的物理机制驱动相变：该相变涉及浴中局域配对涨落增强对杂质近藤屏蔽的挫折，并可由一个以 J 和 U_b表示的普适理论描述。

- 金属相中绝缘解的出现：我们的分析表明，在相变发生之前，当参数 r 取某一特定值时，单粒子杂化参数（V）变为无关（在重整化群意义上），这通过激发态量子相变（ESQPT）使局域磁矩解出现在多粒子谱中。

- 临界涨落与共存区域：我们观察到，在 $r = r_{c1}$ 处的 ESQPT 和 $r = r_{c2}$处的 QPT 附近，长程量子涨落会延伸至传导浴中。我们认为，这很可能是动力学平均场理论（DMFT）中有限温度下二阶临界点以上所观察到的临界涨落的起源 [19, 26]。在 $T = 0$ 处的两步过程，也自然解释了相图中金属态与绝缘态特征在 $r_{c1} < r < r_{c2}$这一参数范围内共存的现象。

- 量子临界点处非费米液体激发的涌现：在量子临界点（QCP）处，局域费米液体被一种跨越杂质、传导浴第零格点和第一格点的准局域非费米液体（NFL）所取代。NFL 源于局域磁矩态与单态之间的简并，并导致：(i) 入射态向正交出射态的“安德烈夫散射”；(ii) 自能和双粒子关联呈现具有普适指数的反常幂律行为；(iii) 杂质具有分数纠缠熵。

- 哈伯德边带中的关联费米液体激发：对哈伯德边带进行多体微扰理论处理后发现，它们由杂质位点与传导浴杂化所产生的空穴子-双占据子激发构成。在最低阶，这些激发由彼此解耦的空穴子和双占据子局域费米液体组成；在更高阶时，杂质与浴之间的关联空穴子-双占据子散射会使它们相互耦合。

2. 模型哈密顿量与方法

2.1. 扩展安德森杂质模型

单杂质安德森模型（SIAM） [29,30] 由一个具有局域排斥关联的单一杂质位点U 构成，该位点通过耦合为 V的（与动量无关的）单粒子跃迁，与非相互作用的费米子传导浴发生杂化。对于半填充杂质位点，SIAM 的哈密顿量为

$$\mathcal{H}_{\mathrm{A}} = -\frac{U}{2}\left(\hat{n}_{d\uparrow} - \hat{n}_{d\downarrow}\right)^2 + \sum_{\vec{k},\sigma} \epsilon_{\vec{k}} \tau_{\vec{k},\sigma} + V \sum_{\sigma} \left(c_{d\sigma}^{\dagger} c_{0\sigma} + \mathrm{h.c.} \right), \tag{1}$$

其中，$\tau_{\vec{k},\sigma} \equiv c_{\vec{k},\sigma}^{\dagger} c_{\vec{k},\sigma} - 1/2$ 表示单粒子动量态 $|\vec{k}\rangle$的占据数。此外，$c_{d\sigma}$ 和$c_{0\sigma} = \sum_k c_{k\sigma}$ 分别是自旋为 σ 、作用于杂质位点和与之耦合的传导浴格点（下文称为零号位点）的费米子湮灭算符。通常认为传导浴具有恒定（即与能量无关）的态密度。

SIAM（及其 $U \to \infty$ 极限——近藤模型）已采用多种解析和数值技术进行研究 [31–46]。对于正 U 情形，在 $T = 0$ 粒子-空穴对称线（即半填充线上），普遍结论是杂质局域磁矩总会被传导电子屏蔽（称为近藤云 [47–58]）。低能下增强的自旋翻转散射会形成宏观单重态基态，以及局域费米液体的无能隙激发 [59,60]。为了扩展 SIAM，我们在哈密顿量中引入两个额外的双粒子相互作用项：

- 一个自旋交换项 $JS_d \cdot \vec{S}_0$，作用于杂质自旋 S_d 和零号位点的自旋 $\vec{S}_0$，以及
- 浴的第零格点上的局域粒子-空穴对称关联项 $-U_b(\hat{n}_{0\uparrow} - \hat{n}_{0\downarrow})^2$。

加入这些额外项后，扩展单杂质安德森模型 （以下简称 e-SIAM）的哈密顿量在粒子-空穴对称性下为

$$\mathcal{H}_{\text{E-A}} = \mathcal{H}_{\text{A}} + J\vec{S}_d \cdot \vec{S}_0 - \frac{1}{2}U_b \left(\hat{n}_{0\uparrow} - \hat{n}_{0\downarrow}\right)^2 \ . \tag{2}$$

哈密顿量中的所有项均已在图（1）左图中以示意图形式展示。附加的相互作用项 J 和 U_b 具有粒子-空穴、SU(2)自旋和 U(1)电荷对称性。因此，扩展单杂质安德森模型哈密顿量（式（2））保留了晶格上半填充哈伯德模型的所有局域对称性，并有望作为一种有效的辅助量子杂质模型（具有关联浴），用于描述后者的局域物理。

2.2. 幺正重整化群方法

为了获得扩展单杂质安德森模型的各种低能相，我们采用近期发展的幺正重整化群（URG）方法 [61, 62]，对相关哈密顿量（式（2））进行标度分析。该方法已成功应用于多种关联费米子问题 [46, 61–68]。该方法通过解析高能自由度中的量子涨落，得到具有重整化耦合和新涌现自由度的低能哈密顿量。通常，对于费米能为 ϵ_F、带宽为 D_0的系统，等能壳层序列 $\{D_{(j)}\}$， $D_{(j)} \in [\epsilon_F, D_0]$ 定义了其量子涨落将被依次解析的各态。位于远离费米面的壳层 $D_{(j)}$ 上的动量态构成紫外态，而位于费米面附近壳层上的动量态则构成红外态。该方案如图（1）右图所示。



图1. *Left:* 扩展单杂质安德森模型哈密顿量的一维示意图。红色球体表示杂质位点，其位点内哈伯德项为 U。它通过两个耦合常数 V和 J 与浴的第零格点（较大的蓝色球体）相连；该格点有自己的位点内哈伯德项 U_b。小蓝色球体构成浴的其余部分，并通过单粒子跃迁 t相连。 *Right:* 幺正重整化群方法中定义并使用的高能—低能方案。远离费米面的态构成紫外子空间，并首先被解耦，从而得到一个块对角性更强、仅由费米面附近红外态组成的哈密顿量。

经过 URG 变换后，给定重整化群步骤 j 中的哈密顿量 $H_{(j)}$ 涉及能量低于 $D_{(j+1)}$的 k–态之间的散射过程。随后定义幺正变换 $U_{(j)}$ ，以消除当前能量最高的一组态 $D_{(j)}$ [61, 62]的数目涨落：

$$H_{(j-1)} = U_{(j)} H_{(j)} U_{(j)}^{\dagger} \ , \text{such that } \left[H_{(j-1)}, \hat{n}_j\right] = 0 \ . \tag{3}$$

的本征值 $\hat{n}_j$ 因此在重整化群变换下被化为一个运动积分（IOM） .

幺正变换可以用具有费米子代数 [61, 62]的生成元$\eta_{(j)}$ 表示:

$$U_{(j)} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(1 + \eta_{(j)} - \eta_{(j)}^{\dagger}\right) \ , \quad \left\{\eta_{(j)}, \eta_{(j)}^{\dagger}\right\} = 1 \ , \tag{4}$$

其中 $\{\cdot\}$ 是反对易子。在公式（4）中出现的幺正算符 $U_{(j)}$ 可以写成幺正算符能够采用的众所周知的一般形式 $U = e^{\mathcal{S}}$， $\mathcal{S} = \frac{\pi}{4}\left(\eta_{j()}^{\dagger} - \eta_{(j)}\right)$， 该形式由反厄米算符$\mathcal{S}$定义。生成元$\eta_{(j)}$ 的表达式为 [61, 62]

$$\eta_{(j)}^{\dagger} = \frac{1}{\hat{\omega}_{(j)} - \text{Tr}\left(H_{(j)}\hat{n}_j\right)} c_j^{\dagger} \text{Tr}\left(H_{(j)} c_j\right) \ . \tag{5}$$

算符 $\eta_{(j)}, \eta^{\dagger}{}_{(j)}$ 的行为类似于单粒子场算符 $c_j, c_j^{\dagger}$ 的多粒子对应物——它们会改变单粒子福克空间 $|n_j\rangle$ 的占据数。重要算符 $\hat{\omega}_{(j)}$ 源自

问题中存在的量子涨落，这是由于哈密顿量中的动能项与相互作用项不对易所致：

$$\hat{\omega}_{(j)} = H_{(j-1)} - H^i_{(j)} \ . \tag{6}$$

$H^i_{(j)}$ 是 $H_{(j)}$ 中与 $\hat{n}_j$ 对易、但不与至少一个 $\hat{n}_l$ 对易的部分， $l < j$。重整化群流持续至能量 D^*，此时由于重整化群函数消失而达到一个不动点。文献 [61, 66]中详细比较了 URG 与其他方法（如泛函重整化群、谱分岔重整化群等）。关于幺正重整化群方法的更多信息，见补充材料第 1 节 [69]。

3. $T = 0$ 扩展单杂质安德森模型的标度理论

3.1. 扩展单杂质安德森模型的 *URG* 方程

扩展安德森杂质模型（e-SIAM）哈密顿量的重整化群方程推导见补充材料第 2 节 [69]。浴耦合 U_b 是边缘的。下面给出给定量子涨落尺度 ω下其余耦合常数的重整化群方程：

$$\Delta U = 4V^2 n_j \left(\frac{1}{d_1} - \frac{1}{d_0}\right) - n_j \frac{J^2}{d_2}, \tag{7}$$

$$\Delta V = -\frac{3n_j V}{8}\left[J\left(\frac{1}{d_2} + \frac{1}{d_1}\right) + \frac{4U_b}{3}\sum_{i=1}^{4}\frac{1}{d_i}\right],$$

$$\Delta J = -\frac{n_j J\,(J + 4U_b)}{d_2} \ , \tag{8}$$

其中分母 d_i 为

$$d_0 = \omega - \frac{D}{2} + \frac{U_b}{2} - \frac{U}{2},\ d_1 = \omega - \frac{D}{2} + \frac{U_b}{2} + \frac{U}{2} + \frac{J}{4} \ , \tag{9}$$

$$d_2 = \omega - \frac{D}{2} + \frac{U_b}{2} + \frac{J}{4} \ , d_3 = \omega - \frac{D}{2} + \frac{U_b}{2} \ . \tag{10}$$

重整化群方程中所用符号的含义如下： ΔU 表示通过解耦能量为 $D_{(j)}$ 的等能壳层，从 j^{th} 哈密顿量变换到（$j-1$）th 哈密顿量时，耦合 U 的重整化（见图（1）右图）。 n_j 是壳层 $D_{(j)}$上的电子态数目。我们注意到，出现在各图（以及正文其他部分）中的标签 U_0、 J_0、 V_0 表示相应耦合常数 U、 J和 V的裸值。当耦合常数 U、 V和 J处于微扰区间时，重整化群方程分别化为单杂质安德森模型 [34] 和单通道近藤模型 [33]中众所周知的“可怜人”标度形式。

重整化群不动点哈密顿量描述系统的低能相。一般而言，若重整化群不动点在能标 D^*处达到，则不动点哈密顿量 $\mathcal{H}^*$ 只需由耦合常数的不动点值确定（并注意到， D^* 以上的态现在属于积分运动常数）：

$$\mathcal{H}^* = \sum_{\sigma,\vec{k}}^{|\epsilon_{\vec{k}}|<D^*} \epsilon_{\vec{k}}\tau_{\vec{k},\sigma} + V^* \sum_{\sigma}\left(c^\dagger_{d\sigma}c_{0\sigma} + \text{h.c.}\right) + J^*\vec{S}_d\cdot\vec{S}_0 - \frac{1}{2}U^*\left(\hat{n}_{d\uparrow} - \hat{n}_{d\downarrow}\right)^2 - \frac{1}{2}U_b\left(\hat{n}_{0\uparrow} - \hat{n}_{0\downarrow}\right)^2 \ .$$

修正 点值通过数值求解重整化群方程获得 .

3.2. 相图

我们将在低能区间内开展研究，其中量子涨落尺度 ω 使得所有分母均为负： $d_i < 0\ \forall\ i$。此外，我们通过关系式 $U_b = -U/10$约束杂质和局域浴关联（分别为 U 和 U_b ）。虽然因子 $1/10$ 的精确取值并不重要，但我们选择了一个远小于 1 的因子，以表明即使 $|U_b|$ 的取值远小于 U，也能得到一系列有趣的结果。此外，上述关系中的负号意义重大，因为我们将在下文看到，当 U_b 为负时（即浴的零号位点具有吸引性位点关联），就会出现 MIT。 U_b 与 U 之间的关系具有唯象依据：当格点内哈伯德排斥增大到很大时，体晶格模型中发生的 MIT，在动力学平均场理论中的辅助模型映射下，对应于通过调节杂质而观察到的局域 MIT

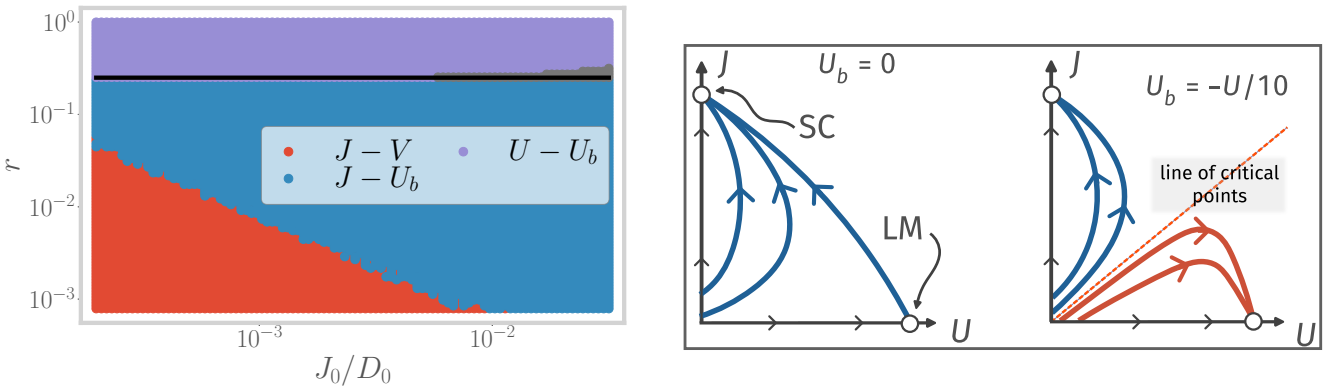

图2. *Left:* 扩展单杂质安德森模型在 r 和 J_0/D_0参数空间中的相图。 U_b 设为 $-U_0/10$。各种相见正文。 *Right:* $U_b = 0$ 和 $U_b = -U/10$的重整化群流示意图。蓝色曲线表示流向强耦合（SC）不动点的重整化群流，红色曲线表示流向局域磁矩（LM）不动点的重整化群流。

关联 U （以及相关的浴关联 U_b），它们属于所提出的有效杂质模型哈密顿量。在浴中引入吸引性位点关联的物理意义，在于为近藤屏蔽的挫折提供了一种机制（对于反铁磁近藤耦合 J（> 0），方程（8））：在一个与单通道传导电子耦合的安德森杂质中，这种机制体现于重整化群方程。我们在本文的结论部分对这一点作了详细讨论。

区域	低能有效哈密顿量 $\text{K.E}^* + V^* \sum_\sigma \left(c^\dagger_{d\sigma} c_{0\sigma} + \text{h.c.}\right) + J^* \vec{S}_d \cdot \vec{S}_0$	杂质基态
1. $0 < r < r_{c1}$		$= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\left\|\uparrow_d\right\rangle \left\|\downarrow_0\right\rangle - \left\|\downarrow_d\right\rangle \left\|\uparrow_0\right\rangle + \left\|2_d\right\rangle \left\|0_0\right\rangle + \left\|0_d\right\rangle \left\|2_0\right\rangle\right)$
2. $r_{c1} < r < r_{c2}$	动能$^* + J^* \vec{S}_d \cdot \vec{S}_0 - \frac{1}{2} U_b \left(\hat{n}_{0\uparrow} - \hat{n}_{0\downarrow}\right)^2$	$= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\left\|\uparrow_d\right\rangle \left\|\downarrow_0\right\rangle - \left\|\downarrow_d\right\rangle \left\|\uparrow_0\right\rangle\right)$
3. $r_{c2} < r$	动能$^* - \frac{U^*}{2} \left(\hat{n}_{d\uparrow} - \hat{n}_{d\downarrow}\right)^2 - \frac{U_b}{2} \left(\hat{n}_{0\uparrow} - \hat{n}_{0\downarrow}\right)^2$	$\left\{\left\|\uparrow_d\right\rangle, \left\|\downarrow_d\right\rangle\right\}$

表1. 图（2）中相图三个重要部分的有效哈密顿量和基态。基态经过简化，仅保留杂质位点的构型，以及至多浴的第零格点的构型。动能* 表示固定点窗口内传导电子态的动能D^*。

相图如图（2）左图所示，纵轴为参数 $r = |U_b|/J$，横轴为裸近藤耦合（J_0）与裸传导浴带宽（D_0）之比。我们首先定义耦合常数空间中的两个重要点。这些点对应参数 r 取特定值时重整化群流的性质发生定性变化，进而导致模型低能物理发生变化

- $r = r_{c1}$ $\left(= -\left(\frac{U_b}{J}\right)_{c1} = \frac{3}{20} = \left(\frac{U}{10J}\right)_{c1} > 0\right)$：在此点，耦合 V变为无关，
- $r = r_{c2}$ $\left(= -\left(\frac{U_b}{J}\right)_{c2} = \frac{1}{4} = \left(\frac{U}{10J}\right)_{c2}\right)$：此时，耦合 J也变得无关。请注意， $r_{c2} > r_{c1}$。

我们将使用参数的这两个取值 r 作为检查点，以此描述低能物理。图（2）中有三个重要区域：

- 红色区域， $0 < r < r_{c1}$： $J - V$ 模型； V 和 J 均相关，但 U 无关；杂质上的自旋和电荷离域；基态中存在自旋-电荷混合
- 蓝色区域， $r_{c1} < r < r_{c2}$： $J - U_b$ 模型； J 相关，但 V和 U 均无关；杂质上的电荷局域和自旋离域；单重态基态
- 紫色区域， $r_{c2} < r$： $U - U_b$ 模型； U 相关，但 V 和 J 均无关；杂质上的自旋和电荷局域；局域磁矩基态。

通向这些相的典型重整化群流如图（3）所示。我们还注意到，图（2）右上角的灰色区域对应的模型中，三个耦合常数（J、 U 和 V）在重整化群意义下均为无关。不过我们发现，这一相是对杂质耦合到有限尺寸传导浴时求解重整化群方程所产生的假象；随着浴尺寸增大，它会逐渐消失。

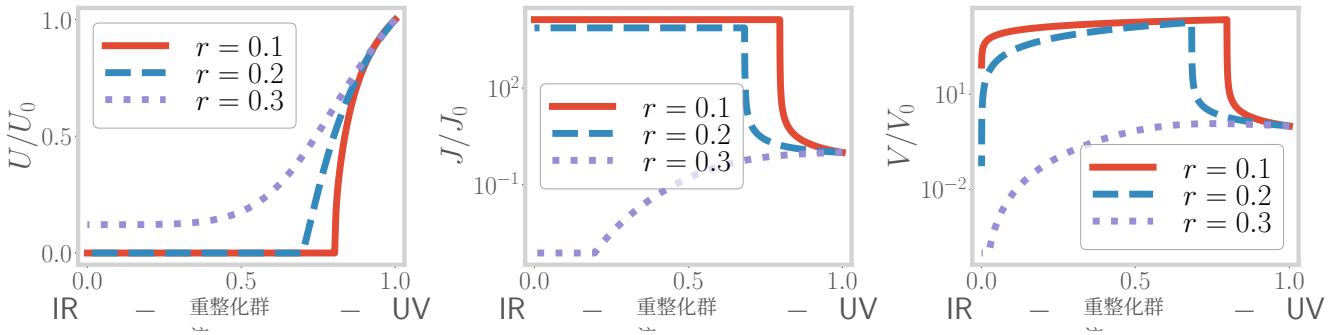

图3。 在重整化群变换过程中，耦合常数 U，V和 J随相变调控比 $r = -U_b/J_0$的三个取值而变化。横轴表示运行截止尺度与费米面之间的距离；最右端对应第一个重整化群步骤（紫外），最左端对应最后一个重整化群步骤（红外）。红色曲线表示 $r < r_{c1}$的流，其中 V和 J均为相关。蓝色曲线表示 $r_{c1} < r < r_{c2}$的重整化群流，其中 J为相关，而 V为无关。紫色曲线表示 $r > r_{c2}$的重整化群流，其中 V和 J均为无关，但 U流向有限值。

3.3. 在 r_{c2}处的相变

各相对应的有效哈密顿量和杂质基态已列于表（1）中。我们通过数值求解不同耦合常数裸值下的不动点哈密顿量，考察了基态的变化，结果如图（4）左图所示。基态从自旋单态突变为局域磁矩，表明蓝色相与紫色相由一次杂质离域-局域化转变分隔（图（2）中的黑线）。该相变发生在关联取有限值时：$r_{c2} = -\left(\frac{U_b}{J}\right)_{c2} = \frac{1}{4} = \left(\frac{U}{10J}\right)_{c2}$。这与标准单杂质安德森模型形成鲜明对比；在该模型中，只有当位点内关联 $U \to \infty$时才会发生相变。因此，各种耦合常数取有限值时临界点的存在，改变了右图示意的重整化群相图格局（图（2）右图）：重整化群流分为两类——一类流向强耦合近藤屏蔽定点，另一类流向局域磁矩固定点。

通过对 J（方程（8）的重整化群方程进行简单改写，可以看出，杂质相变源于 J的近藤屏蔽物理与 U_b的局域配对物理之间的竞争：

$$\Delta J = \overbrace{\frac{(J+2U_b)^2 n_j}{|d_2|}}^{\text{usual Kondo physics}} - \overbrace{\frac{(2U_b)^2 n_j}{|d_2|}}^{\text{competing pairing physics}}, \tag{11}$$

其中 $d_2 = \omega - D/2 + U_b/2 + J/4$。有效近藤项 $(J+2U_b)^2$与相互竞争的配对项 $-4U_b^2$之间的竞争，导致了两个稳定相的存在——一个为近藤屏蔽相，另一个则保持未屏蔽。

在无限维贝特晶格上对 1/2 填充的哈伯德模型进行动力学平均场理论处理时，由于晶格自能中的非局域贡献消失，晶格格林函数可以通过求解局域量子杂质问题 [8]而实现自洽计算。在本文的其余部分，我们将提供大量证据，表明在扩展单杂质安德森模型中观察到的局域相变与动力学平均场理论中观察到的莫特金属-绝缘体转变非常相似。由此我们得出结论：扩展单杂质安德森模型忠实地描述了电子在贝特晶格上的往返运动，而在扩展单杂质安德森模型中观察到的杂质相变，则为体哈伯德模型中的莫特金属-绝缘体转变提供了局域描述。基于这些证据，今后我们将把 r_{c2} 处的相变称为局域金属-绝缘体转变。

4. 局域金属-绝缘体转变的表征量

本节将通过补充的相变表征量，进一步阐明杂质相变的性质。这些表征量包括杂质谱函数和纠缠度量，均由扩展单杂质安德森模型哈密顿量计算得出。

4.1. 杂质谱函数的演化

标准单杂质安德森模型（式（1））的杂质谱函数在U 取有限值时总会显示一个中心峰（当 U足够大时，还会出现哈伯德边带），这表明杂质位点上存在无能隙局域费米液体

激发 [36, 70, 71]。为展示杂质局域化转变，我们计算了扩展单杂质安德森模型（式（2））的杂质局域谱函数。具体而言，我们沿重整化群流，在多个能标下对有效哈密顿量进行数值对角化，并计算从紫外到红外一系列频率范围内的谱权重。我们发现，谱函数（见图（4）右图）呈现出三个显著特征，与动力学平均场理论的结果一致 [8]:

- 当 r 跨越 $r_{c1}\left(=-\binom{U_b}{J}_{c1}=\frac{3}{20}=\binom{U}{10J}_{c1}\right)$时，出现预形成能隙（中心峰与边带之间的谱函数变平）：预形成能隙仅表明在 r_{c1}之外，自旋（中心峰）和电荷（边带）自由度发生了分离。这种分离是由 V变得无关紧要所致。

- 当 r 在 $r_{c1}<r<r_{c2}$范围内增大时，中心峰变尖锐，同时预形成能隙也增大。

- 中心峰消失并出现硬能隙，此时 r 越过 r_{c2}：超过r_{c2} 后， J 变得无关紧要，破坏了近藤屏蔽，并使杂质磁矩局域化。这涉及单重态基态失稳，以及局域磁矩态取而代之并趋于稳定。

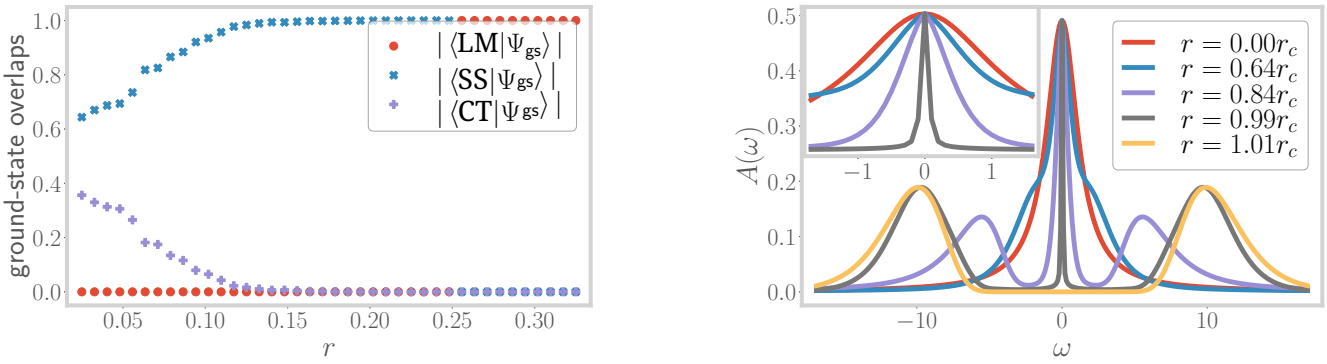

图4. *Left:* 在模型的三个不同区域中，重整化群不动点基态与自旋单重态 $|\mathrm{SS}\rangle$、电荷三重态 $|\mathrm{CT}\rangle$ 中电荷为零的成员，以及局域磁矩态 $|\mathrm{LM}\rangle$之间的重叠。在临界点 $r_{c2}=0.25$之后，与纠缠态的重叠消失，表明系统转变为解耦局域磁矩。 *Right:* 杂质谱函数从 $r=0$ 到 $r>r_{c2}$的变化。在较小的 r下，中心峰较宽；而在较大的 r下，中心峰变尖锐，谱权重的差异被用于形成哈伯德边带。对于 $r>r_{c2}$，中心峰消失。

这些特征也体现在基态关联量中，例如自旋翻转关联和电荷同位旋翻转关联（见图（5）左图），其定义如下:

$$\frac{1}{2}\left(\langle S_i^+S_j^-\rangle+\mathrm{h.c.}\right)=\frac{1}{2}\left(\langle c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow}c_{j\downarrow}^\dagger c_{j\uparrow}\rangle+\mathrm{h.c.}\right)\ ,\ \frac{1}{2}\left(\langle C_i^+C_j^-\rangle+\mathrm{h.c.}\right)=\frac{1}{2}\left(\langle c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow}^\dagger c_{j\downarrow}c_{j\uparrow}\rangle+\mathrm{h.c.}\right)\ . \tag{12}$$

在 r较小时，两种关联都很强，因为基态同时具有自旋和电荷成分（表（1）第 1 行）。随后，杂质-浴电荷翻转关联减弱（图（5）中的紫色点），同时杂质-浴自旋翻转关联增强（图（5）中的红色点），这可归因于 V 在 $r\simeq r_{c1}$ 处变得无关紧要，以及谱函数中预形成能隙的出现。超过 r_{c2}后，自旋翻转关联因 J变得无关紧要而急剧降至零。取而代之的是浴内关联，例如零号位点与第一位点之间的电荷同位旋翻转关联（图（5）中的蓝色点）。浴的位点内项 U_b会促进这类浴内关联。在 r_{c2} 处，基态性质及其关联发生突变，表明存在一个量子临界点，其性质将在后续章节中进一步分析。

4.2. 利用纠缠追踪相变过程中的关联

现在我们将说明，某种纠缠度量会表现为该相变的序参量。我们可以用波函数 $|\psi_1\rangle$ 和 $|\psi_2\rangle$ [72–74]定义纠缠的几何度量:

$$\varepsilon\left(\psi_1,\psi_2\right)=1-|\langle\psi_1|\psi_2\rangle|^2\ . \tag{13}$$

根据这个定义，如果 $|\psi_1\rangle$ 对应于可分离态，那么当其与 $|\psi_1\rangle$ 的重叠较大时，态 $|\psi_2\rangle$ 的纠缠含量就较小。为简洁起见，我们将使用记号 $\varepsilon_{\mathrm{ss}}\equiv\varepsilon\left(\psi_{\mathrm{ss}},\psi_{\mathrm{gs}}^{(2)}\right)$， $\varepsilon_{\mathrm{ct}}\equiv\varepsilon\left(\psi_{\mathrm{ct}},\psi_{\mathrm{gs}}^{(2)}\right)$ 来

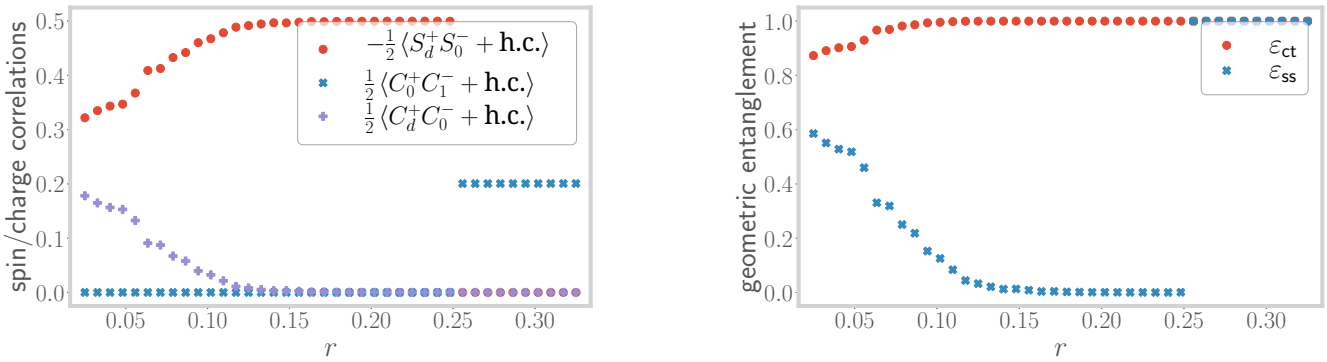

图 5. *Left:* 从 $r \sim 0$ 到 $r > r_{c2}$，杂质-浴自旋翻转关联（红色）、电荷同位旋翻转关联（紫色）以及浴内电荷同位旋翻转关联（蓝色）的变化。杂质-浴同位旋关联在 r_{c1}处消失，表明 V的重整化群相关性发生变化。杂质-浴自旋关联在 r_{c2}处消失，表明此处 J具有边缘性。相变后，浴内关联开始增强，显示杂质与浴发生解耦。 *Right:* 相对于单态的几何纠缠 ε_{ss}（蓝色）以及相对于电荷三重态零态的几何纠缠 ε_{ct}（红色）随 r的变化。前者在 r_{c1}处达到最大值（1），表明真正的基态不含电荷成分。后者在 r_{c2}处不连续地跃变至 1，因此可作为该相变的序参量。

表示扩展单杂质安德森模型基态 $|\psi_{\text{gs}}\rangle$ 与单态 $|\psi_{\text{ss}}\rangle$ 或电荷三重态零态 $|\psi_{\text{ct}}\rangle$之间的几何纠缠。后两种态见表（1）。纠缠度量 ε_{ss} 和ε_{ct} 可通过以下方程与杂质格林函数关联（详情见《补充材料》第 3 节 [69]）：

$$G_d(\omega) = \sum_n \big[(1-\varepsilon_{\text{ss}})\, G_{\Phi_{\text{ss}},\Phi_{\text{ss}}}(\omega,n) + (1-\varepsilon_{\text{ct}})\, G_{\Phi_{\text{ct}},\Phi_{\text{ct}}}(\omega,n) + 2\sqrt{(1-\varepsilon_{\text{ss}})}\sqrt{(1-\varepsilon_{\text{ct}})} G_{\Phi_{\text{ss}},\Phi_{\text{ct}}}(\omega,n)\big] \,, \tag{14}$$

其中

$$G_{\psi_1,\psi_2}(\omega,n) = \frac{1}{2}\frac{\langle\psi_1|c_{d\sigma}|\Psi_n\rangle\langle\Psi_n|c_{d\sigma}^\dagger|\psi_2\rangle + \text{h.c.}}{\omega + E_{\text{gs}} - E_n} + \frac{1}{2}\frac{\langle\psi_1|c_{d\sigma}^\dagger|\Psi_n\rangle\langle\Psi_n|c_{d\sigma}|\psi_2\rangle + \text{h.c.}}{\omega - E_{\text{gs}} + E_n} \,. \tag{15}$$

这一表达式表明，杂质格林函数 G_d 与 r （以及图（5）左图所示的相关关联函数）的演化，取决于纠缠度量 ε_{ss} 和 ε_{ct} （图（5）右图所示）的演化。事实上，我们发现，随着接近 ε_{ct} ，带电荷扇区的几何纠缠趋近于 1；相变之后则保持为 1。单重态纠缠 ε_{ss}是一个更灵敏的度量：由于 r_{c1} 无关紧要，它起初在 V处降至零；但在相变处不连续地跃升至 1，并在局域磁矩相中等于电荷纠缠。因此， ε_{ss} 在处的局域金属-绝缘体转变中充当序参量 r_{c2}。我们发现，交叉项 $\sqrt{}$（$1-\varepsilon_{\text{ss}}$）$\sqrt{}$（$1-\varepsilon_{\text{ct}}$）随 r 增大而单调降至零（未显示），这表明自旋扇区与电荷扇区的混合程度持续减弱，同时双占据子和空穴子在杂质位点上逐渐固定。

一般而言，任何作用于杂质与零号位点的组合希尔伯特空间上的单粒子或双粒子涨落 $\left\langle O_1 O_2^\dagger \right\rangle$ 都可以用这些纠缠度量来表示 ε_{ss}， ε_{ct}。详细的推导过程和表达式见《补充材料》第 3 节 [69]。作为示例，考虑图（5）左图所示的杂质与零号位点之间的自旋-自旋关联。 《补充材料》第 3 节给出的一般表达式 [69]形式如下

$$\langle S_d^+ S_0^- \rangle = (1-\varepsilon_{\text{ss}})\langle\Phi_{\text{ss}}|O_2 O_1^\dagger|\Phi_{\text{ss}}\rangle + (1-\varepsilon_{\text{ct}})\langle\Phi_{\text{ct}}|O_2 O_1^\dagger|\Phi_{\text{ct}}\rangle + \sqrt{1-\varepsilon_{\text{ss}}}\sqrt{1-\varepsilon_{\text{ct}}}\left(\langle\Phi_{\text{ss}}|O_2 O_1^\dagger|\Phi_{\text{ct}}\rangle + \langle\Phi_{\text{ct}}|O_2 O_1^\dagger|\Phi_{\text{s}}\rangle\right) \,. \tag{16}$$

