arXiv:2512.19781v1 [quant-ph] 22 Dec 2025

无序量子偶极子的可扩展自旋压缩理论

Avi Kaplan-Lipkin, [1,*] Philip J. D. Crowley, [1,2,*] Jonathan N. Hall´en, [1,3] Zilin Wang, [1] Weijie Wu, [1] Sabrina Chern, [1] Chris R. Laumann, [1,3] Lode Pollet, 和 Norman Y. Yao[1]

[1] *Department of Physics, Harvard University, Cambridge, Massachusetts 02138, USA* [2] *Department of Physics and Astronomy, Michigan State University, East Lansing, Michigan 48824, USA* [3] *Department of Physics, Boston University, Boston, Massachusetts 02215, USA* [4] *Department of Physics and Arnold Sommerfeld Center for Theoretical Physics (ASC), Ludwig-Maximilians-Universität München, Theresienstrasse 37, D-80333 München, Germany*
[5] *Munich Center for Quantum Science and Technology (MCQST), Schellingstrasse 4, D-80799 München, Germany*

自旋压缩纠缠能够实现超越经典极限的计量精度。从连续对称性破缺的角度来看，偶极自旋系统展现出一种非凡能力：通过其内禀的淬火动力学产生自旋压缩。迄今为止，这一认识主要聚焦于晶格自旋系统；然而在实际中，从超冷分子、核自旋系综到固态色心，偶极自旋系统往往存在显著的位置无序。本文针对由量子偶极子构成的二维随机稀释晶格，建立了可扩展自旋压缩理论；这类晶格自然实现偶极 XXZ 模型。通过大量量子蒙特卡罗模拟，我们绘制了有限温度下 XY 序的相图，并由此确定了可扩展自旋压缩随无序程度和伊辛各向异性变化的规律。我们发现，随着无序增加，可扩展自旋压缩仅在海森堡点附近得以维持。我们证明，这种行为源于少数强耦合二聚体的存在，它们会在量子淬火后有效地加热系统。对于金刚石中强相互作用的氮空位中心，我们表明，一种实验上可行的策略足以将这些有害二聚体与系统动力学解耦，从而实现可扩展自旋压缩。

量子力学测量具有概率性，这为任何传感器的精度设定了基本噪声底限[1–3]。提高精度的经典策略是使用一组 N 独立传感器，使量子投影噪声按$\sim 1/\sqrt{N}$的比例降低。值得注意的是，以自旋压缩形式存在的量子纠缠可用于重塑量子投影噪声，从而实现 $\sim 1/N^{\gamma}$ 超越经典极限 [4–7]的灵敏度。理论上，可扩展自旋压缩（$\gamma > 1/2$）能够使测量灵敏度达到海森堡极限 $\sim 1/N$。

全连接相互作用下的自旋压缩已得到广泛研究 [8–16] ，实验展示的计量增益最高达 ≈ 20 dB [15]。然而，近期的理论见解表明，在范围显著更广的局域相互作用模型中也能产生可扩展压缩 [17–21]。这些发现确立了有限温度下的连续对称性破缺是实现可扩展压缩的关键要素，并揭示了系统动力学性质与平衡性质之间引人注目的联系 [18–20]。这项理论进展几乎立刻影响了实验——很大程度上是因为它指出，实验中无处不在的二维量子偶极子体系能够支持可扩展自旋压缩 [22–28]。事实上，近期已在里德堡原子阵列中的电偶极子体系 [29]、量子气体显微镜中的超冷极性分子磁偶极子体系 [30], , 以及固态色心系综 [32]中观测到压缩动力学 [31], 。

固态体系有别于其他已展示过自旋压缩的合成平台。与后者截然不同，固态色心常用于各种实际传感应用，范围从纳米尺度磁测量 [33–39] 到体内测温 [40–42]。然而，色心面临的一项内在挑战是，由于它们在固体中的位置随机，因而存在强无序。这引出了一个关键问题：在强位置无序的情况下，可扩展自旋压缩将会如何?

