arXiv:2305.02274v1 [cond-mat.str-el] 3 May 2023

# 基于量子蒙特卡罗计算的均匀电子气静态自能和有效质量

Markus Holzmann, [1] Francesco Calcavecchia, [1] David M. Ceperley, [2] 和 Valerio Olevano[3][1] *Univ. Grenoble Alpes, CNRS, LPMMC, 38000 Grenoble, France* [2] *University of Illinois Urbana-Champaign, Urbana, Illinois 61801, USA* [3] *CNRS, Institut Néel, 38042 Grenoble, France*（日期：2023年5月4日）

我们讨论基于静态自能 $\Sigma(k,\ 0)$ 计算有效质量的量子蒙特卡罗方法论。随后，我们使用变分蒙特卡罗计算，求得均匀电子气在各种密度下的 $\Sigma(k,\ 0)$，所得结果与密度参数 $1 \le r_s \le 10$ 对应的微扰 $G_0W_0$计算结果非常接近。得到的有效质量数值接近图示蒙特卡罗的结果，但与先前基于启发式映射、将激发能量映射到理想气体能量的量子蒙特卡罗计算结果不一致。

PACS 编号:

朗道费米液体理论 [1]为退简并费米子的平衡和输运性质提供了一种典范性的唯象描述框架，仅需少数几个特征参数。Silin [2]提出了推广该理论以适用于长程力的方法，从而将其拓展至凝聚态物质中的正常金属 [3, 4]。尽管基础微观理论的形式结构早已为人所知 [5–7], ，但费米液体参数的大多数显式计算仍依赖近似性的微扰方案 [8, 9]。由于图示微扰理论预计无法在典型电子密度下收敛，三维均匀电子气（均匀电子气模型）的基本费米液体参数，例如有效质量$m^*$ 和重整化因子 $Z$，都会受到所采用近似方法的影响 [10]。

近期，研究者对三维均匀电子气开展了变分图示蒙特卡洛计算（VDiagMC） [11, 12] ，以纳入并控制微扰级数的高阶项。这些计算与此前的量子蒙特卡罗计算（量子蒙特卡洛） [13]所得结果整体上较为一致 $Z$ 。然而，参考文献 [14]中的量子蒙特卡洛计算对 VDiagMC 关于 $m^*$ 的结果提出了强烈质疑，得出的数值与之存在显著差异。

本文重新审视了零温度下有效质量的量子蒙特卡洛（QMC）计算方法论，旨在解决 QMC 与微扰方法/VDiagMC 结果之间的差异，展示此类计算的具体实现方式，并为三维均匀电子气模型提供新的结果。原则上，也可以通过热力学量随温度的变化来计算有效质量 [15, 16], 例如，通过有限温路径积分结果 [17–19]; 本文不讨论有限温度方法。与具有短程相互作用的体系 [20], 不同，对于带电体系 [21] ，预计尺寸修正将发挥重要作用，具体原因将在下文详细解释。

朗道能量泛函。Landau [1]现象学-地描述了费米液体的低能激发，其假设理想费米气体的态与相互作用体系的态一一对应，因此，在绝热地开启相互作用之前，相互作用体系的元激发仍可用理想气体的占据数来描述。于是，总能量的变化 $\delta E$ 可以视为关于准粒子占据数变化 $\delta n_{p\sigma}$ 、动量 $p$ 和自旋量子数 $\sigma$ 的泛函

$$\delta E = \sum_{p\sigma} (\varepsilon_p + \mu)\delta n_{p\sigma} + \frac{1}{2V} \sum_{p\sigma,p'\sigma'} f(p\sigma, p'\sigma')\delta n_{p\sigma}\delta n_{p'\sigma'} \tag{1}$$

这里， $\mu$ 是化学势， $\varepsilon_p = (p - p_F)p_F/m^*$是准粒子能量，它决定了费米动量 $p_F$附近动量对应的有效质量； $f(p\sigma, p'\sigma')$是与体积无关的准粒子相互作用 $V$，在最低阶近似下成立。这里以及下文中，我们均假设体系是均匀的，且具有各向同性费米面。

朗道费米液体理论的成功始于其在强相互作用量子液体中的应用 [22]。通过假设熵泛函以准粒子占据数为变量，仅凭少数几个参数便可作出重要预测，其中尤为重要的是作为准粒子能量系数的有效质量$\varepsilon_p$。

费米液体行为源于对基本关联函数某些解析性质的假设 [7], ，尤其是假设存在费米面 [6]，它由零温下动量分布的突变定义 $Z$ ； 有效质量$m^*$ 则由谱函数中准粒子峰的色散关系得到。

因此，这两个量 $Z$ 和 $m^*$ 都可以通过单粒子格林函数进行操作性定义，该函数可方

便地用傅里叶空间表示,

$$G(k,z) = G^{+}(k,z) + G^{-}(k,z) \tag{2}$$

$$G^{\pm}(k,z) = \sum_{n} \frac{|\langle E_n^{N\pm1}|a_k^{\dagger}|E_0^N\rangle|^2}{z-(\pm(E_n^{N\pm1}-E_0^N)-\mu)} \tag{3}$$

其中， $|E_n^N\rangle$ 表示 $N$粒子系统中能量为 $E_n^N$的 $n^{th}$ 本征态。自能 $\Sigma$ 定义为

$$G^{-1}(k,z) = z+\mu-k^2/2m-\Sigma(k,z) \tag{4}$$

涵盖了相互作用的所有效应，其中 $m$ 是裸质量。费米面由$G^{-1}(k_F,0) = 0$，或 $\mu = k_F^2/2m+\Sigma(k_F,0)$确定。奇异性附近的解析结构决定了费米液体行为。在相当一般的假设下，无限系统的自能可以展开为 [7]

$$\Sigma(k,z)-\Sigma(k_F,0) = (k-k_F)\partial_k\Sigma(k_F,0)+z\partial_z\Sigma(k_F,0) \tag{5}$$

直到 $k^2$ 和 $z^2\log z$ 阶修正。于是，格林函数在费米面附近占主导地位的奇异性便是

$$G(k,z) \sim \frac{Z}{z-(k-k_F)k_F/m^*} \tag{6}$$

with

$$Z^{-1} = 1-\partial_z\Sigma(k_F,0) \tag{7}$$

$$\frac{m}{m^*} = Z\left(1+\frac{m}{k_F}\partial_k\Sigma(k_F,0)\right) \tag{8}$$

产生了强度为 $Z$、能量为 $(k-k_F)k_F/m^*$ 的明确定义的准粒子行为。由于 $G(k,0)$ 在 $k=k_F$ 处变号，费米面附近格林函数的奇异性完全包含在 $G^{+}(k,z)$ 或 $G^{-}(k,z)$ 中。实时间谱函数通过使用$z=i\omega+\eta_k$ 逼近实轴获得，其中 $\eta_k=+0\,(-0)$ 对于 $k>k_F(k<k_F)$。

因此，朗道能量泛函可被认定为单粒子传播子 [4, 6], 的准粒子能量，从而提供准粒子占据数 [4, 7]的微观表达式。由于明确需要了解准粒子能量，且其定义涉及能量本征态表象中的非对角矩阵元，这一定义纯属形式上的，在实践中用途不大。然而，这有力地表明，朗道准粒子占据数可能无法表示为一种简单的静态可观测量，其数值不能仅通过单个能量本征态确定。只有在极限$k\to k_F$下，准粒子能量才近似于精确的能量本征态，误差为寿命倒数 [7], 的量级，前提是先取热力学极限。

两者 $Z$ 和 $m^*$均可通过零温下的静态观测量获得。重整化常数 $Z$ 的值可由动量分布的跃变读出

动量分布 [13], , 而 $\Sigma(k,0)$ 则可通过对外部扰动 $\xi(a_k+a_k^{\dagger})$ 的静态响应获得，正如下文所示。两者结合起来可用于计算非常接近费米面的 $m^*$ 。