根据给出的表达式，我们发现只有单重态重叠非零，因此 $\langle S_d^+ S_0^- \rangle$ 与量 $1-\varepsilon_{\text{ss}}$成正比。随着纠缠度量 ε_{ss} 在趋近相变时增大（图（5）右图），量 $1-\varepsilon_{\text{ss}}$ 随之减小，进而导致图（5）左图中观察到的关联幅度减小。为了进一步明确关联与纠缠度量之间的联系，我们在补充材料第 3 节中给出了量子费歇尔信息（QFI） [75]与多粒子格林函数之间的关系 [69]。此外，我们还绘制了若干双粒子算符的量子费歇尔信息随

r的变化，特别是对应于杂质补偿程度（$\langle \vec{S}_d \cdot \vec{S}_0 \rangle$）和杂质磁化强度（$\langle S_d^z \rangle$）的算符。这两个量（以及相应的量子费歇尔信息）十分重要，因为它们能够追踪局域金属-绝缘体转变，并充当该相变的序参量；而对应于这两个算符的量子费歇尔信息则量化了系统中与这些序参量相关的量子涨落。我们在补充材料第 3 节中表明，相变两侧的两个相具有不同的这对量子费歇尔信息值：对应于补偿程度的量子费歇尔信息在近藤屏蔽相中为零，在局域磁矩相中则变为非零；而由杂质磁化强度产生的量子费歇尔信息则恰好相反。恰处于相变点的相有别于两侧的相，因为这两个量子费歇尔信息均为非零。虽然临界点出现多种类型的涨落增强（从而产生普适性）是可以预期的，但令人瞩目的是，这一点也体现在多体纠缠的度量中。

5. 局域金属-绝缘体转变的普适理论

为了确定 r_{c2} 附近转变过程中的竞争趋势，我们现在将推导出能够呈现相同转变的最简有效哈密顿量。这需要消去那些不影响 r_{c2} 附近低能物理的自由度。我们注意到，由于 V 不重要，低能下杂质上的自旋态和电荷态之间不存在散射。此外，由于 U 在 r_{c2} 附近取值很大，杂质电荷态 $|0\rangle$ 和 $|\uparrow_d\downarrow_d\rangle$ 已被推至高能哈伯德边带。因此，可以通过施里弗-沃尔夫变换将杂质电荷态与自旋态安全地解耦。该变换在 V^2/U 的二级近似下，通过生成额外的（近藤）自旋交换项 $\delta J \left(\sim \frac{V^2}{U+U_b}\right)$，以及传导浴零号位点上的额外位点内关联 $\delta U_b \left(\sim \frac{2V^2}{U+U_b+J/2} - \frac{8V^2}{U-U_b}\right)$，计入了 U 和 V 的影响。由此，我们得到以下重整化有效哈密顿量：

$$H_{\mathrm{MIT}} = \mathcal{J}\vec{S}_d \cdot \vec{S}_0 - \frac{1}{2}\mathcal{U}_b \left(\hat{n}_{0\uparrow} - \hat{n}_{0\downarrow}\right)^2 + H_{\mathrm{K.E.}} \,, \tag{17}$$

其中 $\mathcal{J} = J + \delta J$ 是重整化后的 s-d 相互作用，$\mathcal{U}_b = U_b + \delta U_b$ 是浴的第零格点上的重整化后局域关联。有效哈密顿量的一维示意性构造如图（6）左图所示。值得注意的是，过去也曾采用类似方法来提取莫特金属-绝缘体转变的有效理论（[76, 77]）。然而，这些研究本质上得到的是重整化后的近藤模型，其中不存在近藤屏蔽的任何挫折。因此，在不要求自洽性的情况下，这些模型无法呈现杂质相变，只能描述金属区的物理。重要的是，有效 $\mathcal{J} - \mathcal{U}_b$ 模型（式（17））与在相应区间得到的红外固定点哈密顿量一致 $r_{c1} < r < r_{c2}$（表（1）第 2 行）。

简化有效杂质模型式（17）中 $\mathcal{J}$ 和 $\mathcal{U}_b$ 的重整化群方程可通过在重整化群方程（8）中令$U = V = 0$ 而得到：

$$\Delta\mathcal{J} = -\frac{n_j \mathcal{J}\left(\mathcal{J} + 4\mathcal{U}_b\right)}{d_2} \quad , \quad \Delta\mathcal{U}_b = 0 \,. \tag{18}$$

对于 $\mathcal{J} + 4\mathcal{U}_b > 0$，近藤耦合是相关的，低能相是具有无能隙激发的顺磁局域费米液体。但对于 $\mathcal{J} + 4\mathcal{U}_b < 0$，近藤耦合变得无关，基态是与浴解耦、与浴隔离的局域磁矩。若注意到，破坏近藤屏蔽的一种直接方式是抑制杂质与浴之间协调的自旋涨落，便可以理解这种相变的有效图像。近藤屏蔽的这种挫折正是 $\mathcal{U}_b$ 项的作用：它促进与杂质直接耦合的浴格点上的电荷涨落，从而降低杂质与浴之间自旋翻转散射的谱权重。



图 6. *Left:* 金属-绝缘体转变普适理论的一维示意性构造，该理论通过积分掉相变附近杂质的电荷态而得到。 *Right:* 低能有效哈密顿量的零带宽极限，适用于 r 与 r_{c1} 之间 r_{c2}（表（1）中的第二行）。浴被简化为仅含一个自由度——直接与杂质位点耦合的零号位点。

的确，局域关联 $\mathcal{U}_b$ 促进浴中格点之间的纠缠，使杂质-浴单态难以形成。换言之，$\mathcal{J} - \mathcal{U}_b$ 模型表现出单重态的不稳定性

这是通过将纠缠从杂质+浴系统重新分配到纯粹的浴内部实现的（见图（7）左图）。鉴于这些论证十分简单，我们的分析表明，方程（17）中的浴的局域配对涨落提供了一种普适机制，可抑制近藤效应，进而导致一种杂质相变，它是通过动力学平均场理论（DMFT）等辅助场模型方法得到的莫特金属-绝缘体转变的局域对应。我们指出，文献 [27, 28, 78] 对周期性安德森模型混合价态区临界点处非费米液体相的出现，也得出了类似结论。

通过浴的零带宽近似，可以进一步深入了解单重态的不稳定性。在这种近似下，由重整化群流得到的红外有效哈密顿量（图（1）第 2 行）呈现为一个具有修正耦合常数的双位点模型（见图（6）右图）：

$$\tilde{\mathcal{J}}\vec{S}_d \cdot \vec{S}_0 - \frac{1}{2}\tilde{\mathcal{U}}_b \left(\hat{n}_{0\uparrow} - \hat{n}_{0\downarrow}\right)^2 \ . \tag{19}$$

~ ~该模型的谱见图（7）右图。对于 $|\mathcal{U}_b|/\mathcal{J} < 3/2$，单重态基态（红色）。 -与激发的局域磁矩态（蓝色）之间存在能隙 $\frac{-3\mathcal{J}}{4} - \frac{\mathcal{U}_b}{2}$。当我们将 r 调向 r_{c2}时，$|\tilde{\mathcal{U}}_b|$增大，而不动点值 $\mathcal{J}$减小，导致能隙整体缩小。在临界点，能隙闭合，各态在零能处简并；这相当于前文讨论的完整杂质模型在r_{c2} 处的量子临界点。值得注意的是，Brinkman 和 Rice 通过对半填充哈伯德模型进行 Gutzwiller 型变分计算，也观察到了金属态能量的消失 [17]。

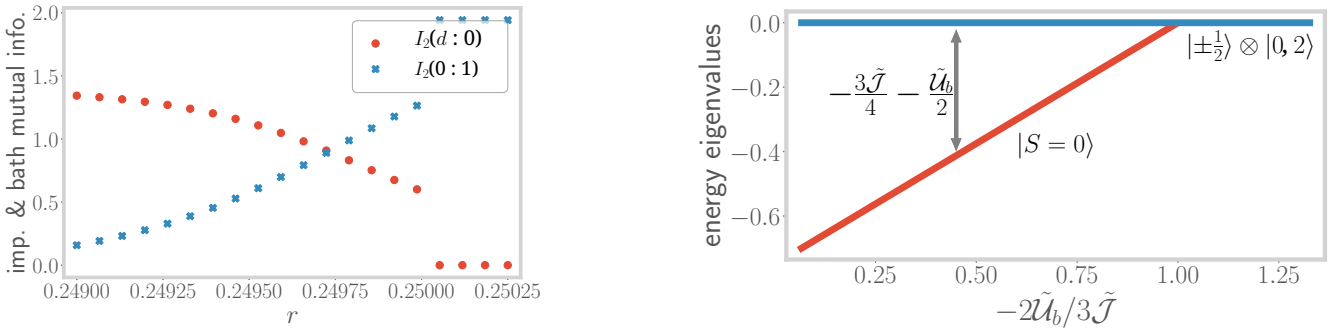

图 7。 *Left:* 非常接近相变时，杂质与零号位点之间的互信息 $I_2(d\colon 0)$（红色曲线）减小，而零号位点与第一位点之间的互信息（I_2(0∶ 1)，蓝色曲线）增加，显示出纠缠的重新分配。 *Right:* 图（6）右图的零带宽哈密顿量的谱。蓝线表示零能量处的局域磁矩态，红线表示能量随着 r 连续增加的单态。

5.1. 局域配对与近藤屏蔽的破坏

非常接近 r_{c2}处的相变时，我们发现了近藤云瓦解的迹象，表现为杂质与零号位点关联的衰减（图（8）左图中的蓝色曲线）以及增强的浴内关联。值得注意的是，我们发现浴的第零格点与第一位点之间的配对关联增加（图（8）左图中的红色曲线）。如上文所述，这些现象被认为是近藤屏蔽遭到破坏的原因：自旋和电荷自由度彼此排斥，而浴的第零格点上增强的电荷涨落抑制了杂质与零号位点之间的自旋翻转散射过程。我们将在后文展示，这些涨落导致模型中的局域费米液体激发遭到破坏，并在 r_{c2} 的邻域内以非费米局域激发取而代之。我们认为，在 r_{c2} 处相变附近观察到的非局域配对关联增长，很可能与局域配对磁化率假定的低能发散有关。文献 [27] 基于一个辅助场模型对无限维空穴掺杂扩展哈伯德模型进行了分析，得出了类似的观察结果；该模型与重费米子的物理相关。与文献 [27], 的结论类似，我们预计，通过将 e-SIAM 调离半填充，浴的配对涨落将占据主导地位，表明体系趋于超导态的不稳定性。

5.2. 扩展单杂质安德森模型中的涌现自洽性

众所周知，动力学平均场理论自洽方程等价于要求杂质格林函数等于浴中的局域格林函数 [8]。在投影

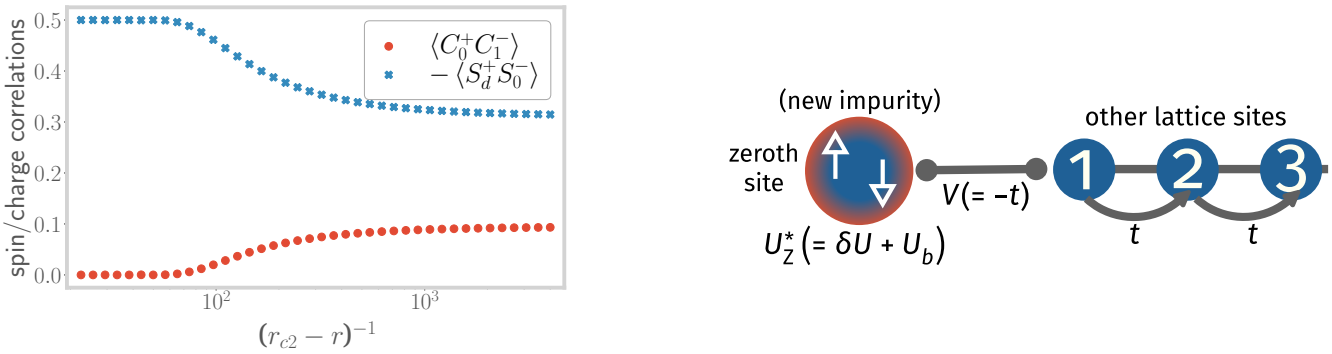

图8。 *Left:* 杂质与浴之间的自旋翻转关联（蓝色），以及浴的第零格点与第一格点之间的电荷同位旋翻转关联（红色），二者均表示为调谐参数 r 的函数，并且非常接近相变。算符定义为 $S_i^+ = c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow}$ 和 $C_i^+ = c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow}^\dagger$。 *Right:* 积分掉杂质与浴的第零格点之间的耦合后生成的新有效单杂质安德森模型哈密顿量。在新的单杂质安德森模型中，第零格点充当新的杂质位点，其位点内关联经过重整化，为 $U_Z^* = U_b + \delta U_Z^*$。

Moeller 等人提出的自洽方法 [76]也对中央近藤共振内的态采用了这一条件。现在我们将展示，我们的模型呈现出定性上相似的涌现特征。为此，通过施行单步 URG 变换，我们从式（11）的不动点哈密顿量其余部分中消去杂质位点。详情见《补充材料》第 4 节 [69]。其基本思路与施里弗-沃尔夫变换类似：移除杂质-浴耦合 J 和 V 会在零号位点上产生额外的排斥关联 δU_z^*。因此，新的低能模型 $H_{\rm Z}$ 是一个安德森杂质模型，其零号位点（现在是“新的杂质位点”）具有净局域关联 $U^*{}_{\rm Z} = \delta U_Z^* + U_b$，并通过单粒子杂化 $V_{\rm Z}^* = -t$ 与由其余格点构成的传导浴耦合。这个新的杂质模型示意于图（8）右图。

$$H_{\rm Z}^* = \underbrace{-\frac{1}{2}U_{\rm Z}^* \left(\hat{n}_{0\uparrow} - \hat{n}_{0\downarrow}\right)^2}_{\text{new impurity} = 0^{\rm th}\text{ site}} + \underbrace{V_{\rm Z}^* \sum_{\langle j,0\rangle} \left(c_{0\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + \text{h.c.}\right)}_{\text{hopping between } 0^{\rm th}\text{ site \& new bath}} + \underbrace{(-t) \sum_{\langle i,j\rangle} \left(c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + \text{h.c.}\right)}_{\text{K.E. of new bath}} . \tag{20}$$

由于对于 $r < r_{c2}$，该模型在低能量下总是流向强耦合，因此最大的能标为 J^*和 V^*。利用这一点，第零格点上的有效关联 U_Z^* 在最低阶近似下可表示为

$$U_{\rm Z}^* \simeq \frac{J^*}{4}\frac{1}{1+2\gamma} - V^* \frac{\gamma}{\gamma^2 - \frac{1}{4}}, \quad \text{where } \gamma \equiv V^*/J^* . \tag{21}$$

从 $r = 0$ 到 $r = r_{c1}$，因杂质位点的单粒子跃迁逐渐被移除（ V变得无关紧要），因子 γ 随之减小，导致关联 U_Z^*增强。这只是换一种说法来表述这样一个事实：产生杂质中心共振峰的散射过程会在浴的第零格点上诱发排斥关联。将杂质位点积分掉后，我们在零号位点上得到一个标准单杂质安德森模型；这意味着，随着原始扩展单杂质安德森模型的参数 r 增大，这个新杂质的谱函数也会再次出现中心峰变尖（并出现哈伯德边带）的现象。这确保杂质位点和零号位点的谱函数在定性上相似，直到 r_{c1}。现在可以迭代地重复这一过程——解耦零号位点会生成一个第一位点上带有排斥关联的标准单杂质安德森模型，依此类推。因此，从浴中任意一点出发的过程都可以用一个正的 U 单杂质安德森模型来描述，这正是我们模型中涌现出的自洽性。参考文献 [51] 中通过对单杂质安德森模型进行有限 U 从属玻色子计算，也观察到了远离杂质的晶格位点上存在关联谱函数的类似迹象。超过 r_{c1}后， V 变得无关紧要，意味着 U_Z^* 可简化为 $J^*/4$。随着r 朝着 r_{c2}增大，关联会减弱，因为 J 正趋近其临界点，这表明浴的第零格点正逐渐离开其局域磁矩区。这也反映出浴的配对涨落增强，以及杂质与浴之间的自旋翻转涨落减弱。

对于 $r > r_{c2}$，杂质模型中的杂质位点与浴解耦。可以按如下方式将这个杂质模型推广为体模型。回想一下，在辅助模型映射中，体晶格的任意格点 $\vec{r}_i$ 都可以充当杂质；可以将杂质位于 $\vec{r}_i$ 处的杂质模型视为一个电子从任意此类格点 $\vec{r}_i$ 逸出并进入浴其余部分的表征。当所有此类杂质模型在 $r = r_{c2}$ 同时发生相变时，所有格点便会与各自的浴解耦，从而得到顺磁性体绝缘体。

6. 扩展单杂质安德森模型中的局域金属相和绝缘相共存

贝特晶格上哈伯德模型的动力学平均场理论解，在两条自旋odal线之间呈现出金属解与绝缘解共存的区域 $U_{c1}(T)$ 和 $U_{c2}(T)$ [8],金属解的内能较低，而绝缘解则是能量较高的亚稳态 [8, 76, 79–81]。观察到该$T = 0$ 相变具有《自然》所述的二级特征，并通过金属解与绝缘解在 U_{c2} [76, 82]处合并而发生。另一方面，在 $T > 0$处，金属-绝缘体转变沿一阶线发生$U_c(T)$ $(U_{c1} < U_c < U_{c2})$，此时两种解的自由能相等；在足够高的温度 T_c下，两条自旋odal线合并为一个二阶临界点。现在我们将说明，基于哈密顿量的方法清晰地揭示了导致$T > 0$处一级相变的物理过程的诸多方面。

6.1. r_{c1}处的激发态量子相变：莫特-哈伯德情景

我们已经详细讨论了 r_{c2}处相变的性质：零带宽图景（见方程（19）附近）显示，金属解和绝缘体解在该点合并，因此可以将r_{c2} 认定为动力学平均场理论相图中 $T = 0$ 处观察到的连续相变。 U_{c2} 此外，有限温度线 $r_{c2}(T) = U_{c2}$ (T)标示出这样一条边界：越过该边界后，自旋单态不再是量子力学谱的本征态。

本小节着重讨论另一个重要点 r_{c1}处的物理性质。如前所述，该点标志着单粒子杂化振幅 V在重整化群意义下无关，并导致基态中排除电荷态（见图（4）左图）。这种排除意味着，杂质电子与浴杂化时可利用的散射通道减少了一个。进而，这会导致杂质部分局域化，并可视为迈向 r_{c2}处更完全局域化的第一步。

除了基态的变化之外， r_{c1} 处的物理还涉及谱中某些激发态发生相变。为揭示这一点，我们考察杂质模型零带宽谱中的以下态，该模型见式（2）：

$$
\begin{aligned}
|1,\sigma,\pm\rangle &= \alpha_\pm |\sigma_d\rangle |0_0\rangle + \sqrt{1-\alpha_\pm^2}\, |0_d\rangle |\sigma_0\rangle\,, \quad |3,\sigma,\pm\rangle = \alpha_\pm |\sigma_d\rangle |2_0\rangle + \sqrt{1-\alpha_\pm^2}\, |2_d\rangle |\sigma_0\rangle \quad (\sigma = \uparrow,\downarrow)\,, \\
E_+ &= -\frac{U_0}{4} + \sqrt{V_0^2 + \frac{U_0^2}{16}}, \quad E_- = -\frac{U_{\rm im}}{4} - \sqrt{V_{\rm im}^2 + \frac{U_{\rm im}^2}{16}}, \\
\alpha_+ &= \frac{V_0}{\sqrt{V_0^2 + \left(E_+ + \frac{U_0}{2}\right)^2}}, \quad \alpha_- = \frac{-V_{\rm im}}{\sqrt{V_{\rm im}^2 + \left(E_- + \frac{U_{\rm im}}{2}\right)^2}}\,.
\end{aligned}
\tag{22}
$$

$E_\pm$是态 $|1(3)\ \sigma,\ \pm\rangle$，下标 d和 0 分别指杂质和浴的第零格点。态 $|1(3)\ \sigma,\ +\rangle$是高能态，因此其能量 E_+和系数 α_+取决于裸单粒子杂化 V_0和杂质位点排斥作用 U_0。另一方面，其他态 $|1(3)\ \sigma,\ -\rangle$更接近红外能标，并涉及重整化中间尺度耦合 $V_{\rm im}$ 和 $U_{\rm im}$。由于 SU(2) 自旋（$\uparrow \leftrightarrow \downarrow$）和粒子-空穴（$|0\rangle \leftrightarrow |2\rangle$）对称性， E_+和 E_- 均为四重简并。例如，对应于 E_+ 的简并子空间由以下态构成： $\{|1,\uparrow,+\rangle, |1,\downarrow,+\rangle, |3,\uparrow,+\rangle, |3,\downarrow,+\rangle\}$。

所有这些态通常都是离域的——它们涉及杂质通过 V与浴发生杂化。然而在$r = r_{c1}$处，耦合 V 变得无关，因此低能态的系数 α_- 在该点之后趋于零。低能态 $|1(3)\ \sigma,\ -\rangle$ 于是会在 r_{c1} 处局域化，并产生一组激发的简并局域磁矩态，即 $\alpha_- \to 0$ 当 $r \to r_{c1}$ 导致

$$
|1(3),\sigma,-\rangle \to \begin{cases} |\uparrow_d\rangle |0_0\rangle\,, |\uparrow_d\rangle |0_0\rangle \\ |\downarrow_d\rangle |2_0\rangle\,, |\downarrow_d\rangle |2_0\rangle \end{cases}\,.
\tag{23}
$$

另一个系数 α_+ 仍然非零，因为如前所述，在重整化群流的紫外尺度下， V 非零。因此，高能态 $|1(3)\ \sigma,\ +\rangle$ 仍然是离域的，并且与局域态之间相隔一个能标

$$
\lim_{r \to r_{c1}^-} (E_+ - E_-) \simeq \sqrt{V_0^2 + \left(\frac{U_0}{4}\right)^2} + \sqrt{V_{\rm im}^2 + \left(\frac{U_{\rm im}}{4}\right)^2} + \frac{U_{\rm im} - U_0}{4}\,.
\tag{24}
$$

这在图（9）左图中以示意图形式展示，对应于零模谱中的预形成能隙。因此， r_{c1} 代表离域-局域激发态量子相变

（激发态量子相变）中，简并的局域磁矩态作为激发态出现在多体谱中。在 r_{c1} 处，杂质的局域化以图（9）右图中的激发态互信息形式展示。该激发态量子相变是 r_{c2}处量子相变的前兆，此处局域磁矩态与自旋单态基态简并。当 $r > r_{c2}$时，局域磁矩态在绝缘相中稳定为基态。

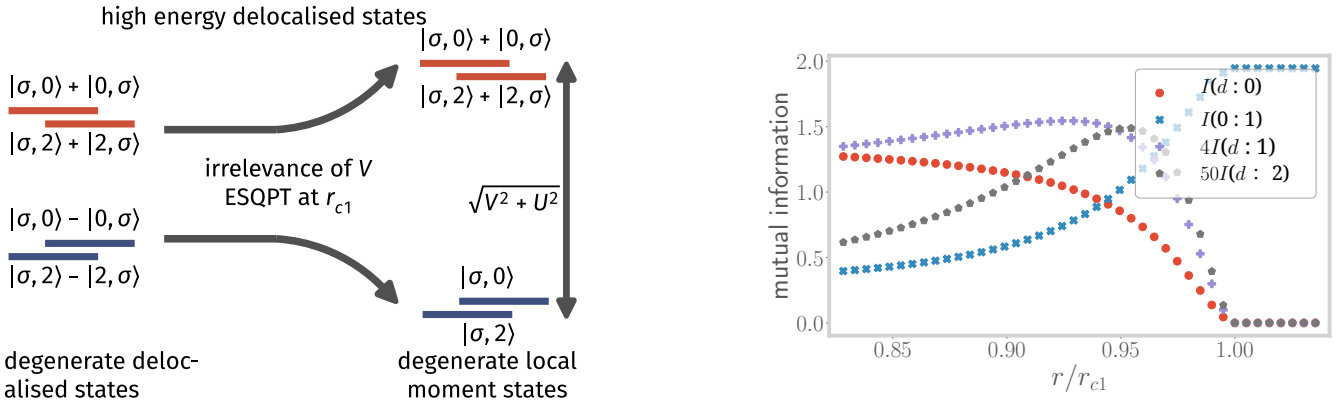

图9。 *Left:* 方程（22）到（22）中提及的激发态随 r 调节经过 r_{c1}时的演化。高能态（红色）保留其杂质-浴耦合，而对应的低能态则解除纠缠，形成一组简并的局域磁矩态。高能态允许杂质离域到浴中，并产生宽广的哈伯德边带。 *Right:* 各方之间的互信息（MI）在 r_{c1}处跨越激发态量子相变（ESQPT）时的变化。杂质与零号位点之间的互信息（红色）在 r_{c1}处消失，表明杂质发生局域化。浴的第零格点与下一格点之间的互信息则在r_{c1}处达到最大值。杂质与浴中其他格点（紫色和灰色）之间的互信息在 r_{c1}附近开始上升，表明激发态量子相变附近的纠缠正变得长程化。

6.2. 哈伯德边带中电荷激发的理论

除 r_{c1}之外，激发至局域磁矩态 $|1,\sigma,-\rangle$ 和 $|3,\sigma,-\rangle$ 的态位于杂质谱函数中心峰的边缘处（图（4）右图中的紫色曲线），但由于缺乏电子迁移率，它们不贡献谱权重。这解释了杂质谱函数中预形成能隙的形成过程。只要注意到中心峰的宽度持续缩小，局域磁矩态就必须向零频率方向退移，最终在 $r = r_{c2}$ 处取代零频率峰，从而在 $r > r_{c2}$ 下形成绝缘的局域磁矩相，便可明白这些局域磁矩态为何必须位于中心峰的边缘。另一方面，仍未局域化的高能态 $|1,\sigma,+\rangle$ 和 $|3,\sigma,+\rangle$ 被推入哈伯德边带；它们通过 V 和 t 与浴发生杂化，导致边带展宽。

离域态被隔离在边带中，这意味着电荷离域过程不再参与低能物理。由于访问边带需要极高能标的激发，这类过程只能以虚过程的形式发生，且涉及的时间尺度极短。因此，低能下观测到的中央近藤共振不支持任何电荷离域，金属激发只能通过杂质的自旋翻转散射过程传播。这表明，莫特绝缘体是由双占据子和空穴子的局域束缚形成的 [13, 83, 84]。与此密切相关的是金属-绝缘体转变的莫特-哈伯德情景；它与我们的观察相符：在 r_{c1} 之后，谱中出现了光学能隙。

边带较宽这一事实表明，存在无能隙激发从杂质位点传播到传导浴中，但其能量位于莫特能隙之外。这些激发也可视为由耦合杂质诱发的浴的金属激发。为揭示这些激发的本质，我们进行了与 Nozi`eres [70] 的局域费米液体计算类似的计算。具体而言，我们将 $\omega \sim \pm U/2$ 处的态视为哈伯德边带的基态，然后计算浴中的激发如何重整化基态子空间。跃迁强度 t 的二级有效哈密顿量可表示为

$$H_{\text{eff}}^{(2)} = \frac{4t^2(1-\alpha_+^2)}{E_+ - E_{\text{gs}}} C_{\text{tot}}^z C_1^z - t \sum_{i>0,\sigma} \left(c_{i\sigma}^\dagger c_{i+1\sigma} + \text{h.c.} \right) , \tag{25}$$

其中 E_+ 和 α_+ 已在方程（22）中定义， $C_i^z\,|2(0)\rangle = +(-)\frac{1}{2}\,|2(0)\rangle$是特定格点 i处电荷同位旋算符的 z 分量，而 $\vec{C}_{\rm tot} = \vec{C}_d + \vec{C}_0$ 是杂质和零号位点的总同位旋。 $E_{\rm gs} = U/2$是边带内基态子空间的双格点能量。这些激发属于局域费米液体类型——不存在同位旋翻转散射项，因此双占据态和空穴态能够各自独立地离域到浴中。因此，二级有效哈密顿量可写成两个相互解耦的部分之和，分别对应空穴态和双占据态的传播，并表明该系统与 $U = 0$ 哈伯德模型 [85]之间存在绝热连续性。

然而，四阶修正会导致出现将空穴态与双占据子相互转化的散射过程，从而使局域费米液体变得具有相关性

$$H_{\rm eff}^{(4)} = \frac{\gamma^4\alpha_+^2\beta^2}{\left(1-\alpha_+^2\right)\left(E'_+ - E_{\rm gs}\right)}\left[-C_{\rm tot}^z C_{\rm tot}^2 C_1^z + \sqrt{2}\mathcal{P}_{\rm tot}^4\left(C_0^+ - C_d^+\right)C_1^- + \text{h.c.}\right], \tag{26}$$

其中 $E'_+ = \frac{U}{4} - \frac{3J}{8} + \sqrt{4V^2 + \left(\frac{U}{4} + \frac{3J}{8}\right)^2}$是包含电荷同位旋三重态零能量的态的能量，而 $\beta = \frac{2V}{\sqrt{4V^2 + (U+3J/4)^2}}$。 $\mathcal{P}_{\rm tot}^4$投影到 $n_{\overline{d}} + n_0 = 4$子空间上。式（26）中的散射过程显然具有非费米液体性质，因为它们允许电荷同位旋本征态相互转化，从而缩短了式（26）中得到的局域费米液体的准粒子激发寿命。关于这一有效哈密顿量计算的更多细节，参见《补充材料》第 5 节 [69]。

6.3. 滞后与一阶线

如上所述，在涌现出的局域磁矩态 $|1、\sigma、-\rangle$和 $|3、\sigma、-\rangle$中， $r > r_{c1}$电荷局域化意味着它们不会对杂质谱函数贡献任何谱权重。相反，它们会在中央近藤共振与两侧的哈伯德边带之间形成涌现的预形成/光学能隙。该光学能隙最终会在 $r = r_{c2}$ 处转变为真正的莫特能隙，此时中心峰消失。另一方面，从 $r > r_{c2}$ 出发并减小 r时，系统最初处于（双重简并的）局域磁矩基态中，杂质态密度自然是有能隙的。在本小节的其余部分，我们将说明，这两个相变的存在使扩展单杂质安德森模型（e-SIAM）呈现出在定性上类似于动力学平均场理论（DMFT）所揭示的哈伯德模型的有限温度行为（该行为已在本节开头介绍，也可见图10）。

在非零温度下，描述系统的不仅有基态，还有激发。金属态解和绝缘解会随温度变化，其能量分别为 $E_M(r,T)$和 $E_I(r,T)$。给定温度下的曲线 $r_{c1}(T)$再次表示局域磁矩态作为激发本征态进入谱的参数 r 的取值，而 $r_{c2}(T)$则标示金属基态离开谱的位置： $E_M(r_{c2}(T)\,T) = E_I(r_{c2}(T)\,T)$。因此，在有限温度 T 下，参数范围 $r_{c1}(T) < r(T) < r_{c2}(T)$内，谱的低能部分（中央近藤共振内的态）同时包含金属态解和绝缘解。这两个低能解进而决定配分函数，从而决定自由能：

$$Z(r,T) \simeq Z_M(r,T) + Z_I(r,T), \quad F(r,T) \simeq -k_B T\ln\left(Z_M(r,T) + Z_I(r,T)\right), \tag{27}$$

其中， $Z_M(r,T) = \exp\left(-\beta\mathcal{V}(E_M(r,T) - TS_M(r,T))\right)$是金属态对应的配分函数，其能量为 $E_M(r,T)$，单位体积 $\mathcal{V}$ 内的熵为 $S_M(r,T)$；同理， $Z_I = \exp\left(-\beta\mathcal{V}(E_I(r,T) - TS_I(r,T))\right)$是局域磁矩态对应的配分函数。

在热力学极限下，只有 Z_M和 Z_I中较大的一个会对配分函数 $Z(r,T)$作出贡献。给定温度 T，存在一个值 $r_c(T)$，位于范围 $r_{c1}(T) < r_c(T) < r_{c2}(T)$内，使得配分函数$Z_M(T)$和 $Z_I(T)$相等： $Z_M(r_c(T)\,T) = Z_I(r_c(T)\,T)$。该条件定义了一条曲线 $\{(T, r_c(T))\}$，系统沿此曲线在金属态和绝缘态之间发生一级相变：

$$\lim_{\mathcal{V}\to\infty} F(r,T) = \begin{cases} -k_B T\ln Z_M(r,T) \text{ if } r < r_c\ (Z_M > Z_I) \\ -k_B T\ln Z_I(r,T) \text{ if } r > r_c\ (Z_M < Z_I) \end{cases}. \tag{28}$$

一级相变曲线 $r_c(T)$由金属态与绝缘态之间的配分函数相等条件（或等价地，自由能相等条件）确定：

$$T = \frac{E_M(r_c,T) - E_I(r_c,T)}{S_M(r_c,T) - S_I(r_c,T)}. \tag{29}$$

在 $T = 0$，一阶线 $r_c(T)$与临界点 r_{c2}重合，因为在 $T = 0$， $E_M(r_c) = E_I(r_c)$。这仅仅意味着热熵在零温下不起作用，而这一相变本质上完全是量子的。随着温度升高，二重简并局域磁矩的高熵 S_I

态开始发挥作用，使绝缘态能够在更小的 r值处占据优势。这表明，在热力学极限下， $r_c(T) < r_{c2}(T)$ 处可能发生一阶相变。这一情况已在图（10）中以示意图的方式展示。

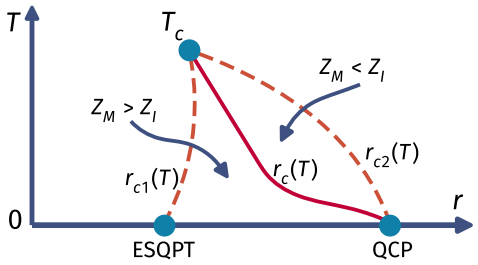

图10。 $J-U_b$ 模型有限温度共存区域的定性结构。左侧和右侧的虚线分别表示旋节线 r_{c1} 和 r_{c2} ，在这些位置绝缘体解和金属解分别变得不稳定。红色实线表示一阶线，在该线上两种解的自由能和配分函数相等， $Z_M = Z_I$。

此外，偏离热力学极限时，公式（27）中的自由能既包含稳定金属态的贡献，也包含亚稳绝缘态的贡献，从而导致两种相共存。这是因为，取决于我们是从 r_{c2}^{+} 还是从 r_{c1}^{-}接近，系统将分别主要停留在 Z_I 或 Z_M 的极小值处。在自由能中，通往另一个极小值存在有限的活化势垒，因而产生滞后。只有在 r_{c1}（T）或 r_{c2}（T）处才能观察到相变，此时绝缘体解和金属解分别变得不稳定。因此，这两条线标志着共存区域的旋节线。在足够高的温度 T_c 下，金属解和绝缘体解在第一旋节线 r_{c1}处变得不可区分： E_M（r_{c1}， T_c） $= E_I$（r_{c1}， T_c） S_M（r_{c1}， T_c） $= S_I$（r_{c1}， T_c）。我们回顾一下，在这两个等式中，第一个（$E_M = E_I$）也对应于第二旋节线的轨迹（对应于 r_{c2}）。此外，将这两个等式（能量和熵）结合起来，可得到自由能相等条件，标志着一阶线的轨迹 r_c（T）。其结果是，两条旋节线和一阶线在温度 T_c处的二阶临界点 r_c（T_c）合并。这结束了我们对扩展单杂质安德森模型有限温度行为的讨论，以及其与贝特晶格上半填充哈伯德模型的动力学平均场理论相图之间定性相似性的讨论。

6.4. 二级点上方临界涨落的零温起源

在二级点 $r_c(T_c)$ 上方，动力学平均场理论相图显示，系统从顺磁金属解迅速交叉到顺磁绝缘解 [8, 86]。值得注意的是，理论分析 [19, 26]，最近预言了这一交叉区域中存在量子临界标度的迹象，此外，实验也在若干有机化合物的输运测量中检测到了这些迹象 [87, 88]。在文献 [19, 26]，中，这被归因于无限配位数贝特晶格上的最大挫折 $1/2$ 填充哈伯德模型中存在一种隐藏的量子临界性 。为了确定这些量子临界性迹象的零温起源，我们仔细考察了模型中两个重要点 r_{c1} 和 r_{c2} 附近的量子力学涨落。