在本文中，我们提出并分析了一种理论，用于描述无序量子偶极子二维系综中的可扩展自旋压缩。在强的面外量子化场作用下，这类偶极子可由典型的自旋-1/2 XXZ 模型 [43]描述:

$$H_{\mathrm{XXZ}} = -\sum_{i<j} J_{ij}\left(s_i^x s_j^x + s_i^y s_j^y + \Delta s_i^z s_j^z\right), \qquad (1)$$

其中 $J_{ij} = J/r_{ij}^3$, $\vec{s}_i$ 为自旋算符， Δ 表征伊辛各向异性（下文记为 $J = 1$）。位置无序由底层晶格上独立随机占据格点的填充率 f 来表征，见图 1] [44–48]； $f = 1$ 对应无无序情形（均匀晶格），而 $f \to 0$ 对应强无序（高度稀释晶格） [49]。

我们的主要结果有三点。首先，我们考察从初始自旋极化乘积态出发，通过淬火动力学生成自旋压缩的传统方案。要实现可扩展压缩，初始乘积态的能量密度必须低于 H_{XXZ} [20, 50, 51] 中铁磁XY序的临界能量密度；等价地，根据勒让德变换，有效温度必须

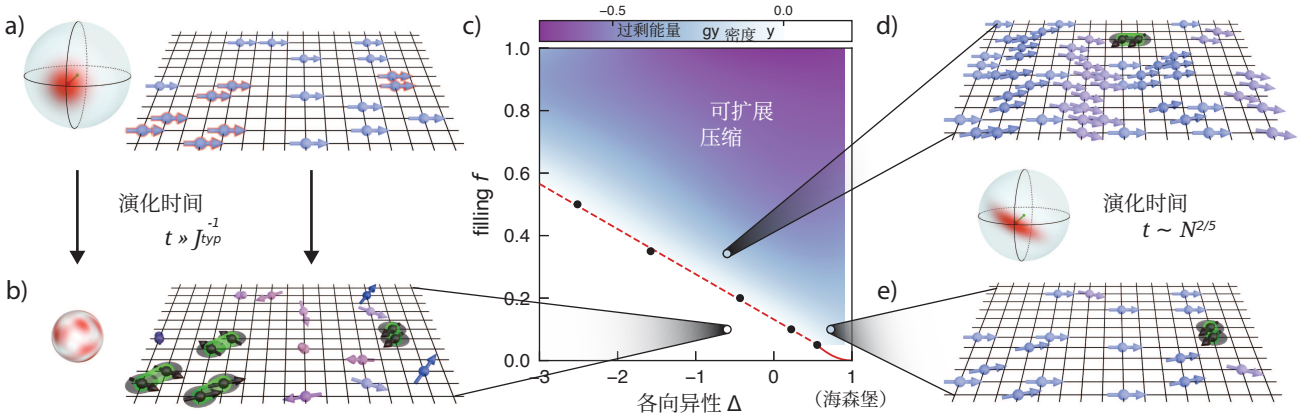


图 1. *Scalable squeezing with disordered dipoles in 2D.* (a) 展示了二维无序自旋构型的一个示例。对于强无序（此处 $f = 0.1$），当系统制备于沿 x方向极化的乘积态时，近邻“二聚体”（红色光晕）会被强烈激发。对于这种乘积态，布洛赫球上集体自旋的维格纳分布（红色）集中在 $+x$ 方向附近，其 $O(\sqrt{N})$–投影噪声为.....。(b) 在 H_{XXZ}作用下演化时，二聚体弛豫至其局域基态（黑色箭头），释放能量，从而可能使系统升温至 XY有序温度 T_{c}以上。(c) 当初始 x态的能量密度（E_x）低于临界态的能量密度（E_{c}）时，即超额能量密度（$E_x - E_{\mathrm{c}}$）$/|E_x| < 0$（密度图），在 H_{XXZ} 作用下的时间演化会产生可扩展自旋压缩。相边界由量子蒙特卡罗（黑点，红色虚线为视觉引导）确定；对于 $f \to 0$，则由解析论证得到（红色实线）。随着 $f \to 0$，可扩展自旋压缩区域局限于海森堡点（$\Delta = 1$）附近的范围。从非压缩相出发，可通过以下方式恢复可扩展压缩：(d) 提高填充率，使其趋近均匀情形 $f = 1$，从而降低强二聚体键与典型相互作用之间的能量尺度层级；或 (e) 提高 Δ 使其趋近海森堡点，从而降低二聚体激发能。据信，最佳压缩出现在时间尺度 $t \sim N^{2/5}$ [20]。