朗道费米液体理论成功地描述了热平衡或流体动力学输运可观测量 [22], , 即体性质。朗道能量泛函的形式（式（1））保证，其能量随准粒子占据数变化而产生的变化，在一阶近似下具有可加性，修正项来自一个很小的$\sim 1/V$成对相互作用。尽管在绝热微扰理论中，这些能量变化可以映射为未扰动理想气体传播子的变化 [7], , 但通常无法将其映射为相互作用体系的精确激发能量本征态。

微观理论将它们映射为单粒子准粒子谱，其特征是在趋近实轴时，精确的相互作用传播子（式（6））中出现的极点， $z=i\omega+\eta_k$ with$\eta_k\to\pm 0$。然而，对于任何有限系统，精确的格林函数（式（2））在实轴上都是高度不规则的函数；只有在距实轴有限距离处，才可期待其平滑， $|\eta_k|\gtrapprox k_F 2\pi/(mL)$。相反，有效质量公式（式（8））只涉及带有 $z=0$ 的静态量，这些量在实轴上定义良好，即使尚未取热力学极限也是如此。其计算仍可能受到显著有限尺寸效应的影响， [21], 但数值外推最终会收敛到无限系统尺寸下的数值。

考虑广义哈密顿量$\hat{K}=\hat{H}-\mu\hat{N}$，外部微扰 $\xi(a_k+a_k^{\dagger})$ 将 $N$ 粒子系统的基态与包含 $N\pm1$ 个粒子的激发态耦合。从定态微扰理论出发，将状态限制在 $N$ 个粒子和 $N+1$ 个粒子的子空间 $|E^{+}\rangle$ 内，扰动后基态在 $\xi$ 的线性阶近似下可写为

$$|E_k^{+}(\xi)\rangle = |E_0^N\rangle - \xi\sum_n \frac{|E_n^{N+1}\rangle\langle E_n^{N+1}|a_k^{\dagger}|E_0^N\rangle}{E_n^{N+1}-E_0^N-\mu} \tag{9}$$

从而得到关于 $\xi$ 的二阶能量:

$$E_k^{+}(\xi) = E_0^N+\mu-\xi^2\sum_n \frac{|\langle E_n^{N+1}|a_k^{\dagger}|E_0^N\rangle|^2}{E_n^{N+1}-E_0^N-\mu}. \tag{10}$$

类似地， $E_k^{-}$ 是受扰动哈密顿量在 $N$ 和 $N-1$ 子空间内的基态。通过与 Lehmann 表示式（公式（2））进行比较，可以确定格林函数。

$$G^{\pm}(k,0) = \lim_{\xi\to 0}\left[\pm(E_k^{\pm}(\xi)-E_0^N)-\mu\right]/\xi^2. \tag{11}$$

基态能量 $E_k^{\pm}$ 的上界可通过对 $|E_k^{\pm}\rangle$ 采用变分试探函数，并使微扰哈密顿量的期望值关于变分参数取极小值来获得。尽管

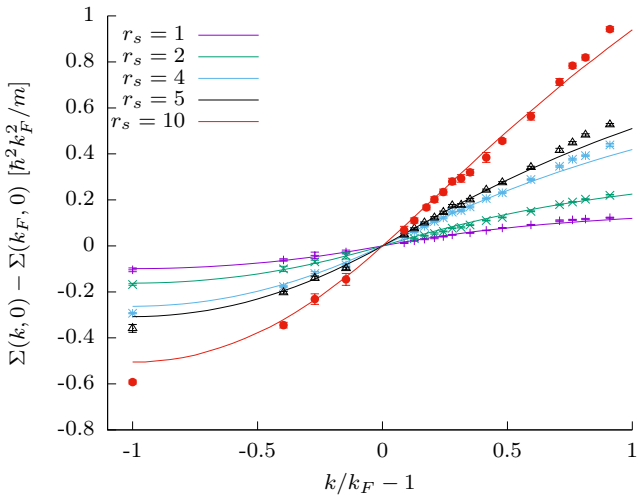


图 1：采用回流（BF）试探波函数和 GC-TABC 模拟计算的不同密度（$r_s$）下的静态自能，针对 $N = 38$ 个电子。结果包含尺寸修正。彩色曲线来自 $G_0W_0$ 计算。

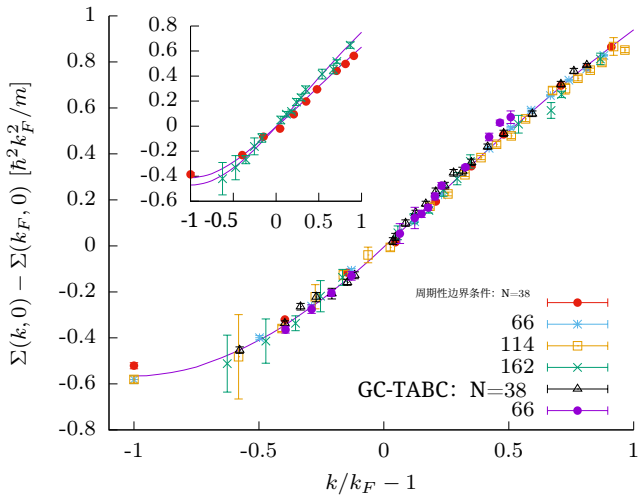


图 2：对于 $r_s = 10$，使用 SJ-VMC 试探波函数计算的静态自能。模拟采用周期性边界条件（PBC）和 GC-TABC，系统尺寸从 $N = 38$ 到 $N = 162$ 不等，并依据公式（17）进行尺寸修正；实线为对数据的拟合。插图显示了 $N = 38$ 和 $N = 162$（PBC）的未修正值，线条表示依据公式（17）拟合得到的尺寸修正。

从技术上说虽然稍微复杂一些，但静态格林函数的计算因此可归结为静态响应函数的计算，类似于此前采用基态蒙特卡罗方法进行的密度响应 [23] 计算。

量子蒙特卡罗计算。现在我们转向通过量子蒙特卡罗方法计算静态单粒子格林函数，重点关注$G^+(k,\ 0)$。为此，我们在 $N$和 $N+1$ 粒子波函数构成的福克空间中，使用试探波函数$|\Psi_T(\xi)\rangle$，对~广义哈密顿量 $H$ 的能量 $E_T^+$ (ξ)进行最小化，从而得到 $E_k^+$ (ξ)的上界。

假设 $\xi$ 足够小，试探波函数可以展开为

$$|\Psi_T(\xi)\rangle = |\Psi_0^N\rangle + \xi \sum_{i=1}^{M} \alpha_i |\Psi_i^{N+1}\rangle \qquad (12)$$

其中 $M$ 是基底中的态数。它将 $N$ 粒子系统的基态波函数 $|\Psi_0^N\rangle$（或我们目前最佳的变分基态波函数）与具有不同波函数 $|\Psi_i^{N+1}\rangle$ 的 $N+1$粒子态耦合起来，这些态的总动量对应于 $k$。变分参数为集合 $\{\alpha_i\}$。一种最简选择是令 $M = 2$，并取 $|\Psi_1^{N+1}\rangle$ 作为纯激发态波函数的候选者；在动量为 $k$的$N+1$ 部分中分别将激发态能量 $E_k^{N+1}$ 最小化，并令 $|\Psi_2^{N+1}\rangle \sim a_k^\dagger|\Psi_0^N\rangle$；这应能最大化微扰与基态之间的重叠矩阵元。

在 $\alpha_1, \alpha_2$ 趋于 $\xi \to 0$的极限下进行最小化，我们得到格林函数的一个变分近似。

粒子激发扇区中的函数

$$G_\mu^+(k,0) = -\frac{\zeta_1^2\varepsilon_{22} - 2\zeta_1\zeta_2\varepsilon_{12} + \zeta_2^2\varepsilon_{11}}{\varepsilon_{11}\varepsilon_{22} - \varepsilon_{12}^2} \qquad (13)$$

$$\text{with} \quad \varepsilon_{ij} = \langle\Psi_i^{N+1}|H_{N+1} - E_0^N - \mu|\Psi_j^{N+1}\rangle \qquad (14)$$

$$\zeta_i = \langle\Psi_i^{N+1}|a_k^\dagger|\Psi_0^N\rangle \qquad (15)$$

这里我们假设波函数已归一化，例如 $\langle\Psi_i^{N\pm1}|\Psi_i^{\pm}\rangle = 1$，且整体相位选取使得所有矩阵元均为实数。