靠近 r_{c1}时，我们计算态 $|1、\ \sigma、\ -\rangle$中的关联。如图（11）上图所示，我们发现，尽管杂质与浴之间的单粒子关联消失了，浴的零号位点与第一位点之间的单粒子关联却增强了。重要的是，这些关联延伸到了杂质的直接邻域之外。例如，零号位点与第二位点之间的单粒子关联（图（11）上图中的紫色曲线）就体现了这一点。图（11）还展示了浴中关联的其他一些迹象：左图显示浴的零号位点与第一位点之间的自旋翻转关联和电荷同位旋翻转关联增强；右图中，浴的零号位点与第二位点之间也观察到了类似现象。我们的发现与近期数值重整化群-动力学平均场理论计算 [89] 得到的尺度不变解相符，这些解对应于共存区域中的亚稳绝缘解。

浴中类似长程关联的增长（并从杂质的紧邻域向外延伸）也出现在 r_{c2} 附近。我们回顾一下，观测发现杂质与零号位点之间的关联有所减弱（见图（5）左图）。相反，如图（12）所示，杂质与浴的零阶格点以及距离更远的浴位点之间出现了非平凡的双粒子关联。图（12）左图所示的自旋-自旋关联扩展，表明近藤单重态在被破坏之前发生了“拉伸”。我们稍后将展示，这些增强的关联还会导致准粒子

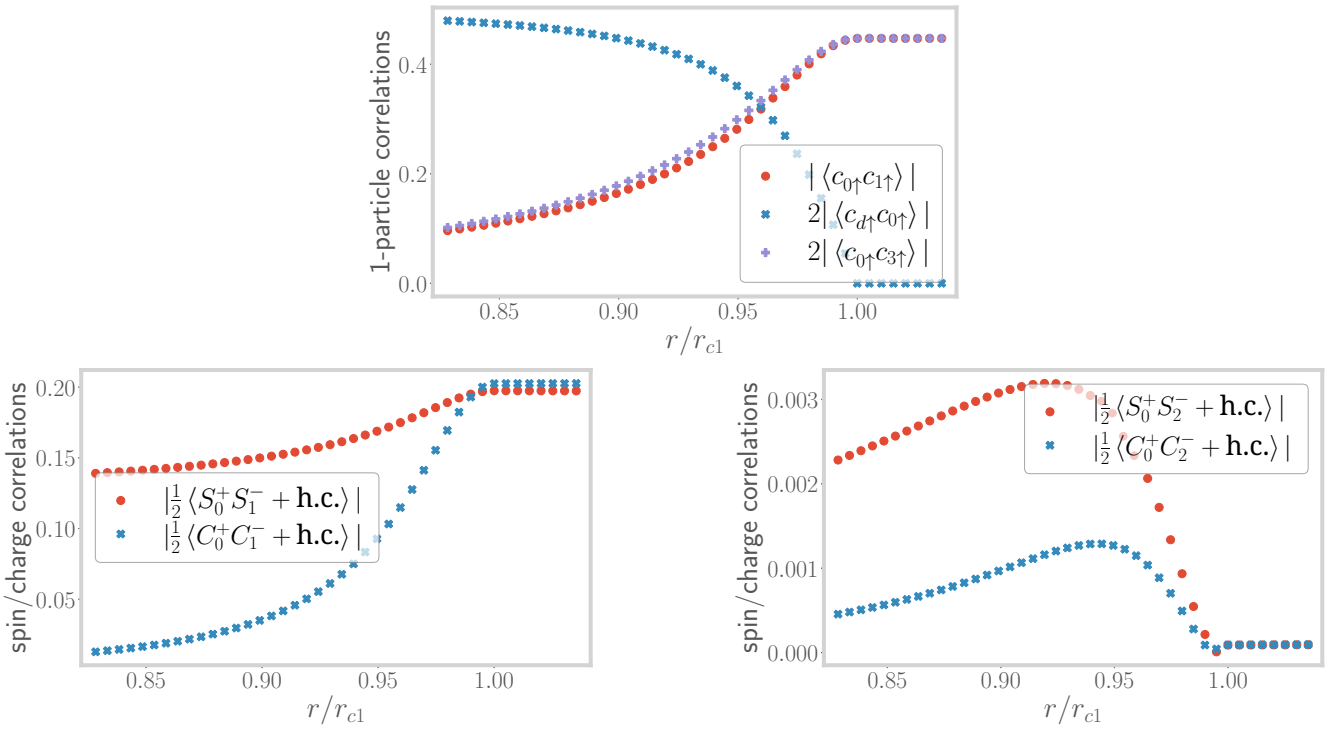

图11。 *Top:* 态 $|1、\sigma、-\rangle$ 中杂质与浴的第零格点之间的单粒子关联（蓝色），以及浴内部的单粒子关联（红色和紫色）的变化。前者消失，表明在 r_{c1} 处发生了激发态局域化转变。 *Left:* 接近 r_{c1} 时，杂质与浴之间自旋翻转（红色）和电荷同位旋翻转（蓝色）关联的变化。二者均增强，表明杂质与浴的耦合减弱。*Right:* 接近 r_{c1} 时，浴的零号位点与第二格点之间自旋翻转（红色）和电荷同位旋翻转（蓝色）关联的变化。二者起初均有所增强，使相对长程的关联在浴中传播。

质量在 r_{c2}处发散，表明局域费米液体金属态发生崩溃。此外，图（12）右图显示，随着接近相变，浴的第零格点与距离更远的浴位点之间会形成更长程的配对关联。

一般而言，在金属相内且远离 r_{c1} 或 r_{c2}时，杂质与浴的零号位点强烈耦合，杂质-浴纠缠遵循面积律，这是杂质问题局域性的一种特征。然而，分别接近 r_{c1} 或 r_{c2} 处的激发态和基态相变时，这些结果表明纠缠会向浴中扩散：随着接近激发态量子相变或量子临界点，零号位点以外越来越多的浴位点会与杂质位点产生关联。补充材料 [69]中的图 3 也证实了这一点。这表明纠缠显著增强，超出了面积律所预示的范围，并且与在各种双粒子关联中观察到的临界量子涨落相一致。

我们在上文论证了，零温点 r_{c1} 和 r_{c2} 处的物理特性会以相图中两条旋节线的形式延续至有限温度。本小节的结果表明，即使在 $T > 0$，也可能通过实验探测到旋节线附近此类临界量子涨落的特征。我们注意到，最近确实在三氧化二钒中观察到了二阶临界性的特征，表现为临界减速和临界乳光 [90]。因此，人们不禁猜想，这些特征源自临界量子涨落的存在。

7. 金属-绝缘体转变处的非费米液体特征

7.1. 局域费米液体的消亡：*Brinkman-Rice*情景

通过考察模型在金属相中的单重态基态˜（能量为 $\sim -3\mathcal{J}/4$），并将单重态与浴其余部分之间的电子跃迁项（耦合为t）视为微扰来研究其影响，即可得到浴的低能金属激发（见图（13）左图）。这种以 $t^2/\tilde{\mathcal{J}}$ 的幂次展开的强耦合展开，导出了近藤模型中常见的局域费米液体有效哈密顿量

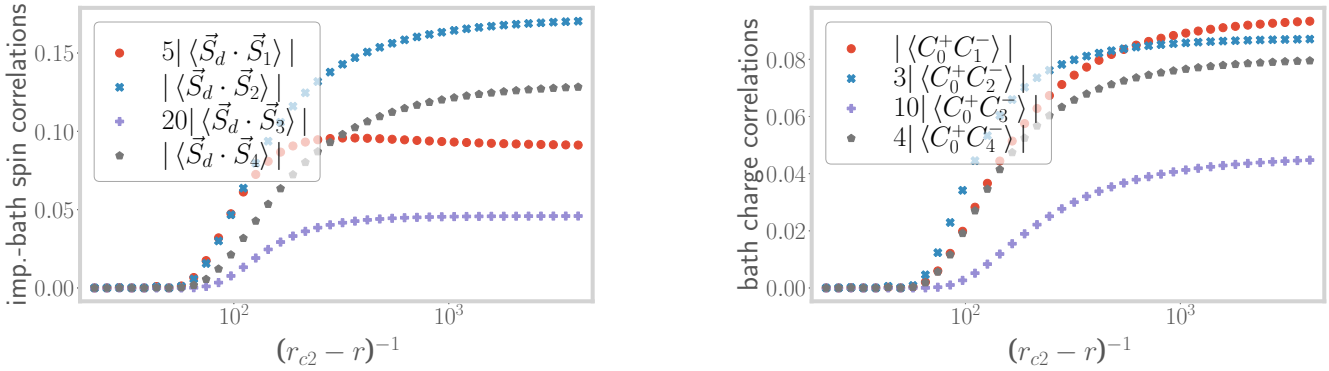

图12。 *Left:* 杂质与浴位点1至4之间自旋-自旋关联在接近r_{c2}时的变化。它们呈现出增加趋势，揭示了纠缠向浴中的分布。*Right:* 浴内配对关联的变化。由于近藤单态减弱，这些关联呈现出增加趋势。

模型 [36, 46, 70, 91]:

$$H_{\mathrm{LFL}} = \mathcal{F}\hat{n}_{1\uparrow}\hat{n}_{1\downarrow} + H_{\mathrm{KE}} \ , \quad \mathcal{F} \sim t^4/\tilde{\mathcal{J}}^3 \ , \tag{30}$$

其中，$\hat{n}_{1\sigma}$ 是第一格点（紧邻传导浴零号位点的格点）的数目算符，H_{KE}是浴中除零号位点外所有格点之间最近邻跃迁所产生的动能，而 $\mathcal{F}$ 是局域费米液体关联强度。近藤单态（由杂质自旋与浴的第零格点形成）已与晶格其余部分解耦，式（30）描述了零号位点以外浴其余部分的有效哈密顿量。

采用相同的方法，我们发现，金属态中低能激发的有效哈密顿量为

$$H_{\mathrm{LFL}} = \mathcal{F}\left[\hat{n}_{1\uparrow}\hat{n}_{1\downarrow} + (1-\hat{n}_{1\uparrow})(1-\hat{n}_{1\downarrow})\right] + H_{\mathrm{KE}}, \quad \text{where } \mathcal{F} = \frac{2t^4}{\tilde{\mathcal{J}}\left(3\tilde{\mathcal{J}}/4 + \tilde{\mathcal{U}}_b\right)^2} \ . \tag{31}$$

我们注意到，对于扩展单杂质安德森模型，当趋近于金属-绝缘体转变时，局域费米液体关联 $\mathcal{F}$ 会发散~ ~在 $3\mathcal{J}/4 + \mathcal{U}_b \to 0$。 $\mathcal{F}$的发散会导致准粒子的重整化质量发散；正如 Brinkman 和 Rice 所展示的，这也可以通过古茨维勒变分计算得到 [17]。这表明微扰理论失效，也说明在金属-绝缘体转变处，基态即将发生变化。

局域费米液体的消亡，也可从动态生成的低能近藤屏蔽能标趋于零这一现象中看出 T_K。为求得 T_K 相变附近的情况，我们沿用 Moeller 等人 1995 [76] 和 Held 等人 2013 [77]所采用的方法。在相变附近，他们通过对单杂质安德森模型施行施里弗-沃尔夫变换，得到了近藤模型；该变换消除了杂质位点的电荷涨落，只保留近藤耦合的物理效应 J。这相当于从杂质谱函数中去除侧峰，并聚焦于低能中心峰（图（13）右图）。随后，Held 等人利用浴中的洛伦兹型态密度 $\rho(D)$，对该近藤模型的重整化群方程进行了积分： $\rho(D) = \frac{\rho_0 \Gamma^2}{D^2+\Gamma^2}$。这一做法的依据是



图13. *Left:* 用于求得强耦合基态之上低能激发的设置。浴的其余部分的影响通过将零号位点（左侧的蓝色球体）与第一位点（标记为 1 的球体）之间的跃迁视为在杂质（红色球体）与零号位点形成的单重态基态之上的微扰来纳入。 *Right:* 在 r_{c1}，由于存在有限的光学能隙，哈伯德边带已与局域谱函数中的中心峰分离。移除耦合低能带与高能带的紫外激发后，便得到一个具有洛伦兹型态密度的近藤模型理论。

杂质谱函数的中心峰呈洛伦兹函数形状，并且在自洽条件下，浴等价于杂质位点。

我们在扩展单杂质安德森模型中采用相同的方法，使得施里弗-沃尔夫变换得到一个$J-U_b$其浴具有洛伦兹函数电子态密度的模型。此类系统的近藤温度表达式已在补充材料第 6 节中推导 [69]。非常接近相变时，我们有$r\to 0.25^-$，近藤温度为

$$T_K=\frac{D_0}{k_B}\exp\left[-\frac{\ln\left(r_{c2}-r\right)}{4U_b\rho_0}\right]\ , \tag{32}$$

其中 $r_{c2}=0.25$ ， D_0 是裸带宽。注意，对数项的前因子为正，因为 U_b 为负： $-4U_b\rho_0=|4U_b\rho_0|$。随着我们接近相变，参数 r 趋于极限 $r\to r_{c2}^-$，近藤温度尺度随之消失：

$$\lim_{r\to r_{c2}^-}T_K=\frac{D_0}{k_B}\lim_{r\to r_{c2}^-}\left(r_{c2}-r\right)^{4|U_b\rho_0|}\to 0\ . \tag{33}$$

按照 Hewson 的重整化微扰理论方法 [92,93], ，局域费米液体准粒子自能的虚部为

$$\mathrm{Im}\left[\Sigma(\omega)\right]\sim\frac{\mathcal{F}^2}{D_0}\frac{\omega^2}{T_K^2}\ , \tag{34}$$

而准粒子剩余量由 $Z\sim T_K$ 给出。在相变处，$\mathrm{Im}\left[\Sigma(\omega)\right]$ 的发散，以及 T_K 和准粒子剩余量趋于零，是局域费米液体激发消失、近藤屏蔽崩溃的重要标志。

近藤温度尺度趋于零还会导致热力学量发散，例如杂质对局域自旋磁化率 χ_{imp} 和比热系数 γ_{imp} 的贡献。由于低能理论是局域费米液体， χ_{imp} 和 γ_{imp} 保持其费米液体形式，但其中涉及高度重整化的近藤温度尺度 [36,94]:

$$\begin{aligned}\chi_{\mathrm{imp}}&=\frac{w}{4k_BT_K},\quad \lim_{r\to r_{c2}^-}\chi_{\mathrm{imp}}=\frac{w}{4k_B}\left(r_{c2}-r\right)^{-4|U_b\rho_0|},\\ \gamma_{\mathrm{imp}}&=\frac{\pi^2k_B^2w}{6T_K},\quad \lim_{r\to r_{c2}^-}\gamma_{\mathrm{imp}}=\frac{\pi^2k_B^2w}{6}\left(r_{c2}-r\right)^{-4|U_b\rho_0|}\ ,\end{aligned} \tag{35}$$

其中， $w\sim 0.4128$ 是近藤模型 [36,46] 的Wilson数。这些结果还表明，χ_{imp} 与 γ_{imp} 的比值（称为Wilson比 $R\equiv\frac{4\pi^2k_B^2\chi_{\mathrm{imp}}}{3\gamma_{\mathrm{imp}}}$ ）对于 $r\to r_{c2}-$ 始终保持在单通道~~Kondo~~值 $R_{\mathrm{LFL}}=2$。这说明低频Landau准粒子能够一直存续到非常接近量子临界点。正如我们将在下一小节中展示的，在量子临界点处，金属激发呈现出非费米液体特征，并涉及空穴子与双占据子之间的额外关联。预计这些额外关联会增强Wilson比。动力学平均场理论对非常接近Brinkman-Rice相变处的局域Wilson比的计算 $R_{\mathrm{loc}}=2.9\pm 0.2$ [8] 为此提供了证据。

7.2. 相变处非费米液体激发的涌现

为了获得恰处于临界点的激发的有效哈密顿量 $r=1/4$，我们首先注意到，零带宽 $J-U_b$ 有效模型（式（19））的基态子空间在此处变为简并：

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\uparrow\rangle_d|\downarrow\rangle_0-|\downarrow\rangle_d|\uparrow\rangle_0\right)\ ,\ |\sigma\rangle_d|0\rangle_0\ ,\ |\sigma\rangle|2\rangle_0\ ,\quad(\sigma=\uparrow,\downarrow)\ , \tag{36}$$

所有态的能量均为零。这里，第一个 ket（下标为 d）表示杂质自旋构型，第二个 ket（下标为 0）表示浴的第零格点的构型）。现在，我们在电子跃迁 t 进入传导浴其余部分的作用下对这些态进行对角化，并得到由 t介导的低能激发的有效哈密顿量。补充材料第 7 节 [69]对此进行了详细说明。我们注意到，在跃迁作用下，基态在能量 $-t$ 处四重简并，由以下态组成：

$$|N_{\mathrm{tot}}=2,S^z_{\mathrm{tot}}=0\rangle\ ,\ |N_{\mathrm{tot}}=4,S^z_{\mathrm{tot}}=0\rangle\ ,\ |N_{\mathrm{tot}}=3,S^z_{\mathrm{tot}}=\frac{1}{2}\rangle\ ,\ |N_{\mathrm{tot}}=3,S^z_{\mathrm{tot}}=-\frac{1}{2}\rangle\ , \tag{37}$$

其中， $N_{\mathrm{tot}}=\hat{}n_d+\hat{}n_0+\hat{}n_1$和 $S^z_{\mathrm{tot}}=S^z_d+S^z_0+S^z_1$分别是将杂质、浴的第零格点和第一格点合在一起时的总数算符和总磁化算符。值得注意的是

- 基态子空间中存在未屏蔽态 $|N_{总}=3,\ S^{z}{}_{总}=\pm\frac{1}{2}\rangle$，这是临界点处不完全屏蔽的结果，并且
- 简并基态流形的存在表明，浴的这些激发很可能属于非费米液体（NFL）类型 [27,95,96]。

通过考察基态流形与能量为 {v1} 的激发态，可以得到这一非费米液体的有效哈密顿量的精确形式，以及各种关联通过结合基态流形与能量为 $-t$ 的激发态，可以得到函数。

由于总哈密顿量守恒总自旋 $S^z_{\rm tot}$，有效哈密顿量分为两个扇区：$S^z_{\rm tot}=0$ 和 $|S^z_{\rm tot}|=\frac{1}{2}$。关于如何从重整化群不动点理论推导该有效哈密顿量的详细计算见《补充材料》第 7 节 [69]。为突出某些鲜明特征，我们仅给出 $S^z_{\rm tot}=0$ 和 $S^z_{\rm tot}=\frac{1}{2}$ 扇区的简化有效哈密顿量。我们先来看$S^z_{\rm tot}=0$ 扇区：

$$H_{\rm eff}^{S^z_{\rm tot}=0}=t\vec{S}_d\cdot\left(\vec{\mathcal{S}}_{1,-}+\vec{\mathcal{S}}_{3,-}\right)\ . \tag{38}$$

有效自旋1/2升降算符 $\vec{\mathcal{S}}_{1,\pm}$ 作用于由态张成的 $\hat{n}_0+\hat{n}_1=1$ 子空间的正、负宇称扇区（分别以 $\pm$ 标记）

$$|\Uparrow\rangle_{1,\pm}=|\uparrow\rangle_0|0\rangle_1\pm|0\rangle_0|\uparrow\rangle_1\,,\quad |\Downarrow\rangle_{1,\pm}=|\downarrow\rangle_0|0\rangle_1\pm|0\rangle_0|\downarrow\rangle_1\ , \tag{39}$$

从而得到 $\vec{\mathcal{S}}_{1,\pm}$ 在该基底下的泡利矩阵表示。泡利矩阵算符 $\vec{\mathcal{S}}_{3,\pm}$ 同样作用于由态 $n_0+n_1=3$ 张成的子空间 $|\Uparrow\rangle_{3,\pm}=|\uparrow\rangle_0|2\rangle_1\pm|2\rangle_0|\uparrow\rangle_1$ 以及 $|\Downarrow\rangle_{3,\pm}=|\downarrow\rangle_0|2\rangle_1\pm|2\rangle_0|\downarrow\rangle_1$这些态是将变换 $|0\rangle\to 2$ 作用于其 $\hat{n}_0+\hat{n}_1=1$ 对应态后得到的。现在我们指出式（38）中这个简化有效哈密顿量的两个有趣特征。

- 杂质现在与涌现自旋相互作用 $\vec{\mathcal{S}}_1$，而这些自旋 $\vec{\mathcal{S}}_3$ 跨越两个晶格格点（$\vec{0}$ 和 $\vec{1}$），而不是仅位于浴的第零格点，这表明杂质与浴之间的纠缠如今已延伸至浴的第零格点之外，并且单重态正在被拉伸。
- 两个自旋试图同时屏蔽杂质自旋，这会给杂质的动力学带来挫折。这让人联想到双通道Kondo效应，我们在本文的结论部分将更精确地阐明二者之间的联系。

这两个特征都是局域磁矩区中屏蔽最终被彻底破坏的先兆，反映出杂质-浴系统此时处于过度屏蔽态。

现在我们聚焦于 $S^z_{\rm tot}\neq 0$ 子空间的有效哈密顿量：

$$H_{\rm eff}^{S^z_{\rm tot}\neq 0}=-\frac{1}{2}t\left(S_d^-\mathcal{B}_\uparrow^+ +\text{h.c.}\right)\ . \tag{40}$$

泡利矩阵算符 $\mathcal{B}_\uparrow^+$ 和 $\mathcal{B}_\uparrow^-$ 在态双重态 $|\uparrow\rangle_0|\uparrow\rangle_1$ 与 $\frac{1}{\sqrt{2}}(|2\rangle_0|0\rangle_1+|0\rangle_0|2\rangle_1)$之间进行翻转：

$$\begin{aligned}\mathcal{B}_\uparrow^-|\uparrow\rangle_0|\uparrow\rangle_1&=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|2\rangle_0|0\rangle_1+|0\rangle_0|2\rangle_1\right),\\ \mathcal{B}_\uparrow^+\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|2\rangle_0|0\rangle_1+|0\rangle_0|2\rangle_1\right)&=|\uparrow\rangle_0|\uparrow\rangle_1\ .\end{aligned} \tag{41}$$

式（40）中的有效哈密顿量结构与局域费米液体的行为有另一项显著差异：它允许电子通过从第一位点跃迁到零号位点，被“安德烈夫散射”至一个正交态。考察式（41）中的散射过程即可轻易看出这一点：态$|\uparrow\rangle_0|\uparrow\rangle_1$（即，位点 1 处于 $\uparrow$构型）有一定概率翻转为 $|\downarrow\rangle_0|2\rangle_1$ 态（即，位点 1 处于双占据态构型）。因此，入射电子 $c^\dagger_{1\uparrow}$ 从零号位点散射后，可以变为双占据态 $c^\dagger_{1\uparrow}c^\dagger_{1\downarrow}$ 或空穴 $c_{1\uparrow}$。这是临界点处单重态与第一位点之间存在纠缠的直接结果，而在 e-SIAM 的金属区中并不存在这种纠缠。值得注意的是，在双通道近藤问题中，有效赝粒子与赝空穴之间也会发生类似的正交散射过程 [97]。

此时值得指出，极化基态 $|S^z_{\rm tot}=\frac{1}{2}\rangle$ 可以写成单态 $|\text{SS}\rangle_{d0}\otimes|\uparrow\rangle_1$ 与局域磁矩态 $\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow,\ 0,\ 2\rangle-|\uparrow,\ 2,\ 0\rangle)$ 的等权叠加态。这个对称性破缺的基态及其对应态 $|S^z_{\rm tot}=-\frac{1}{2}\rangle$，构成了连接金属相与绝缘相基态的桥梁。因此，它们对于揭示量子临界点处近藤云的瓦解及其所导致的后果至关重要。接下来，我们将在下一小节讨论这些态，并展示它们的一些奇异非费米液体性质，例如杂质的不完全屏蔽、分数杂质磁化强度和分数杂质纠缠熵。

最后，通过将扩展单杂质安德森模型的量子杂质问题映射为经典库仑气体问题 [27,31],可以证明，杂质和零号位点的局域自能 $\Sigma_{dd}(\omega)$ 和 $\Sigma_{00}(\omega)$，以及某些二粒子关联函数，在频域中具有幂律行为：

$$\mathrm{Re}\left[\Sigma_{dd}\right](\omega) \sim |\omega|^{\gamma_{dd}}, \quad \mathrm{Re}\left[\Sigma_{00}\right](\omega) \sim |\omega|^{\gamma_{00}} , \tag{42}$$

$$\left\langle S_d^+ \right\rangle \sim |\omega|^{(\alpha_1-1)/2}, \quad \left\langle c_{0\uparrow}^\dagger c_{0\downarrow}^\dagger \right\rangle \sim |\omega|^{(\alpha_3-1)/2} . \tag{43}$$

关于传导电子散射相移的指数精确形式，以及计算中的其他若干技术细节，见《补充材料》第 8 节 [69]。虽然发现各种指数都是不动点值 J 和耦合 U_b 在$r \to r_{c2}$–条件下的非普适函数，但我们在小节（7.4）中论证，它们恰好在量子临界点（$r = r_{c2}$）处取普适值。这些局域关联的代数行为令人联想到归属于局域量子临界性这一类的临界行为 [98,99]。

7.3. 杂质磁化强度与纠缠熵

通过计算对称性破缺态 $|S^z_{\mathrm{tot}} = \sigma/2\rangle$ 下的杂质磁化强度和杂质纠缠熵（$S_{\mathrm{EE}}(d)$）（见《补充材料》第 9 节 [69]），可以获得量子临界点处存在非费米液体行为的更多证据。这使得两个态各自具有分数纠缠熵（以 log2 为单位）：

$$\begin{aligned} \rho_{\mathrm{imp}} &= \begin{pmatrix} \frac{1}{2}+m^z_{\mathrm{imp}} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2}-m^z_{\mathrm{imp}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{3}{4} & 0 \\ 0 & \frac{1}{4} \end{pmatrix} , \\ S_{\mathrm{EE}}(d) &= -\mathrm{Tr}\left(\rho_{\mathrm{imp}} \ln \rho_{\mathrm{imp}}\right) \simeq 0.81 \log 2 , \end{aligned} \tag{44}$$

其中，杂质磁化强度 m^z_{imp} 在量子临界点（QCP）处取值为 $m^z_{\mathrm{imp}} = 1/4$ （即局域磁矩磁化强度的一半）。此外，$S_{\mathrm{EE}}(d)$可以用有效杂质简并度 g_{imp}表示，我们根据杂质磁化强度将其定义为：$g_{\mathrm{imp}} \equiv 1+2|m^z_{\mathrm{imp}}|$，使其在局域费米液体相和局域磁矩相中分别取预期值 1 和 2（此时 m^z_{imp} 分别为 0 和 $1\ 2$ ）。因此，量子临界点处极化子空间中的有效简并度 $S^z_{\mathrm{tot}} = \pm 1/2$ 为 3/2，恰好介于唯一态与双重态之间。 这意味着在量子临界点处，杂质自由度受到部分屏蔽；与此相反，金属相中是完全屏蔽（$g_{\mathrm{imp}} = 1$），而绝缘相中则没有屏蔽（$g_{\mathrm{imp}} = 2$）。

在补充材料第 9 节中 [69], 我们表明，不完全磁化（因而 S_{EE} 取分数值）源于局域费米液体基态 $|\phi\rangle = \otimes_{k<=k_F} |k\uparrow\rangle |k\downarrow\rangle$与其上方无能隙激发 $|e\rangle_\sigma = e^\dagger_\sigma |\phi\rangle$， $e \equiv \sum_{k\in FS} c^\dagger_{k\sigma}$之间的混合，导致局域费米液体准粒子 [95]衰变。这可由量子临界点处修正后的基态 $|-\rangle$及最低激发态 $|+\rangle$ 描述：

$$|\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|SS\rangle \otimes |e\rangle_\sigma \pm |LM\rangle_\sigma \otimes |\phi\rangle \right) . \tag{45}$$

自旋单重态$|SS\rangle \sim \sum_\sigma \sigma |\sigma\rangle_d |\bar{\sigma}\rangle_0$和局域磁矩态 $|LM\rangle_\sigma = |\sigma\rangle_d |2\rangle_0$ 分别代表杂质和浴的第零格点的构型。这样的基态 $|-\rangle$ 应与局域费米液体基态 $|SS\rangle \otimes |\phi\rangle$ 形成对照，后者在 $r_{c1} < r < r_{c2}$的金属相中稳定。这种基态变化体现为局域费米液体激发的准粒子剩余量消失：$Z = |\langle +|e^\dagger_\sigma|-\rangle|^2 = |\langle +| \left(|LM\rangle_\sigma \otimes |e\rangle_\sigma\right)|^2 = 0$，这与下文式 (34) 中所述的正交灾变一致。随着局域费米液体准粒子变得不稳定，它们被稳定的复合三格点激发所取代，其形式为 $S^-_d c_{0\bar{\sigma}} e^\dagger_\sigma$。相应的三格点复合激发具有非零剩余量这一事实也进一步印证了这一点：在量子临界点处，$|\langle +|S^-_d c_{0\bar{\sigma}} e^\dagger_\sigma|-\rangle|^2 > 0$。

7.4. Friedel散射相移与分数过剩电荷

量子临界点处，传导浴的红外激发遭遇的正交灾变表明，散射 [101] 态具有一种“未重整化”的相移 $k-$。事实上，利用弗里德尔求和规则 [102–104], 我们得到 $\pi/2$ 量子临界点处费米面上延展态的相移仅为幺正极限的一半。这一点可通过回顾方程（45）中的基态看出：它是解耦局域磁矩态与单态的等权混合。通过单态，杂质向传导浴的费米面贡献一个单位的过剩电荷（这是由于存在无能隙的自旋翻转涨落）。局域磁矩态不贡献任何过剩电荷，因为杂质与浴解耦。因此，净过剩电荷为 $n_{\mathrm{exc}} = \frac{1}{2}\ (1+0)\ = \frac{1}{2}$。根据弗里德尔求和规则，

不动点处的相移为 $\delta^* = \pi n_{\rm exc} = \pi/2$，如上所述。正如预期的那样， $n_{\rm exc}$ 在局域磁矩相中为零。此外，由于方程（42）所示局域量的代数形式的指数是散射相移的函数，我们发现这些指数恰好在量子临界点处取普适值。

量子临界点（QCP）处和局域磁矩相中的过剩电荷值会导出重要推论。首先，从 $r < r_{c2}$ 到 $r > r_{c2}$ 时过剩电荷跃变一个单位，实际上意味着传导浴 [105,106]的卢廷格体积 V_L 减小。 V_L 统计费米体积处及以下存在的延展态数目，并对应一个拓扑量子数 [61,107–109]。由于上文计算的过剩电荷$n_{\rm exc}$ 只是费米面处 V_L 的杂质贡献，因此相变两侧过剩电荷的差异意味着两个相具有不同的不变量 V_L。因此， $n_{\rm exc}$追踪卢廷格体积的变化（ΔV_L），该相变本质上是拓扑性的。其次，在一项近期研究中，Sen等人 [110] 表明，无限维哈伯德模型的莫特金属-绝缘体转变是通过一条连接到物理晶格位点的虚构Su-Schrieffer-Heeger链中的畴壁解离而实现的。若将他们的发现与这样一个事实结合起来——SSH链两端解离的两个畴壁被认为共同承载一个电荷 [111,112], ——便会发现，我们在量子临界点得到的分数过剩电荷，对应于Sen等人所发现的、局域在SSH链中物理晶格位点附近的态。SSH模型广为人知的体边对应（例如参见 [113]）表明，过剩电荷 $n_{\rm exc}$ 和卢廷格体积的变化 ΔV_L 分别是扩展单杂质安德森模型（e-SIAM）中相互关联的边界与体的拓扑不变量。此外，扩展单杂质安德森模型的金属-绝缘体转变（MIT）处出现半量子化的 $n_{\rm exc}$ ，在SSH模型中对应于一对畴壁—反畴壁的解离，其中每个畴壁都携带半个电荷 [111,112]。

我们在补充材料第 9 节中 [69] 证明，实际上可以用一个关系式将散射相移（δ^*）、杂质磁化强度（$m^z_{\rm imp}$）、有效简并度（$\tilde{g}$）和过剩电荷（$n_{\rm exc}$）联系起来：

$$\delta^* = \pi n_{\rm exc} = \left[1 + \left(\frac{2-\tilde{g}}{\tilde{g}-1}\right)^2\right]^{-1} = \frac{4{m^z_{\rm imp}}^2}{1 - 4|m^z_{\rm imp}| + 8{m^z_{\rm imp}}^2} \,. \tag{46}$$

正如我们接下来将要讨论的，这为理解挫折对杂质自旋的影响提供了统一图景。正如我们前面所见，e-SIAM 的哈密顿量中存在 U_b ，会使局域磁矩态出现在谱中，并在 QCP 处产生杂质磁化强度非零的态。这种非零磁化可以解释为对杂质自旋的部分屏蔽，进而导致有效杂质简并度（$1 < \tilde{g} < 2$介于唯一的屏蔽态与未屏蔽的局域磁矩态之间。部分屏蔽还体现为仅有一半的过剩电荷被传导浴所贡献。过剩电荷的这种减少相当于改变了与杂质耦合的传导电子所感受到的边界条件，并表现为小于幺正极限 π 的相移。

8. 讨论与展望

总而言之，我们证明，浴的第零格点上的吸引性关联足以挫败近藤效应并稳定局域磁矩相。近藤云及其相关的局域费米液体的消失，是通过浴中以及杂质附近的配对涨落（图（8）左图）实现的。这让人想起在半填充哈伯德模型中观察到的一种次要超导倾向，其出现在$T = 0$ 根据文献 [66,114]中的幺正重整化群处理所得的结果。我们发现，临界点呈现非费米液体行为，准粒子剩余量 Z趋于零。我们的结果与动力学平均场理论的多个方面高度吻合，这表明，该方法中自洽获得的局域自能可以通过扩展单杂质安德森模型相当准确地表示。因此，直接在动力学平均场理论框架内检验我们的方法所作出的预测将十分重要。我们注意到，临界点处的非费米液体表现出双占据子与空穴子之间的部分关联，这不仅不同于关联费米液体金属（未束缚的空穴子与双占据子），也不同于顺磁绝缘体（由束缚的空穴子与双占据子构成）。在基态子空间（方程（37））的两个未屏蔽态中传播的激发涉及双占据态与空穴态的同时产生：在这些通道中，双占据子和空穴子缺一便无法传播。这种不完全关联是迈向局域磁矩相中完全禁闭的中间步骤。尝试在介观量子点上对其中一些设想进行实验检验似乎颇有意义 [115,116] ；该量子点除了通过通常的电子隧穿耦合连接到电子库外，还通过近邻效应与一条超导引线耦合。

我们在此强调，本文分析的扩展单杂质安德森模型是一种杂质模型，它（i）具有单个关联的传导电子通道；（ii）符合半填充哈伯德模型的对称性（SU(2)自旋、U(1)电荷和粒子-空穴对称性）；（iii）表现出局域金属-绝缘体转变。因此，该模型

为获得基于哈密顿量的动力学平均场理论理解提供了一条最简路径。此外，在涉及近藤屏蔽挫折的重整化群流层面，我们引入的吸引性现场相互作用 U_b ，其作用等价于相关杂质模型中引入的额外浴关联。这些模型包括 Giamarchi 等人研究的具有多个各向异性传导通道的单杂质安德森模型 [117], ，以及 Si 和 Kotliar [27, 78, 118] 以及 Ruckenstein 等人 [119]研究的周期性安德森模型；后者在传导带和杂质带之间加入了显式的 s-d 耦合（以及密度-密度相互作用）。在前一种 K–通道模型（文献 [117], ）中，额外传导通道里的近藤相互作用的z–分量（V_l, $l \in [1, K-1]$）会对原有 $l = 0$ 通道中近藤相互作用的自旋翻转项 γ_0 造成挫折，从而导致近藤屏蔽失效。扩展单杂质安德森模型中的 U_b 耦合也起到类似的挫折作用：二者在重整化群方程层面等价，因此， V_l 和 U_b 分别抑制 γ_0 和 J 的重整化群相关性。比较本文的重整化群方程（方程（8））与 Giamarchi 等人 [117]的方程，可以更精确地说明这一点：两个挫折项 U_b 和 V_l 之间的映射形式为 $U_b \sim \sum_{l=1}^{K-1} V_l^2 \rho$，其中 ρ 是传导浴态密度。我们得到的重整化群方程与 Si 和 Kotliar [27]研究的扩展周期性安德森模型的重整化群方程之间，也存在类似关系。从这个意义上说，我们的分析适用于多种模型：在某些参数范围内，近藤效应是稳定的；而在其他参数范围内，杂质自旋自由度会受到某种形式的量子力学挫折，从而使近藤效应消失。