低于临界温度。因此，我们通过大量路径积分量子蒙特卡罗（QMC）计算，确定了XY序的临界温度如何随填充率变化 f 以及伊辛各向异性Δ。这使我们能够绘制可扩展自旋压缩的相图，并确定临界无序强度；超过该强度后，将无法实现可扩展压缩[图 1c]。

其次，我们探讨相图中一个出人意料且影响深远的特征 [图 1c]：随着无序程度增加（$f \to 0$），可扩展自旋压缩仅在 Δ 海森堡点附近（$\Delta = 1$）一个趋于消失的狭窄范围内存续。我们表明，这一行为源于稀有“二聚体”（即耦合异常强的自旋对）的存在；它们在强无序下出现。这里有两个效应在起作用：(i) 偏离海森堡点时，二聚体处于非偏振三重态，而不是参与 XY 序，在能量上更为有利；(ii) 当二聚体初始处于自旋偏振态时，它们极其“炽热”，并在淬火动力学过程中向周围自旋释放能量。我们尝试通过微扰簇展开和对二聚体关联的非微扰处理，从解析上捕捉这些效应，并成功再现了量子蒙特卡罗模拟的关键特征。

最后，回到固态色心这一实验场景，我们分析了金刚石中强相互作用氮-空位（NV）缺陷系综实现可扩展自旋压缩的前景。我们发现，

对于当前一代样品， [27], 强烈的位置无序会阻碍通过从极化初态简单地进行量子淬火来产生可扩展自旋压缩。近期实验提出并实施了有效“搁置”二聚体、消除其对压缩动力学影响的策略 [32]。受此启发，我们开展了一组新的量子蒙特卡罗模拟，研究不同程度的二聚体搁置，并证明这种搁置能够恢复可扩展自旋压缩。

XY序的临界温度。——考虑由 H_{XXZ} 支配的正方晶格上的稀疏偶极子。为确定可扩展自旋压缩的参数范围，我们计算了不同填充率下 XY 序的临界温度，最低达到 T_{c}，并考察其随 Δ的变化 $f = 0.05$[图2a]。我们采用基于虚时间路径积分表示的无序平均量子蒙特卡洛，并使用蠕虫型更新[52, 53]。随着系统变得稀疏，偶极子间的典型距离增大$r_{\mathrm{typ}} \sim 1/\sqrt{f}$，相互作用强度因此按 $J_{\mathrm{typ}} = 1/r_{\mathrm{typ}}^3 \sim f^{3/2}$缩放。因此，自然的做法是将所有能量——包括临界温度——都按 $f^{-3/2}$重新缩放。

在无无序情形下， [$f = 1$, 红色曲线（图2a]） T_{c}表现出相对较弱的 Δ依赖性，并在 $\Delta_{\mathrm{peak}} \approx -0.5$处略有峰值。引入无序会显著改变这一行为：临界温度随 Δ 变化呈现尖锐峰值，而该峰的位置则大幅向海森堡方向移动

点， $\Delta = 1$ [图2a]。这表明，位置无序会大幅抑制有限温度下的 XY 序，使其在中等温度下局限于 $\Delta = 1$附近一个更窄的区域。