在空穴扇区进行类似计算，可得 $G_\mu^-$(k,0)。这是基于空穴激发最低能态与 $a_k|\Psi_0^N\rangle$ 的叠加所进行的变分计算。因此，静态格林函数 $G_\mu(k,0) = G_\mu^+(k,0) + G_\mu^-(k,0)$ 得以确定。

到目前为止，作为参数代入 $G_\mu^\pm$ 的化学势 $\mu$ 尚未被指定。由于费米液体中的单粒子激发是无能隙的，化学势可以通过隐式方程 $\lim_{k\to k_F} G_\mu^{-1}(k,\ 0) = 0$ 确定。

有限尺寸效应。我们的量子蒙特卡罗计算针对有限数量的电子 $N$进行，这些电子被限制在边长为 $L$、体积为 $V = L^3$的周期性立方体中。必须将计算结果外推到热力学极限。单粒子能谱中的壳层效应和库仑相互作用是有限尺寸效应的主要来源 [24]。

通过扭转边界条件可以消除壳层效应 [25]，这相当于在动量空间中进行网格平移计算。采用巨正则系综扭转平均（GC-TABC）[26]，我们得到了清晰的费米面。我们

对任意 $k$ 进行球面平均 $G_\mu^{\pm}(k,\ 0)$，使用32个权重相等的点，这些点能够对球面上直至八阶的所有多项式进行精确积分 [27, 28]。

尽管 GC-TABC 使我们能够针对任意 $k$ 获得 $G_\mu^{\pm}(k,\ 0)$，但由内禀二体效应引起的尺寸效应仍然存在。在带电体系中，这些效应主要由长程库仑相互作用 [29] 主导。具体而言，预计 $z_k$ 和 $n_k$ 会受到显著的尺寸效应影响 [13]，其量级为 $1/L$。我们不直接处理这些效应，因为这需要全面考察它们随 $L$ 和 $k$ 的变化；取而代之的是，我们将基于费米液体理论进行图示分析，以确定修正项的精确主导阶形式 [7]。按照文献 [21],，在随机相位近似下，$\delta\Sigma(k,\ 0) = \Sigma_\infty(k,\ 0) - \Sigma_N(k,\ 0)$ 可表示为

$$\delta\Sigma(k,0) \simeq -\int_{-\pi/L}^{\pi/L} \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\nu}{(2\pi)} \frac{v_q}{\epsilon(q,i\nu)} \frac{1}{i\nu + \mu - \varepsilon^0_{k+q}} \tag{16}$$

其中 $v_q = 4\pi e^2/q^2$ 是库仑相互作用，$\varepsilon_k = \hbar^2k^2/2m$，积分区域限制为一个立方体，其中任意空间分量 ($\alpha = x,\ y,\ z$) 均满足$|q_\alpha| < \pi/L$。由于这一限制，我们可以对介电函数使用表达式 $\epsilon(q,\ \omega) \simeq 1 - \omega_p^2/\omega$，其中 $\omega_p$ 是等离子体频率。由于积分的主要贡献来自 $\omega = i\nu$ 的有限取值，用介电函数的这一极限形式替代，可以准确描述 $q$ 趋于零时的行为。由此得到的积分为

$$\delta\Sigma(k,0) = C\frac{\varepsilon^0_k - \mu}{\omega_p + |\varepsilon^0_k - \mu|} \tag{17}$$

其中 $C \simeq 1.22\, e^2/L$。可以证明，若将 $\varepsilon^0_k - \mu$ 替换为精确的单粒子能量（$k - k_F$）$k_F/m^*$，则式（17）不仅在随机相位近似范围内成立，而且是严格精确的。这是因为，在频率固定而动量转移趋于零的极限下，不可约顶角修正趋于 $1/Z$ [7]，并且恰好与精确传播子的准粒子权重相抵消；在随机相位近似表达式中，精确传播子取代了非相互作用传播子。

结果与讨论。我们基于解析的 Slater-Jastrow（SJ）和 Slater-Jastrow 回流（BF）波函数 [30]，对三维均匀电子气进行了变分蒙特卡罗（VMC）计算，这些波函数曾用于先前一项关于重整化因子 [13] 的研究。其密度 $n$ 由 $r_s \equiv a/a_B$ 参数化，其中 $a_B$ 为玻尔半径，$a = (4\pi n/3)^{-1/3}$ 为平均电子间距。VMC 计算过程的详细信息见补充材料。

在图 2 中，我们说明了 $r_s = 10$ 处尺寸效应的重要性，比较了使用 SJ 波函数、系统尺寸从 $N = 38$ 到 114 且采用周期性边界条件（PBC）的正则模拟。尽管裸曲线似乎表明随尺寸变化只有很小的差异，但基于解析方法的尺寸校正曲线示意了-

| $r_s$ | 方法 | $Z$ | $mk_F^{-1}\partial_k\Sigma$ | $m^*/m$ |
|---|---|---|---|---|
| 1 | BF-VMC | 0.86(1) [13] | $0.17^{0.18}_{0.15}$(1) | $1.00^{1.01}_{0.99}$(1) |
| | SJ-VMC | 0.894(9) [13] | $0.17^{0.18}_{0.15}$(1) | $0.96^{0.97}_{0.95}$(1) |
| | $G_0W_0$ (随机相位近似) | 0.859 [31] | 0.200 | 0.970 [10] |
| | VDiagMC [12] | 0.8725(2) | 0.200(1) | 0.955(1) |
| 2 | BF-VMC | 0.78(1) | $0.309^{0.361}_{0.280}$(6) | $0.98^{1.00}_{0.94}$(1) |
| | SJ-VMC | 0。82(1) | $0.30^{0.31}_{0.28}$(2) | $0.94^{0.95}_{0.93}$(2) |
| | $G_0W_0$ (随机相位近似) | 0.768 [31] | 0.313 | 0.992 [10] |
| | VDiagMC [12] | 0.7984(2) | 0。328(4) | 0.943(3) |
| 4 | 回流-VMC | 0.65(1) | $0.538^{0.549}_{0.530}$(7) | $1.00^{1.01}_{0.99}$(2) |
| | SJ-VMC | 0.69(1) | $0.55_{0.45}$(2) | $0.94^{1.00}$(2) |
| | $G_0W_0$ (随机相位近似) | 0.646 [31] | 0.490 | 1.039 [10] |
| | VDiagMC [12] | 0.6571(2) | 0.528(5) | 0.996(3) |
| 5 | BF-VMC | 0.59(1) | $0.56^{0.65}$(1) | $1.09_{1.03}$(3) |
| | SJ-VMC | 0.61(1) | $0.610^{0.624}_{0.596}$(9) | $1.02^{1.03}_{1.01}$(2) |
| | $G_0W_0$ (随机相位近似) | 0.602 [31] | 0.569 | 1.059 [10] |
| 10 | BF-VMC | 0.41(1) | $0.90^{0.98}_{0.88}$(2) | $1.28^{1.30}_{1.23}$(3) |
| | SJ-VMC | 0.45(1) | $0.97^{1.03}_{0.91}$(3) | $1.13^{1.16}_{1.09}$(3) |
| | $G_0W_0$ (随机相位近似) | 0.45 [31] | 0.98 | 1.13 |

表 I：我们采用回流（BF）和 Slater-Jastrow（SJ）试探函数得到的量子蒙特卡洛结果，并与 $G_0W_0$（随机相位近似）及变分图示蒙特卡罗（VDi-agMC） [12, 32, 33]的结果进行比较。上标和下标表示采用不同拟合函数/范围确定 $\partial_k\Sigma$（$k_F, 0$）时的系统误差。

上述公式表明，对于如此小的系统，裸曲线距离达到热力学极限仍相差甚远。由于修正项衰减缓慢，我们没有尝试对这些曲线进行数值外推。对于较小的 $r_s$，外推更加困难，因为变化被较大的随机误差所掩盖。