本研究的拓展方向包括利用 e-SIAM 辅助模型分析杂质位点的混合价态区（即偏离半填充的情况）。这使得一种可能性成为现实：本研究中观察到的$T = 0$ 激发态量子相变与量子相变合并，从而使动力学平均场理论一级相变的有限温度临界终点转变为量子临界点。近期的动力学平均场理论计算 [120] 表明，随着空穴掺杂，共存区域逐渐缩小，但尚未揭示量子临界点。若这样的量子临界点确实存在，它能否容纳杂质位点与第零个浴位点之间的配对涨落，并使其在掺杂后占据主导地位，从而预示相关体模型可能出现超导不稳定性？我们回顾一下：在 $T = 0$ 处，通过文献 [65, 114]中的幺正重整化群处理，确实观察到空穴掺杂哈伯德模型中有超导态从量子临界点涌现。或许可以通过考察 e-SIAM 的团簇变体（即多个杂质由单粒子跃迁和/或类 RKKY 相互作用 [121, 122]彼此连接），来捕捉 k–空间中的电子分化。一般而言，辅助模型中存在多种不同类型的关联——莫特物理导致的局域化、自旋和电荷涨落导致的离域化，以及局域吸引关联导致的配对——这使其成为一种极具潜力的辅助模型，有望描述关联量子物质中各种新颖相的涌现。

致谢

AM 感谢 IISER 加尔各答通过初级和高级研究奖学金提供资助。SL 感谢 SERB 和印度政府通过 MATRICS 基金 MTR/2021/000141 以及核心研究基金 CRG/2021/000852 提供资助。作者谨此感谢与 G. Martins、E. Vernek、E. Anda、B. Bansal、S. Kundu、S. R. Hassan、M. S. Laad、R. K. Singh、S. Sen、D. Jaiswal-Nagar、T. Banerjee 和 N. Mohanta 的讨论。

参考文献

[1] N. F. Mott。金属-绝缘体转变。 *Rev. Mod. Phys.*，40:677–683，1968年10月。[2] R F Milligan 和 G A Thomas。金属-绝缘体转变。 *Annual Review of Physical Chemistry*，36(1):139–158，1985年。[3] Masatoshi Imada、藤森淳和十仓好纪。金属-绝缘体转变。 *Reviews of modern physics* 70 4 1039, , (): 。[4] Y 1998 Kuramoto 和 T Watanabe。重费米子系统中动量依赖磁响应理论。载于 *Proceedings of the Yamada Conference XVIII on Superconductivity in Highly Correlated Fermion Systems* 80 83 1987 ，第 – 页。爱思唯尔，。[5] D. L. Cox 和 N. Grewe。安德森晶格的输运性质。 *Zeitschrift für Physik B Condensed Matter*，71(3):321–340，1988年9月。[6] Walter Metzner 和 Dieter Vollhardt。 $d = \infty$ 维中的关联晶格费米子。 *Phys. Rev. Lett.*，62:324–327，1989年1月。[7] X. Y. Zhang、M. J. Rozenberg 和 G. Kotliar。零温下 d $=\infty$ *Phys. Rev.* 哈伯德模型中 *Lett.* 70 1666 1993 的莫特转变。，:–1669，3月。[8] Antoine Georges、Gabriel Kotliar、Werner Krauth 和 Marcelo J Rozenberg。强关联费米子系统的动力学平均场理论及无限维极限。 *Reviews of Modern Physics*，68(1):13，1996年。[9] O. Parcollet、G. Biroli 和 G. Kotliar。莫特转变的团簇动力学平均场分析。 *Phys. Rev. Lett.*，92:226402，2004年6月。[10] Thomas Maier、Mark Jarrell、Thomas Pruschke 和 Matthias H. Hettler。量子团簇理论。 *Rev. Mod. Phys.*，77:1027–1080，2005年10月。

[11] G. Kotliar、S. Y. Savrasov、K. Haule、V. S. Oudovenko、O. Parcollet 和 C. A. Marianetti。利用动力学平均场理论进行电子结构计算。 *Rev. Mod. Phys.*，78:865–951，2006年8月。[12] Takuma Ohashi、Tsutomu Momoi、Hirokazu Tsunetsugu 和 Norio Kawakami。各向异性三角晶格上哈伯德模型的有限温度莫特转变。 *Phys. Rev. Lett.*，100:076402，2008年2月。[13] N F Mott。金属电子理论的基础，特别论及过渡金属。 *Proceedings of the Physical Society. Section A* 62 7 416 422, 1949 ，( ): –，

7月。[14] Martin C. Gutzwiller。关联对过渡金属铁磁性的影响。 *Phys. Rev. Lett.*，10:159–162，1963年3月。[15] Junjiro Kanamori。过渡金属中的电子关联与铁磁性。 *Progress of Theoretical Physics*，30(3):275–289，1963年9月。[16] John Hubbard。窄能带中的电子关联。载于 *Proceedings of the royal society of london a: mathematical, physical and engineering sciences* 276, 238 257 1963 ，卷号 页码 –。英国皇家学会，。[17] W. F. Brinkman 和 T. M. Rice。将 Gutzwiller变分法应用于金属-绝缘体转变。 *Phys. Rev.* , :–, *B* 2 4302 4304, 1970

11月。[18] David E Logan 和 Martin R Galpin。动力学平均场理论框架下的莫特绝缘体与掺杂诱导的莫特转变：单带哈伯德模型的精确结果。 *Journal of Physics: Condensed Matter*，28(2):025601，2015年12月。[19] J. Vučičević、H. Terletska、D. Tanaskovi´c 和 V. Dobrosavljevi´c。莫特转变附近的有限温度交叉与量子维德姆线。 *Phys. Rev. B*，88:075143，2013年8月。[20] Hyowon Park、Kristjan Haule 和 Gabriel Kotliar。莫特转变的团簇动力学平均场理论。 *Physical review letters* 101 18 186403, 2008 ，( ): 。

[21] G. Rohringer、H. Hafermann、A. Toschi、A. A. Katanin、A. E. Antipov、M. I. Katsnelson、A. I. Lichtenstein、A. N. Rubtsov 和 K. Held。超越动力学平均场理论研究非局域关联的图解路径。 *Rev. Mod. Phys.*，90:025003，2018年5月。[22] A. I. Lichtenstein 和 M. I. Katsnelson。关联系统中准粒子能带结构的第一性原理计算：LDA++ 方法。 *Phys. Rev. B*，57:6884–6895，1998年3月。[23] G. Kotliar、S. Y. Savrasov、K. Haule、V. S. Oudovenko、O. Parcollet 和 C. A. Marianetti。利用动力学平均场理论进行电子结构计算。 *Rev. Mod. Phys.*，78:865–951，2006年8月。[24] K. Held。利用动力学平均场理论进行电子结构计算。 *Advances in Physics*，56(6):829–926，2007年。[25] Karsten Held、Andrey A Katanin 和 Alessandro Toschi。动力学顶角近似：简介。 *Progress of Theoretical Physics Supplement* 176 117 133, 2008 ，:–。

[26] H. Terletska、J. Vučičević ´ ´ ´ *Phys.* c、D. *Rev. Lett.* 107 026401, 2011
Tanaskovic 和 V. Dobrosavljevic。莫特转变附近的量子临界输运。，:，7月。[27] Qimiao Si 和 Gabriel Kotliar。无限维扩展哈伯德模型的金属非费米液体相。 *Phys.* , :– *Rev. B* 48 13881 1993
13903，11月。[28] Gabriel Kotliar 和 Qimiao Si。量子化学、反常维数，以及强关联系统中费米液体理论的失效。 *Physica Scripta*，T49:165，1993年。[29] P. W. Anderson。金属中的局域磁态。 *Phys. Rev.*，124:41–53，1961年10月。[30] P. W. Anderson。局域磁矩与局域态。 *Rev. Mod. Phys.*，50:191–201，1978年4月。[31] Philip W Anderson 和 Gideon Yuval。近藤问题的精确结果：等价于经典一维库仑气体。 *Physical Review Letters*，23(2):89，1969年。[32] Philip W Anderson、G Yuval 和 DR Hamann。近藤问题的精确结果。II. 标度理论、定性正确的解，以及关于一维经典统计模型的一些新结果。 *Physical Review B*，1(11):4464，1970年。[33] PW Anderson。近藤问题标度定律的简明推导。 *Journal of Physics C: Solid State Physics*，3 12( ):2436，1970年。[34] FDM Haldane。非对称安德森模型的标度理论。 *Physical Review Letters*，40(6):416，1978年。[35] J H Jefferson。混合价问题的重整化群方法。 *Journal of Physics C: Solid State Physics*，10 18 3589 1977 ( ):–3599，1977年9月。[36] Kenneth G. Wilson。重整化群：临界现象与近藤问题。 *Rev. Mod. Phys.*，47:773–840，1975年10月。[37] H. R. Krishna-murthy、J. W. Wilkins 和 K. G. Wilson。稀磁合金安德森模型的重整化群方法。I. 对称情形下的静态性质。 *Phys. Rev. B*，21:1003–1043，1980年2月。[38] N. Andrei。近藤哈密顿量的对角化。 *Phys. Rev. Lett.*，45:379–382，1980年8月。[39] N Andrei、K Furuya 和 J H Lowenstein。近藤问题的解。 *Rev. Mod. Phys.*，55:331，1983年。[40] P B Wiegmann。s-d交换模型（近藤问题）的精确解。 *Journal of Physics C: Solid State Physics*，14 10 1463 1981 ( ):–1478，1981年4月。[41] A M Tsvelick 和 P B Wiegmann。磁性合金理论中的精确结果。 *Adv. in Phys.*，32:453，1983年。[42] Gabriel Kotliar 和 Qimiao Si。广义安德森模型混合价区间中的图卢兹点与非费米液体态。 *Phys. Rev. B*，53:12373–12388，1996年5月。[43] Solomon F. Duki。su(n)近藤模型的可解极限。 *Phys. Rev. B*，83:134423，2011年4月。[44] L. Borda、A. Schiller 和 A. Zawadowski。玻色化与安德森-尤瓦尔方法在量子杂质问题强耦合极限下的适用性。 *Phys. Rev. B*，78:201301，2008年11月。[45] Simon Streib、Aldo Isidori 和 Peter Kopietz。通过泛函重整化群求解安德森杂质模型。*Phys. Rev. B*，87:201107，2013年5月。[46] Anirban Mukherjee、Abhirup Mukherjee、N. S. Vidhyadhiraja、A. Taraphder 和 Siddhartha Lal。揭示近藤云：近藤模型的幺正重整化群研究。 *Phys. Rev. B*，105:085119，2022年2月。[47] Erik S. Sørensen 和 Ian Affleck。近藤屏蔽云的标度理论。 *Phys. Rev. B*，53:9153–9167，1996年4月。[48] Ian Affleck 和 Pascal Simon。探测量子点周围的近藤屏蔽云。 *Phys. Rev. Lett.*，86:2854–2857，2001年3月。[49] Pascal Simon 和 Ian Affleck。介观器件中的近藤屏蔽云效应。 *Phys. Rev. B*，68:115304，2003年9月。[50] C. A. Busser、G. B. Martins、L. C. Ribeiro、E. Vernek、E. V. Anda 和 E. Dagotto。 *Phys. Rev. 9*，81:045111，2010年。[51] L. C. Ribeiro、G. B. Martins、G. Gomez-Silva 和 E. V. Anda。 *Phys. Rev. B*，99:085139，2019年。[52] D. Goldhaber-Gordon、Hadas Shtrikman、D. Mahalu、David Abusch-Magder、U. Meirav 和 M. A. Kastner。量子点中的近藤效应

单电子晶体管。 *Nature*，391(6663):156–159，1998年1月。[53] Sara M. Cronenwett、Tjerk H. Oosterkamp 和 Leo P. Kouwenhoven。量子点中的可调控近藤效应。 *Science*，281 5376 540 544，1998（）：–。[54] J¨org Schmid、J ¨ürgen Weis、Karl Eberl 和 Klaus v. Klitzing。与储库强耦合极限下的量子点。，-：–185，1998。[55] Michael Pustilnik 和 Leonid Glazman。量子点中的近藤效应。 *Journal of Physics: Condensed Matter*，16(16):R513，2004年4月。[56] Ivan V. Borzenets、Jeongmin Shim、Jason C. H. Chen、Arne Ludwig、Andreas D. Wieck、Seigo Tarucha、H.-S. Sim 和 Michihisa Yamamoto。近藤屏蔽云的观测。 *Nature*，579(7798):210–213，2020年3月。[57] N. N´eel、J. Kr¨oger、R. Berndt、T. O. Wehling、A. I. Lichtenstein 和 M. I. Katsnelson。逐原子调控 $CoCu_n$ 团簇中的近藤效应。 *Phys. Rev. Lett.*，101:266803，2008年12月。[58] Aidi Zhao、Qunxiang Li、Lan Chen、Hongjun Xiang、Weihua Wang、Shuan Pan、Bing Wang、Xudong Xiao、Jinlong Yang、J. G. Hou 和 Qingshi Zhu。通过化学键合调控吸附磁性离子的近藤效应。 *Science*，309 5740 1542 1544，2005（）：–，9月。[59] Masahiro Nozaki、Shinsei Ryu 和 Tadashi Takayanagi。量子场论中纠缠重整化的全息几何。 *Journal of High Energy Physics*，2012(10):193，2012。[60] Christophe Mora、C˘at˘alin Pa¸scu Moca、Jan von Delft 和 Gergely Zar´and。单杂质安德森模型的费米液体理论。 *Phys. Rev. B*，92:075120，2015年8月。[61] Anirban Mukherjee 和 Siddhartha Lal。关联电子的全息幺正重整化群-I：张量网络方法。 *Nuclear Physics B*，960:115170，2020。[62] Anirban Mukherjee 和 Siddhartha Lal。关联电子的全息幺正重整化群-II：对费米子临界性的洞见。 *Nuclear Physics B*，960:115163，2020。[63] Santanu Pal、Anirban Mukherjee 和 Siddhartha Lal。有限磁场下量子 kagome 反铁磁体中的关联自旋液体：重整化群分析。 *New Journal of Physics*，21(2):023019，2019年2月。[64] Anirban Mukherjee、Siddhartha Patra 和 Siddhartha Lal。费米子临界性由费米面拓扑塑造：汤川—卢廷格液体案例研究。 *Journal of High Energy Physics*，04:148，2021。[65] Anirban Mukherjee 和 Siddhartha Lal。莫特–哈伯德跃迁标度理论-II：掺杂莫特绝缘体的量子临界性。 *New Journal of Physics*，22(6):063008，2020年6月。[66] Anirban Mukherjee 和 Siddhartha Lal。莫特–哈伯德跃迁标度理论：I. $t = 0$ 半填充哈伯德模型的相图。 *New Journal of Physics*，22(6):063007，2020年6月。[67] Siddhartha Patra 和 Siddhartha Lal。库珀对绝缘体中拓扑序的起源。 *Phys. Rev. B*，104:144514，2021年10月。[68] Siddhartha Patra、Abhirup Mukherjee、Anirban Mukherjee、N. S. Vidhyadhiraja、A. Taraphder 和 Siddhartha Lal。挫折塑造多通道近藤物理：星形图视角。 *pre-print*，2022。[69] 补充材料可在线获取。[70] P Nozieres。低温下对近藤问题的“费米液体”描述。 *Journal of Low Temperature Physics* 17 31, , ：。 1974 [71] T.A. Costi 和 A.C. Hewson。计算强关联系统谱的新方法。 *Physica B: Condensed Matter* 163 1 179 , （）：– 181，1990。[72] Abner Shimony。纠缠度。 *Annals of the New York Academy of Sciences*，755(1):675–679，1995。[73] Tzu-Chieh Wei 和 Paul M Goldbart。纠缠的几何度量及其在二分与多体量子态中的应用。 *Physical Review A*，68(4):042307，2003。[74] Ryszard Horodecki、Pawe l Horodecki、Micha l Horodecki 和 Karol Horodecki。量子纠缠。 *Reviews of modern physics* 81 2 865, 2009 , （）：。 [75] Philipp Hauke、Markus Heyl、Luca Tagliacozzo 和 Peter Zoller。通过动态磁化率测量多体纠缠。 *Nature Physics*，12(8):778–782，2016年8月。[76] Goetz Moeller、Qimiao Si、Gabriel Kotliar、Marcelo Rozenberg 和 Daniel S. Fisher。哈伯德模型莫特转变附近的临界行为。 *Phys. Rev. Lett.*，74:2082–2085，1995年3月。[77] K. Held、R. Peters 和 A. Toschi。对强电子关联所致折点的通俗理解。 *Phys. Rev. Lett.* 110 246402, 2013 *Phys. Rev.*，：6 月。[78] Gabriel Kotliar 和 Qimiao Si。广义安德森模型混合价区间中的图卢兹点与非费米液体态。 *Phys. Rev. B*，53:12373–12388，1996年5月。[79] R. Bulla。无限维哈伯德模型中的零温金属-绝缘体转变。 *Phys. Rev. Lett.*，83:136–139，1999年7月。[80] Antoine Georges。强关联电子材料：动力学平均场理论与电子结构。 *Proceedings* 715 1 3 74, 2004 *AIP Conference*，（）：–。 [81] Antoine Georges 和 Werner Krauth。无限维半填充哈伯德模型的物理性质。 *Phys. Rev. B*，48 7167 7182，1993：–，9月。[82] Marcelo J. Rozenberg、Goetz Moeller 和 Gabriel Kotliar。零温下哈伯德模型中的金属—绝缘体转变 II。 *Modern Physics Letters B*，08(08n09):535–543，1994。[83] Walter Kohn。绝缘态理论。 *Physical review*，133(1A):A171，1964。[84] C. Castellani、C. Di Castro、D. Feinberg 和 J. Ranninger。金属-绝缘体转变的新模型哈密顿量。 *Phys. Rev. Lett.* 43 1957 1979 *Phys.*，：– 1960，12月。[85] H. R. Krishnamurthy、C. Jayaprakash、Sanjoy Sarker 和 Wolfgang Wenzel。非二分晶格中的莫特-哈伯德金属-绝缘体转变。 *Phys. Rev. Lett.*，64:950–953，1990年2月。[86] P. Limelette、A. Georges、D. J´érôme、P. Wzietek、P. Metcalf 和 J. M. Honig。莫特转变处的普适性与临界行为。 *Science*，302(5642):89–92，2003。[87] F. Kagawa、K. Miyagawa 和 K. Kanoda。准二维有机导体中的非常规临界行为。*Nature*，436(7050):534–537，2005年7月。[88] Tetsuya Furukawa、Kazuya Miyagawa、Hiromi Taniguchi、Reizo Kato 和 Kazushi Kanoda。有机材料中莫特转变的量子临界性。 *Nature Physics*，11(3):221–224，2015年3月。

[89] Heike Eisenlohr、Seung-Sup B. Lee 和 Matthias Vojta。单带哈伯德模型中的莫特量子临界性：动力学平均场理论、幂律谱与标度。 *Phys. Rev. B*，100:155152，2019年10月。[90] Satyaki Kundu、Tapas Bar、Rajesh Kumble Nayak 和 Bhavtosh Bansal。突变莫特转变处的临界减速：一级相变何时变为零级相变并呈现二级相变的特征。 *Phys. Rev. Lett.*，124:095703，2020年3月。[91] Nozi`eres，Ph. 和 Blandin，A. 真实金属中的近藤效应。 *J. Phys. France*，41(3):193–211，1980。[92] A. C. Hewson。 *The Kondo Problem to Heavy Fermions*。剑桥大学出版社，1993。[93] Piers Coleman。 *Introduction to many-body physics*。剑桥大学出版社，2015。第18章。[94] A. C. Hewson。重整化微扰展开与费米液体理论。 *Phys. Rev. Lett.*，70:4007–4010，1993年6月。[95] CM Varma、Z Nussinov 和 Wim Van Saarloos。奇异费米液体或非费米液体。 *Physics Reports*，361(5-6):267–417，2002。[96] Gabriel Kotliar 和 Qimiao Si。强关联系统中的量子化学、反常维数与费米液体理论的失效。 *Physica Scripta*，T49A:165–171，1993年1月。[97] Jan von Delft、Gergely Zar´and 和 Michele Fabrizio。二通道近藤模型的有限尺寸玻色化：数值重整化群与共形场论之间的桥梁。 *Phys. Rev. Lett.*，81:196–199，1998年7月。[98] P Coleman、C P

´ *Journal of Physics: Condensed* epin、 *Matter* 13 35 723, 2001

Qimiao Si 和 R Ramazashvili。费米液体如何变重并消亡？，（）：R，8月。[99] Qimiao Si、Silvio Rabello、Kevin Ingersent 和 J. Lleweilun Smith。强关联金属中的局域临界量子相变。 *Nature*，413(6858):804–808，2001年10月。[100] Philip W Anderson。具有局域散射势的费米气体中的红外灾变。

Physical Review Letters 18 24 1049, ，（）：。 1967

[101] P. W. Anderson。二维哈伯德模型正常金属态的“卢廷格液体”行为。 *Phys. Rev. Lett.*，64:1839–1841，1990年4月。[102] J. Friedel。关于金属固溶体的一些电学和磁学性质。 *Canadian Journal of Physics*，34(12A):1190–1211，1956。[103] JS Langer 和 V A mbegaokar。相互作用电子系统的弗里德尔求和规则。 *Physical Review*，121(4):1090，1961。[104] David C. Langreth。局域杂质态安德森模型的弗里德尔求和规则。 *Phys. Rev.*，150:516–518，1966年10月。[105] JM Luttinger。相互作用费米子系统的费米面及若干简单平衡性质。 *Physical Review*，119 4( ):1153，1960。[106] Richard M Martin。费米面求和规则及其对周期性近藤和混合价系统的影响。 *Physical Review Letters* 48 5 ，（）：

362，1982。[107] Masaki Oshikawa。卢廷格定理的拓扑方法及近藤晶格的费米面。 *Physical Review Letters*，84 15 3370，2000（）：。[108] Kazuhiro Seki 和 Seiji Yunoki。卢廷格定理的拓扑诠释。 *Physical Review B*，96(8):085124，2017。[109] Joshuah T Heath 和 Kevin S Bedell。卢廷格定理成立的必要且充分条件。 *New Journal of Physics* 22 6 063011, 2020 ，（）：

6月。[110] Sudeshna Sen、Patrick J. Wong 和 Andrew K. Mitchell。莫特转变作为拓扑相变。 *Phys. Rev. B*，102 2020：081110，8月。[111] A. J. Heeger、S. Kivelson、J. R. Schrieffer 和 W. P. Su。导电聚合物中的孤子。 *Rev. Mod. Phys.*，60:781–850，1988年7月。[112] M. Stone。一维费米子数分数化的初等推导。 *Phys. Rev. B*，31:6112–6115，1985年5月。[113] J´anos K. Asb´oth、L´aszl´o Oroszl´any 和 Andr´as P´alyi。 *A Short Course on Topological Insulators*。Springer International Publishing，2016。[114] Anirban Mukherjee 和 Siddhartha Lal。掺杂二维电子哈伯德模型中排斥作用导致的超导性：纠缠视角。 *Journal of Physics: Condensed Matter*，34(27):275601，2022年4月。[115] Z. Iftikhar、S. Jezouin、A. Anthore、U. Gennser、F. D. Parmentier、A. Cavanna 和 F. Pierre。宏观量子电荷态下的二通道近藤效应与重整化流。 *Nature*，526(7572):233–236，2015年10月。[116] Z. Iftikhar、A. Anthore、A. K. Mitchell、F. D. Parmentier、U. Gennser、A. Ouerghi、A. Cavanna、C. Mora、P. Simon 和 F. Pierre。可调控量子临界性与“电荷”近藤电路中的超弹道输运。 *Science*，360 6395 1315( ):–1320，2018。[117] T. Giamarchi、C. M. Varma、A. E. Ruckenstein 和 P. Nozi`eres。具有有限程相互作用的杂质模型的奇异低能性质。 *Phys. Rev. Lett.*，70:3967–3970，1993年6月。[118] Qimiao Si 和 G. Kotliar。无限维扩展哈伯德模型的费米液体相与非费米液体相。

Phys. ，：–， *Rev. Lett.* 70 3143 3146, 1993

5月。[119] AE Ruckenstein 和 CM Varma。边缘费米液体理论。 *Physica C: Superconductivity*，185:134–140，1991。[120] J. Vuˇciˇc evi´c、D. Tanaskovi´c、M. J. Rozenberg 和 V. Dobrosavljevi´c。坏金属行为揭示了掺杂哈伯德模型中的莫特量子临界性。 *Phys. Rev. Lett.*，114:246402，2015年6月。[121] Michel Ferrero、Lorenzo De Leo、Philippe Lecheminant 和 Michele Fabrizio。强关联概览。 *Journal of Physics: Condensed Matter* 19 43 433201, 2007 ，（）：

10月。[122] Shiro Sakai、Yukitoshi Motome 和 Masatoshi Imada。掺杂莫特绝缘体电子结构的演化：格林函数极点与零点的重构。 *Phys. Rev. Lett.*，102:056404，2009年2月。

arXiv:2302.02328v1 [cond-mat.str-el] 5 Feb 2023

《通过电荷涨落产生的近藤挫折：通向莫特局域化的途径》的补充材料

Abhirup Mukherjee[1]，**N. S. Vidhyadhiraja**[2]，**A. Taraphder**[3] 和 **Siddhartha Lal**[1]

电子邮箱： am18ip014@iiserkol.ac.in, raja@jncasr.ac.in, arghya@phy.iitkgp.ernet.in, slal@iiserkol.ac.in[1]
印度理工学院科学教育与研究学院加尔各答分校物理科学系，印度西孟加拉邦 741246[2]贾瓦哈拉尔·尼赫鲁高级科学研究中心理论科学部，贾库尔，班加罗尔 560064，印度[3]印度理工学院克勒格布尔分校物理系，克勒格布尔 721302，印度

1. 幺正重整化群方法

杂质问题的非平凡性源于这样一个事实：杂质自旋与传导电子之间的多粒子关联会在传导电子态之间诱发多粒子相互作用。这意味着，在传导带内，高能态和低能态彼此纠缠，从而产生所谓的紫外-红外混合。重整化群（RG）方法是获取低能物理、同时考虑高能自由度影响的方法之一。本文采用的特定重整化群变体是我们中的一些人于文献中提出的幺正重整化群（URG）方法。 [1–7]该方法通过对哈密顿量施加幺正变换来解耦高能 $k-$态，在此过程中有效带宽减小，低能自由度的耦合常数也发生变化。这一过程产生一系列重整化哈密顿量，进而得到耦合常数重整化群方程。尽管从思路上看，这与 Anderson 将穷人标度方法应用于单通道Kondo模型的做法相似， [8], 但两种方法之间存在若干差异，下面详细介绍该方法时将会说明这些差异。

我们首先为单粒子电子态定义一个紫外-红外方案 $k_\sigma = (k_F + |k|)\hat{s}$。我们根据单粒子 $k-$态到费米面（FS）的法向距离 $\Lambda = |k|$ 以及单位向量 $\hat{s} = \hat{k}$的取向来标记这些态，其中 $\hat{s} = \frac{\nabla_{\mathbf{k}}\epsilon_{\mathbf{k}}}{|\nabla_{\mathbf{k}}\epsilon_{\mathbf{k}}|}|_{\epsilon_{\mathbf{k}}=E_F}$。每个 $\hat{s}$ 都表示一个垂直于费米面的方向。将这两个标签与自旋指标 $\sigma =\uparrow,\downarrow$结合后，每个单粒子态便可唯一标记为$|j,l\rangle = |(k_F + \Lambda_j)\hat{s},\sigma\rangle , l \equiv (\hat{s},\sigma)$。这些 Λ按如下方式排列： $\Lambda_N > \Lambda_{N-1} > \ldots > 0$，因此 Λ_N距费米面最远，能量最高（紫外）；而 Λ_0 距费米面最近，能量最低（红外）。幺正重整化群通过逐步解纠缠这些态 Λ_j来推进，从紫外附近的态开始，逐渐向红外方向进行标度变换。这导出哈密顿量流方程 [9]

$$H_{(j-1)} = U_{(j)} H_{(j)} U^\dagger_{(j)} \ , \tag{1}$$

其中，酉操作 $U_{(j)}$ 是重整化群步骤 j中的酉映射。 $U_{(j)}$ 将等几何曲线上的所有电子态$|\mathbf{k}_{\Lambda_j\hat{s}_m},\sigma\rangle$ 解纠缠，其形式为 [2,9]

$$U_{(j)} = \prod_l U_{j,l}, U_{j,l} = \frac{1}{\sqrt{2}}\sum_l [1 + \eta_{j,l} - \eta^\dagger_{j,l}] \ , \tag{2}$$

其中， l 对距离为 Λ_j处等能壳层上的态求和，而 $\eta_{j,l}$ 是满足以下代数关系的电子-空穴跃迁算符

$$\left\{\eta_{j,l}, \eta^\dagger_{j,l}\right\} = 1 \ , \ \left[\eta_{j,l}, \eta^\dagger_{j,l}\right] = 2\hat{n}_{j,l} - 1 \ . \tag{3}$$

跃迁算符可以用哈密顿量的非对角部分表示，$H^X_{j,l} = Tr_{j,l}(c^\dagger_{j,l} H_j)c_{j,l} +$及其厄米共轭，以及对角部分$H^D_{j,l}$（动能和自能）：

$$\eta_{j,l} = Tr_{j,l}(c^\dagger_{j,l} H_{j,l})c_{j,l} \frac{1}{\hat{\omega}_{j,l} - Tr_{j,l}(H^D_{j,l}\hat{n}_{j,l})\hat{n}_{j,l}} \ . \tag{4}$$

分子中的非对角算符$Tr_{j,\,l}\,(c_{j\,,\,l}^{\dagger}H_{j,\,l})\;c_{j,\,l}$ 包含所有可能改变福克态构型的散射顶角$\eta_{j,\,l}\;\;,\;\;l\rangle$ [9]。H_{j}^{D}和H_{j}^{X}的通式如下 $|j,\;\;l\rangle$ [9]。$H_{j\,,\,l}^{D}$ 和$H_{j\,,\,l}^{X}$ 的通式如下

$$\begin{aligned}H_{j,l}^{D}&=\sum_{\Lambda\hat{s},\sigma}\epsilon^{j,l}\hat{n}_{\mathbf{k}_{\Lambda\hat{s}},\sigma}+\sum_{\alpha}\Gamma_{\alpha}^{4,(j,l)}\hat{n}_{\mathbf{k}\sigma}\hat{n}_{\mathbf{k}'\sigma'}+\sum_{\beta}\Gamma_{\beta}^{6,(j,l)}\hat{n}_{\mathbf{k}\sigma}\hat{n}_{\mathbf{k}'\sigma'}\hat{n}_{\mathbf{k}''\sigma''}+\cdots\;,\\H_{j,l}^{X}&=\sum_{\alpha}\Gamma_{\alpha}^{2}c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger}c_{\mathbf{k}'\sigma'}+\sum_{\beta}\Gamma_{\beta}^{4}c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger}c_{\mathbf{k}'\sigma'}^{\dagger}c_{\mathbf{k}_{1}'\sigma_{1}'}c_{\mathbf{k}_{1}\sigma_{1}}+\cdots\;.\end{aligned}\tag{5}$$

指标 α 和 β 是字符串，表示特定相互作用顶角 Γ_{α}^{n} 或 Γ_{β}^{m} 处入射和出射电子态的量子数。算符 $\hat{}\omega_{j,\,l}$ 描述了重整化哈密顿量不同部分之间不对易所引起的量子涨落，其形式如下： [9]

$$\hat{\omega}_{j,l}=H_{j,l}^{D}+H_{j,l}^{X}-H_{j,l-1}^{X}\;.\tag{6}$$

沿着一条等几何曲线，以距离 Λ_{j} 为间隔解纠缠电子态$\hat{s},\;\;\sigma$ 后，将得到以下有效哈密顿量 $H_{j,\,l}$

$$H_{j,l}=\prod_{m=1}^{l}U_{j,m}H_{(j)}[\prod_{m=1}^{l}U_{j,m}]^{\dagger}\;.\tag{7}$$

仅考虑主要的切向散射过程，以及沿法向的其他动量转移过程$\hat{s}$后，重整化哈密顿量 $H_{(j-1)}$ 的形式为 [9]

$$Tr_{j,(1,\ldots,2n_{j})}(H_{(j)})+\sum_{l=1}^{2n_{j}}\{c_{j,l}^{\dagger}Tr_{j,l}(H_{(j)}c_{j,l}),\eta_{j,l}\}\tau_{j,l}\;.\tag{8}$$

当式（4）中的分母在某个能标 Λ^{*}处趋于零时，便达到重整化群不动点。可以证明，分母趋于零与非对角分量 H^{X} [9]趋于零同时发生，且量子涨落算符在不动点处的值等于哈密顿量的一个本征值。不动点哈密顿量 H^{*} 由仍然纠缠的重整化自由度 Λ_{j} （这些自由度位于窗口 Λ^{*}: $\Lambda_{j}<\Lambda^{*}$内）以及沿途通过幺正重整化群变换解耦的运动积分（IOM）组成。运动积分不再包含任何数目涨落，因此在每个解耦自由度对应的数算符基底下均为对角形式。

$$H^{*}=\sum_{\Lambda_{j}<\Lambda^{*}}H^{*}(\Lambda_{j})+\sum_{\Lambda_{j}>\Lambda^{*}}H_{\mathrm{IOMs}}(\Lambda_{j})\;.\tag{9}$$

有效哈密顿量可用于构造相应的热密度矩阵，进而得到温度为 T 时的配分函数:

$$Z^{*}=\mathrm{Tr}\left[\hat{\rho}^{*}\right]=\mathrm{Tr}\left[e^{-\beta\hat{H}^{*}}\right]=\mathrm{Tr}\left[U^{\dagger}e^{-\beta\hat{H}^{*}}U\right]=\mathrm{Tr}\left[e^{-\beta\hat{H}}\right]=Z\;,\tag{10}$$

其中， $\beta=1/k_{B}T$, $U=\prod_{1}^{j^{*}}U_{(j)}$, H 是裸哈密顿量， j^{*} 是达到红外稳定不动点时的重整化群步骤。幺正变换在重整化群流过程中保持配分函数不变。

2. 扩展型SIAM重整化群方程的推导

我们所研究的哈密顿量是扩展安德森杂质模型（主文稿第三节中对此进行了描述）：

$$\mathcal{H}=-\frac{1}{2}U\left(\hat{n}_{d\uparrow}-\hat{n}_{d\downarrow}\right)^{2}+\sum_{\vec{k},\sigma}\epsilon_{\vec{k}}\tau_{\vec{k},\sigma}+J\vec{S}_{d}\cdot\vec{S}_{0}+V\sum_{\sigma}\left(c_{d\sigma}^{\dagger}c_{0\sigma}+\mathrm{h.c.}\right)-\frac{1}{2}U_{b}\left(\hat{n}_{0\uparrow}-\hat{n}_{0\downarrow}\right)^{2}\;.\tag{11}$$

在解耦一个电子态 $q\beta$后，哈密顿量 $H_{(j)}$ 在第 j^{th} 个重整化群步骤中的重整化由以下表达式给出:

$$\left(\Delta H_{(j)}\right)_{\vec{q},\beta}=H_{(j-1)}-H_{(j)}=c_{\vec{q},\beta}^{\dagger}T_{\vec{q},\beta}\frac{1}{\omega_{e}-H_{D}}T_{\vec{q},\beta}^{\dagger}c_{\vec{q},\beta}+T_{\vec{q},\beta}^{\dagger}c_{\vec{q},\beta}\frac{1}{\omega_{h}-H_{D}}c_{\vec{q},\beta}^{\dagger}T_{\vec{q},\beta}\;,\tag{12}$$