为了将临界温度图转化为可扩展自旋压缩的相图，我们先回顾一下淬火方案。我们制备一个初始的、 x-极化乘积态 $|\psi_x\rangle = |{\rightarrow}\cdots{\rightarrow}\rangle_x$ ，随后在 $H_{\rm XXZ}$下演化，直至压缩达到最佳。如果 $|\psi_x\rangle$热化到温度 $T_x < T_{\rm c}$ （或者等价地，其能量密度满足 $E_x < E_{\rm c}$），那么 XY 序在动力学演化过程中保持稳定，系统便会呈现可扩展压缩 [20]。由此立即得到图1c所示的相图。

值得注意的是，可扩展压缩区域继承了 XY 序的特性——随着填充率降低，它会急剧收缩至$\Delta = 1$ 。换言之，原则上，只要 Δ足够接近海森堡点，即使位置无序任意强，也有可能实现可扩展压缩。然而，这里存在一个问题：在此极限下，最优时间尺度会发散 $\sim (1-\Delta)^{-1}$ 。这是因为，恰好在海森堡点处， $|\psi_x\rangle$ 是一个不呈现动力学的基态；偏离该点后，自旋压缩动力学由哈密顿量中破坏 SU(2) 对称性的项驱动，其能量尺度为 $\sim (1-\Delta)$。综合这些限制，我们得出结论：使用传统淬火方案，无法实现稀疏偶极子的可扩展压缩。这引出了以下问题：是什么物理机制导致图1c 中的可扩展压缩区域在低 f时消失？我们能否制定策略使其重现？

平均场簇展开。——为了获得直观认识，我们考虑一种标准的平均场图像。事实证明，它在 $f = 1$ 附近表现尚可，但在强无序极限下会失效。我们的出发点是一种自洽的变分平均场理论，其中 $H_{\rm MF} = -h\sum_i s_i^x$ [53, 54]。XY序临界温度的平均场条件为：

$$\sum_{ij}\chi_{ij} = \sum_{ijkl}\chi_{ij}\,J_{jk}\,\chi_{kl}, \qquad (2)$$

其中， χ_{ij} 表示自旋i 对施加在自旋 j 上的场的平均场横向磁化率（见补充材料（SM） [53]）。在 $H_{\rm MF}$条件下，磁化率呈现简单的对角形式， $\chi_{ij} = \delta_{ij}/4T$。于是，平均场临界温度为 $T_{\text{平均场临界温度}} = (4N)^{-1}\sum_{ij}J_{ij} = 2.25\ldots\times f$。这一估算几乎无法捕捉到图 2a 中相图的定性特征：它不依赖于 Δ，且按 $T_{\rm MFc}\sim f$ 缩放，而非按 $T_{\rm c}\sim f^{3/2}$ 缩放。

一个自然的延伸是考虑高温簇展开 [55, 56], ，从而能够捕捉接近 $T_{\rm c}$ 的少体量子关联。采用修正后的变分试探态 $H_\lambda = (1-\lambda)H_{\rm MF} + \lambda H_{\rm XXZ}$，我们计算了 $T_{\rm c}$ 关于 λ [53] 的领先阶，并得到图2a中的实线曲线。该方法定性地再现了 Δ对 $T_{\rm c}$ 的依赖关系（适用于弱无序）。但仍有许多问题有待解决。例如， $T_{\rm c}$ 中的峰值始终固定在 $\Delta_{\rm peak} = -0.5$ ， 与f无关，而不是向海森堡点移动。

显然，强无序下的物理规律并未被该分析充分捕捉。事实上，由于在试探态中对所有自旋一视同仁，该分析忽略了强耦合自旋簇的影响，而这在强稀释条件下尤为重要。这些随机出现的簇由成对间距 r_{ij} 异常小的自旋组成， $r_{ij} \ll r_{\rm typ} \sim 1/\sqrt{f}$。在强无序（$f \to 0$）极限下，包含 n 个自旋的此类簇的密度按 f^n缩放，这自然促使我们