图（1）中，我们将采用正则系综扭转平均进行 BF-VMC 计算并经尺寸校正后的结果，与微扰 $G_0W_0$ 结果进行了比较。尽管$r_s = 10$ 被认为远远超出微扰方法的适用范围，但我们的量子蒙特卡洛结果表明，在整个 $r_s \leq 10$范围内，修正幅度都很小；图中几乎看不出差异。

与$Z$相比，对$\partial_k\Sigma(k_F, 0)$的微扰计算似乎对基础近似方案的依赖性要小得多，例如自洽性和顶角修正 [34, 35]。我们不认为QMC与 $G_0W_0$ 之间静态自能的定量一致性是偶然误差抵消的结果。

为了推导有效质量，我们拟合了 $\Sigma(k,\ 0)$ 在 $k_F$ 附近的量子蒙特卡洛结果，以获得$\partial_k\Sigma(k_F,\ 0)$。表 I 汇总了基于尺寸修正后的 GC-TABC 计算、采用 $N = 66$ SJ 和 $N = 54$ 回流波函数得到的结果。我们看到，$Z$ 的下降与 $\partial_k\Sigma(k_F,\ 0)$的上升相互竞争，

因此 $m^*/m$ 的值非常接近 1。然而，由于即使在 $r_s = 10$时， $mk_F^{-1}\partial_k\Sigma(k_F,\ 0)$仍小于 1，随着 $r_s$ 增加， $Z$ 的降低最终会对有效质量起主导作用，并且对于 $r_s \gtrsim 4$， $m^*$ 会明显增大。

与 $Z$ 类似，从 SJ 试探函数改用更精确的 BF 试探函数，会使 $k_F,\ 0$ 处的 $\partial_k\Sigma$ 降低少许，降幅略大于我们的统计分辨率。这粗略估计了试探波函数带来的偏差。由于我们采用变分方法，预期结果是 $\partial_k\Sigma$ 的上界。此外，关联性更强的波函数往往会降低 $Z$ [13, 36] 的数值，因此我们得到的 $m^*$ 很可能是下界。未来基于迭代回流和机器学习波函数的研究 [36–38] 可用于进一步减小波函数偏差。

我们的结果与微扰 $G_0W_0$ 计算 [10, 31] 以及近期包含高阶图的变分图示蒙特卡洛计算 [12, 32] 相当吻合。它们与先前关于 $m^*$ 的量子蒙特卡洛计算 [14] 存在差异；后者基于将激发能映射到理想气体的启发式方法，而非单粒子格林函数的性质。正如我们上文所述，利用朗道能量泛函根据有限系统的激发谱确定费米液体参数，存在严重问题。补充材料中进一步详细比较了这些结果。

两种在方法和数值上均不同的方法——实空间量子蒙特卡洛和VDiagMC——之间的定量一致性非常令人鼓舞。与高精度测量结果的比较（正如对固态钠 [39]和锂 [40, 41] 的重整化因子 $Z$所进行的比较）现在可以扩展到带宽和有效质量。

作者感谢格勒诺布尔纳米科学基金会提供的支持。扩散蒙特卡罗由美国能源部 CMS 计划（DE-SC0020177）提供支持。M.H. 感谢 Saverio Moroni 的许多宝贵讨论。计算使用了由格勒诺布尔科研界支持的 GRICAD 基础设施，以及 GENCI-IDRIS 的高性能计算资源（A0140914158）。

## 补充材料

在本补充材料中，我们详细介绍 VMC 计算、自能的提取方法以及误差的估算方法。随后，我们在表 S.2 中给出不同模拟胞尺寸下的数据。最后，我们计算激发能对应的有效带质量，并与近期的一项计算结果进行比较。

### 变分蒙特卡罗模拟

我们采用 Γ点和巨正则系综扭转平均边界条件（GC-TABC），对包含 $N = 38$ 至$N = 162$ 个电子的系统进行了变分量子蒙特卡罗模拟。在这些计算中，我们使用了 Slater-Jastrow（SJ）和 Slater-Jastrow-Backflow（BF）试探波函数，并采用解析形式的 Jastrow 势和回流势；相关细节见文献 [30]，该文针对三维均匀电子气模型，并在此前关于动量分布 [13] 和有效质量公式中所用重整化因子 $Z$ 的计算中采用了这些形式。

*Wave function structure*

基态的一个 SJ/回流波函数是

$$\Psi_0^N = D_k^N e^{-U_N} \tag{S.18}$$

with

$$D^N = \det_{qn} \varphi_q(r_n) \tag{S.19}$$

$$\varphi_q(r) = e^{iq\cdot r} \tag{S.20}$$

其中， $q$ 包含最低的 $|q|$ 个波矢 $N$ （此处及下文中，我们不明确考虑顺磁系统的自旋结构；在该系统中，行列式可进一步化为两个行列式的乘积，每个自旋对应一个），而 $U_N$ 表示对称的成对关联因子

$$U_N = \sum_{i<j} u(r_i - r_j) \tag{S.21}$$

对于 SJ 波函数，轨道 $\varphi_q(\cdot)$ 的自变量是裸电子坐标；而在回流波函数中，这些坐标会被多体关联因子 [30] 平移。

随后，我们基于$N$粒子基态的 SJ（回流）基态波函数 $\Psi_0^N$，以及 $M = 2$ 个非正交态 $\Psi_1^{N\pm1}$和 $\Psi_2^{N\pm1}$，构造出扰动后的波函数，即式（12）。为描述动量为 $k$ 的扰动， $\Psi_{1/2}^{N\pm1}$ 描述的波函数本质上是在 $N$粒子基态中加入或移除一个波矢为 $k$ 的平面波轨道。 $\Psi_1^{N\pm1}$与 $\Psi_2^{N\pm1}$之间的关联程度有所不同。下文将详细描述这两种波函数。

首先讨论 $\Psi_1^{N\pm1}$，它的选取旨在为相对于基态具有动量 $\pm k$ 的 $N\pm1$ 粒子能态提供一个良好的试探波函数。对于 $\Psi_1^{N\pm1}$，我们采用了将基态波函数扩展到关联激发态的最简单方式，

该态近似描述了 $N \pm 1$ 粒子扇区中动量为 $\pm k$ 的精确本征态

$$\Psi_1^{N\pm1} = D_k^{N\pm1} e^{-U_{N\pm1}} \tag{S.22}$$

对于粒子激发（$\Psi_1^{N+1}$），斯莱特行列式 $D^{N+1}$ 的轨道除了包含基态中占据的所有波矢外，现在还包含 $k$；而对于空穴激发（$\Psi_1^{N-1}$），波矢为 $k$ 的轨道则被移除。此外，$U_{N\pm1}$ 表示对称的成对关联势

$$U_{N\pm1} = \sum_{i<j} u(r_i - r_j) \tag{S.23}$$

它由基态中使用的同一 Jastrow 势 $u(\cdot)$ 构造而成，求和遍及所有 $N(N\pm1)/2$ 粒子对。

与 $\Psi_1^{N\pm1}$ 不同，我们在其中采用了一种直接的方法来寻找总能量的最小值，

$$E_{11}^{N\pm1} \equiv \frac{\langle \Psi_1^{N\pm1} | H_{N\pm1} | \Psi_1^{N\pm1} \rangle}{\langle \Psi_1^{N\pm1} | \Psi_1^{N\pm1} \rangle} \tag{S.24}$$

$\Psi_2^{N\pm1}$ 的选择旨在使其与作用于基态的微扰 $a_k^\dagger|\Psi_0^N\rangle$ 的重叠最大。因此，自然的候选态是在粒子激发的情况下直接采用态 $|\Psi_2^{N+1}\rangle \propto a_k^\dagger|\Psi_0^N\rangle$，而在空穴激发的情况下采用 $|\Psi_2^{N-1}\rangle \propto a_k|\Psi_0^N\rangle$。

在坐标表象中，未归一化的空穴态 $\Psi_2^{N-1}$可写为

$$\Psi_2^{N-1}(\mathbf{R}_{N-1}) = \int d\mathbf{r}_n e^{-ik\cdot r_N} \Psi_0^N(\mathbf{R}_N) \tag{S.25}$$