其中，$\omega_{e,\;h}$ 是电子和空穴散射通道的量子涨落尺度， H_{D} 是哈密顿量中在 k–空间对角的部分，而$T_{\vec{q}\,,\;\beta}+T_{\vec{q}\;,\;\beta}^{\dagger}$ 是哈密顿量中与$\hat{}n_{\vec{q},\;\beta}$ 不对易的部分（简言之，它是相对于某个特定态 $\vec{q}$， β而言的非对角部分）。这个非对角部分由 V， J和 U_{b}的贡献构成： $T_{\vec{q}\uparrow}=\left[Vc_{d\uparrow}^{\dagger}+J\sum_{\vec{k}}S_{d}^{+}c_{\vec{k}\downarrow}^{\dagger}+U_{b}\sum_{\vec{k}_{1},\;\vec{k}_{2},\;\vec{k}_{3}}c_{\vec{k}_{1}\uparrow}^{\dagger}c_{\vec{k}_{3}\downarrow}^{\dagger}c_{\vec{k}_{4}\downarrow}\right]c_{\vec{q}\uparrow}$,

而对角部分为 $H_D = \epsilon_{\bar{q}}\tau_{q\uparrow} + \frac{1}{4}JS_d^z(\hat{n}_{q\uparrow} - \hat{n}_{q\downarrow}) - \frac{1}{2}U_b(\tau_{q\uparrow} - \tau_{q\downarrow})^2$。$U_b$的贡献通过从哈密顿量中的完整相互作用项中，取出与态 $|q\sigma\rangle$ 对应的哈特里贡献得到。请注意，我们忽略了非对角部分中的势散射项 $T_{\bar{q}\beta}$。为了同时允许自旋翻转和电荷转移散射过程，我们从具有 $\tau_{q\uparrow} = -\tau_{q\downarrow}$的初始态出发。因此，动能对 H_D的贡献为 $\epsilon_q\tau_{q\uparrow} = (\pm D) \times \left(\pm\frac{1}{2}\right) = D/2$，而 U_b的贡献为
$-\frac{1}{2}U_b\left(\pm\frac{1}{2} - \left(\mp\frac{1}{2}\right)\right)^2 = -U_b/2.$

2.1. U_b的重整化

U_b 只能通过自身进行重整化。粒子扇区中的相关重整化项为

$$U_b^2 \sum_{q\beta} \sum_{\substack{k_1,k_2,k_3,\\ k_1',k_2',k_3'}} c_{q\beta}^\dagger c_{k_1\beta} c_{k_3\bar{\beta}}^\dagger c_{k_1'\bar{\beta}} \frac{1}{\omega - H_D} c_{k_2'\bar{\beta}}^\dagger c_{k_3'\bar{\beta}} c_{k_2\beta}^\dagger c_{q\beta} \ . \tag{13}$$

为了重整化 U_b，我们需要再收缩一对动量。有两种选择。第一种是令 $k_3 = k_3' = q$。那么，这两个内部态分别为 $q\beta$ 和 $q\beta$。如上所述，中间态能量为 $-U_b/4$。因此我们得到

$$\frac{U_b^2 n_j}{\omega - D/2 + \frac{U_b}{2}} \sum_\beta \sum_{k_1,k_2,k_1',k_2'} c_{k_1\beta} c_{k_1'\bar{\beta}} c_{k_2'\bar{\beta}}^\dagger c_{k_2\beta}^\dagger = \frac{U_b^2 n_j}{\omega - D/2 + \frac{U_b}{2}} \sum_\beta \sum_{k_1,k_2,k_1',k_2'} c_{k_2'\bar{\beta}}^\dagger c_{k_1'\bar{\beta}} c_{k_2\beta}^\dagger c_{k_1\beta} \ . \tag{14}$$

另一种收缩动量的方法是令 $k_1' = k_2' = q$，由此得到一个重整化 of

$$\frac{U_b^2 n_j}{\omega - D/2 + \frac{U_b}{2}} \sum_\beta \sum_{k_1,k_2,k_3,k_3'} c_{k_1\beta} c_{k_3'\bar{\beta}}^\dagger c_{k_3\prime\bar{\beta}} c_{k_2\beta}^\dagger = -\frac{U_b^2 n_j}{\omega - D/2} \sum_\beta \sum_{k_1,k_2,k_3,k_3'} c_{k_3'\bar{\beta}}^\dagger c_{k_3\prime\bar{\beta}} c_{k_2\beta}^\dagger c_{k_1\beta} \ . \tag{15}$$

这两项相互抵消。空穴扇区中也会发生同样的抵消。

2.2. 杂质关联 U 的重整化

耦合 U 通过两类顶点进行重整化： V^2 和 J^2。我们将逐一考察这些过程。为方便起见，定义 $\epsilon_d = -U/2$。

在粒子扇区中，第一类项所引起的重整化为

$$\begin{aligned}\sum_{q\beta} c_{q\beta}^\dagger c_{d\beta} \frac{V^2}{\omega - H_D} c_{d\beta}^\dagger c_{q\beta} &= \sum_{q\beta} V^2 \hat{n}_{q\beta}(1 - \hat{n}_{d\beta}) \left(\frac{1 - \hat{n}_{d\bar{\beta}}}{\omega_0 - E_0} + \frac{\hat{n}_{d\bar{\beta}}}{\omega_1 - E_1}\right) \\ &= V^2 n_j \sum_\beta (1 - \hat{n}_{d\beta}) \left(\frac{1 - \hat{n}_{d\bar{\beta}}}{\omega_0 - E_0} + \frac{\hat{n}_{d\bar{\beta}}}{\omega_1 - E_1}\right) \ . \end{aligned} \tag{16}$$

q 遍历在此重整化群步骤中被解耦的动量态： $|q| = \Lambda_{j}$。$E_{1,\ 0}$分别是 $\hat{n}_{d\beta} = 1$，0 处哈密顿量的对角部分：$E_1 = \frac{D}{2}$ 和 $E_0 = \frac{D}{2} + \epsilon_d - \frac{J}{4}$。为了将 ω_0 和 ω_1 与传导电子的共同涨落尺度 ω 联系起来，我们将这些量子涨落尺度替换为从中开始散射的初始态对应的单粒子自能的当前重整化值。对于 $\hat{n}_{d\beta} = 0$，由于杂质没有自旋，因此不存在额外的自能： $\omega_0 = \omega$。对于 $\hat{n}_{d\beta} = 1$，则存在一个由杂质上的关联产生的额外自能 ϵ_d： $\omega_1 = \omega + \epsilon_d$。代入 $E_{0,\perp}$ 和 $\omega_{0,\ 1}$ 的值后，我们得到

$$V^2 n_j \sum_\beta (1 - \hat{n}_{d\beta}) \left(\frac{1 - \hat{n}_{d\bar{\beta}}}{\omega - \frac{D}{2} - \epsilon_d + \frac{J}{4}} + \frac{\hat{n}_{d\bar{\beta}}}{\omega - \frac{D}{2} + \epsilon_d}\right) \ . \tag{17}$$

对空穴扇区进行类似计算，可得其贡献：

$$V^2 n_j \sum_\beta \hat{n}_{d\beta} \left(\frac{1 - \hat{n}_{d\bar{\beta}}}{\omega - \frac{D}{2} + \epsilon_d} + \frac{\hat{n}_{d\bar{\beta}}}{\omega - \frac{D}{2} - \epsilon_d + \frac{J}{4}}\right) \ . \tag{18}$$

现在来看第二类项：自旋-自旋项。我们先考察粒子扇区：

$$\frac{J^2}{4} \sum_{q\beta} c_{d\bar{\beta}}^\dagger c_{d\beta} c_{q\beta}^\dagger c_{-q\bar{\beta}} \frac{1}{\omega - H_D} c_{d\beta}^\dagger c_{d\bar{\beta}} c_{q\bar{\beta}}^\dagger c_{q\beta} = \frac{J^2}{4} n_j \frac{1}{\omega - \frac{D}{2} + \frac{J}{4}} \sum_\beta \hat{n}_{d\bar{\beta}}(1 - \hat{n}_{d\beta}) \ . \tag{19}$$

在这种情况下，分母中的对角部分很容易推导，因为散射的性质要求自旋 S_d^z 和 $\frac{\beta}{2}\left(\hat{n}_{q\beta}-\hat{n}_{q\beta}\right)$ 必须反平行。这确保中间态的能量为 $E=\frac{D}{2}+\epsilon_d-\frac{J}{4}$，量子涨落尺度为 $\omega'=\omega+\epsilon_d$，因此 $\omega'-E=\omega-\frac{D}{2}+\frac{J}{4}$。在空穴扇区中，我们有

$$\frac{J^2}{4}n_j\frac{1}{\omega-\frac{D}{2}+\frac{J}{4}}\sum_{\beta}\hat{n}_{d\beta}\left(1-\hat{n}_{d\bar{\beta}}\right)\ . \tag{20}$$

由方程（17）、（18）、（19）和（20），我们写出

$$\begin{aligned}\Delta U&=\Delta\epsilon_2+\Delta\epsilon_0-2\Delta\epsilon_1\\&=-\frac{4V^2n_j}{\omega+\frac{U_b}{2}-\frac{D}{2}-U/2}+\frac{4V^2n_j}{\omega+\frac{U_b}{2}-\frac{D}{2}+U/2+\frac{J}{4}}-\frac{J^2n_j}{\omega+\frac{U_b}{2}-\frac{D}{2}+\frac{J}{4}}\ ,\end{aligned} \tag{21}$$

其中，我们已将 U_b 对分母的贡献恢复了。

2.3. 杂化重整化 V

V 的重整化通过两类过程发生：VJ 和 VU_b。在第一类过程中，散射既可以通过 S_d^z，也可以通过 $S_d^{\pm}$。对于第一类过程，粒子扇区中的贡献如下：

$$\begin{aligned}&\sum_{q\beta}Vc_{q\beta}^{\dagger}c_{d\beta}\frac{1}{\omega-H_D}\frac{1}{4}J\sum_k\left(\hat{n}_{d\beta}-\hat{n}_{d\bar{\beta}}\right)c_{k\beta}^{\dagger}c_{q\beta}\\&=\frac{1}{4}VJn_j\frac{1}{2}\left(\frac{1}{\omega_1'-E}+\frac{1}{\omega_2'-E}\right)\sum_{k\beta}\left(1-\hat{n}_{d\bar{\beta}}\right)c_{d\beta}c_{k\beta}^{\dagger}\ .\end{aligned} \tag{22}$$

从 $\frac{1}{\omega-H_D}$ 到 $\frac{1}{2}\left(\frac{1}{\omega_1'-E}+\frac{1}{\omega_2'-E}\right)$ 的变换旨在通过两个涨落尺度 ω_1' 和 ω_2'，分别考虑初始态和末态的能量；我们分别计算初态和末态的分母，然后取二者的平均值（因此前面有系数二分之一）。此前不需要这样做，因为在早先的散射过程中，至少就 $\epsilon_d(\hat{n}_{d\uparrow}-\hat{n}_{d\downarrow})^2$，而言，杂质最终会回到初始态，因此我们有 $\omega_1'=\omega_2'=\omega'$。代入能量和 $\omega-$ 尺度后，得到

$$-\left(\frac{\frac{n_j}{4}VJ\frac{1}{2}}{\omega-\frac{D}{2}+\frac{J}{4}}+\frac{\frac{n_j}{4}VJ\frac{1}{2}}{\omega-\frac{D}{2}-\epsilon_d+\frac{J}{4}}\right)\sum_{k\beta}\left(1-\hat{n}_{d\bar{\beta}}\right)c_{k\beta}^{\dagger}c_{d\beta}\ . \tag{23}$$

交换单粒子过程和自旋交换过程，可以得到另一个类似的过程：

$$\sum_{q\beta}\frac{1}{4}J\sum_k\left(\hat{n}_{d\beta}-\hat{n}_{d\bar{\beta}}\right)c_{q\beta}^{\dagger}c_{k\beta}\frac{1}{\omega-H_D}Vc_{d\beta}^{\dagger}c_{q\beta}\ . \tag{24}$$

这只是前一个贡献的厄米共轭。将其与前一个贡献合并，得到

$$-\frac{n_j}{8}VJ\left(\frac{1}{\omega-\frac{D}{2}+\frac{J}{4}}+\frac{1}{\omega-\frac{D}{2}-\epsilon_d+\frac{J}{4}}\right)\sum_{k\beta}\left(1-\hat{n}_{d\bar{\beta}}\right)\times\left(c_{d\bar{\beta}}^{\dagger}c_{k\beta}+\text{h.c.}\right)\ . \tag{25}$$

如果我们同样计算涉及 $S_d^{\pm}$ 的自旋交换过程所产生的贡献，就得到

$$-\frac{1}{4}VJn_j\left(\frac{1}{\omega-\frac{D}{2}+\frac{J}{4}}+\frac{1}{\omega-\frac{D}{2}-\epsilon_d+\frac{J}{4}}\right)\sum_{k\beta}\left(1-\hat{n}_{d\beta}\right)\left(c_{k\bar{\beta}}^{\dagger}c_{d\bar{\beta}}+\text{h.c.}\right)\ . \tag{26}$$

空穴扇区的贡献可通过对粒子扇区的贡献进行变换 $\hat{n}_{d\beta}\to1-\hat{n}_{d\beta}$ 得到。来自 VJ 过程的 V 总重整化为

$$-\frac{3n_j}{8}VJ\left(\frac{1}{\omega+U_b/4-\frac{D}{2}+\frac{J}{4}}+\frac{1}{\omega+U_b/4-\frac{D}{2}+U/2+\frac{J}{4}}\right)\sum_{k\beta}\left(c_{d\beta}^{\dagger}c_{k\beta}+\text{h.c.}\right)\ . \tag{27}$$

重整化　　在 V 中，来自 U_b 的局域化源于 VU_b 和 U_bV 类型的项。第一项给出

$$\begin{aligned}-\sum_{k\beta}c_{d\beta}^{\dagger}c_{k\beta}\Bigg[&\frac{\hat{n}_{d\bar{\beta}}}{2}\left(\frac{n_jU_bV}{\omega-\frac{D}{2}-\frac{U}{2}+\frac{U_b}{4}}+\frac{n_jU_bV}{\omega-\frac{D}{2}+\frac{U_b}{4}}\right)\\&+\frac{1-\hat{n}_{d\bar{\beta}}}{2}\left(\frac{n_jU_bV}{\omega-\frac{D}{2}+\frac{U_b}{4}+\frac{U}{2}+\frac{J}{4}}+\frac{n_jU_bV}{\omega-\frac{D}{2}+\frac{U_b}{4}+\frac{J}{4}}\right)\Bigg]\ .\end{aligned} \tag{28}$$

第二项的形式为 $\sum_{q\beta}\sum_k U_b V c^\dagger_{q\beta}c_{d\beta}\,\frac{1}{\omega-H_D}\hat{}n_{q\beta}c^\dagger_{k\beta}c_{q\beta}$，它正是前一项的厄米共轭，因此这两项合起来得到

$$-n_j U_b V\sum_{k\beta}\left(c^\dagger_{d\beta}c_{k\beta}+\text{h.c.}\right)\left[\frac{\hat{n}_{d\overline{\beta}}}{2}\left(\frac{1}{\omega-\frac{D}{2}-\frac{U}{2}+\frac{U_b}{4}}+\frac{1}{\omega-\frac{D}{2}+\frac{U_b}{4}}\right)+\frac{1-\hat{n}_{d\overline{\beta}}}{2}\left(\frac{1}{\omega-\frac{D}{2}+\frac{U_b}{4}+\frac{U}{2}+\frac{J}{4}}+\frac{1}{\omega-\frac{D}{2}+\frac{U_b}{4}+\frac{J}{4}}\right)\right]. \tag{29}$$

在空穴扇区中，我们有

$$-n_j U_b V\sum_{k\beta}c^\dagger_{k\beta}\left[\frac{\hat{n}_{d\overline{\beta}}}{2}\left(\frac{1}{\omega_1-E_1}+\frac{1}{\omega_1'-E_1}\right)+\frac{1-\hat{n}_{d\overline{\beta}}}{2}\left(\frac{1}{\omega_0-E_0}+\frac{1}{\omega_0'-E_0}\right)\right]c_{d\beta}\ . \tag{30}$$

$E_1=D/2-U_b/4-U/2-J/4,\quad E_0=D/2-U_b/4-K/4$。涨落尺度为 $\omega_1=\omega=\omega_0',\quad \omega_1'=\omega-U/2=\omega_0$。代入后得到

$$-\sum_{k\beta}c^\dagger_{d\beta}c_{k\beta}\left[\frac{1-\hat{n}_{d\overline{\beta}}}{2}\left(\frac{n_jU_bV}{\omega-\frac{D}{2}-\frac{U}{2}+\frac{U_b}{4}}+\frac{n_jU_bV}{\omega-\frac{D}{2}+\frac{U_b}{4}}\right)+\frac{\hat{n}_{d\overline{\beta}}}{2}\left(\frac{n_jU_bV}{\omega-\frac{D}{2}+\frac{U_b}{4}+\frac{U}{2}+\frac{J}{4}}+\frac{n_jU_bV}{\omega-\frac{D}{2}+\frac{U_b}{4}+\frac{J}{4}}\right)\right]. \tag{31}$$

交换 V和 U_b得到的另一项是厄米共轭，因此空穴扇区的总贡献与粒子扇区的总贡献相同，但其中 $\hat{}n_{d\beta}\to 1-\hat{}n_{d\beta}$。合并两个扇区，得到

$$-\sum_{k\beta}\left(c^\dagger_{d\beta}c_{k\beta}+\text{h.c.}\right)\left[\left(\frac{n_jU_bV/2}{\omega-\frac{D}{2}-\frac{U}{2}+\frac{U_b}{4}}+\frac{n_jU_bV/2}{\omega-\frac{D}{2}+\frac{U_b}{4}}\right)+\left(\frac{n_jU_bV/2}{\omega-\frac{D}{2}+\frac{U_b}{4}+\frac{U}{2}+\frac{J}{4}}+\frac{n_jU_bV/2}{\omega-\frac{D}{2}+\frac{U_b}{4}+\frac{J}{4}}\right)\right]. \tag{32}$$

2.4. 自旋交换耦合 J的重整化

项 $J\vec{S}_d\cdot\vec{S}_0$可分为三部分： $J^zS^z_d$， $\frac{1}{2}J^+S^+_dS^-_0$和 $\frac{1}{2}J^-S^-_dS^+_0$。我们只计算 J^+中的重整化；由于自旋旋转对称性，它将与 J^-， J^z 中的重整化相同。重整化 J^+ 的项具有 $S^+_dS^z_d$ 和 $S^z_dS^+_d$ 的形式。在粒子扇区中，我们有

$$\begin{aligned}-\sum_q\sum_{kk'}\frac{1}{4}J^2S^+_dc^\dagger_{q\downarrow}c_{k'\uparrow}\frac{1}{\omega-H_D}S^z_dc^\dagger_{k\downarrow}c_{q\downarrow}&=n_j\frac{1}{4}J^2\left(-\frac{1}{2}S^+_d\right)\sum_{kk'}c^\dagger_{k\downarrow}c_{k'\uparrow}\frac{1}{\omega+\frac{U_b}{2}-\frac{D}{2}+\frac{J}{4}}\ ,\\ \sum_q\sum_{kk'}\frac{1}{4}J^2S^z_dc^\dagger_{q\uparrow}c_{k'\uparrow}\frac{1}{\omega-H_D}S^+_dc^\dagger_{k\downarrow}c_{q\uparrow}&=-n_j\frac{1}{4}J^2\left(\frac{1}{2}S^+_d\right)\sum_{kk'}c^\dagger_{k\downarrow}c_{k'\uparrow}\frac{1}{\omega+\frac{U_b}{2}-\frac{D}{2}+\frac{J}{4}}\ .\end{aligned} \tag{33}$$

分母由 $E=\frac{D}{2}+\epsilon_d-\frac{J}{4}$和 $\omega'=\omega+\epsilon_d$确定。在空穴扇区中，我们同样有

$$\begin{aligned}\sum_q\sum_{kk'}\frac{1}{4}J^2S^+_dc^\dagger_{k\downarrow}c_{q\uparrow}\frac{1}{\omega-H_D}S^z_dc^\dagger_{q\uparrow}c_{k'\uparrow}&=n_j\frac{1}{4}J^2\left(-\frac{1}{2}S^+_d\right)\sum_{kk'}c^\dagger_{k\downarrow}c_{k'\uparrow}\frac{1}{\omega+\frac{U_b}{2}-\frac{D}{2}+\frac{J}{4}}\ ,\\ -\sum_q\sum_{kk'}\frac{1}{4}J^2S^z_dc^\dagger_{k\downarrow}c_{q\downarrow}\frac{1}{\omega-H_D}S^+_dc^\dagger_{q\downarrow}c_{k'\uparrow}&=-n_j\frac{1}{4}J^2\left(\frac{1}{2}S^+_d\right)\sum_{kk'}c^\dagger_{k\downarrow}c_{k'\uparrow}\frac{1}{\omega+\frac{U_b}{2}-\frac{D}{2}+\frac{J}{4}}\ .\end{aligned} \tag{34}$$

T由 U_b 引起的重整化也通过多个项发生。其中一项 is

$$\frac{1}{2}JU_b\sum_q\sum_{k,k'}S^+_dc^\dagger_{q\downarrow}c_{k\uparrow}\frac{1}{\omega-H_D}\hat{n}_{q\uparrow}c^\dagger_{k'\downarrow}c_{q\downarrow}=-\frac{1}{2}\frac{JU_bn_j}{\omega-\frac{D}{2}+\frac{U_b}{2}+\frac{J}{4}}\sum_{k,k'}S^+_dc^\dagger_{k'\downarrow}c_{k\uparrow}\ . \tag{35}$$

前面的二分之一因子与我们用 $S^z,S^\pm$ 重写 $\vec{S}_1\cdot\vec{S}_2$ 时， $S^+_1S^-_2,S^-_1S^+_2$ 项前面的二分之一因子相同。交换 J 和 U_b 可得到另一项：

$$\frac{1}{2}JU_b\sum_q\sum_{k,k'}\hat{n}_{q\downarrow}c^\dagger_{q\uparrow}c_{k\uparrow}\frac{1}{\omega-H_D}S^+_dc^\dagger_{k'\downarrow}c_{q\uparrow}=-\frac{1}{2}\frac{JU_bn_j}{\omega-\frac{D}{2}+\frac{U_b}{2}+\frac{J}{4}}\sum_{k,k'}S^+_dc^\dagger_{k'\downarrow}c_{k\uparrow}\ . \tag{36}$$

空穴扇区中的对应项为

$$-\frac{1}{2}\frac{JU_b n_j}{\omega-\frac{D}{2}+\frac{U_b}{2}+\frac{J}{4}}\sum_{k,k'}S_d^+ c_{k'\downarrow}^\dagger c_{k\uparrow}\ ,-\frac{1}{2}\frac{JU_b n_j}{\omega-\frac{D}{2}+\frac{U_b}{2}+\frac{J}{4}}\sum_{k,k'}S_d^+ c_{k'\downarrow}^\dagger c_{k\uparrow}\ . \tag{37}$$

2.5. 最终 *URG* 方程

总之，耦合常数的重整化形式如下：

$$\Delta U=4V^2 n_j\left(\frac{1}{d_1}-\frac{1}{d_0}\right)-n_j\frac{J^2}{d_2},\quad \Delta V=-\frac{3n_jV}{8}\left[J\left(\frac{1}{d_2}+\frac{1}{d_1}\right)+\frac{4U_b}{3}\sum_{i=1}^{4}\frac{1}{d_i}\right],$$
$$\Delta J=-\frac{n_j J\left(J+4U_b\right)}{d_2}\ ,\qquad \Delta U_b=0\ , \tag{38}$$

其中，分母 d_i 为

$$d_0=\omega-\frac{D}{2}+\frac{U_b}{2}-\frac{U}{2},\ d_1=\omega-\frac{D}{2}+\frac{U_b}{2}+\frac{U}{2}+\frac{J}{4}\ , \tag{39}$$
$$d_2=\omega-\frac{D}{2}+\frac{U_b}{2}+\frac{J}{4}\ ,d_3=\omega-\frac{D}{2}+\frac{U_b}{2}\ . \tag{40}$$

为完整起见，我们给出杂质与浴之间电荷同位旋近藤耦合 K 的重整化群方程：

$$\Delta K=-\frac{n_j K\left(K+4U_b\right)}{\omega-\frac{D}{2}+\frac{U_b}{2}+\frac{K}{4}}\ . \tag{41}$$

事实上，观察发现， K 的重整化群方程与自旋近藤耦合 J的方程形式相同，后者可通过变换 $J\to K$得到。这表明，浴的第零格点与第一格点之间的电荷涨落（由吸引相互作用 U_b激发）会导致 $K(>0)$在重整化群意义下无关，从而使电荷近藤效应失稳；这一结果与主文稿中针对 J所展示的情况类似。

3. 用纠缠表示关联函数

我们将首先建立杂质格林函数与几何纠缠之间的联系。给定基态 $|\Psi\rangle_{\rm gs}$ 和一组能量谱 $\{E_n\}$，推迟杂质格林函数（时域）定义为 $G_{d\sigma}(t)=-i\theta(t)\langle\left\{c_{d\sigma}(t)\ c_{d\sigma}^\dagger\right\}\rangle$。它可以用 e-SIAM 的本征态 $\{|\Psi\rangle_n\}$ 表示为谱表示：

$$G_{d\sigma}(\omega)=\frac{1}{Z}\sum_n\left[\frac{|\langle\Psi_{\rm gs}|c_{d\sigma}|\Psi_n\rangle|^2}{\omega+E_{\rm gs}-E_n}+\frac{|\langle\Psi_n|c_{d\sigma}|\Psi_{\rm gs}\rangle|^2}{\omega-E_{\rm gs}+E_n}\right]\ , \tag{42}$$

其中 $Z\equiv\sum_n e^{-\beta E_n}$ 是配分函数。现在我们将在该表达式中插入一个完备基。这个基由哈密顿量 $H=H_1+H_2$的本征态构成，其中 H_1 是由杂质和零号位点构成的双格点 $J-U_b$ 哈密顿量，而 H_2 是由其余格点构成的紧束缚哈密顿量。由于这两个哈密顿量彼此解耦，本征态$|\Psi\rangle_{m,\ n}$是由各个哈密顿量 H_1和 H_2的本征态 $|\phi\rangle_m$， $|\psi\rangle_n$组合而成的直积态：$|\Phi\rangle_{m,\ n}=|\phi\rangle_m\otimes|\psi\rangle_n$。插入这个基后，可得：

$$|\Psi\rangle_{\rm gs}=\sum_{m,n}|\Phi\rangle_{m,n}\left(\langle\phi_m|\otimes\langle\psi_n|\right)|\Psi_{\rm gs}\rangle\ . \tag{43}$$

H_1 的基态是自旋单态： $|\phi\rangle_0=|{\rm ss}\rangle$。我们用 $|\psi\rangle_0$表示紧束缚哈密顿量H_2 的基态。由于耦合常数 V和 J经过了高度重整化，杂质位点几乎与零号位点最大程度地纠缠，因此在 $r<0.25$ 区间内，基态 $|\Psi\rangle_{\rm gs}$ 可视为双格点基态 $c|{\rm ss}\rangle+\sqrt{1-c^2}\,|{\rm ct}\rangle$与紧束缚基态的直积：

$$|\Psi\rangle_{\rm gs}\simeq\left(c\,|{\rm ss}\rangle+\sqrt{1-c^2}\,|{\rm ct}\rangle\right)\otimes|\psi\rangle_0=|\Phi\rangle_{\rm ss}+|\Phi\rangle_{\rm ct}\ , \tag{44}$$

其中 $|\Phi\rangle_{\rm ss(ct)}=|{\rm ss(ct)}\rangle\otimes|\psi\rangle_0$。这表明，方程（43）求和中的项并非全部都有贡献；在所有 $\{|\psi\rangle_n\}$中，只有基态 $n=0$ 有贡献，而集合 $\{|\phi\rangle_m\}$中只有 $|ss\rangle$ 和 $|ct\rangle$ 有贡献。于是求和可简化为

$$|\Psi\rangle_{\rm gs}=|\Phi\rangle_{ss}\langle{\rm ss}|\Psi_{\rm gs}^{(2)}\rangle+|\Phi\rangle_{ct}\langle{\rm ct}|\Psi_{\rm gs}^{(2)}\rangle\ , \tag{45}$$

其中 $|\Psi^{(2)}_{\rm gs}\rangle$ 是基态的双格点部分，可通过从完整基态$|\Psi\rangle_{\rm gs}$ 出发，并对系统中其余晶格位点求迹得到。

我们假设波函数的全局相位为实数，并且由于波函数的内部权重也为实数，重叠 $\langle {\rm ss}|\Psi^{(2)}_{\rm gs}\rangle$，$\langle {\rm ct}|\Psi^{(2)}_{\rm gs}\rangle$ 也为实数。我们可以利用这些重叠来定义纠缠的几何度量 [10–12]:

$$\varepsilon\left(\psi_1,\psi_2\right)=1-|\left\langle\psi_1|\psi_2\right\rangle|^2\ . \tag{46}$$

如果将 $|\psi_1\rangle$ 视为可分离态，那么当 $|\psi_2\rangle$ 与 $|\psi_1\rangle$ 的重叠较大时，它的纠缠程度就应较低，而这正是该定义所体现的。于是，重叠变为 $\langle {\rm ss}|\Psi^{(2)}_{\rm gs}\rangle=\sqrt{1-\varepsilon\left(ss,\Psi^{(2)}_{\rm gs}\right)}$，对于态 $|{\rm ct}\rangle$也同理。为简洁起见，我们采用记号 $\varepsilon_{\rm ss}\equiv\varepsilon\left(ss,\Psi^{(2)}_{\rm gs}\right)$，$\varepsilon_{\rm ct}\equiv\varepsilon\left(ct,\Psi^{(2)}_{\rm gs}\right)$。自旋 σ 的推迟杂质格林函数现在可以用这些度量表示:

$$\begin{aligned}G_{d\sigma}(\omega)=\frac{1}{Z}\sum_n\Bigg[&(1-\varepsilon_{\rm ss})\left(\frac{|\left\langle\Phi_{\rm ss}|c_{d\sigma}|\Psi_n\right\rangle|^2}{\omega+E_{\rm gs}-E_n}+\frac{|\left\langle\Psi_n|c_{d\sigma}|\Phi_{\rm ss}\right\rangle|^2}{\omega-E_{\rm gs}+E_n}\right)+(1-\varepsilon_{\rm ct})\frac{|\left\langle\Phi_{\rm ct}|c_{d\sigma}|\Psi_n\right\rangle|^2}{\omega+E_{\rm gs}-E_n}\\&+(1-\varepsilon_{\rm ct})\frac{|\left\langle\Psi_n|c_{d\sigma}|\Phi_{\rm ct}\right\rangle|^2}{\omega-E_{\rm gs}+E_n}+\sqrt{(1-\varepsilon_{\rm ss})}\sqrt{(1-\varepsilon_{\rm ct})}\frac{\left\langle\Phi_{\rm ss}|c_{d\sigma}|\Psi_n\right\rangle\left\langle\Psi_n|c^\dagger_{d\sigma}|\Phi_{\rm ct}\right\rangle+{\rm h.c.}}{\omega+E_{\rm gs}-E_n}\\&+\sqrt{(1-\varepsilon_{\rm ss})}\sqrt{(1-\varepsilon_{\rm ct})}\frac{\left\langle\Phi_{\rm ct}|c_{d\sigma}|\Psi_n\right\rangle\left\langle\Psi_n|c^\dagger_{d\sigma}|\Phi_{\rm ss}\right\rangle+{\rm h.c.}}{\omega-E_{\rm gs}+E_n}\Bigg]\ .\end{aligned} \tag{47}$$

现在，我们将其推广到任意涉及算符 O_1，O_2 的实空间双粒子关联；这些算符至多是双粒子算符，并作用于杂质位点和零号位点的组合希尔伯特空间。与这些算符对应的所谓小于格林函数定义为

$$G^<_{O_1^\dagger,O_2}(t)\equiv i\left\langle O_1^\dagger O_2(t)\right\rangle,\quad G^<_{O_1^\dagger,O_2}(t\to\infty)=i\left\langle\Psi_{\rm gs}|O_1^\dagger O_2|\Psi_{\rm gs}\right\rangle\ . \tag{48}$$

我们在此关注静态情形（$t\to\infty$）。根据式（45），我们可以用上文提到的纠缠度量来重写基态。

$$|\Psi\rangle_{\rm gs}=|\Phi\rangle_{ss}\sqrt{1-\varepsilon_{\rm ss}}+|\Phi\rangle_{ct}\sqrt{1-\varepsilon_{\rm ss}}\ , \tag{49}$$

其中，$|\Phi\rangle_{\rm ss(ct)}$ 是哈密顿量的零自旋和零电荷同位旋本征态，该哈密顿量 $H=H_1+H_2$ 定义于式（42）之后。将其代入静态小于格林函数可得

$$\begin{aligned}\frac{1}{i}G^<_{O_1^\dagger,O_2}(t\to\infty)=&\ (1-\varepsilon_{\rm ss})\left\langle\Phi_{\rm ss}|O_2O_1^\dagger|\Phi_{\rm ss}\right\rangle+(1-\varepsilon_{\rm ct})\left\langle\Phi_{\rm ct}|O_2O_1^\dagger|\Phi_{\rm ct}\right\rangle\\&+\sqrt{1-\varepsilon_{\rm ss}}\sqrt{1-\varepsilon_{\rm ct}}\left(\left\langle\Phi_{\rm ss}|O_2O_1^\dagger|\Phi_{\rm ct}\right\rangle+\left\langle\Phi_{\rm ct}|O_2O_1^\dagger|\Phi_{\rm s}\right\rangle\right)\ .\end{aligned} \tag{50}$$

这可以推广到一般化迟滞格林函数 $G^R_{O_1^\dagger,\ O_2}(t)\ \equiv-i\theta(t)\left\langle\left\{O_1^\dagger(t)\ O_2\right\}\right\rangle$，其谱表示形式为

$$G^R_{O_1^\dagger,O_2}(\omega)=\frac{1}{Z}\sum_n\left[\frac{\left\langle\Psi_{\rm gs}|O_2|\Psi_n\right\rangle\left\langle\Psi_n|O_1^\dagger|\Psi_{\rm gs}\right\rangle}{\omega+E_{\rm gs}-E_n}+\frac{\left\langle\Psi_n|O_2|\Psi_{\rm gs}\right\rangle\left\langle\Psi_{\rm gs}|O_1^\dagger|\Psi_n\right\rangle}{\omega-E_{\rm gs}+E_n}\right]\ . \tag{51}$$

采用与推导式（47）时非常相似的方法，我们可以将一般化格林函数表示为几何纠缠度量:

$$\begin{aligned}G^R_{O_1^\dagger,O_2}(\omega)=\frac{1}{Z}\sum_n\Bigg[&(1-\varepsilon_{\rm ss})\left(\frac{(O_1)^*_{{\rm ss},n}(O_2)_{{\rm ss},n}}{\omega+E_{\rm gs}-E_n}+\frac{(O_1)^*_{n,{\rm ss}}(O_2)_{n,{\rm ss}}}{\omega-E_{\rm gs}+E_n}\right)+(1-\varepsilon_{\rm ct})\frac{(O_1)^*_{{\rm ct},n}(O_2)_{{\rm ct},n}}{\omega+E_{\rm gs}-E_n}\\&+(1-\varepsilon_{\rm ct})\frac{(O_1)^*_{n,{\rm ct}}(O_2)_{n,{\rm ct}}}{\omega-E_{\rm gs}+E_n}+\sqrt{(1-\varepsilon_{\rm ss})}\sqrt{(1-\varepsilon_{\rm ct})}\frac{(O_2)_{{\rm ss},n}(O_1)^*_{{\rm ct},n}+{\rm h.c.}}{\omega+E_{\rm gs}-E_n}\\&+\sqrt{(1-\varepsilon_{\rm ss})}\sqrt{(1-\varepsilon_{\rm ct})}\frac{(O_2)_{{\rm ct},n}(O_1)^*_{{\rm ss},n}+{\rm h.c.}}{\omega-E_{\rm gs}+E_n}\Bigg]\ ,\end{aligned} \tag{52}$$