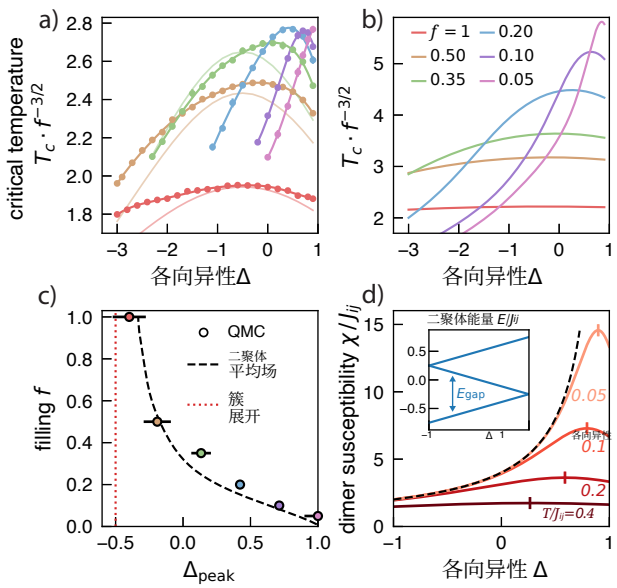


图 2。 *Thermodynamic phase diagram of XY order.* (a) 量子蒙特卡罗（QMC）得到的临界温度 $T_{\rm c}$ （实线）随伊辛各向异性 Δ 的变化，不同填充率 f 对应多条曲线（图例与面板 (b) 共用）。温度按 $f^{-3/2}$ 重新缩放，以计入系统稀释时典型最近邻偶极相互作用强度的变化。请注意， $T_{\rm c}$ 在图示的数值可达点以下还会延伸很远。图中还给出了填充率最高的三种情况下的一阶平均场簇展开结果（浅色线）。(b) 二聚体平均场试探态 [对应的类似 $T_{\rm c}$ 曲线，见式 (4)], ；该试探态完整地捕捉了二聚体内关联。(c) 展示了使 $T_{\rm c}$ 达到最大值的各向异性 $\Delta_{\rm peak}$，其中数值来自不同填充率 f 下的量子蒙特卡罗结果（彩色圆点），以及含二聚体修正的平均场理论（黑色虚线）。相比之下，簇展开对所有 f 均给出 $\Delta_{\rm peak} = -0.5$ （红色点线）。(d) 当二聚体更易发生 XY 序时，临界温度 $T_{\rm c}$ 更高；对于给定的二聚体（内部耦合为 J_{ij}），其在来自其他自旋的横向场作用下的磁化率 χ 可用于量化这一点，见式 (7)], , 图中给出了不同各向异性 Δ 和温度 T下的结果。在$T \approx E_{\rm gap}$ 处，磁化率从居里行为 $\chi \sim 1/T$ 过渡到 $\chi \sim 1/E_{\rm gap}$。 （插图）展示了二聚体能谱随各向异性的变化。

将注意力集中于二聚体的影响 [图1a]。

理解二聚体的影响。——强无序区需要考虑强耦合二聚体的物理性质。二聚体具有未磁化的局域基态 $|S=1,m=0\rangle$，其能隙为

$$E_{\rm gap} = J_{ij}(1-\Delta)/2 \tag{3}$$

至其余三重态（见图 2d插图）。当温度约为 $J_{\rm typ}$（$\ll J_{ij}$) 时，二聚体会“冻结”（$E_{\rm gap} \gg T$），不会参与磁序。然而， $E_{\rm gap}$ 随着各向异性 Δ向海森堡点调节，$E_{\rm gap}$ 会趋于零。这反映在二聚体的磁化率上：在温度 $T \ll J_{ij}$ 处会出现一个大峰（见图 2d 和文末补充材料）。因此，在海森堡点附近，二聚体实际上会参与 XY序，增加未冻结自旋的密度，并提高整体 $T_{\rm c}$。