其中 $\mathbf{R}_N = (\mathbf{r}_1、\ldots\ldots、\mathbf{r}_N)$。

实际上，我们对权重 $|\Psi_1^{N-1}(\mathbf{R}_{N-1})|^2$进行 VMC 计算，而包含 $\Psi_0^N(\mathbf{R}_N)$ 和 $\Psi_2^{N-1}(\mathbf{R}_{N-1})$ 的矩阵元/期望值，则可通过引入关于 $\mathbf{r}_N$ 的额外积分并进行重加权来获得。

在粒子激发部分，对于 SJ 波函数，$\Psi_2^{N+1}$，我们可以在坐标表象中明确写出 $|\Psi_2^{N+1}\rangle \propto a_k^\dagger|\Psi_0^N\rangle$

$$\Psi_2^{N+1}(\mathbf{R}_{N+1}) = \sum_n \frac{\delta D_k^{N+1}}{\delta \varphi_k(\mathbf{r}_n)} \varphi_k(\mathbf{r}_n) e^{-U_N^n(\mathbf{R}_{N+1})} \tag{S.26}$$

其中

$$U_N^n(\mathbf{R}_{N+1}) \equiv \sum_{i<j, i,j\neq n} u(r_i - r_j) = U_{N+1}(\mathbf{R}_{N+1}) - \widetilde{u}(r_n) \tag{S.27}$$

$$\widetilde{u}(r) = \sum_{i=1}^{N+1} u(r_i - r) - u(0) \tag{S.28}$$

并且我们可以写成

$$\Psi_2^{N+1}(\mathbf{R}_{N+1}) = \sum_n \frac{\delta D_k^{N+1}}{\delta \varphi_k(\mathbf{r}_n)} \varphi_k(\mathbf{r}_n) e^{\widetilde{u}(r_n)} e^{-U_{N+1}(\mathbf{R}_{N+1})} \tag{S.29}$$

将轨道 $k$ 表示为 $\widetilde{\varphi}_k(r) = \varphi_k(r)\exp[\widetilde{u}(r)]$，我们可以将波函数写成一个行列式乘以一个对称关联函数的形式

$$\Psi_2^{N+1}(\mathbf{R}_{N+1}) = \det_{qn} \widetilde{\varphi}_q(r_n) e^{-U_{N+1}(\mathbf{R}_{N+1})} \tag{S.30}$$

对于 $q \neq k$，有 $\widetilde{\varphi}_q(r) = \varphi_q(r)$。局域能所需的行列式导数可以类似地通过回流 [42, 43] 计算。

对于 BF，我们采用了式 (S.30)，并将裸坐标替换为回流坐标，其构造方式与 $N+1$ 粒子情形完全相同。尽管该波函数并不严格正比于 $a_k^\dagger|\Psi_0^N\rangle$，但我们预计不会有显著差异；例如，我们已确认 $|\langle\Psi_2^{N+1}|a_k^\dagger|\Psi_0^N\rangle|^2$ 与 $\langle\Psi_0|aa_k^\dagger|\Psi_0^N\rangle = 1 - n_k$ 在随机误差范围内一致。

## GC-TABC

在 GC-TABC 过程中，[24, 26, 44] 模拟盒的体积由 $V = N/n$ 确定，其中 $n$ 为电子密度。每次模拟都由一个扭转矢量表征；当电子从超胞一侧离开并从另一侧重新进入时，试探函数会获得一个相位。对于给定的扭转矢量，我们的波函数的斯莱特行列式由所有满足 $|\mathbf{k}| \leq k_F\mathbf{k}$ 的波矢为 $\mathbf{k}$ 的平面波态组成。因此，电子数取决于扭转矢量 $N_\theta$，但对所有扭转取平均后的电子数等于$N$。每个扭曲角下的可观测量期望值和矩阵元都分别计算，然后再对各扭转取平均。在我们的所有模拟中，$N$均选为在 $\Gamma$点具有闭壳层基态的值。

注意到，我们所有的试探波函数都具有这样的性质：经过空间反演后，它们等于自身的复共轭，因此重叠积分和矩阵元均为实数。

在研究静态自能 $\Sigma(k,0)$ 时，对于给定的 $\mathbf{k}$ 和扭曲角，我们通过一次权重为 $|\Psi_1^{N+1}|^2$、采用重加权的变分蒙特卡罗计算，求得了观测量和矩阵元 $\varepsilon_{ij}$、$z_k$、$n_k$（由式（14）、（15）和（16）给出），以及基态能量 $E_0$。（空穴扇区中采用 $|\Psi_1^{N-1}|^2$ 的等效过程亦然。）在 GC-TABC 中，先对期望值进行扭转平均，再将其代入格林函数表达式（式（13））。注意，式（13）以化学势 $\mu$ 为参数，但蒙特卡罗期望值对 $\mu$ 的依赖是平凡的。对于在$\Gamma$ 点进行的正则系综变分蒙特卡罗计算，$k$ 的取值位于由电子数 $N$决定的离散网格上。只有在 $N \to \infty$ 的极限下，$k$ 才能取连续值。

对于 GC-TABC，通过施加相应的扭曲角，可以到达任意 $k$ 矢量。球平均

对所有给定模长的 $k$ 矢量进行平均，相当于对产生相同 $k$模的所有扭转角进行扭转平均。在 GC-TABC 计算中，我们使用了 32 个权重相等的点，它们可以对球面上直至八阶的所有多项式进行精确积分 [27, 28]，适用于任意给定的 $k$。通常，对于每个 $N$，我们在计算中会围绕 $k_F$ 选取约 $\sim 10$ 个不同的 k 值。在 GC-TABC 计算中，我们选择了与正则系综计算中相近的 $k$ 值，其中 $k$ 值由 $N$ 固定。我们还选择了一些中间值，以便在这些值之间进行更好的插值。在 GC-TABC 计算中，我们避免选取过于接近$k_F$的 $k$ 矢量，尤其是区域 $|k - k_F| \lesssim \pi/L$，因为在正则系综模拟中该区域内不可能发生激发；在该区域内进行扭转平均可能会在自能中产生伪影。无论如何，由于当 $k \to k_F$时，扰动后的能量趋近于 $E_0 \pm \mu$，蒙特卡罗计算的有限精度也限制了我们进行过于接近费米面的计算。

### 自能的估算

给定化学势 $\mu$ 后，格林函数 $G^{\pm}_{\mu}$ 可以用量子蒙特卡洛可观测量表示，例如正文中的式（13–16），（进而得到 $\Sigma_\mu(k,\ 0)$），方法是减去单粒子能量。通过在 $k_F$ 附近进行线性和二次拟合，得到了其在费米面上的值 $\Sigma_\mu(k_F,\ 0)$，以及自能的斜率。随后改变 $\mu$ 的值，使得 $\Sigma_\mu(k_F,\ 0) = \mu$。在表 S.2 中，$\mu_N$ 和 $\partial_k\Sigma_N$ 表示尺寸外推前得到的值。对于给定系统尺寸 $N$ 下的裸值，以及使用外推后的自能 $\Sigma^{\infty}_{\mu}(k,\ 0) = \Sigma_\mu(k,\ 0) + \delta\Sigma(k,\ 0)$，本文均采用了这一方法，后者依据式（18）。在表中（哪一个表？），$\mu_\infty$ 和 $\partial_k\Sigma_\infty$ 分别对应使用外推后的自能得到的化学势和斜率。

### 误差估计

由于计算格林函数/自能所需的所有矩阵元都是在同一组量子蒙特卡洛模拟中计算的，因此这些误差并不独立。因此，我们通过确定自能在 GC-TABC 中多次独立计算及不同扭转角下的离散程度，估算其最终不确定性。