其中 $(O_2)_{{\rm ss},\ n}$ 是矩阵元 $\langle\Phi_{\rm ss}|O_2|\Psi_n\rangle$，而 $(O_1)_{{\rm ss},\ n}$ 及其 $|\Phi_{\rm ct}\rangle$ 对应量也有类似定义。与几何纠缠密切相关的是量子费歇尔信息（QFI）F_Q [13,14]，它量化了态 ρ 对由可观测量 $\hat{O}$生成的幺正变换的敏感程度。对于纯态 $\rho=|\psi\rangle\langle\psi|$，
F_Q ψ O O (, $\hat{}$)根据算符 $\hat{}$ 的方差（即连通关联函数）定义:

$$F_Q(\psi,\hat{O})=4\Delta(\hat{O})^2=4\left(\left\langle\psi|\hat{O}^2|\psi\right\rangle-\left\langle\psi|\hat{O}|\psi\right\rangle^2\right)\ , \tag{53}$$

它给出了测量与可观测量 $\hat{O}$对偶的参数 θ时所能达到的精度上限： $\mathcal{N}(\Delta\theta)^2 \geq F_Q^{-1}$，其中 $\mathcal{N}$是独立测量的次数 [13, 14]。因此， $F_Q(\psi, \hat{O})$衡量了 $|\psi\rangle$ 中量子涨落所产生的纠缠（相对于 $\hat{O}$的一个本征态来考察）。考虑一个本征态为 $\{|m\rangle\}$的无迹算符 $\hat{M}$，便可更清楚地看出这一点。不失一般性，我们可以对算符重新缩放，使得 $\sum m^2 = 1/2$。在本文的语境中，此类算符有多个例子，例如杂质磁化算符（S_d^z）、近藤自旋翻转算符（$S_d^+ S_0^- +$ h.c.）和近藤同位旋翻转算符（$C_d^+ C_0^- +$ h.c.）。若 $\varepsilon_m(\psi) \equiv 1 - |\langle m|\psi\rangle|^2$ 表示给定态 $|\psi\rangle$ 与 $\hat{}$ 的本征态之间的几何纠缠，则态 ψ 中与 M 对应的 QFI 可写为

$$F_Q(\psi, \hat{M}) = 4\left[\frac{1}{2} - \sum_m m^2 \varepsilon_m - \left(\sum_m m\varepsilon_m\right)^2\right]. \tag{54}$$

总几何纠缠 $\sum_m \varepsilon_m$ 受限于 $d_M - 1$，其中 d_M 是算符 $\hat{}$ 的维数M。由于每个本征值 m 的模至多为 $1/\sqrt{2}$ （所有 m^2 之和必须等于 $1/2$），式（54）中最后两项的最大模（因此量子费舍尔信息的最小值）出现在某些 ε_m 为零的情形下。然而，由于本征态彼此正交，其中只有一个能与态 $|\psi\rangle$ 完美重叠，并且同一时刻只能有一个 ε_m 为零。因此，量子费舍尔信息最小的情形对应于 $\varepsilon_{m^*} = 0$， $\varepsilon_{m\neq m^*} = 1$，从而得到 $F_Q = 0$。相反，当所有几何纠缠度量均非零且相等时， $\varepsilon_m = 1/d_M$，量子费舍尔信息达到最大值 $F_Q = 2/d_M$。因此，均匀分布的几何纠缠分布会带来较大的量子费舍尔信息，而更集中的分布则会使其减小。以上概括了量子费舍尔信息与几何纠缠之间的关系。

如果我们从某一参与方的角度来看，其本征态是可分离态，那么当 $|\psi\rangle$ 相对于其中一个可分离态具有零几何纠缠时，量子费舍尔信息会消失；而当 $|\psi\rangle$ 与所有这些态都具有有限的几何纠缠时，量子费舍尔信息达到饱和。因此，较大的量子费舍尔信息可以与更多的纠缠联系起来。此外，如果 M 的本征态是对称性破缺态，那么量子费舍尔信息消失表明 $|\psi\rangle$ 非常接近这样的对称性破缺态，而较大的量子费舍尔信息则表明 $|\psi\rangle$ 是这些对称性破缺态的均匀叠加，因此整体上保持对称性。较大的量子费舍尔信息意味着存在更多的量子涨落，以及对对称性破缺缺乏磁化率。

为了在当前问题中展示这些思想，我们计算了 e-SIAM 基态中若干厄米算符对应的量子费舍尔信息，将其表示为参数 $r = -U_b/J_0$ 的函数。这些结果显示在图（1）（左图）中。为了解释图中所描绘的行为，我们再次指出，对于 $r \ll r_{c2}$、 $r \lesssim r_{c2}$ 和 $r > r_{c2}$，其基态分别为 $|\mathrm{SS}\rangle + |\mathrm{CT}\rangle$、 $|\mathrm{SS}\rangle$ 以及 $|\mathrm{LM}\rangle$，其中 $|\mathrm{SS}\rangle$、 $|\mathrm{CT}\rangle$和 $|\mathrm{LM}\rangle$ 分别表示自旋单重态、电荷三重态和局域磁矩态。我们关注自旋翻转量子费舍尔信息，其对应的算符为 $\hat{O} = S_d^+ S_0^- +$h.c.。

- 对于 $r < r_{c1}$，基态同时包含 $|SS\rangle$ 和 $|CT\rangle$，这意味着两个纠缠度量$\varepsilon_{\mathrm{SS}}$ 和$\varepsilon_{\mathrm{CT}}$ 都不为零。正如上一段所述，这会使量子费舍尔信息达到最大值，图中也可以看到这一点。

- 在 $r = r_{c1}$，电荷三重态成分消失，此后基态纯粹为单重态。因此，在范围 $r_{c1} < r < r_{c2}$内，与单态对应的几何纠缠为零，从而量子费舍尔信息达到最小值并降为零。图中也再次展示了这一点。

- 最后，对于 $r > r_{c2}$，局域磁矩态成为基态；由于跃迁到浴的其余部分，浴的第零格点呈现出四种构型的叠加态。这一态同样不是自旋翻转算符的本征态，几何纠缠会均匀分布在各个态上，没有任何一个为零。这解释了局域磁矩相中较大的量子费舍尔信息。

对于杂质与零号位点之间的单粒子跃迁 QFI，以及零号位点与第一位点之间的电荷同位旋 QFI，类似的解释同样成立。在图（1）（右图）中，我们展示了非常接近 MIT 时（即，当 $r \lesssim r_{c2}$时）同样三个算符的 QFI。两个重要的量能够追踪局域金属-绝缘体转变，并作为相变的序参量：杂质的补偿程度（$\langle \vec{S}_d \cdot \vec{S}_0 \rangle$）和杂质磁化强度（$\langle S_d^z \rangle$）。因此，图1 中的前两个 QFI（红色和蓝色曲线）尤为重要，因为它们量化了系统中与这些序参量相对应的量子涨落。我们的分析表明，相变两侧的两个相以这对 QFI 的不同取值为特征：在近藤屏蔽相中，与补偿程度对应的 QFI 为零，而在局域磁矩相中则变为非零；对于源自杂质磁化强度的 QFI，情况恰好相反。恰处于相变点的相不同于两侧的相，因为它呈现出非零的

both the QFI. While it is expected that a critical point would show enhanced fluctuations of multiple kinds (giving rise to universality), it is interesting that in a multi-body entanglement measure, the three quantum Fisher information all tend to finite non-zero values at the metal-insulator transition, which indicates that the non-Fermi liquid state in the middle has three types of quantum fluctuations.

Now, we relate the quantum Fisher information to some other correlation measures. The quantum Fisher information corresponding to a certain observable can be directly related to the static susceptibility function associated with the observable:

$$F_Q(\psi,\hat{O}_2)=4\left(\langle\hat{O}_2\hat{O}_1^\dagger\rangle\Big|_{\hat{O}_1^\dagger=\hat{O}_2}-\langle\hat{O}_2\hat{O}_1^\dagger\rangle^2\Big|_{\hat{O}_1=1}\right)=4\left[G^<_{\hat{O}_2,\hat{O}_2}(t\to\infty)-\left(G^<_{1,\hat{O}_2}(t\to\infty)\right)^2\right] \quad (55)$$

In the context of this study, Eq. (50) relates the quantum Fisher information to the geometric entanglement with respect to the spin singlet and charge triplet. Combining Eq. (50) and Eq. (55), we obtain

$$\begin{aligned}F_Q(\psi,\hat{O}_2)=4\Big[&(1-\varepsilon_{\rm ss})\langle\Phi_{\rm ss}|\hat{O}_2^2|\Phi_{\rm ss}\rangle+(1-\varepsilon_{\rm ct})\langle\Phi_{\rm ct}|\hat{O}_2^2|\Phi_{\rm ct}\rangle\\&+\sqrt{1-\varepsilon_{\rm ss}}\sqrt{1-\varepsilon_{\rm ct}}\left(\langle\Phi_{\rm ss}|\hat{O}_2^2|\Phi_{\rm ct}\rangle+\langle\Phi_{\rm ct}|\hat{O}_2^2|\Phi_{\rm s}\rangle\right)-\Big\{(1-\varepsilon_{\rm ss})\langle\Phi_{\rm ss}|\hat{O}_2|\Phi_{\rm ss}\rangle\\&+(1-\varepsilon_{\rm ct})\langle\Phi_{\rm ct}|\hat{O}_2|\Phi_{\rm ct}\rangle+\sqrt{1-\varepsilon_{\rm ss}}\sqrt{1-\varepsilon_{\rm ct}}\left(\langle\Phi_{\rm ss}|\hat{O}_2|\Phi_{\rm ct}\rangle+\langle\Phi_{\rm ct}|\hat{O}_2|\Phi_{\rm s}\rangle\right)\Big\}^2\Big]\ . \quad (56)\end{aligned}$$

Moreover, the retarded Green's function defined in the above Eq. (51) can be related to the quantum Fisher information in very general circumstances. Using the simplified notation ${}^i_2G^R_{O_2,\ O_2}(t\to\infty)\equiv\langle(O_2)^2\rangle$ and ${}^i_2G^R_{1,\ O_2}(t\to\infty)=\langle O_2\rangle$, we have

$$F_Q(\psi,\hat{O}_2)=2iG^R_{O_2,O_2}(t\to\infty)+\left(G^R_{1,O_2}(t\to\infty)\right)^2\ . \quad (57)$$

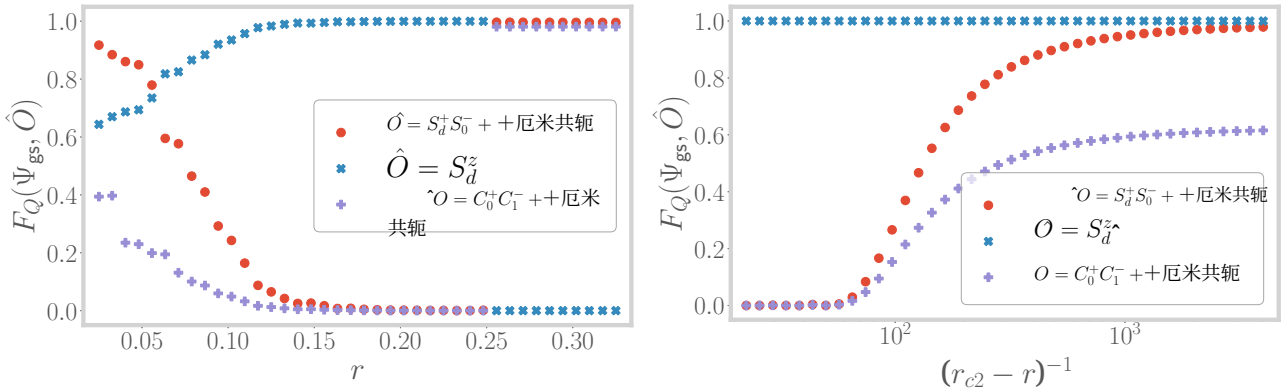

图1。 *Left:* 在 r 的整个取值范围内，三种独立涨落对应的量子费舍尔信息的变化。 *Right:* 对于同样三个算符，在非常接近 r_{c2} 处的量子临界点时所对应的量子费舍尔信息。

For completeness, we follow the method of Hauke et al. [14] to generalize the above relation to finite temperature. For a mixed state with inverse temperature β and density matrix $\rho=\sum_n f_n|n\rangle\langle n|$ expressed in terms of its eigenvalues and eigenstates $(E_n,\ |n\rangle)$, $f_n=e^{-\beta E_n}/\sum_n e^{-\beta E_n}$ is the Boltzmann weight, the quantum Fisher information can be expressed in the spectral representation [14]

$$F_Q(\rho,\hat{O})=2\sum_{m,n}\frac{(f_m-f_n)^2}{f_m+f_n}|\langle m|\hat{O}|n\rangle|^2\ . \quad (58)$$

Using the identity $\frac{f_m-f_n}{f_m+f_n}=\int_{-\infty}^{\infty}d\omega\delta(\omega+E_m-E_n)\tanh(\beta\omega/2)$, the finite temperature FQI can be written in the following form

$$F_Q(\rho,\hat{O})=2\int_{-\infty}^{\infty}d\omega\tanh(\beta\omega/2)\sum_{m,n}(f_m-f_n)\delta(\omega+E_m-E_n)|\langle m|\hat{O}|n\rangle|^2\ . \quad (59)$$

To relate it to correlation functions, we now point out that the lesser Green's function $G^<$ (see Eq. (48)) and the greater Green's function $G^>$ we will define now can also be expressed in the eigenbasis $|n\rangle$ of the full problem:

$$G^<_{O^\dagger,O}(t)\equiv i\langle\hat{O}^\dagger\hat{O}(t)\rangle\implies G^<_{O^\dagger,O}(\omega)=2\pi i\sum_{m,n}f_n\delta(\omega+E_m-E_n)|\langle m|\hat{O}^\dagger|n\rangle|^2\ , \quad (60)$$

$$G^>_{O^\dagger,O}(t)\equiv -i\langle\hat{O}(t)\hat{O}^\dagger\rangle\implies G^>_{O^\dagger,O}(\omega)=-2\pi i\sum_{m,n}f_m\delta(\omega+E_m-E_n)|\langle m|\hat{O}|n\rangle|^2\ . \quad (61)$$

如果 $\hat{O}$ 是一个厄米算符，式（60）可用于将量子费舍尔信息改写为关于 $G^{\lessgtr}_{\hat{O}^\dagger,\, O}(\omega)$ 的形式。事实上，将式（60）和式（59）与假设 $\hat{O} = \hat{O}^\dagger$ 结合，可得

$$F_Q(\rho, \hat{O}) = -\frac{1}{\pi i}\int_{-\infty}^{\infty} d\omega \tanh\left(\beta\omega/2\right)\left(G^{>}_{O,O}(\omega) + G^{<}_{O,O}(\omega)\right) \ . \tag{62}$$

这构成了任意厄米多粒子算符 O 的有限温度量子费舍尔信息与相应的零频及有限频率多粒子关联之间的一般关系。

算符 $\hat{O}(t)$ 在同一算符微扰作用下对应的 Kubo 线性响应函数，与关联函数/磁化率 $\mathcal{C}_{\hat{O}}(t,\ t') = i\theta(t-t')\left\langle\left[\hat{O}(t),\ \hat{O}(t')\right]\right\rangle$ 有关。转到频域后，这类函数的虚部可与小于格林函数和大于格林函数之和联系起来：

$$\begin{aligned}
\mathcal{C}_{\hat{O}}(\omega) \ &= i\int_0^{\infty} d(t-t')e^{i\omega(t-t')}\left(\left\langle\hat{O}(t)\hat{O}(t')\right\rangle - \left\langle\hat{O}(t')\hat{O}(t)\right\rangle\right) \\
\implies \mathcal{C}_{\hat{O}}(\omega) - \mathcal{C}_{\hat{O}}(\omega)^* &= i\int_0^{\infty} d(t-t')\left(e^{i\omega(t-t')} - e^{-i\omega(t-t')}\right)\left(\left\langle\hat{O}(t)\hat{O}(t')\right\rangle - \left\langle\hat{O}(t')\hat{O}(t)\right\rangle\right) \\
&= i\int_{-\infty}^{\infty} d(t-t')e^{i\omega(t-t')}\left(\left\langle\hat{O}(t)\hat{O}(t')\right\rangle - \left\langle\hat{O}(t')\hat{O}(t)\right\rangle\right) \\
&= -\left(G^{>}_{O,O}(\omega) + G^{<}_{O,O}(\omega)\right)
\end{aligned} \tag{63}$$

这使我们能够将量子费舍尔信息与文献 [14] 中得到的 Kubo 关联函数/磁化率的虚部联系起来：

$$F_Q(\rho, \hat{O}) = \frac{1}{\pi i}\int_{-\infty}^{\infty} d\omega \tanh\left(\beta\omega/2\right)\left(\mathcal{C}_{\hat{O}}(\omega) - \mathcal{C}_{\hat{O}}(\omega)^*\right) \ . \tag{64}$$

4. 将杂质与零号位点单次解耦

我们将通过一次 URG 变换，将杂质态从不动点哈密顿量中解耦出来。当然，这会在零号位点上产生关联。所得哈密顿量将是一个 AIM，其中零号位点与链其余部分之间的跃迁充当有效杂化。示意如下：

$$\begin{aligned}
H^* = H_{\text{imp}} + V_{\text{imp-0}} + H_0 + H_{0\text{-}1} + H_{\text{rest}} \xrightarrow{\text{decouple imp.}} & E_{\text{imp}} + \tilde{H}_0 + H_{0\text{-}1} + H_{\text{rest}} \\
&= H_{\text{new imp}} + V_{\text{new 杂质 - 其余部分}} + H_{\text{rest}} \ .
\end{aligned} \tag{65}$$

由于杂质没有与零号格点以外的任何格点耦合，哈密顿量中涉及“其余部分”的项在此过程中不会发生变化。这也意味着，我们可以通过考察较小的哈密顿量来完成解耦。

$$\begin{aligned}
H_{\text{imp+0}} = H_{\text{imp}} + H_0 + V_{\text{imp-0}} = \ & -\frac{U^*}{2}\left(\hat{n}_{d\uparrow} - \hat{n}_{d\downarrow}\right)^2 - U_b\left(\hat{n}_{0\uparrow} - \hat{n}_{0\downarrow}\right)^2 + J^* S^z_d S^z_0 \\
& + V^*\sum_{\sigma}\left(c^\dagger_{d\sigma}c_{0\sigma} + \text{h.c.}\right) + \frac{J^*}{2}\left(c^\dagger_{d\uparrow}c_{d\downarrow}c^\dagger_{0\downarrow}c_{0\uparrow} + \text{h.c.}\right) \ .
\end{aligned} \tag{66}$$

4.1. 从 V^* 进行重整化

由涉及 V^* 的非对角项，我们在 0 的粒子扇区中得到以下项：

$$\sum_{\sigma} c^\dagger_{0\sigma}c_{d\sigma}\frac{V^{*2}}{\tilde{\omega} - H_d}c^\dagger_{d\sigma}c_{0\sigma} = \sum_{\sigma} c^\dagger_{0\sigma}c_{d\sigma}\frac{V^{*2}}{\tilde{\omega} + \frac{U^*}{2}\left(1-\hat{n}_{d\bar{\sigma}}\right)^2 + U_b\hat{n}_{0\bar{\sigma}} + \frac{J^*}{4}\left(1-\hat{n}_{d\bar{\sigma}}\right)\hat{n}_{0\bar{\sigma}}}c^\dagger_{d\sigma}c_{0\sigma} \ . \tag{67}$$

其中，$\tilde{\omega}$ 是杂质位点的量子涨落算符，而 $H_d = -\frac{U^*}{2}\left(\hat{n}_{d\uparrow} - \hat{n}_{d\downarrow}\right)^2 - U_b\left(\hat{n}_{0\uparrow} - \hat{n}_{0\downarrow}\right)^2 + J^* S^z_d S^z_0$ 是杂+0 系统哈密顿量的对角部分。为了确定分母中的算符，我们使用恒等式 $1 = \hat{n}_{d\bar{\sigma}}\hat{n}_{0\bar{\sigma}} + \hat{n}_{d\bar{\sigma}}\hat{h}_{0\bar{\sigma}} + \hat{h}_{d\bar{\sigma}}\hat{n}_{0\bar{\sigma}} + \hat{h}_{d\bar{\sigma}}\hat{h}_{0\bar{\sigma}}$ 在分子中展开单位算符，其中 $\hat{h} = 1 - \hat{n}$ 是空穴算符。代入后，我们得到

$$\begin{aligned}
\sum_{\sigma} c^\dagger_{0\sigma}c_{d\sigma}\frac{V^{*2}}{\tilde{\omega} - H_d}c^\dagger_{d\sigma}c_{0\sigma} &= V^{*2}\sum_{\sigma} c^\dagger_{0\sigma}c_{d\sigma}\frac{\hat{h}_{d\bar{\sigma}}\hat{h}_{0\bar{\sigma}} + \hat{h}_{d\bar{\sigma}}\hat{n}_{0\bar{\sigma}} + \hat{n}_{d\bar{\sigma}}\hat{h}_{0\bar{\sigma}} + \hat{n}_{d\bar{\sigma}}\hat{n}_{0\bar{\sigma}}}{\tilde{\omega} + \frac{U^*}{2}\hat{h}_{d\bar{\sigma}} + U_b\hat{n}_{0\bar{\sigma}} + \frac{J^*}{4}\hat{h}_{d\bar{\sigma}}\hat{n}_{0\bar{\sigma}}}c^\dagger_{d\sigma}c_{0\sigma} \\
&= V^{*2}\sum_{\sigma}\hat{h}_{d\sigma}\hat{n}_{0\sigma}\left[\frac{\hat{h}_{d\bar{\sigma}}\hat{h}_{0\bar{\sigma}}}{\tilde{\omega}_{00} + \frac{U^*}{2}} + \frac{\hat{h}_{d\bar{\sigma}}\hat{n}_{0\bar{\sigma}}}{\tilde{\omega}_{01} + \frac{U^*}{2} + U_b + \frac{J^*}{4}} + \frac{\hat{n}_{d\bar{\sigma}}\hat{h}_{0\bar{\sigma}}}{\tilde{\omega}_{10}} + \frac{\hat{n}_{d\bar{\sigma}}\hat{n}_{0\bar{\sigma}}}{\tilde{\omega}_{11} + U_b}\right] \ .
\end{aligned} \tag{68}$$

$\tilde{\omega}_{(0,1),\ (0,1)}$ 表示分子中构型对应的量子涨落尺度。

为了"冻结"杂质动力学，我们将用 $\hat{n}_{d\sigma} = \hat{n}_{d\bar{\sigma}} = \frac{1}{2}$ 替代，因为杂质能级具有 Z_2 对称性和粒子-空穴对称性。由此得到

$$\frac{1}{4}V^{*2}\sum_{\sigma}\hat{n}_{0\sigma}\left[\frac{\hat{h}_{0\bar{\sigma}}}{\tilde{\omega}_{00}+\frac{U^*}{2}}+\frac{\hat{n}_{0\bar{\sigma}}}{\tilde{\omega}_{01}+\frac{U^*}{2}+U_b+\frac{J^*}{4}}+\frac{\hat{h}_{0\bar{\sigma}}}{\tilde{\omega}_{10}}+\frac{\hat{n}_{0\bar{\sigma}}}{\tilde{\omega}_{11}+U_b}\right]\ . \tag{69}$$

最能代表金属基态的态是 $\bar{\omega}_{10}$，我们将其取作参考量子涨落尺度 $\bar{\omega}$。其量级为 $\bar{\omega}\sim-\frac{J^*}{4}-\frac{U^*}{2}-U_b$。现在，我们将通过用初始态的能量表示其他尺度，将它们与 $\bar{\omega}$ 联系起来：

$$\tilde{\omega}_{00}\sim-U_b=\bar{\omega}+\frac{J^*}{4}+\frac{U^*}{2},\ \tilde{\omega}_{01}\sim 0=\bar{\omega}+\frac{J^*}{4}+\frac{U^*}{2}+U_b,\ \tilde{\omega}_{11}\sim-\frac{U^*}{2}=\bar{\omega}+\frac{J^*}{4}+U_b\ . \tag{70}$$

代入后得到

$$\frac{1}{4}V^{*2}\sum_{\sigma}\hat{n}_{0\sigma}\left[\hat{h}_{0\bar{\sigma}}\alpha_1+\hat{n}_{0\bar{\sigma}}\alpha_2\right]\ , \tag{71}$$

其中 $\alpha_1=\left(\bar{\omega}+U^*+\underline{\frac{J^*}{4}}\right)^{-1}+\ (\bar{\omega})^{\ -1}$ 且 $\alpha_2=\left(\bar{\omega}+U^*+2U_b+\underline{\frac{J^*}{2}}\right)^{-1}+\left(\bar{\omega}+2U_b+\underline{\frac{J^*}{4}}\right)^{-1}$。

由于杂质和浴中都具有粒子-空穴对称性，来自 hole sector 的重整化只需通过变换 $n\leftrightarrow h$ 即可得到：

$$\frac{1}{4}V^{*2}\sum_{\sigma}\hat{h}_{0\sigma}\left[\hat{n}_{0\bar{\sigma}}\alpha_1+\hat{h}_{0\bar{\sigma}}\alpha_2\right]\ . \tag{72}$$

因此，来自 V 的总重整化为

$$\frac{1}{4}V^{*2}\sum_{\sigma}\left[\alpha_1\left(\hat{n}_{0\sigma}\hat{h}_{0\bar{\sigma}}+\hat{h}_{0\sigma}\hat{n}_{0\bar{\sigma}}\right)+\alpha_2\left(\hat{n}_{0\sigma}\hat{n}_{0\bar{\sigma}}+\hat{h}_{0\sigma}\hat{h}_{0\bar{\sigma}}\right)\right]=\frac{1}{2}V^{*2}\left(\alpha_1-\alpha_2\right)\left(\hat{n}_{0\uparrow}-\hat{n}_{0\downarrow}\right)^2+\text{constant}\ . \tag{73}$$

4.2. 来自 J^*的重整化

对近藤耦合进行解耦所产生的重整化包含两项。第一项产生于零号位点的自旋初始向上时：

$$\begin{aligned}\frac{J^{*2}}{4}c^\dagger_{d\downarrow}c_{d\uparrow}c^\dagger_{0\uparrow}c_{0\downarrow}\frac{1}{\tilde{\omega}-H_d}c^\dagger_{0\downarrow}c_{0\uparrow}c^\dagger_{d\uparrow}c_{d\downarrow}&=c^\dagger_{d\downarrow}c_{d\uparrow}c^\dagger_{0\uparrow}c_{0\downarrow}\frac{J^{*2}/4}{\tilde{\omega}+\frac{U^*}{2}+U_b+\frac{J^*}{4}}c^\dagger_{0\downarrow}c_{0\uparrow}c^\dagger_{d\uparrow}c_{d\downarrow}\\&=\frac{J^{*2}}{4}\frac{\hat{n}_{d\downarrow}\hat{h}_{d\uparrow}\hat{n}_{0\uparrow}\hat{h}_{0\downarrow}}{\tilde{\omega}+\frac{U^*}{2}+U_b+\frac{J^*}{4}}\ .\end{aligned} \tag{74}$$

量子涨落尺度 s 对此过程的尺度 $\tilde{\omega}$ 可以同样关联到 $\bar{\omega}$：$\tilde{\omega}\sim-\frac{U^*}{2}-U_b-\frac{J^*}{4}=\bar{\omega}$。这给出 s

$$\frac{J^{*2}}{4}\frac{\hat{n}_{d\downarrow}\hat{h}_{d\uparrow}\hat{n}_{0\uparrow}\hat{h}_{0\downarrow}}{\bar{\omega}+\frac{U^*}{2}+U_b+\frac{3J^*}{4}}=\frac{J^{*2}}{16}\frac{\hat{n}_{0\uparrow}\hat{h}_{0\downarrow}}{\bar{\omega}+\frac{U^*}{2}+U_b+\frac{J^*}{4}}\ , \tag{75}$$

作为此构型的重整化。在最后一步，我们代入了 $\hat{n}_{d\sigma}=\hat{h}_{d\sigma}=\frac{1}{2}$。对于零号位点自旋朝下的另一种构型，我们得到

$$\frac{J^{*2}}{16}\frac{\hat{n}_{0\downarrow}\hat{h}_{0\uparrow}}{\bar{\omega}+\frac{U^*}{2}+U_b+\frac{J^*}{4}}\ . \tag{76}$$

将两个扇区相加，我们得到

$$\frac{J^{*2}}{16}\frac{1}{\bar{\omega}+\frac{U^*}{2}+U_b+\frac{J^*}{4}}\left(\hat{n}_{0\uparrow}-\hat{n}_{0\downarrow}\right)^2\ . \tag{77}$$

4.3. 总重整化

将 V^*和 J^*的贡献相加后，净重整化的结果是在零号位点上生成一个局域关联项 $-U'(\hat{n}_{0\uparrow}-\hat{n}_{0\downarrow})^2$，其中 U'由下式给出

$$U'=\frac{-J^{*2}/16}{\bar{\omega}+\frac{U^*}{2}+U_b+\frac{J^*}{4}}-\frac{1}{2}V^{*2}\left(\frac{1}{\bar{\omega}+U^*+\frac{J^*}{4}}+\frac{1}{\bar{\omega}}-\frac{1}{\bar{\omega}+U^*+2U_b+\frac{J^*}{2}}-\frac{1}{\bar{\omega}+2U_b+\frac{J^*}{4}}\right) \tag{78}$$

因此，零号位点的有效哈密顿量为

$$H_{0+\text{rest}} = \underbrace{-\left(U'+U_b\right)\left(\hat{n}_{0\uparrow}-\hat{n}_{0\downarrow}\right)^2}_{\text{new correlated impurity}} \quad \underbrace{-t\sum_{\substack{j\in\text{n.n. of 0,}\\ \sigma}}\left(c_{0\sigma}^{\dagger}c_{j\sigma}+\text{h.c.}\right)}_{\text{hopping between new impurity \& new bath}} \quad \underbrace{-t\sum_{\langle i,j\rangle}\left(c_{i\sigma}^{\dagger}c_{j\sigma}+\text{h.c.}\right)}_{\text{K.E. of new bath}} . \tag{79}$$

5. 哈伯德边带内激发的有效哈密顿量

除了 r_{c1}之外，还可以看到，哈伯德边带在杂质谱函数中与中央近藤共振分离。这些边带较宽，表明在高能量 $\omega\sim U/2$处，杂质位点在边带内与浴发生杂化。这些过程使得莫特能隙之外的浴其余部分存在无能隙激发。为了求得浴其余部分（格点 1 及之后）的有效哈密顿量，我们将双位点哈密顿量 H中位于边带内的本征态视为基态，并将从零号位点到浴其余部分的跃迁视为微扰。双位点哈密顿量为

$$H_{\text{two site}} = V\sum_{\sigma}\left(c_{d\sigma}^{\dagger}c_{0\sigma}+\text{h.c}\right)+J\vec{S}_d\cdot\vec{S}_0-\frac{U}{2}\left(\hat{n}_{d\uparrow}-\hat{n}_{d\downarrow}\right)^2+\frac{U}{2} . \tag{80}$$

为了将双占据杂质能级置于更常见的数值 $U/2$，我们将哈密顿量平移了相同的常数值。由于在与边带物理相关的频率下， U_b 相较于 U 较小，因此忽略了它的影响。位于哈伯德边带内的双位点态为

$$\begin{aligned}
&|\Psi_{cc}\rangle \equiv |c\rangle_d|c\rangle_0 ; \quad c\in\{0,2\} ; \quad |\Psi_{\text{CS}}\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|2\rangle_d|0\rangle_0-|0\rangle_d|2\rangle_0\right) ;\\
&|\Psi_{\sigma,c}\rangle = \alpha|\sigma\rangle_d|c\rangle_0+\sqrt{1-\alpha^2}|c\rangle_d|\sigma\rangle_0 ; \ \sigma\in\{\uparrow,\downarrow\} ;\\
&|\Psi_{\text{CT}}\rangle = \beta\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\uparrow\rangle_d|\downarrow\rangle_0-|\downarrow\rangle_d|\uparrow\rangle_0\right)+\sqrt{1-\beta^2}\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|2\rangle_d|0\rangle_0+|0\rangle_d|2\rangle_0\right) ,
\end{aligned} \tag{81}$$

本征态的系数为

$$\alpha\simeq\frac{V}{\sqrt{V^2+\left(E_{\text{X1}}+\frac{U}{2}\right)^2}},\ \beta=\frac{2V}{\sqrt{4V^2+\left(E_{\text{CS}}+\frac{U}{2}+\frac{3J}{4}\right)^2}} . \tag{82}$$

各态的能量为

$$\begin{aligned}
&E_{\text{gs}}\equiv E_{00}=E_{22}=E_{CS}=\frac{U}{2}, E_{\text{X1}}\equiv E_{\sigma,c}=\frac{U}{4}+\sqrt{V^2+\frac{U^2}{16}} ,\\
&E_{\text{X2}}\equiv E_{\text{CS}}=\frac{U}{4}-\frac{3J}{8}+\sqrt{4V^2+\left(\frac{U}{4}+\frac{3J}{8}\right)^2} .
\end{aligned} \tag{83}$$

基态（由方程（81）中所示的态组成）是三重简并的。为了研究浴的动力学，我们现在引入微扰 $H_I=-t\sum_{\sigma}\left(c_{0\sigma}^{\dagger}c_{1\sigma}+\text{h.c.}\right)$。我们还取一组扩展的本征态 $\{|\Psi_n\rangle\otimes|a\rangle\}$，其中 $\{|\Psi_n\rangle\}$ 是$H_{\text{two 格点}}$的本征态集合，而 $|a\rangle\in\{|0\rangle,|\uparrow\rangle,|\downarrow\rangle,|2\rangle\}$表示第一位点的构型。$H_{\text{two 格点}}$ 的本征态也是总数算符 $\hat{n}_d+\hat{n}_0+\hat{n}_1$的本征态，并且由于 H_I不守恒总数，所有奇数阶能量修正均为零： $\langle\Psi_n|H_I^b|\Psi_n\rangle$， $b=1$，3，.....，对所有本征态均为零。

对于二阶能量修正，我们需要计算基态中 n 的重叠 $\langle\Psi_m|H_I|\Psi_n\rangle$， $m\neq n$。由于这三个基态都涉及电荷构型为（0 或 2）的杂质和零号位点，因此 $H_I|\Psi\rangle_n$ 将得到形式为 $|0(2)\rangle_d|\sigma\rangle_0|a\rangle_1$的态。该结果态仅与展开态$|\Psi_{\sigma,c}\rangle|a\rangle$的 $\sqrt{1-\alpha^2}|c\rangle_d|\sigma\rangle_0|a\rangle$部分有非零重叠。因此，每个此类重叠的平方为 $t^2\left(1-\alpha^2\right)$。

- 来自基态 $|\Psi_{00}\rangle|0\rangle$ 和 $|\Psi_{22}\rangle|2\rangle$ 的激发与其他任何态的重叠均为零，因此这些态中的二阶能量移动为零。

- 来自基态 $|\Psi_{00}\rangle|\sigma\rangle$ 和 $|\Psi_{22}\rangle|\sigma\rangle$ 的激发分别与一个激发态有非零重叠，因此这些态中的二阶能量修正为 $\gamma^2\equiv t^2\left(1-\alpha^2\right)/\left(E_{\text{X1}}-E_{\text{基态}}\right)$。
- 其余基态产生的激发分别与两个激发态具有非零重叠，因此这些态的二阶能量修正为 $2\gamma^2$。

舍去零级部分（因为它对浴的其余部分没有动力学影响）后， t 的二级有效哈密顿量形式如下

$$H_{\text{eff}}^{(2)} = \gamma^2 \left[\left(|\Psi_{00}\rangle \langle \Psi_{00}| + |\Psi_{22}\rangle \langle \Psi_{22}| + 2\,|\Psi_{\text{CS}}\rangle \langle \Psi_{\text{CS}}| \right) \left(\sum_\sigma |\sigma\rangle_1 \langle \sigma|_1 \right) \right.$$
$$\left. +2\left(|\Psi_{22}\rangle \langle \Psi_{22}| + |\Psi_{\text{CS}}\rangle \langle \Psi_{\text{CS}}| \right) |0\rangle_1 \langle 0|_1 + 2\left(|\Psi_{00}\rangle \langle \Psi_{00}| + |\Psi_{\text{CS}}\rangle \langle \Psi_{\text{CS}}| \right) |2\rangle_1 \langle 2|_1 \right] . \quad (84)$$

利用第一位点希尔伯特空间的完备关系 $1 = \sum_\sigma |\sigma\rangle_1 \langle\sigma|_1 + |0\rangle_1 \langle 0|_1 + |2\rangle_1 \langle 2|_1$，可得

$$H_{\text{eff}}^{(2)} = \text{constant} + \gamma^2 \left(|\Psi_{22}\rangle \langle \Psi_{22}| - |\Psi_{00}\rangle \langle \Psi_{00}| \right) \left(|2\rangle_1 \langle 2|_1 - |0\rangle_1 \langle 0|_1 \right) , \quad (85)$$

其中，“常数”项指的是不涉及、也不依赖于浴其余部分动力学的算符。定义电荷同位旋算符 $C^z\,|2(0)\rangle = +(-)\frac{1}{2}\,|2(0)\rangle$后，有效哈密顿量可写为（略去非动力学部分）

$$H_{\text{eff}}^{(2)} = 4\gamma^2 C_{\text{tot}}^z C_1^z , \quad (86)$$

其中， C_i^z是格点 i 的电荷同位旋，而 $C_{\text{tot}}^z \equiv C_d^z + C_0^z$ 是杂质和零号位点的总电荷同位旋的 z 分量。

本征态 $|\Psi_n\rangle$ 的能量四阶位移为

$$E_n^{(4)} = \sum_{j,k,l} \frac{(H_I)_{nl}\,(H_I)_{lk}\,(H_I)_{kj}\,(H_I)_{jn}}{(E_l - E_n)\,(E_k - E_n)\,(E_j - E_n)} - E_n^{(2)} \left[\frac{(H_I)_{kn}}{E_k - E_n} \right]^2 , \quad (87)$$

其中矩阵元（H_I）$_{in}$定义为 $\langle i|H_I|n\rangle$。对于几乎所有基态，这一四阶能量位移都为零。对于其余态，则需要考虑它们的简并性。能够产生非零四阶贡献的“适当”态组合为

$$|+\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}}\,|\Psi_{22}\rangle\,|0\rangle_1 + \sqrt{\frac{1}{3}}\,|\Psi_{\text{CS}}\rangle\,|2\rangle_1 , \quad |-\rangle = -\sqrt{\frac{2}{3}}\,|\Psi_{00}\rangle\,|2\rangle_1 + \sqrt{\frac{1}{3}}\,|\Psi_{\text{CS}}\rangle\,|0\rangle_1 . \quad (88)$$

对于这些基态，本征值的四阶能量位移为

$$E^{(4)} = \frac{3\gamma^4\alpha^2\beta^2}{(1-\alpha^2)\,(E_{\text{X2}} - E_{\text{gs}})} , \quad (89)$$

使得有效哈密顿量的四阶贡献为

$$H_{\text{eff}}^{(4)} = E^{(4)} \left(|+\rangle \langle +| + |-\rangle \langle -| \right)$$
$$= \frac{\gamma^4\alpha^2\beta^2}{(1-\alpha^2)\,(E_{\text{X2}} - E_{\text{gs}})} \left[-C_{\text{tot}}^z C_{\text{tot}}^2 C_1^z + \sqrt{2}\mathcal{P}_{\text{tot}}^4 \left(C_0^+ - C_d^+ \right) C_1^- + \text{h.c.} \right] . \quad (90)$$

算符 $\mathcal{P}_{\text{tot}}^4$ 作用于属于合并后的 $d+0$ 希尔伯特空间的态，并投影到 $\hat{n}_d + \hat{n}_0 = 4$子空间。

6. 相变附近近藤尺度的行为 T_K

为了获得涌现的近藤温度尺度 T_K 在相变附近的行为，我们沿用 Moeller 等人 1995 [15] 和 Held 等人 2013 [16] 采用的方法。在相变附近，他们通过对完整的 AIM 应用施里弗-沃尔夫变换，消除了杂质位点的电荷涨落，仅保留 s-d 耦合的物理效应，从而得到一个近藤模型 J。这相当于从杂质谱函数中去除侧峰，并聚焦于低能中心峰。随后，Held 等人采用浴中的洛伦兹型态密度，对该近藤模型的重整化群方程进行积分。这一做法的依据是，杂质谱函数的中心峰呈洛伦兹型，而在自洽条件下，浴与杂质位点等效。我们对扩展杂质模型采用相同的方法，所得变换将导出一个$J - U_b$ 模型。相关的重整化群方程见主文稿第四节：

$$\Delta J = -\frac{n_j J\,(J + 4U_b)}{\omega - D/2 + U_b/2 + J/4}, \quad \Delta U_b = 0 , \quad (91)$$

其中 $n_j = \rho(D)|\Delta D|$ 与浴态密度成正比。在主文稿第七节中，我们表明，零号位点的谱函数会通过相干自旋翻转

涨落跟随杂质位点的谱函数，这表明在此区间内，浴适用的态密度应为洛伦兹函数型（与杂质谱函数中心峰的形状相同）。因此我们设定

$$\rho(D) = \frac{\rho_0 \Gamma^2}{D^2 + \Gamma^2} \ , \tag{92}$$

其中 Γ 表示洛伦兹函数的半宽度。Held等人提出了类似的论证思路。[16]。接近相变时，配对项的竞争会阻滞近藤耦合 J 的重整化群流，重整化群方程可简化为穷人标度 1–环形式：

$$\frac{dJ}{dD} \simeq -2\rho_0 \Gamma^2 \frac{J\left(J + 4U_b\right)}{\left(\Gamma^2 + D^2\right) D} \ . \tag{93}$$

现在，我们在 $D \in [D_0, D^*]$ 的范围内对该重整化群方程积分，其中 D_0 是裸带宽， D^* 是不动点带宽。 D^* 表示红外区传导电子的能标。

$$\begin{aligned} &\int_{J_0}^{J^*} \frac{dJ}{J\left(J + 4U_b\right)} = -\int_{D_0}^{D^*} \frac{2\rho_0 \Gamma^2 dD}{\left(\Gamma^2 + D^2\right) D} \\ &\implies \frac{1}{4U_b \rho_0} \left(\ln \frac{J^*}{J_0} - \ln \frac{J^* + 4U_b}{J_0 + 4U_b} \right) = \ln \frac{D^* + \Gamma^2}{D_0 + \Gamma^2} - \ln \frac{D^*}{D_0} \ . \end{aligned} \tag{94}$$

现在我们取 .....的极限 $J_0 + 4U_b \to 0^-$ ，并 令等式两边的奇异项相等 :

$$\ln \frac{D^*}{D_0} = -\frac{1}{4U_b \rho_0} \ln \frac{J_0 + 4U_b}{J_0} = -\frac{1}{4U_b \rho_0} \ln \left(r_{c2} - r\right) + \text{non-singular part} \ . \tag{95}$$

我们将耦合常数 J 和 U_b 替换为无量纲参数 $r = -U_b/J_0$ 和 $r_{c2} = 1/4$。略去非奇异部分并对 D^* 求解，便得到红外能标：

$$D^* = D_0 \exp\left[-\frac{\ln\left(r_{c2} - r\right)}{4U_b \rho_0} \right] \ . \tag{96}$$

由此得到动态生成的近藤温度尺度

$$T_K = \frac{D^*}{k_B} = \frac{D_0}{k_B} \exp\left[-\frac{\ln\left(r_{c2} - r\right)}{4U_b \rho_0} \right] \ . \tag{97}$$

注意，对数项的系数为正，因为 U_b 为负： $-4U_b\rho_0 = |4U_b\rho_0|$。接近相变时，参数 r 趋于极限 $r \to r_{c2}^-$，近藤温度尺度随之消失：

$$\lim_{r \to r_{c2}^-} T_K = \frac{D_0}{k_B} \lim_{r \to r_{c2}^-} \left(r_{c2} - r\right)^{4|U_b\rho_0|} \to 0 \ . \tag{98}$$

7. 临界点处低能激发的有效哈密顿量

为了得到浴中低能激发的有效哈密顿量，我们将在双位点哈密顿量 H_0 中引入一个连接零号位点和第一位点的跃迁项 V，并对该项进行微扰处理。

$$H = \underbrace{J\vec{S}_d \cdot \vec{S}_0 - U_b \left(\hat{n}_{0\uparrow} - \hat{n}_{0\downarrow}\right)^2}_{H_0} \underbrace{-t \sum_\sigma \left(c_{0\sigma}^\dagger c_{1\sigma} + \text{h.c.} \right)}_{V} \ . \tag{99}$$

如前所述， H_0 是我们的零阶哈密顿量，而 V 是微扰。在临界点处，零阶哈密顿量具有一个 $20-$ 重简并基态流形，我们稍后将证明，正是这种简并导致了非费米液体激发。这些基态为

$$\left\{ |S = S^z = 0\rangle, |\uparrow, 0\rangle, |\uparrow, 2\rangle, |\downarrow, 0\rangle, |\downarrow, 2\rangle \right\} \otimes \left\{ |0\rangle, |\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle \right\} \ . \tag{100}$$

$\otimes$ 左侧的缔合态描述了杂质和零号位点的构型； $S = S^z = 0$ 表示单重态，而其余四个态 $|\sigma、\ 0\rangle$ 、 $|\sigma、\ 2\rangle$ 是局域磁矩态。 $\otimes$ 右侧的缔合态表示第一位点的构型。其中八个态在基态子空间内的矩阵元为零，即使存在微扰时也是如此，因此我们舍弃这些态。由于完整的哈密顿量守恒粒子总数 $N_{\text{tot}} = \sum_\sigma (\hat{n}_{d\sigma} + \hat{n}_{0\sigma} + \hat{n}_{1\sigma})$和总自旋 $S_{\text{tot}}^z = S_d^z + S_0^z + S_1^z$，剩余的 12 个态可以根据这两个算符的值分成解耦块：

$$\begin{aligned} &N_{\text{tot}} = c + 2, S_{\text{tot}}^z = 0 : |S = S^z = 0\rangle |c\rangle, |\uparrow, c, \downarrow\rangle, |\downarrow, c, \uparrow\rangle \ ; \ c = 0, 2, \\ &N_{\text{tot}} = 3, S_{\text{tot}}^z = \pm\frac{1}{2} \ : |S = S^z = 0\rangle |\sigma\rangle, |\sigma, 0, 2\rangle, |\sigma, 2, 0\rangle \ ; \sigma = \uparrow, \downarrow \ . \end{aligned} \tag{101}$$

微扰 V 将解除每个块中的简并；为了计算修正后的谱，我们在 V存在时对每个块进行对角化。我们将首先写出微扰对单重态基态的作用：这将更容易辨认出真正的本征态。

$$
\begin{aligned}
&N_{\mathrm{tot}}=c+2, S^z_{\mathrm{tot}}=0: V\left|\mathrm{SS}_c\right\rangle=\frac{t}{\sqrt{2}}\left(\left|\downarrow, c, \uparrow\right\rangle-\left|\uparrow, c, \downarrow\right\rangle\right),\ c=0,2,\\
&N_{\mathrm{tot}}=3, S^z_{\mathrm{tot}}=\frac{\sigma}{2}\quad : V\left|\mathrm{SS}_\sigma\right\rangle=\frac{t}{\sqrt{2}}\left|\sigma\right\rangle\otimes\left(\left|0,2\right\rangle+\left|2,0\right\rangle\right),\ \sigma=\uparrow(1),\downarrow(-1)\ ,
\end{aligned}
\tag{102}
$$

其中我们引入了记号 $\left|\mathrm{SS}_\alpha\right\rangle=\left|S=S^z=0\right\rangle\otimes\left|\alpha\right\rangle$， $\alpha=0$，$\uparrow$，$\downarrow$，2。这表明，微扰作用于单重态时，会在相应的各个块中产生局域磁矩态的线性组合。因此，我们在每个块内定义两种可能的线性组合 $\left|\mathrm{LM}^{N_{\mathrm{tot}},\ S^z\ {}_{\mathrm{tot}}}_{\pm}\right\rangle$：

$$
\begin{aligned}
&N_{\mathrm{tot}}=c+2, S^z_{\mathrm{tot}}=0: \left|\mathrm{LM}^{c+2,0}_{\pm}\right\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\left|\uparrow, c, \downarrow\right\rangle\pm\left|\downarrow, c, \uparrow\right\rangle\right),\ c=0,2,\\
&N_{\mathrm{tot}}=3, S^z_{\mathrm{tot}}=\frac{\sigma}{2}\quad : \left|\mathrm{LM}^{3,\frac{1}{2}}_{\sigma}\right\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\left|\sigma,0,2\right\rangle\pm\left|\sigma,2,0\right\rangle\right),\ \sigma=\uparrow(1),\downarrow(-1)\ .
\end{aligned}
\tag{103}
$$

用这些线性组合表示后，我们得到

$$
\begin{aligned}
&V\left|\mathrm{SS}_0\right\rangle=t\left|\mathrm{LM}^{2,0}_{-}\right\rangle,\ \ V\left|\mathrm{LM}^{2,0}_{-}\right\rangle=t\left|\mathrm{SS}_0\right\rangle,\ \ V\left|\mathrm{LM}^{2,0}_{+}\right\rangle=0;\quad V\left|\mathrm{SS}_\uparrow\right\rangle=t\left|\mathrm{LM}^{3,\uparrow}_{+}\right\rangle,\\
&V\left|\mathrm{LM}^{3,\uparrow}_{+}\right\rangle=t\left|\mathrm{SS}_\uparrow\right\rangle,\ \ V\left|\mathrm{LM}^{3,\uparrow}_{-}\right\rangle=0,\ \ V\left|\mathrm{SS}_\downarrow\right\rangle=t\left|\mathrm{LM}^{3,\downarrow}_{+}\right\rangle,\ \ V\left|\mathrm{LM}^{3,\downarrow}_{+}\right\rangle=t\left|\mathrm{SS}_\downarrow\right\rangle,\\
&V\left|\mathrm{LM}^{3,\downarrow}_{-}\right\rangle=0;\quad V\left|\mathrm{SS}_2\right\rangle=t\left|\mathrm{LM}^{4,0}_{-}\right\rangle,\ \ V\left|\mathrm{LM}^{4,0}_{-}\right\rangle=t\left|\mathrm{SS}_2\right\rangle,\ \ V\left|\mathrm{LM}^{4,0}_{+}\right\rangle=0\ .
\end{aligned}
\tag{104}
$$

每行最右端的零矩阵元应理解为 V 会将这些态带出基态子空间。例如，态 $V\left|\mathrm{LM}^{2\ 0}_{-}\right\rangle$. 实际上并非为零，而是 $V\left|\mathrm{LM}^{2\ 0}_{-}\right\rangle$. 与由20个简并态张成的基态子空间中的任何其他态之间的重叠为零。现在可以看到，用线性组合 $\left|\mathrm{LM}_{\pm}\right\rangle$ 表示时，每个 3×3 块都解耦为一个 2×2 块 $\begin{pmatrix}0 & t\\ t & 0\end{pmatrix}$和一个 1×1 块 $\begin{pmatrix}0\end{pmatrix}$。因此，最后一个块中的态已经是本征态，但其能量为零，所以它不会出现在有效哈密顿量中。剩余的 2×2 块具有本征态 $\left|\pm^{N_{\mathrm{tot}},\ S^z\ {}_{\mathrm{tot}}}\right\rangle$，它们是单重态和剩余局域磁矩组合的线性组合，对应的本征值为 $\pm t$:

$$
\begin{aligned}
&N_{\mathrm{tot}}=2, S^z_{\mathrm{tot}}=0: \left|\pm^{2,0}\right\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\left|\mathrm{SS}_0\right\rangle\pm\left|\mathrm{LM}^{2,0}_{-}\right\rangle\right),\\
&N_{\mathrm{tot}}=3, S^z_{\mathrm{tot}}=\frac{1}{2}: \left|\pm^{3,\frac{1}{2}}\right\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\left|\mathrm{SS}_\uparrow\right\rangle\pm\left|\mathrm{LM}^{3,\frac{1}{2}}_{+}\right\rangle\right),\\
&N_{\mathrm{tot}}=3, S^z_{\mathrm{tot}}=-\frac{1}{2}: \left|\pm^{3,-\frac{1}{2}}\right\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\left|\mathrm{SS}_\downarrow\right\rangle\pm\left|\mathrm{LM}^{3,-\frac{1}{2}}_{+}\right\rangle\right),\\
&N_{\mathrm{tot}}=4, S^z_{\mathrm{tot}}=0: \left|\pm^{4,0}\right\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\left|\mathrm{SS}_2\right\rangle\pm\left|\mathrm{LM}^{4,0}_{-}\right\rangle\right)\ .
\end{aligned}
\tag{105}
$$

此处值得指出，极化基态 $\left|S^z_{\mathrm{tot}}=\sigma\frac{1}{2}\right\rangle,\sigma=\pm1$ 可写成单重态 $\left|\mathrm{SS}\right\rangle_{d0}\otimes\left|\sigma\right\rangle_1$ 与局域磁矩态 $\frac{1}{\sqrt{2}}(\left|\sigma,0,2\right\rangle-\left|\sigma,2,0\right\rangle)$ 的等权叠加态。因此，极化对称性破缺态在两个相的基态之间起到桥梁作用，对于展示近藤云在量子临界点处的破坏及其引发的后果（例如杂质的不完全屏蔽、分数量子化磁化和纠缠熵）十分重要，相关内容将在下一节讨论。

将每个块的两个本征态 $\left|\pm\right\rangle$ 组合起来，便可重构有效哈密顿量$\mathcal{H}^{N_{\mathrm{tot}},S^z\ {}_{\mathrm{tot}}\mathrm{eff}}$，该哈密顿量描述零阶哈密顿量基态子空间内第一位点的动力学。形式上，它可写为

$$
\begin{aligned}
\mathcal{H}^{N_{\mathrm{tot}},S^z_{\mathrm{tot}}}_{\mathrm{eff}}&=t\left|+^{N_{\mathrm{tot}},S^z_{\mathrm{tot}}}\right\rangle\left\langle+^{N_{\mathrm{tot}},S^z_{\mathrm{tot}}}\right|-t\left|-^{N_{\mathrm{tot}},S^z_{\mathrm{tot}}}\right\rangle\left\langle-^{N_{\mathrm{tot}},S^z_{\mathrm{tot}}}\right|\ ,\\
&=\begin{cases}t\left[\left|\mathrm{SS}_\alpha\right\rangle\left\langle\mathrm{LM}^{N_{\mathrm{tot}},S^z_{\mathrm{tot}}}_{-}\right|+\left|\mathrm{LM}^{N_{\mathrm{tot}},S^z_{\mathrm{tot}}}_{-}\right\rangle\left\langle\mathrm{SS}_\alpha\right|\right], & \alpha=0,2\ ,\\ t\left[\left|\mathrm{SS}_\alpha\right\rangle\left\langle\mathrm{LM}^{N_{\mathrm{tot}},S^z_{\mathrm{tot}}}_{+}\right|+\left|\mathrm{LM}^{N_{\mathrm{tot}},S^z_{\mathrm{tot}}}_{+}\right\rangle\left\langle\mathrm{SS}_\alpha\right|\right], & \alpha=\uparrow,\downarrow\ .\end{cases}
\end{aligned}
\tag{106}
$$

我们首先写出对应于 $N_{\mathrm{tot}}=2$，$S^z_{\mathrm{tot}}=0$ 的 $\alpha=0$ 有效哈密顿量:

$$
\mathcal{H}^{2,0}_{\mathrm{eff}}=t\left[\left|\mathrm{SS}_0\right\rangle\left\langle\mathrm{LM}^{2,0}_{-}\right|+\left|\mathrm{LM}^{2,0}_{-}\right\rangle\left\langle\mathrm{SS}_0\right|\right]\ .
\tag{107}
$$

为了将其转换为二次量子化形式，我们将使用以下恒等式：

$$|\mathrm{SS}_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(P_d^{\uparrow}c_{0\downarrow}^{\dagger} - P_d^{\downarrow}c_{0\uparrow}^{\dagger}\right)P_0^{(0)}P_1^{(0)}\,|0\rangle\,; \quad |\mathrm{LM}_{-}^{2,0}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(P_d^{\uparrow}c_{1\downarrow}^{\dagger} - P_d^{\downarrow}c_{1\uparrow}^{\dagger}\right)P_0^{(0)}P_1^{(0)}\,|0\rangle\ , \tag{108}$$

其中， $P_i^{(m)}(m=0,\ 1,\ 2)$ 将投影到 i^{th} 格点上的 $\hat{}n_i = m$ 子空间，而 P_d^{σ} 则将杂质自旋投影到 $|\sigma\rangle$； $\sigma = \uparrow,\ \downarrow$ 构型。于是有

$$\begin{aligned}|\mathrm{SS}_0\rangle\langle\mathrm{LM}_{-}^{2,0}| &= \frac{1}{2}\left(P_d^{\uparrow}c_{0\downarrow}^{\dagger} - P_d^{\downarrow}c_{0\uparrow}^{\dagger}\right)P_0^{(0)}P_1^{(0)}\left(P_d^{\uparrow}c_{1\downarrow} - P_d^{\downarrow}c_{1\uparrow}\right)\\ &= P_1^{(0)}\frac{1}{2}\left(P_d^{\uparrow}c_{0\downarrow}^{\dagger}c_{1\downarrow} + P_d^{\downarrow}c_{0\uparrow}^{\dagger}c_{1\uparrow} - S_d^{+}c_{0\downarrow}^{\dagger}c_{1\uparrow} - S_d^{-}c_{0\uparrow}^{\dagger}c_{1\downarrow}\right)P_0^{(0)}\ ,\end{aligned} \tag{109}$$

其中我们用到了：若 P 是投影算符，则 $P^2 = P$；以及 $P_d^{\uparrow}P_d^{\downarrow} = S_d^{+}$。将这些代入有效哈密顿量，并注意到 $P_d^{\uparrow} = \frac{1}{2} + S_d^z$， $P_d^{\downarrow} = \frac{1}{2} - S_d^z$，可得

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_{\mathrm{eff}}^{2,0} = \frac{t}{2}\Bigg[&\left(\frac{1}{2}+S_d^z\right)c_{0\downarrow}^{\dagger}P_0^{(0)}P_1^{(0)}c_{1\downarrow} - S_d^{+}c_{0\downarrow}^{\dagger}P_0^{(0)}P_1^{(0)}c_{1\uparrow} - S_d^{-}c_{0\uparrow}^{\dagger}P_0^{(0)}P_1^{(0)}c_{1\downarrow}\\ &+\left(\frac{1}{2}-S_d^z\right)c_{0\uparrow}^{\dagger}P_0^{(0)}P_1^{(0)}c_{1\uparrow}\Bigg] + \mathrm{h.c.}\ .\end{aligned} \tag{110}$$

为了更清楚地说明这一点，我们定义空穴子激发算符 $h_{i\sigma}^{\dagger} = c_{i\sigma}^{\dagger}P_i^{(0)}$。用这些算符表示时，有效哈密顿量变为

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_{\mathrm{eff}}^{2,0} = \frac{t}{2}\Bigg[&\left(\frac{1}{2}+S_d^z\right)\left(h_{0\downarrow}^{\dagger}h_{1\downarrow} + h_{1\downarrow}^{\dagger}h_{0\downarrow}\right) - S_d^{+}\left(h_{0\downarrow}^{\dagger}h_{1\uparrow} + h_{1\downarrow}^{\dagger}h_{0\uparrow}\right) - S_d^{-}\left(h_{0\uparrow}^{\dagger}h_{1\downarrow} + h_{1\uparrow}^{\dagger}h_{0\downarrow}\right) +\\ &\left(\frac{1}{2}-S_d^z\right)\left(h_{0\uparrow}^{\dagger}h_{1\uparrow} + h_{1\uparrow}^{\dagger}h_{0\uparrow}\right)\Bigg]\\ =\ &-t\Bigg[S_d^z\frac{1}{2}\left(h_{0\uparrow}^{\dagger}h_{1\uparrow} + h_{1\uparrow}^{\dagger}h_{0\uparrow} - h_{0\downarrow}^{\dagger}h_{1\downarrow} - h_{1\downarrow}^{\dagger}h_{0\downarrow}\right) + \frac{1}{2}S_d^{+}\left(h_{0\downarrow}^{\dagger}h_{1\uparrow} + h_{1\downarrow}^{\dagger}h_{0\uparrow}\right)\\ &+\ \frac{1}{2}S_d^{-}\left(h_{0\uparrow}^{\dagger}h_{1\downarrow} + h_{1\uparrow}^{\dagger}h_{0\downarrow}\right)\Bigg] + \frac{t}{4}\left(h_{0\uparrow}^{\dagger}h_{1\uparrow} + h_{1\uparrow}^{\dagger}h_{0\uparrow} + h_{0\downarrow}^{\dagger}h_{1\downarrow} + h_{1\downarrow}^{\dagger}h_{0\downarrow}\right)\ .\end{aligned} \tag{111}$$

哈密顿量的第一部分（前面带有因子 $-t$ ）类似于一个双自旋海森堡哈密顿量。为了探究这一点，我们写出可能的第二个自旋：

$$\mathcal{S}_1^z \equiv \frac{1}{2}\left(h_{0\uparrow}^{\dagger}h_{1\uparrow} + h_{1\uparrow}^{\dagger}h_{0\uparrow} - h_{0\downarrow}^{\dagger}h_{1\downarrow} - h_{1\downarrow}^{\dagger}h_{0\downarrow}\right)\ . \tag{112}$$

请注意，构成完整算符 $\mathcal{S}_1^z$ 的每一项中间都有一个组合投影算符 $P_{(0)\,0\,1} = P_{(0)\,0}\ P_{(0)\,1} = P_{(0}{}_{P_0^{(0)})}$，右侧则有一个湮灭算符。这意味着， $\mathcal{S}^z$ 投影到仅由满足 $\hat{}n_0 + \hat{}n_1 = 1$ 的那些态构成的较小集合上。这也是 $\mathcal{S}_1^z$ 中下标 1 的含义。这样的态有四个： $|\uparrow,0\rangle, |\downarrow,0\rangle, |0,\uparrow\rangle, |0,\downarrow\rangle$。事实上，很容易看出， $\mathcal{S}^z$ 的本征态为

$$|\Uparrow\rangle_{1,\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\uparrow,0\rangle \pm |0,\uparrow\rangle\right), \quad \mathcal{S}_1^z\,|\Uparrow\rangle_{1,\pm} = \pm\frac{1}{2}\,|\Uparrow\rangle_{1,\pm}\,, \tag{113}$$

$$|\Downarrow\rangle_{1,\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\downarrow,0\rangle \pm |0,\downarrow\rangle\right), \quad \mathcal{S}_1^z\,|\Downarrow\rangle_{1,\pm} = \mp\frac{1}{2}\,|\Downarrow\rangle_{1,\pm}\ . \tag{114}$$

本征态上方的标签 $\pm$ 表示，这些态也是宇称算符 $\mathcal{P}_{01}$ 的本征态；该算符会交换格点标签 0 和 1：

$$\mathcal{P}_{01}\,|\alpha,\alpha'\rangle = |\alpha',\alpha\rangle\,; \quad \alpha,\alpha' \in \{0,\uparrow,\downarrow,2\}\ . \tag{115}$$

事实上，本征态 $|\Uparrow\rangle_{1,+1}$ 和 $|\Downarrow\rangle_{1,-1}$ 都具有 $\mathcal{S}^z = \frac{1}{2}$，但由于宇称不同而彼此正交。与 $\mathcal{S}_1^z$ 算符类似，我们也可以从有效哈密顿量中直接读出可能的 $\mathcal{S}_1^{\pm}$ 阶梯算符：

$$\mathcal{S}_1^{+} = h_{0\uparrow}^{\dagger}h_{1\downarrow} + h_{1\uparrow}^{\dagger}h_{0\downarrow}, \quad \mathcal{S}_1^{-} = \left(\mathcal{S}_1^{+}\right)^{\dagger}\ . \tag{116}$$

将这些阶梯算符作用于 $\mathcal{S}_1^z$ 的本征态上，可得

$$\mathcal{S}_1^{+}\,|\Downarrow\rangle_{1,\pm} = \pm\,|\Uparrow\rangle_{1,\pm}\,; \quad \mathcal{S}_1^{-}\,|\Uparrow\rangle_{1,\pm} = \pm\,|\Downarrow\rangle_{1,\pm}\,; \quad \mathcal{S}_1^{+}\,|\Uparrow\rangle_{1,\pm} = \mathcal{S}_1^{-}\,|\Downarrow\rangle_{1,\pm} = 0\ . \tag{117}$$

由此可以清楚地看出，态 $|\Uparrow\rangle_1^+$ 和 $|\Downarrow\rangle_1^+$ 构成一个自旋二分之一双重态，另一对态 $|\Uparrow\rangle_1^-$ 和$|\Downarrow\rangle_1^-$ 也是如此。我们可以定义仅作用于单个宇称子空间的新自旋算符：

$$\mathcal{S}^a_{1,\pm} = \pm\mathcal{S}^a\ \frac{1}{2}\left(1 \pm \mathcal{P}_{01}\right);\quad a = x, y, z\ . \tag{118}$$

算符 $_{1\,2}\,(1 \pm \mathcal{P}_{01})$ 投影到具有 ± 1 宇称的子空间。在记号 $\mathcal{S}^a_{1,\pm}$ 中，标签 $\pm$ 表示该算符所作用的宇称扇区，而 $\mathbf{1}$ 表示我们在 $\hat{}n_0 + \hat{}n_1 = 1$ 的子空间中进行操作。对应于不同宇称子空间的两个算符彼此对易，因为它们作用于互不相交的希尔伯特空间：$\left[\mathcal{S}^a_{+1}, \mathcal{S}^b_{-1}\right] = 0$。用这些投影后的自旋算符表示，我们得到通常的自旋二分之一 SU(2) 代数：

$$\begin{aligned}
&\mathcal{S}^z_{1,\pm}\,|\Uparrow\rangle_{1,\pm} = \frac{1}{2}\,|\Uparrow\rangle_{1,\pm};\quad \mathcal{S}^z_{1,\pm}\,|\Downarrow\rangle_{1,\pm} = -\frac{1}{2}\,|\Downarrow\rangle_{1,\pm};\\
&\mathcal{S}^+_{1,\pm}\,|\Downarrow\rangle_{1,\pm} = |\Uparrow\rangle_{1,\pm};\quad \mathcal{S}^-_{1,\pm}\,|\Uparrow\rangle_{1,\pm} = |\Downarrow\rangle_{1,\pm}.
\end{aligned} \tag{119}$$

现在可以用这些新的自旋算符来表示有效哈密顿量中涉及杂质的部分：

$$t\left(\vec{S}_d \cdot \vec{\mathcal{S}}_{-,1} - \vec{S}_d \cdot \vec{\mathcal{S}}_{+,1}\right);\quad \vec{\mathcal{S}}_\pm = \left(\mathcal{S}^x_\pm\ \ \mathcal{S}^y_\pm\ \ \mathcal{S}^z_\pm\right)\ . \tag{120}$$

现在可以将式（111）中的最后一项（其前因子为 $\frac{t}{4}$）-识别为宇称算符 $\mathcal{P}_{01}$，它在子空间 $\hat{}n_0 + \hat{}n_1 = 1$ 中作用，因为它的本征态为 $|\uparrow, 0\rangle \pm |0, \uparrow\rangle$ 和 $|\downarrow, 0\rangle \pm |0, \downarrow\rangle$，对应的本征值为 ± 1。于是，$N_{\rm tot} = 2$ 子空间中的完整有效哈密顿量可简洁地写为

$$\mathcal{H}^{2,0}_{\rm eff} = t\left(\vec{S}_d \cdot \vec{\mathcal{S}}_{1,-1} - \vec{S}_d \cdot \vec{\mathcal{S}}_{1,+}\right) + \frac{t}{4}\mathcal{P}_{01}P^{(1)}_{01}\ , \tag{121}$$

其中 $P_{(1)01} = P_{(1}{}_0 P^{(0)}_1 \pm P^{(0)}_0 P^{(1)}_{1)}$ 投影到 $\hat{}n_0 + \hat{}n_1 = 1$ 子空间。鉴于这些新的自旋算符，原本征态 $|\pm^{2,0}\rangle$ 可用这些涌现自旋 $|\Uparrow\rangle_{1,\pm}$ 和 $|\Downarrow\rangle_{1,\pm}$表示：

$$\begin{aligned}
|\pm^{2,0}\rangle &= \frac{1}{2}\left(|\uparrow,\downarrow,0\rangle - |\downarrow,\uparrow,0\rangle \pm |\uparrow,0,\downarrow\rangle \mp |\downarrow,0,\uparrow\rangle\right) = \frac{1}{2}\left[|\uparrow\rangle\left(|\downarrow,0\rangle \pm |0,\downarrow\rangle\right) - |\downarrow\rangle\left(|\uparrow,0\rangle \pm |0,\uparrow\rangle\right)\right]\\
&= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\uparrow\rangle\,|\Downarrow\rangle_{1,\pm} - |\downarrow\rangle\,|\Uparrow\rangle_{1,\pm}\right)\ .
\end{aligned} \tag{122}$$

因此，基态和激发态都是自旋单态，但它们分别属于负宇称扇区和正宇称扇区。

现在我们继续讨论 $N_{\rm tot} = 4$ 扇区，它等价于 $\alpha = 2$ 和 $\hat{}n_0 + \hat{}n_1 = 3$。由式（106）可知，$\alpha = 2$ 扇区的有效哈密顿量可由 $\alpha = 0$ 扇区的有效哈密顿量通过将空穴子替换为双占据子得到，$|0\rangle \to |2\rangle$。因此，只需进行上述空穴子—双占据子变换，即可直接使用 $N_{\rm tot} = 2$ 扇区的结果。相应地，$0 + 1$格点系统的复合上自旋和下自旋变为

$$|\Uparrow\rangle_{3,\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\uparrow, 2\rangle \pm |2, \uparrow\rangle\right),\quad |\Downarrow\rangle_{3,\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\downarrow, 2\rangle \pm |2, \downarrow\rangle\right)\ , \tag{123}$$

由此，我们可以为正、负宇称扇区定义自旋算符：

$$\mathcal{S}^z_\pm = \frac{1}{2}\left(|\Uparrow\rangle_{3,\pm} - |\Downarrow\rangle_{3,\pm}\right),\quad \mathcal{S}^+_\pm = |\Uparrow\rangle_{3,\pm}\langle\Downarrow|_{3,\pm}\ , \tag{124}$$

类似于式（113）和（116）中 $N_{\rm tot} = 2$ 扇区的定义。随后，这些定义使我们能够将$\tilde{}$有效哈密顿量改写为 $\mathcal{S}^z_\pm$ 的本征态形式，进而用自旋算符 $\mathcal{S}_{3,\ \pm}$表示。该扇区的本征态 $|\pm^{4,\ 0}\rangle$ 以及有效哈密顿量 $H^{4,\ 0}$ 效可写为

$$|\pm^{4,0}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\uparrow\rangle_d\,|\Downarrow\rangle_{3,\pm} - |\downarrow\rangle_d\,|\Uparrow\rangle_{3,\pm}\right)\ . \tag{125}$$

随后，有效哈密顿量可以用这些涌现自旋表示

$$\begin{aligned}
H^{4,0}_{\rm eff} = \frac{t}{2}\Big[&\left(|\uparrow\rangle_d\,|\Downarrow\rangle_{3,+} - |\downarrow\rangle_d\,|\Uparrow\rangle_{3,+}\right)\left(\langle\uparrow|_d\,\langle\Downarrow|_{3,+} - \langle\downarrow|_d\,\langle\Uparrow|_{3,+}\right)\\
&- \left(|\uparrow\rangle_d\,|\Downarrow\rangle_{3,-} - |\downarrow\rangle_d\,|\Uparrow\rangle_{3,-}\right)\left(\langle\uparrow|_d\,\langle\Downarrow|_{3,-} - \langle\downarrow|_d\,\langle\Uparrow|_{3,-}\right)\Big]\ .
\end{aligned} \tag{126}$$