表中所有量的系统误差，均通过考察 $\chi^2$ 值相对于拟合值的变化来估算。GC-TABC 曲线的拟合通常会得出每个自由度的 $\chi^2$ 接近 1 的值——

dom。在 Γ 点进行规范模拟时，拟合结果的 $\chi^2$ 值通常更大，尤其对于$N = 38$ 和 $N = 66$ 系统而言，这是因为态壳层的填充不规则

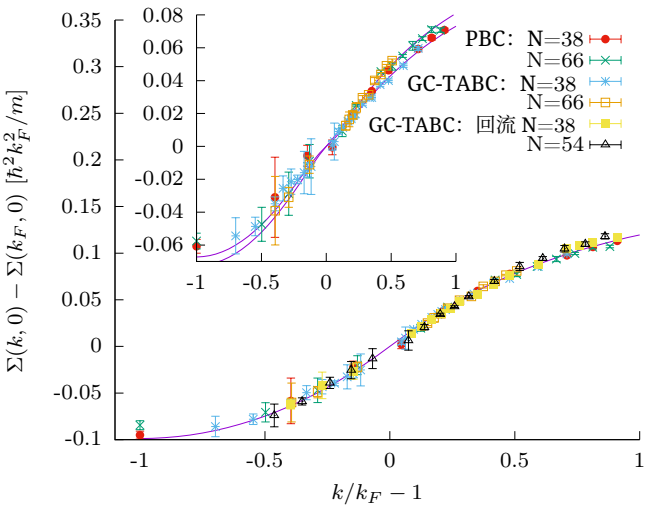


图 S.3：使用 SJ-VMC 试探波函数计算的 $r_s = 1$ 静态自能，分别对应采用周期性边界条件（PBC）的模拟和 GC-TABC，适用于 $N = 38$ 和 $N = 66$；同时还给出了使用 BF-VMC 试探波函数并采用 GC-TABC 的结果 $N = 38$ 和 $N = 54$。主图中的所有曲线均根据正文中的式 (17) 进行了尺寸修正，直线表示 $G_0W_0$ 自能。插图展示了未经修正的数值（为清晰起见，仅显示 SJ 结果），曲线表示基于正文式 (17) 对 $G_0W_0$ 曲线进行的尺寸修正。

以及接近 $k_F$的 $k$ 值更少。

### 有限尺寸数据

在正文表格中，我们报告了使用包含 $N = 66$和 $N = 54$的系统，通过尺寸外推 GC-TABC 得到的 SJ 和 BF 数值。由于不同尺寸下结果存在系统性不确定性，我们没有尝试进一步进行数值外推。表 S.2 报告了未经尺寸修正的数据。

在图 S.3 中，我们进一步展示了自能在 $r_s = 1$ 处因尺寸修正而产生的变化。

### 与参考文献 [14]的比较

在文献 [14] 中，研究者按照朗道能量泛函的思路，假设能量本征态与 SJ 和回流波函数中所用轨道的占据数之间存在映射，据此确定了一个表观有效质量。正如我们在正文中所述，将准粒子能量与有限系统的精确能量本征态联系起来虽然极具直观性，但存在问题，且缺乏坚实的理论依据。因此，我们的 $m^*$ 值与文献 [14] 中给出的结果不同，主要是因为这里采用了不同的方法论，而非 VMC 波函数存在差异，也不是由于使用了

| $r_s$ | $\Psi$ | BC | $N$ | $\mu_N$ | $\mu_\infty$ | $mk_F^{-1}\partial_k\Sigma_N$ | $mk_F^{-1}\partial_k\Sigma_\infty$ |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 1 | SJ | $\Gamma$ | 38 | $0.6224^{0.632}_{0.618}(8)$ | $0.628^{0.637}_{0.626}(3)$ | $0.095^{0.114}_{0.068}(3)$ | $0.18^{0.20}_{0.16}(1)$ |
| | | | 66 | $0.628^{0.632}_{0.623}(1)$ | $0.629^{0.641}_{0.627}(4)$ | $0.108^{0.112}_{0.091}(4)$ | $0.18^{0.20}_{0.16}(2)$ |
| | | GC-TABC | 38 | $0.632^{0.634}_{0.621}(1)$ | $0.634^{0.639}_{0.623}(1)$ | $0.089^{0.117}_{0.079}(4)$ | $0.182^{0.22}_{0.14}(6)$ |
| | | | 66 | $0.634^{0.635}_{0.629}(3)$ | $0.635^{0.640}_{0.632}(2)$ | $0.09^{0.11}_{0.08}(2)$ | $0.17^{0.18}_{0.16}(1)$ |
| | 回流 | GC-TABC | 38 | $0.628^{0.629}_{0.623}(1)$ | $0.633^{0.637}_{0.628}(2)$ | $0.086^{0.097}_{0.077}(8)$ | $0.17^{0.18}_{0.15}(1)$ |
| | | | 54 | $0.628^{0.629}_{0.619}(1)$ | $0.634^{0.637}_{0.622}(4)$ | $0.097^{0.112}_{0.078}(4)$ | $0.167^{0.179}_{0.157}(4)$ |
| 2 | SJ | $\Gamma$ | 38 | $0.2082^{0.2090}_{0.2070}(5)$ | $0.2110_{0.2088}(5)$ | $0.190^{0.207}_{0.185}(4)$ | $0.334^{0.370}(4)$ |
| | | | 66 | $0.235^{0.241}_{0.222}(2)$ | $0.250^{0.251}_{0.230}(2)$ | $0.173^{0.218}_{0.150}(6)$ | $0.260^{0.33}(6)$ |
| | | GC-TABC | 38 | $0.230^{0.232}_{0.222}(1)$ | $0.234^{0.240}_{0.221}(1)$ | $0.168^{0.165}_{0.183}(5)$ | $0.310^{0.336}_{0.300}(5)$ |
| | | | 66 | $0.233^{0.234}_{0.226}(2)$ | $0.237^{0.243}_{0.238}(4)$ | $0.186^{0.190}_{0.167}(5)$ | $0.30^{0.31}_{0.28}(2)$ |
| | 回流 | GC-TABC | 38 | $0.226^{0.233}_{0.217}(2)$ | $0.233^{0.235}_{0.226}(2)$ | $0.15^{0.18}_{0.13}(1)$ | $0.28^{0.29}(1)$ |
| | | | 54 | $0.212^{0.215}_{0.206}(1)$ | $0.219_{0.209}(2)$ | $0.201^{0.227}_{0.161}(4)$ | $0.309^{0.361}_{0.280}(6)$ |
| 4 | SJ | $\Gamma$ | 38 | $-0.660^{-0.656}(1)$ | $-0.655^{-0.654}_{-0.656}(1)$ | $0.312_{0.279}(3)$ | $0.511^{0.555}_{0.457}(3)$ |
| | | | 66 | $-0.638^{-0.631}_{-0.650}(7)$ | $-0.636^{-0.625}_{-0.646}(7)$ | $0.32^{0.37}_{0.28}(3)$ | $0.50^{0.56}_{0.47}(3)$ |
| | | GC-TABC | 38 | $-0.633^{-0.629}_{-0.644}(2)$ | $-0.628^{-0.622}_{-0.644}(1)$ | $0.32^{0.30}_{0.34}(1)$ | $0.53^{0.57}_{0.51}(1)$ |
| | | | 66 | $-0.633^{-0.628}_{-0.646}(3)$ | $-0.632^{-0.623}_{-0.650}(4)$ | $0.35^{0.37}_{0.31}(1)$ | $0.55_{0.45}(2)$ |
| | 回流 | GC-TABC | 38 | $-0.653^{-0.652}_{-0.661}(2)$ | $-0.649^{-0.645}_{-0.663}(2)$ | $0.285^{0.301}_{0.278}(8)$ | $0.51^{0.52}_{0.48}(1)$ |
| | | | 54 | $-0.668^{-0.661}_{-0.672}(3)$ | $-0.666^{-0.656}_{-0.671}(2)$ | $0.34^{0.36}_{0.31}(1)$ | $0.538^{0.549}_{0.491}(7)$ |
| 5 | SJ | $\Gamma$ | 38 | $-1.1137^{-1.1110}_{-1.1172}$ (8) | $-1.1090^{-1.1067}_{-1.1134}$ (8) | $0.357^{0.370}_{0.309}(2)$ | $0.592^{0.637}_{0.530}(4)$ |
| | | | 66 | $-1.105^{-1.100}(2)$ | $-1.098^{-1.092}(2)$ | $0.40_{0.38}(1)$ | $0.60_{0.57}(1)$ |
| | | | 114 | $-1.114^{-1.113}_{-1.117}(5)$ | $-1.113^{-1.108}_{-1.115}(5)$ | $0.43^{0.48}_{0.39}(3)$ | $0.62^{0.66}_{0.58}(3)$ |
| | | GC-TABC | 38 | $-1.089^{-1.085}_{-1.102}(3)$ | $-1.083^{-1.080}_{-1.102}(3)$ | $0.38^{0.41}_{0.36}(2)$ | $0.62^{0.67}_{0.61}(2)$ |
| | | | 66 | $-1.085^{-1.082}_{-1.092}(3)$ | $-1.079^{-1.078}_{-1.097}(4)$ | $0.415^{0.424}_{0.390}(9)$ | $0.610^{0.624}_{0.596}(9)$ |
| | | | 114 | $-1.088^{-1.091}_{-1.072}$ (4) | $-1.080^{-1.047}_{-1.088}(4)$ | $0.48_{0.43}(2)$ | $0.64^{0.65}_{0.56}(2)$ |
| | 回流 | GC-TABC | 38 | $-1.114^{-1.111}_{-1.127}(2)$ | $-1.105^{-1.104}_{-1.127}(2)$ | $0.35^{0.36}_{0.33}(1)$ | $0.573^{0.613}_{0.570}(5)$ |
| | | | 54 | $-1.118^{-1.114}_{-1.137}(3)$ | $-1.112_{-1.121}(2)$ | $0.35^{0.44}(1)$ | $0.56^{0.65}(1)$ |
| 10 | SJ | $\Gamma$ | 38 | $-3.510_{-3.532}(1)$ | $-3.535^{-3.527}_{-3.539}(2)$ | $0.604_{0.544}(2)$ | $0.809^{0.891}(7)$ |
| | | | 66 | $-3.541^{-3.540}_{-3.555}(2)$ | $-3.535^{-3.527}_{-3.550}(2)$ | $0.61^{0.70}(1)$ | $0.91^{0.98}_{0.87}(1)$ |
| | | | 114 | $-3.552^{-3.543}_{-3.572}$ (5) | $-3.540^{-3.535}_{-3.560}(5)$ | $0.66^{0.69}_{0.56}(2)$ | $0.88^{0.92}_{0.81}(2)$ |
| | | | 162 | $-3.563^{-3.533}_{-3.575}$ (10) | $-3.554^{-3.533}_{-3.571}(10)$ | $0.70^{0.75}_{0.62}(5)$ | $0.91^{0.95}_{0.85}(5)$ |
| | | GC-TABC | 38 | $-3.514^{-3.507}_{-3.524}(5)$ | $-3.509^{-3.504}_{-3.538}(5)$ | $0.71^{0.74}_{0.65}(3)$ | $1.08^{1.16}_{0.89}(3)$ |
| | | | 66 | $-3.502^{-3.491}_{-3.535}(6)$ | $-3.494^{-3.491}_{-3.522}(6)$ | $0.68^{0.73}_{0.65}(2)$ | $0.97^{1.03}_{0.91}(3)$ |
| | 回流 | GC-TABC | 38 | $-3.536^{-3.534}_{-3.555}(5)$ | $-3.526^{0.518}_{-3.553}(7)$ | $0.58^{0.61}_{0.53}(2)$ | $0.93^{0.96}_{0.86}(2)$ |
| | | | 54 | $-3.567^{-3.563}_{-3.580}(5)$ | $-3.558^{-3.553}_{-3.576}(5)$ | $0.62^{0.68}_{0.57}(2)$ | $0.90^{0.98}_{0.88}(2)$ |