通过替换 $\tilde{}$带有自旋算符的涌现自旋$\mathcal{S}_{3,\ \pm}$我们得到哈密顿量的最终形式 an

$$H^{4,0}_{\rm eff} = t\left(\vec{S}_d \cdot \vec{\mathcal{S}}_{3,-} - \vec{S}_d \cdot \vec{\mathcal{S}}_{3,+}\right) + \frac{t}{4}\mathcal{P}_{01}P^{(3)}_{01}\ , \tag{127}$$

其中 $\mathcal{P}_{01}$ 是方程（115）中定义的宇称变换算符，而 $P_{01}^{(3)}$ 投影到 $\hat{n}_0 + \hat{n}_1 = 3$子空间上。这就完成了 $S^z_{\rm tot} = 0$ 扇区的有效哈密顿量。

现在我们来讨论 $S^z_{\rm tot} = +1/2$ 扇区。根据式（106），该扇区的有效哈密顿量为

$$H_{\rm eff}^{3,\frac{1}{2}} = t\left[|{\rm SS}_\uparrow\rangle\langle{\rm LM}_-^{3,\frac{1}{2}}| + |{\rm LM}_-^{3,\frac{1}{2}}\rangle\langle{\rm SS}_\uparrow|\right] , \tag{128}$$

其中

$$|{\rm SS}_\uparrow\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(P_d^\uparrow c_{0\downarrow}^\dagger - P_d^\downarrow c_{0\uparrow}^\dagger\right)c_{1\uparrow}^\dagger|0\rangle ; \quad |{\rm LM}_-^{3,\frac{1}{2}}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}P_d^\uparrow\left(c_{0\uparrow}^\dagger c_{0\downarrow}^\dagger + c_{1\uparrow}^\dagger c_{1\downarrow}^\dagger\right)|0\rangle , \tag{129}$$

满足

$$|{\rm SS}_\uparrow\rangle\langle{\rm LAM}_-^{3,\frac{1}{2}}| = \frac{1}{2}\left(P_d^\uparrow c_{0\downarrow}^\dagger - P_d^\downarrow c_{0\uparrow}^\dagger\right)c_{1\uparrow}^\dagger\left(c_{0\downarrow}c_{0\uparrow} + c_{1\downarrow}c_{1\uparrow}\right)P_d^\uparrow \tag{130}$$

$$= -\frac{1}{2}\left[P_d^\uparrow\left(c_{1\uparrow}^\dagger c_{0\uparrow}\hat{n}_{0\downarrow} + c_{0\downarrow}^\dagger c_{1\downarrow}\hat{n}_{1\uparrow}\right) + S_d^-\left(c_{1\uparrow}^\dagger c_{0\downarrow}\hat{n}_{0\uparrow} - c_{0\uparrow}^\dagger c_{1\downarrow}\hat{n}_{1\uparrow}\right)\right] . \tag{131}$$

于是，完整的有效哈密顿量变为

$$\begin{aligned} H_{\rm eff}^{3,\frac{1}{2}} = & -\frac{t}{2}\Big[P_d^\uparrow\Big\{\left(c_{1\uparrow}^\dagger c_{0\uparrow} + c_{0\downarrow}^\dagger c_{1\downarrow}\right)\left(P_0^{(2)}P_1^{(0)} + P_0^{(0)}P_1^{(2)}\right) + \left(c_{0\uparrow}^\dagger c_{1\uparrow} + c_{1\downarrow}^\dagger c_{0\downarrow}\right)P_0^{(1)}P_1^{(1)}\Big\} \\ & + S_d^-\left(c_{1\uparrow}^\dagger c_{0\downarrow} - c_{0\uparrow}^\dagger c_{1\downarrow}\right)\left(P_0^{(2)}P_1^{(0)} + P_0^{(0)}P_1^{(2)}\right) + S_d^+\left(c_{0\downarrow}^\dagger c_{1\uparrow} - c_{1\downarrow}^\dagger c_{0\uparrow}\right)P_0^{(1)}P_1^{(1)}\Big] \\ = & \, t\left[P_d^\uparrow\sqrt{2}\mathcal{A}_{\frac{1}{2}}^z - \frac{1}{2}S_d^+\mathcal{B}_{\frac{1}{2}}^- - \frac{1}{2}S_d^-\mathcal{B}_{\frac{1}{2}}^+\right] , \end{aligned} \tag{132}$$

其中我们定义了

$$\mathcal{A}_{\frac{1}{2}}^z = -\frac{1}{2\sqrt{2}}\left[\left(c_{1\uparrow}^\dagger c_{0\uparrow} + c_{0\downarrow}^\dagger c_{1\downarrow}\right)\left(P_0^{(2)}P_1^{(0)} + P_0^{(0)}P_1^{(2)}\right) + \left(c_{0\uparrow}^\dagger c_{1\uparrow} + c_{1\downarrow}^\dagger c_{0\downarrow}\right)P_0^{(1)}P_1^{(1)}\right] , \tag{133}$$

and

$$\mathcal{B}_{\frac{1}{2}}^+ = \left(c_{1\uparrow}^\dagger c_{0\downarrow} - c_{0\uparrow}^\dagger c_{1\downarrow}\right)\left(P_0^{(2)}P_1^{(0)} + P_0^{(0)}P_1^{(2)}\right) ; \quad \mathcal{B}_{\frac{1}{2}}^- = \left(c_{0\downarrow}^\dagger c_{1\uparrow} - c_{1\downarrow}^\dagger c_{0\uparrow}\right)P_0^{(1)}P_1^{(1)} . \tag{134}$$

通过对哈密顿量施加变换，，可得到 $S^z_{\rm tot} = -1/2$ $P_d^\sigma \to$扇区的有效哈密顿量。这样做的依据是，对$S^z_{\rm tot} = 1/2$ 本征态施加相同的变换，可得到 $S^z_{\rm tot} = -1/2$ 本征态。 $P_d^{\bar{\sigma}}\ c_{i\sigma} \to c_{i\bar{\sigma}}$

$$H_{\rm eff}^{3,-\frac{1}{2}} = t\left[P_d^\uparrow\sqrt{2}\mathcal{A}_{-\frac{1}{2}}^z - \frac{1}{2}S_d^+\mathcal{B}_{-\frac{1}{2}}^- - \frac{1}{2}S_d^-\mathcal{B}_{-\frac{1}{2}}^+\right] . \tag{135}$$

算符 $\mathcal{A}_{-\frac{1}{2}}^z$ 和 $\mathcal{B}_{-\frac{1}{2}}^\pm$ 是对相应的 $S^z_{\rm tot} = +1/2$算符施加上述变换得到的。

8. 自能和双粒子关联中的非费米液体指数

通过将杂质模型映射为经典库仑气体，可以证明，杂质和零号位点对应的单粒子自能，以及一些相关的二粒子关联函数，在 r_{c2}处的Brinkman-Rice相变附近呈现幂律行为。这与Anderson、尤瓦尔和哈曼对近藤模型 [17] 的研究，以及Si和Kotliar对周期性安德森模型 [18]的研究类似。事实上，后者采用了一种与我们的扩展安德森杂质模型相似的辅助场。接下来，我们将他们的结果应用于我们的模型。这些非普适幂律是 r_{c2}处涌现的非费米液体激发的特征。

在 r_{c2} 附近，扩展单杂质安德森模型可约化为 $J - U_b$ 模型（见主文稿 V.A 小节）。由于势能 J 和 U_b 的存在，传导电子在杂质上发生散射时会产生相移。这些相移分别为 $\delta_{\rm sp} = \arctan(\pi\rho_0 J/2)$ 和 $\delta_{\rm ch} = \arctan(\pi\rho_0 U_b/2)$ [18, 19],，其中 ρ_0 是传导浴中的电子态密度。局域杂质与浴自能的低能行为可用这些相移表示 [18]:

$$\begin{aligned} & \Sigma_{dd}(\omega) \sim \omega^{\gamma_{dd}}, \ \ \Sigma_{d0}(\omega) \sim \omega^{\gamma_{d0}}, \ \ \Sigma_{00}(\omega) \sim \omega^{\gamma_{00}} , \\ & \gamma_{dd} = \frac{5}{4} - \left(\frac{\delta^*_{\rm tot}}{\pi}\right)^2 - \left(\frac{\delta^*_{\rm ch}}{\pi}\right)^2, \ \ \gamma_{d0} = 2\left[\left(\frac{\delta^*_{\rm ch}}{\pi}\right)^2 + \left(\frac{\delta^*_{\rm tot}}{\pi}\right)^2 - \frac{1}{4}\right], \\ & \gamma_{00} = \left(\frac{\delta^*_{\rm tot}}{\pi} - \frac{1}{2}\right)^2 + \left(\frac{\delta^*_{\rm ch}}{\pi}\right)^2 - 2 , \end{aligned} \tag{136}$$

其中我们定义了一个总相移参数 $\frac{\delta_{\rm tot}}{\pi} \equiv \frac{\delta_{\rm sp}+\delta_{\rm ch}}{\pi} - \frac{1}{2}$。这也可以推广到某些关联函数。杂质自旋翻转关联、杂质-浴激子关联以及零号格点配对关联 [18]:

$$\begin{aligned}
\left\langle S_d^+(\tau) S_d^-(0)\right\rangle &\sim \tau^{-\alpha_1} \quad &\Longrightarrow \quad \left\langle S_d^+\right\rangle(\omega) &\sim \omega^{(\alpha_1-1)/2}, \\
\left\langle (c_{d\uparrow}^\dagger c_{0\uparrow})(\tau)(c_{0\uparrow}^\dagger c_{d\uparrow})(0)\right\rangle &\sim \tau^{-\alpha_2} \quad &\Longrightarrow \quad \left\langle c_{d\uparrow}^\dagger c_{0\uparrow} c_{0\uparrow}^\dagger c_{d\uparrow}\right\rangle(\omega) &\sim \omega^{(\alpha_2-1)/2}, \\
\left\langle (c_{0\uparrow}^\dagger c_{0\downarrow}^\dagger)(\tau)(c_{0\downarrow} c_{0\uparrow})(0)\right\rangle &\sim \tau^{-\alpha_3} \quad &\Longrightarrow \quad \left\langle c_{0\uparrow}^\dagger c_{0\downarrow}^\dagger\right\rangle(\omega) &\sim \omega^{(\alpha_3-1)/2}\ ,
\end{aligned} \tag{137}$$

其中指数为

$$\alpha_1 = 2\left(1-\frac{\delta_{\rm sp}^*}{\pi}\right)^2, \alpha_2 = \left(\frac{\delta_{\rm tot}^*}{\pi}-\frac{1}{2}\right)^2 + \left(\frac{\delta_{\rm ch}^*}{\pi}\right)^2, \alpha_3 = \left(\frac{\delta_{\rm tot}^*}{\pi}+\frac{1}{2}\right)^2 + \left(1+\frac{\delta_{\rm ch}^*}{\pi}\right)^2\ . \tag{138}$$

9. 量子临界点处的纠缠熵、磁化和相移

如上一节所述，极化基态 $|-\rangle^{3,\ \pm\frac{1}{2}}$ （式105）是特殊的，因为它们同时包含强耦合基态和局域磁矩基态。因此，总体基态既包含纠缠的杂质贡献，也包含非纠缠的杂质贡献，因而偏离最大纠缠。现在，我们将计算恰好在量子临界点处出现的这些极化基态中的杂质纠缠熵 $S_{\rm EE}(d)$，并证明 $S_{\rm EE}(d)$ 具有分数值（以 log 2 为单位）。事实证明，这与杂质在这些态中仅被部分屏蔽有关，因此杂质磁化强度非零，但仅为局域磁矩相中磁化强度的一半。

分数熵源于费米面处无能隙激发的奇异散射，导致局域费米液体遭到破坏。为了研究这些过程，我们将使用超出零号位点的半连续传导浴（晶格位点总数为 $N\to\infty$）：$H_{\rm bath} = \sum_{k,\ \sigma} \epsilon(k)\psi_\sigma^\dagger(k)\psi_\sigma^\dagger(k)$。这个由超出零号位点的晶格位点的希尔伯特空间所形成的 k–态组成的传导浴，将被称为约化导电浴。这是在杂质和零号位点的哈密顿量之外的另一部分：$H_{d0} = J\vec{S}_d\cdot\vec{S}_0 - \frac{U_b}{2}\left(c_{0\uparrow}^\dagger c_{0\uparrow} - c_{0\downarrow}^\dagger c_{0\downarrow}\right)^2$，其中 $\vec{S}_d$ 是杂质位点的自旋算符，而 $c_{0\sigma}^\dagger$ 在零号位点创建一个自旋为 σ 的电子。完整的哈密顿量还包含一个将这两个哈密顿量耦合起来的单粒子跃迁项：$H = H_{d0} + H_{\rm bath} + H_{\rm int}$，其中

$$H_{\rm int} = -t\sum_\sigma\left(c_{0\sigma}^\dagger c_{1\sigma} + {\rm h.c.}\right) = -\frac{t}{N}\sum_{k,\sigma}\left[c_{0\sigma}^\dagger\psi_\sigma(k) + {\rm h.c.}\right]. \tag{139}$$

$c_{1\sigma}^\dagger = \frac{1}{N}\sum_k \psi_\sigma^\dagger(k)$ 是传导浴的第一位点的产生算符，该传导浴包含 N 个格点（但对于由 $H_{\rm bath}$ 定义的约化导电浴而言，它实际上是零号位点）。我们将在 t/J 中对 $H_{\rm int}$ 作微扰处理，以获得一组重整化后的 $g-$ 重简并基态 $\left\{|\psi_{\rm gs}^{(n)}\rangle;\ n=1,\ \ldots\ldots,\ g\right\}$。

如前所述，这里旨在计算非费米液体基态中的磁化和纠缠熵。对于一个简并子空间，其中 $S_{\rm tot}^z = \pm 1/2$，且 $S_{\rm tot}^z = S_d^z + S_0^z + S_1^z$ 是总自旋算符，我们的问题中必须在任意一个简并态中计算磁化 m_d^z。为此，我们在存在无穷小磁场项 $-hS_{\rm tot}^z$ 的情况下求解该问题；该项会解除简并并选出一个对称性破缺基态。这类似于 David Logan 提出的“双自能描述”，该方法通过施加正、负磁场 [20–22] 得到不同的自能，从而计算局域磁矩相／莫特绝缘相中的物理量。由于哈密顿量在 $S_{\rm tot}^z \to -S_{\rm tot}^z$ 下具有对称性，极限 $h=0^+$ 和 $h=0^-$ 对密度矩阵和纠缠熵给出相同的结果。我们将采用 $h=0^+$。由于总哈密顿量 H 和微扰 $H_{\rm int}$ 保持总自旋 $S_{\rm tot}^z = S_d^z + S_0^z + \int dk S_k^z$，因此只需求解 $S_{\rm tot}^z$ 取最大正值的扇区，因为正磁场$h=0^+$会选出这些态。

在没有 $H_{\rm int}$ 的情况下，具有正 $S_{\rm tot}^z$ 的基态集合最初将包含局域磁矩态 $|\uparrow\rangle_d|0\rangle_0|\phi\rangle$ 和 $|\uparrow\rangle_d|2\rangle_0|\phi\rangle$，其中 $|\phi\rangle$ 表示约化导电浴中填满的费米海，作为其无自旋基态。这些态具有 $S_{\rm tot}^z = 1/2$。我们可以将这些态标记为 $|n_{\rm tot},\ \mu_d^z\rangle$，其中使用粒子总数 $n_{\rm tot} = n_d + n_0 + n_{\rm bath}$（它也是守恒量，并且我们对集合 $|\phi\rangle$ 设定 $n_{\rm bath}=1$）和杂质态的平均磁化 μ_d^z：$|2,\ \frac{1}{2}\rangle \equiv |\uparrow\rangle_d|0\rangle_0|\phi\rangle$，$|4,\ \frac{1}{2}\rangle \equiv |\uparrow\rangle_d|2\rangle_0|\phi\rangle$。由于单态 $|SS\rangle_{d0}$（位于 d 和零号位点上）与局域磁矩态 $|\uparrow\rangle_d|0(2)\rangle_0$简并，因此可以通过在费米面处产生磁激发，构造具有 $S_{\rm tot}^z = 1/2$ 的其他态。我们正在研究这一事实

热力学极限大的浴（$N \to \infty$）意味着在费米面任意接近处都会存在无能隙激发。这类态的形式为 $|\mathrm{SS}\rangle_{d0}\,|e_\uparrow\rangle$（在 $|n_{\mathrm{tot}},\ \mu_d^z\rangle$ 记法中标记为 $|4,\ 0\rangle$）以及 $|\mathrm{SS}\rangle_{d0}\,|h_\downarrow\rangle$（标记为 $|2,\ 0\rangle$），其中 $|e_\sigma\rangle$ 和 $|h_\downarrow\rangle$ 分别为空穴态和电子态：

$$|e_\sigma\rangle = \sum_k^{\mathrm{FS}} \psi_\sigma^\dagger(k)\,|\phi\rangle\,, \quad |h_\sigma\rangle = \sum_k^{\mathrm{FS}} \psi_\sigma(k)\,|\phi\rangle\ . \tag{140}$$

求和遍历费米面上的 k–态。由于单态中 $\langle S_d^z\rangle$ 为零，因此在态符号中将单态的杂质位点自旋设为零。按粒子总数分类的全部相关简并基态为

$$n_{\mathrm{tot}} = 4 : |4,0\rangle\,, |4,\frac{1}{2}\rangle\,; \quad n_{\mathrm{tot}} = 2 : |2,0\rangle\,, |2,\frac{1}{2}\rangle\ . \tag{141}$$

在每个 2×2 区块内，相互作用矩阵 H_{int} 在方程（141）中各态构成的基底下具有如下形式（

$$(H_{\mathrm{int}})_{\mathrm{gs}}^{n_{\mathrm{tot}}=2} = \frac{t}{N} \times \begin{pmatrix} 0 & 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} & 0 \end{pmatrix} = -\,(H_{\mathrm{int}})_{\mathrm{gs}}^{n_{\mathrm{tot}}=4}\ , \tag{142}$$

于是很容易得到S_{tot}^z = $\pm\frac{1}{2}$基态，其形式为$|\psi_{\mathrm{gs}}\rangle^{(n_{\mathrm{tot}})}$ = $\frac{1}{\sqrt{2}}\big(|n_{\mathrm{tot}}\ 0\rangle - |n_{\mathrm{tot}}\ \frac{1}{2}\rangle\big)$。$n_{\mathrm{tot}} = 2$ 4, N ，，，& 与无关。两个基态都包含一个 $\mu_d^z = 1/2$ 态和一个 $\mu_d^z = 0$ 态的等权叠加，因此在任一重整化极化态中，杂质磁化强度的净值为

$$m_d^z = \frac{1}{2}\left(0 + \frac{1}{2}\right) = \frac{1}{4}\ . \tag{143}$$

现在可以立即得到极化态中杂质自旋的约化密度矩阵 $\rho_{\mathrm{imp}} = \mathrm{Tr}'\left(|\psi_{\mathrm{gs}}\rangle^{(n_{\mathrm{tot}})}\ {}_{(n_{\mathrm{tot}})}\langle\psi_{\mathrm{gs}}|\right)$（其中 Tr' 表示对除杂质态以外的所有态取部分迹）。它与 n_{tot} 无关，实际上恰好处于最大混合密度矩阵 $\rho_{\mathrm{MM}} = \frac{1}{2}I$和非纠缠密度矩阵 $\rho_{\mathrm{NE}} = \begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 0\end{pmatrix}$之间：

$$\rho_{\mathrm{imp}} = \begin{pmatrix} 3/4 & 0 \\ 0 & 1/4 \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\left(\rho_{\mathrm{MM}} + \rho_{\mathrm{NE}}\right), \quad S_{\mathrm{EE}}(d) = -\mathrm{Tr}\left(\rho_{\mathrm{imp}} \ln \rho_{\mathrm{imp}}\right) \simeq 0.81 \log 2\ . \tag{144}$$

这个以 log 2 为单位的熵分数值，是非费米液体的另一个特征。我们可以用杂质自由度的有效简并度 $\tilde{g}$ 来表示这一点。我们将有效简并度定义为$\tilde{g} = 1 + 2|m_d^z|$，这样便可恢复局域费米液体相中唯一的基态（其具有 $m_d^z = 0$, $\tilde{g} = 1$）以及局域磁矩相中的磁性双重态（其具有 $m_d^z = 1/2, \tilde{g} = 2$）。所提出的形式还使量子临界点处的非费米液体具有非整数的杂质简并度 $\tilde{g}^* = 3/2$。利用有效简并度 $\tilde{g}$，还可以写出一个一般的基态

$$|\psi_{\mathrm{gs}}(g)\rangle = \frac{1}{\sqrt{(2-\tilde{g})^2 + (\tilde{g}-1)^2}}\left[(2-\tilde{g})\,|n_{\mathrm{tot}},0\rangle - (\tilde{g}-1)\,|n_{\mathrm{tot}},1/2\rangle\right]\ , \tag{145}$$

该态在 $r < r_{c2}$（因此为 $\tilde{g} = 1$）的强耦合基态与 $r > r_{c2}$（因此为 $\tilde{g} = 2$）的弱耦合基态之间插值，同时也描述了两者之间的量子临界点（$\tilde{g} = 3/2$）。用 $\tilde{g}$ 表示时，纠缠熵的形式为

$$\rho_{\mathrm{imp}} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 2-\tilde{g} & 0 \\ 0 & \tilde{g} \end{pmatrix} = \frac{1}{2} + \begin{pmatrix} m_d^z & 0 \\ 0 & -m_d^z \end{pmatrix}, \tag{146}$$

$$S_{\mathrm{EE}}(d) = -\left(1 - \frac{\tilde{g}}{2}\right)\ln\left(1 - \frac{\tilde{g}}{2}\right) - \frac{\tilde{g}}{2}\ln\frac{\tilde{g}}{2}\ . \tag{147}$$

约化密度矩阵 ρ_{imp} 与杂质磁化强度 m_d^z 之间的关系，与 Kopp 等人得到的结果 [23]一致。

极化插值基态的一般形式 $|\psi_{\mathrm{gs}}(g)\rangle$ 也使我们能够计算杂质添加到导电浴费米面上的过剩电荷（n_{exc}）（通过无能隙激发）。由此便可将传导电子的散射相移（通过弗里德尔求和规则 [24–26] 得到）与杂质磁化强度 m_d^z 联系起来。根据态 $|n_{\mathrm{tot}},\ 0\rangle$ 和 $|n_{\mathrm{tot}},\ 1.2\rangle$ 的定义，我们注意到

前一个态包含一个杂质-浴单态，而后一个态包含一个解耦局域磁矩。由于其中的杂质-浴纠缠，单态对传导浴贡献一个单位的过剩电荷： $n_{\rm exc}^{\rm SS}=1$。局域磁矩态不贡献任何过剩电荷，因为在该态中，杂质自旋不再与浴杂化： $n_{\rm exc}^{\rm LM}=0$。综合这些结果，式（145）中的态贡献的净过剩电荷为

$$n_{\rm exc}=\frac{1}{(2-\tilde{g})^2+(\tilde{g}-1)^2}\left[(2-\tilde{g})^2 n_{\rm exc}^{\rm SS}+(\tilde{g}-1)^2 n_{\rm exc}^{\rm LM}\right]=\left[1+\left(\frac{2-\tilde{g}}{\tilde{g}-1}\right)^2\right]^{-1}. \tag{148}$$

在量子临界点，过剩电荷获得了 $1/2$ 的分数值，这再次表明，在相变处只有一半的杂质仍与浴耦合。弗里德尔求和规则可用于将这一过剩电荷与传导电子从杂质散射时所经历的相移 δ^* 联系起来，在不动点处有：

$$\delta^*=\pi n_{\rm exc}=\left[1+\left(\frac{2-\tilde{g}}{\tilde{g}-1}\right)^2\right]^{-1}=\frac{4m_d^{z\,2}}{1-4|m_d^z|+8m_d^{z\,2}}\,. \tag{149}$$

方程（149）统一描述了导致杂质受到挫折并破坏近藤效应的若干重要因素的影响。的存在将局域磁矩态引入谱中，并导致在量子临界点出现具有非零杂质磁化强度的态 m_d^z ；这一非零 m_d^z 可解释为有效杂质简并度 $\tilde{g}$ ，但它仅受到部分屏蔽，因此只有一半的过剩电荷 $n_{\rm exc}$ 由传导浴贡献。这种过剩电荷的减少相当于改变了传导电子所感受到的边界条件，并表现为小于幺正极限 π的相移。

10. 激发态量子相变和量子临界点附近的额外关联

我们在此补充了扩展单杂质安德森模型的一些关联，以突出主文稿中提到的特征。图（2）左图显示了杂质和零号位点的双占据。二者在 r_{c1}处均消失，表明近藤模型的出现。非常接近 r_{c2}时，零号位点的双占据态占据数上升（见插图），显示近藤云的瓦解。图（2）右图显示了 r_{c2}附近的各种纠缠度量。杂质-浴互信息（蓝色）随相变临近而降低，表明杂质屏蔽的失效。杂质与第一位点的互信息（紫色），零号位点

以及第一位点的互信息（红色），以及杂质、零号位点和第一位点的三方信息（灰色）均有所增加，表明相变附近出现了长程关联。图（3）展示了在 r_{c1} 和 r_{c2} 附近，浴内长程互信息的出现，分别表明激发态量子相变和量子临界点附近的临界行为。图（4）中的浴内电荷密度波关联和杂质-浴伊辛关联也显示出前文提及的长程关联的出现。

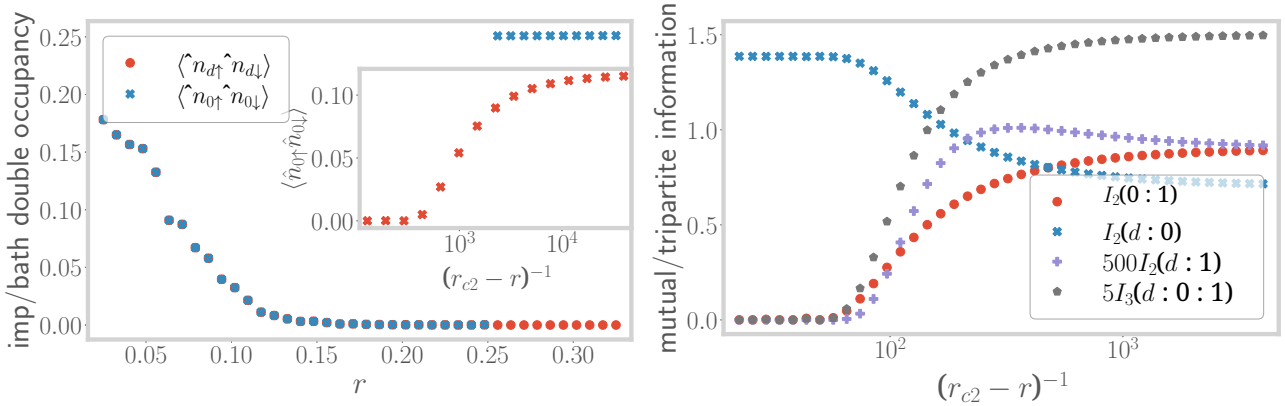

图2。左：杂质（红色）双占据随 r 的变化，以及零号位点基态双占据（蓝色）的变化。右：非常接近相变处各种量子信息论度量的变化。

参考文献

[1] Santanu Pal、Anirban Mukherjee 和 Siddhartha Lal。有限磁场下量子 kagome 反铁磁体中的关联自旋液体：重整化群分析。*New Journal of Physics*，21(2):023019，2019 年 2 月。

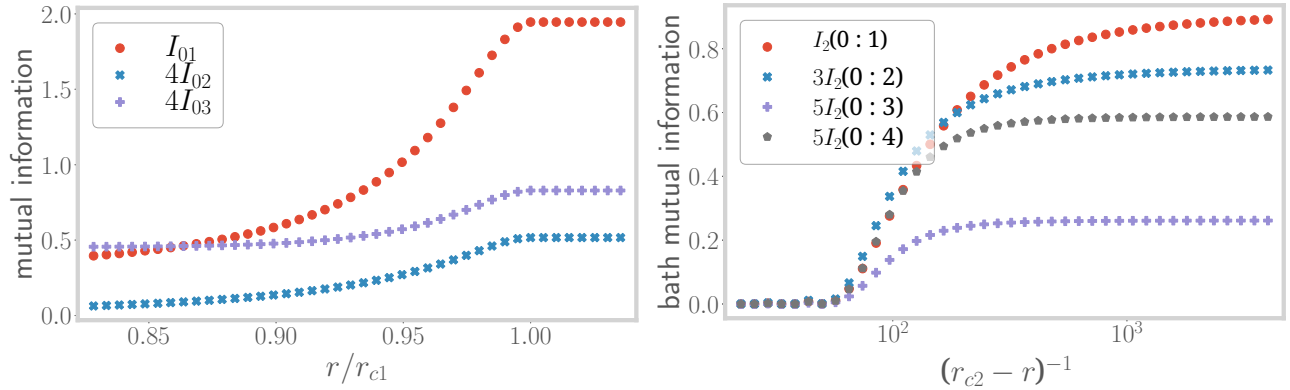

图3. 零号位点与位于其附近 r_{c1} （左）和r_{c2} （右）的1、2、3号位点之间浴内互信息的变化。

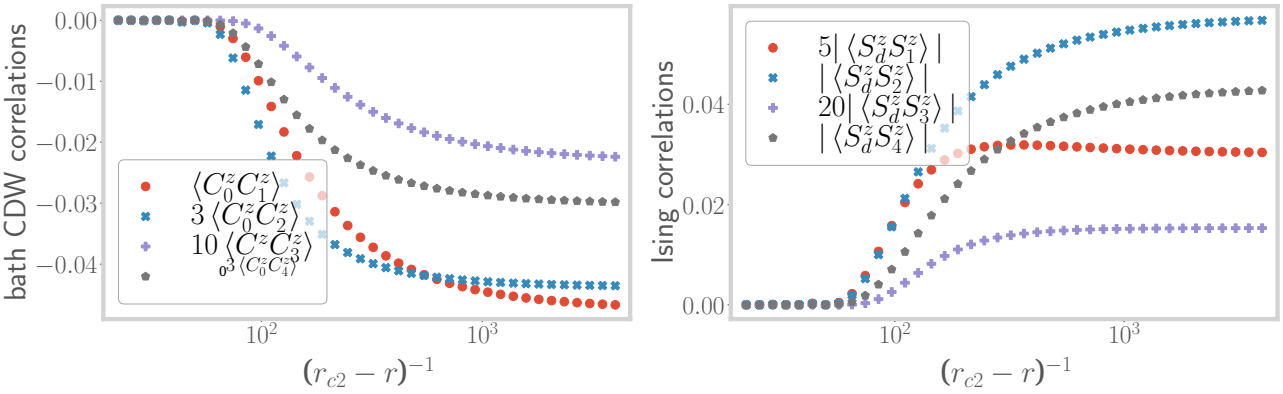

图4. 左：零号位点与链上更远处浴位点之间电荷同位旋伊辛关联的变化。右：杂质位点与零号位点以外浴位点之间的伊辛关联。两组关联均随 $r \to r_{c2}$整体增强。

[2] Anirban Mukherjee 和 Siddhartha Lal。莫特–哈伯德跃迁标度理论：I. t = 0 半填充哈伯德模型的相图。 *New Journal of Physics*, 22(6):063007, 2020 年 6 月。[3] Anirban Mukherjee 和 Siddhartha Lal。莫特–哈伯德跃迁标度理论-II：掺杂莫特绝缘体的量子临界性。 *New Journal of Physics*, 22(6):063008, 2020 年 6 月。[4] Anirban Mukherjee、Siddhartha Patra 和 Siddhartha Lal。费米子临界性由费米面拓扑塑造：汤川—卢廷格液体的案例研究。 *Journal of High Energy Physics*, 04:148, 2021。[5] Siddhartha Patra 和 Siddhartha Lal。库珀对绝缘体中拓扑序的起源。 *Phys. Rev. B*, 104:144514, 2021 年 10 月。[6] Anirban Mukherjee 和 Siddhartha Lal。掺杂二维电子哈伯德模型中由排斥作用产生的超导性：纠缠视角。 *J. Phys.: Condens. Matter*, 34:275601, 2022。[7] Anirban Mukherjee、Abhirup Mukherjee、N. S. Vidhyadhiraja、A. Taraphder 和 Siddhartha Lal。揭开近藤云：近藤模型的幺正重整化群研究。 *Phys. Rev. B*, 105:085119, 2022 年 2 月。[8] PW Anderson。近藤问题标度定律的简明推导。 *Journal of Physics C: Solid State Physics*, 3 12( ):2436, 1970。[9] Anirban Mukherjee 和 Siddhartha Lal。关联电子的全息幺正重整化群-I：张量网络方法。 *Nuclear Physics B*, 960:115170, 2020。[10] Abner Shimony。纠缠度。 *Annals of the New York Academy of Sciences*, 755(1):675–679, 1995。[11] Tzu-Chieh Wei 和 Paul M Goldbart。纠缠的几何度量及其在二分与多体量子态中的应用。 *Physical Review A*, 68(4):042307, 2003。[12] Ryszard Horodecki、Pawe l Horodecki、Micha l Horodecki 和 Karol Horodecki。量子纠缠。 *Reviews of modern physics* 81 2 865, 2009 , ( ): 。

[13] Samuel L Braunstein 和 Carlton M Caves。统计距离与量子态几何。 *Physical Review Letters*, 72 22 3439, 1994 ( ): 。[14] Philipp Hauke、Markus Heyl、Luca Tagliacozzo 和 Peter Zoller。通过动态磁化率测量多体纠缠。 *Nature Physics*, 12(8):778–782, 2016 年 8 月。[15] Goetz Moeller、Qimiao Si、Gabriel Kotliar、Marcelo Rozenberg 和 Daniel S. Fisher。哈伯德模型莫特转变附近的临界行为。 *Phys. Rev. Lett.*, 74:2082–2085, 1995 年 3 月。[16] K. Held、R. Peters 和 A. Toschi。强电子关联导致的拐点：简明理解。 *Phys. Rev.* : *Lett.* 110 246402, 2013

2020 年 6 月。[17] Philip W Anderson 和 Gideon Yuval。近藤问题中的精确结果：等价于经典一维库仑

《通过电荷涨落产生的近藤挫折：通向莫特局域化的途径》的补充材料 23

气体。 *Physical Review Letters*，23(2):89，1969。[18] Qimiao Si 和 Gabriel Kotliar。无限维扩展哈伯德模型的金属非费米液体相。 *Phys. Rev.* , : –13903，11月。[19] Thierry *B* 48 13881 1993 Giamarchi。 *Quantum physics in one dimension*。Clarendon Oxford，2004。[20] Matthew T Glossop 和 David E Logan。安德森模型的单粒子动力学：局域磁矩方法。 *Journal of Physics: Condensed Matter* 14 26 6737, 2002 , ( ): 6月。[21] David E. Logan、Adam P. Tucker 和 Martin R. Galpin。量子杂质物理中常见的非费米液体相。 *Phys.* , : 8月。[22] David E Logan 和 Martin R *Rev. B* 90 075150, 2014 Galpin。动力学平均场理论框架下莫特绝缘体与掺杂诱导的莫特转变：单带哈伯德模型的精确结果。 *Journal of Physics: Condensed Matter*，28(2):025601，2015年12月。[23] Angela Kopp、Xun Jia 和 Sudip Chakravarty。在量子相变中以冯·诺依曼熵取代能量。 *Annals of Physics* 322 6 1466 1476, 2007 , ( ): – 。[24] J. Friedel。关于金属固溶体的一些电学和磁学性质。 *Canadian Journal of Physics* 34 12 1190 1211, , (A): – 。[25] JS Langer 和 V Ambegaokar。相互作用电子系统的弗里德尔求和规则。 *Physical Review*，121(4):1090，1961。[26] David C. Langreth。关于局域杂质态的安德森模型的弗里德尔求和规则。 *Phys. Rev.*，150:516–518，1966年10月。 1956