表 S.2：采用 Slater-Jastrow (SJ) 和 Slater-Jastrow 回流 (BF) 波函数 ($\Psi$)，在周期性 ($\Gamma$) 和巨正则系综扭转平均 (GC-TABC) 边界条件 (BC) 下进行模拟所得的各种量子蒙特卡洛计算结果汇总。这里，$\mu_N$是以 $\hbar^2k_F^2/2m$为单位的化学势，$mk_F^{-1}\partial_k\Sigma_N$是自能在 $k_F$处的无量纲斜率，二者均对应有限体积 $\sim N$下的计算；$\mu_\infty$ 和 $\partial\Sigma_\infty$ 表示加入库仑奇点导致的首要有限尺寸修正后得到的相应数值。拟合结果在最低有效位上的统计不确定性以括号标示，而上下标表示由拟合范围和多项式拟合阶数导致的系统性偏移。结果通过在区域 $|k-k_F|/k_F \geq 0.2$内采用线性函数拟合获得；系统误差则通过采用最高二次函数进行拟合来评估

文献 [14] 中的扩散蒙特卡罗；我们将在下文中说明这一点。

在我们对静态自能的计算中，选择 $\Psi_1^{N\pm1}$，以便为动量为 $\pm k$ 的 $N\pm1$ 粒子系统的激发能量本征态提供合理的近似。因此，我们可以直接比较能量期望值，尤其是“能带”

色散

$$\begin{aligned} E(k) &= \theta(|k|-k_F)\left[E_{11}^{N+1}(k)-E_0^N\right] \\ &\quad +\theta(k_F-|k|)\left[E_0^N-E_{11}^{N-1}(k)\right] \end{aligned} \tag{S.31}$$

与参考文献 [14] 中给出的结果一致。

通过帕德´拟合或多项式拟合对这一能量色散进行拟合，参考文献 [14] 中的有效质量由费米面处的

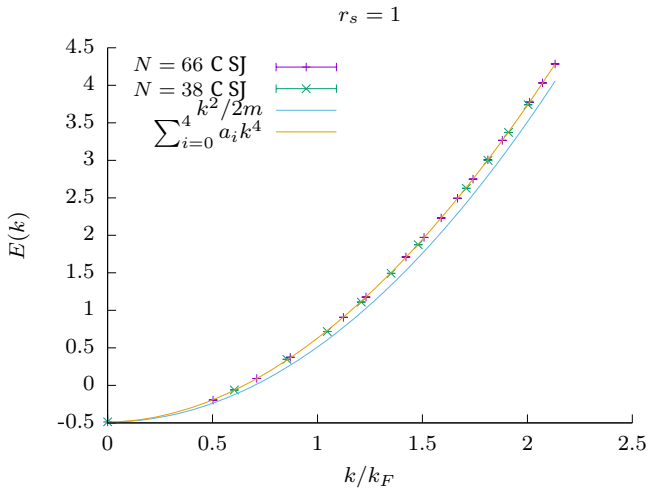


图 S.4：基于 $\Psi_1^{N\pm1}$ 的 SJ 波函数，采用 $N = 38$ 和 $N = 66$ 个电子时，能量期望值 $E(k)$ 的色散，与非相互作用电子的裸 $k^2/2m$ 行为进行比较。穿过我们数据点的曲线基于对 $N = 66$ 系统进行的四阶多项式拟合。根据 $k_F$ $k-k_F$ $k_F/m_{eff}$ $m_{eff}/m \simeq$处的拟合，0.93 0.915 1 我们得到 ( )，其值在费米面附近，与参考文献 [14] 中外推至无限系统尺寸的 ( ) 接近。

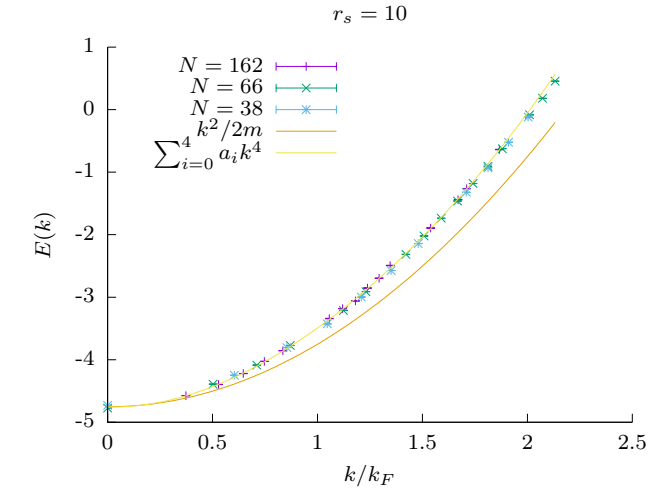


图 S.5：基于 $\Psi_1^{N\pm1}$ 的 SJ 波函数，采用$N = 38$、 $N = 66$和 $N = 162$ 个电子时，能量期望值 $E(k)$ 的色散，与非相互作用电子的裸 $k^2/2m$ 行为进行比较。穿过我们数据点的曲线基于对 $N = 162$ 系统进行的四阶多项式拟合。根据 $k_F$处的拟合，我们得到 $(k - k_F)\ k_F/m_{eff}$，其在费米面附近的值为 $m_{eff}/m \simeq 0.83$。与参考文献 [14] 中无限系统的 0.75(1) 相比，这一差异与该文所示的有限尺寸效应相符。

斜率确定

$$E(k) = (|k| - k_F)k_F/m_{\text{eff}}, \quad k \to k_F \tag{S.32}$$

其中，我们将这样得到的“有效质量”记为 $m_{\text{eff}}$，以避免与用于表征 $m^*$ 的准粒子激发能相混淆。

在图 S.4 和 S.5 中，我们展示了 $r_s = 1$ 和 $r_s = 10$ 的 SJ 能带色散。与文献 [14], 的结果一致，该能带的色散比非相互作用电子更陡。对我们最大系统的 $E(k)$ 进行四阶多项式拟合，得到$m_{\text{eff}}/m \simeq 0.93$ （对应 $r_s = 1$），$r_s = 2$为 0.90，$r_s = 4$为 0.88，$r_s = 5$为 0.86，$r_s = 10$为 0.83。这些数值与文献 [14]中相近尺寸系统的结果一致，且在定量上吻合。正如文献 [14]中已指出的那样，按照文献[14]所述优化激发态波函数，以及通过扩散蒙特卡罗进行随机改进，对 $m_{\text{eff}}$的影响都很小。因此，与 $m_{\text{eff}}$ 计算 [14] 相比，我们在表 I 中得到的 $m^*$ 在定性和定量上的差异，源于方法论不同。将$m_{\text{eff}}$ 解释为准粒子的有效质量，并援引朗道能量泛函，是有问题的。

[1] L. D. Landau，苏联物理学报《实验与理论物理学杂志》**30**，1058（1956）。[2] V. P. Silin，苏联物理学报《实验与理论物理学杂志》**33**，495（1957）。[3] P. Nozi´eres 和 J. P. Luttinger，《物理评论》**127**，1423（1962）。[4] J. M. Luttinger 和 P. Nozi´eres，《物理评论》**127**，1431（1962）。[5] L. D. Landau，苏联物理学报《实验与理论物理学杂志》**35**，97（1958）。[6] J. M. Luttinger，《物理评论》**119**，1153（1960）。[7] P. Nozi`eres，*Theory of interacting Fermi systems*，W.A. Benjamin, Inc.，纽约，（1964）。[8] G. F. Giuliani 和 G. Vignale，《电子液体量子理论》（剑桥大学出版社，剑桥，2005）。[9] R. M. Martin、L. Reining 和 D. M. Ceperley，《相互作用电子》，剑桥大学出版社，剑桥（2016）。[10] G. E. Simion 和 G. F. Giuliani，《物理评论B》**77**，035131（2008）。[11] K. Chen 和 K. Haule，《自然·通讯》**10**，3725（2019）。[12] K. Haule 和 K. Chen，《科学报告》**12**，2294（2022）。[13] M. Holzmann、B. Bernu、C. Pierleoni、J. McMinis、D. M. Ceperley、V. Olevano 和 L. Delle Site，《物理评论快报》**107**，110402（2011）。[14] S. Azadi、N. D. Drummond 和 W. M. C. Foulkes，《物理评论快报》**127**，086401（2021）。[15] F. G. Eich、M. Holzmann 和 G. Vignale，《物理评论B》**96**，035132（2017）。[16] H. Xie、L. Zhang 和 L. Wang，arXiv:2201.03156（2022）。[17] E. W. Brown、B. K. Clark、J. L. DuBois 和 D. M. Ceperley，《物理评论快报》**110**，146405（2013）。[18] E. W. Brown、J. L. DuBois、M. Holzmann 和 D. M. Ceperley，《物理评论B》**88**，081102(R)（2013）；同上 **88**，

199901(E)（2013）。[19] T. Dornheim、S. Groth 和 M. Bonitz，《物理学报告》**744**，1（2018）。[20] E. Vitali、H. Shi、M. Qin 和 S. Zhang，《物理评论B》**94**，085140（2016）。[21] M. Holzmann、B. Bernu 和 D. M. Ceperley，《物理学杂志：会议系列》**321**，012020（2011）；arXiv:1105.2964。[22] G. Baym 和 C. J. Pethick，《Landau费米液体理论：概念与应用》，Wiley（2008）。[23] S. Moroni、D. M. Ceperley 和 G. Senatore，《物理评论快报》**69**，1837（1992）。[24] M. Holzmann、R. C. Clay、M. A. Morales、N. M. Tubman、D. M. Ceperley 和 C. Pierleoni，《物理评论B》**94**，035126（2016）。[25] C. Lin、F.-H. Zong 和 D. M. Ceperley，《物理评论E》**64**，016702（2001）。[26] M. Holzmann、B. Bernu、V. Olevano、R. M. Martin 和 D. M. Ceperley，《物理评论B》**79**，041308(R)（2009）。[27] R. Womersley，《高效球面设计及其良好几何性质》[28] R. S. Womersley 编于 *Contemporary Computational Mathematics - A Celebration of the 80th Birthday of Ian Sloan*，J. Dick、F. Kuo、H. Wozniakowski（编），Spring，Cham（2018）。[29] S. Chiesa、D. M. Ceperley、R. M. Martin 和 M. Holzmann，《物理评论快报》**97**，076404（2006）。[30] M. Holzmann、D. M. Ceperley、C. Pierleoni 和 K. Esler，《物理评论E》**68**，046707（2003）。[31] L. Hedin，《物理评论》**139**，A796（1965）。[32] 结果见 [12]，是在有限电子温度 $T = T_F/25$ 下获得的，其中 $T_F$ 为费米温度；通过零温外推可能会对结果进行修正。[33] VDiagMC 和 $G_0W_0$ 的 $\partial_k\Sigma_\infty$ 值是根据 $Z$ 和 $m^*/m$的数值获得的，并假设相应的误差彼此统计独立。[34] K. Van Houcke、I. S. Tupitsyn、A. S. Mishchenko 和 N. V. Prokof'ev，《物理评论B》**95**，195131（2017）。[35] A. L. Kutepov 和 G. Kotliar，《物理评论B》**96**，035108（2017）。[36] M. Wilson、S. Moroni、M. Holzmann、N. Gao、F. Wu- darski、T. Vegge 和 A. Bhowmik，arXiv:2202.04622（2022）。[37] M. Holzmann 和 S. Moroni，《物理评论快报》**124**，206404 2020( )。[38] G. Cassella、H. Sutterud、S. Azadi、N. D. Drummond、D. Pfau、J. S. Spencer 和 W. M. C. Foulkes，《物理评论快报》**130**，036401（2023）。[39] S. Huotari、J. A. Soininen、T. Pylkk¨anen、K. H¨am¨al¨ainen、A. Issolah、A. Titov、J. McMinis、J. Kim、K. Esler、D. M. Ceperley、M. Holzmann 和 V. Olevano，《物理评论快报》**105**，086403（2010）。[40] N. Hiraoka、Y. Yang、T. Hagiya、A. Niozu、K. Matsuda、S. Huotari、M. Holzmann 和 D. M. Ceperley，《物理评论B》**101**，165124（2020）。[41] Y. Yang、N. Hiraoka、K. Matsuda、M. Holzmann 和 D.M. Ceperley，《物理评论B》**101**，165125（2020）。[42] Y. Kwon、D. M. Ceperley 和 R. M. Martin，《物理评论》**B 48**，12037（1993）。[43] M. Taddei、M. Ruggeri、S. Moroni 和 M. Holzmann，《物理评论B》**91**，115106（2015）。[44] Y. Yang、V. Gorelov、C. Pierleoni、D. M. Ceperley 和 M. Holzmann，《物理评论B》**101**，085115（2020）。