为定量描述二聚体的作用，我们将先前的平均场理论扩展到包含其量子关联：

$$H_{\rm MF}^{\rm (d)} = -h\sum_i s_i^x - \sum_{(ij)\in{\rm dimers}} J_{ij}\left(s_i^x s_j^x + s_i^y s_j^y + \Delta s_i^z s_j^z\right), \tag{4}$$

其中 (ij) $\in$二聚体表示自旋 i 和 j 构成一个二聚体。数值上，我们使用实空间匹配算法识别强耦合二聚体 [53, 57]。在这一新的平均场哈密顿量下，式（2）中的磁化率 χ_{ij}具有来自二聚体关联的非对角贡献（参见补充材料末尾及 SM [53]）。同时关于 f 和 Δ 的临界温度如图2b 所示，并捕捉到了量子蒙特卡罗 [图2a]中观察到的定性特征。如图2c所示，我们发现，从二聚体平均场理论提取的 $\Delta_{\rm peak}$ 与从量子蒙特卡罗提取的结果高度吻合。

可扩展压缩相图的结构[图1c] 也可以用二聚体图像来理解。我们从海森堡点 $\Delta = 1$开始，此处x态是多体基态，因此对于所有 $E_x < E_{\rm c}$均有 f。偏离该点后，从 x 态进行量子淬火会留下高度激发的二聚体，它们弛豫至基态，并将能量 δE 释放给周围自旋。对于一个单独的二聚体（见式（4）），直接计算可得

$$\delta E := E_x - E_{\rm gs} = -|h| + \sqrt{h^2 + \tfrac{1}{4}E_{\rm gap}^2} \tag{5}$$

其中 $h \sim J_{\rm typ} \sim f^{3/2}$ 是其他自旋产生的局域场，而 $E_{\rm gap}$ 由方程（3）给出。

我们首先讨论 $f \to 0$ 的稀薄极限。在此极限下，二聚体相互作用满足 $E_{\rm gap} \gg h$，因此$\delta E \sim E_{\rm gap} \sim J_{ij}(1-\Delta)$。总能量释放主要由耦合最强的二聚体主导（$J_{ij} = 1$），

尽管其占比随 $\sim f$ 趋于零。因此，它们的弛豫会集体提高其余

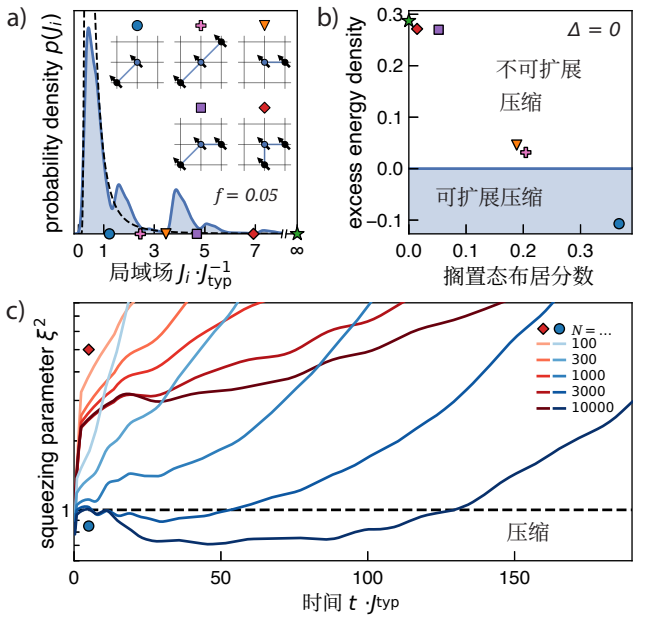


图 3。*Scalable squeezing via the shelving of dimers.* (a) 局域场的重标度分布 $p(J_i)$ $J_i := \sum_{j\neq i} J_{ij}$ 对于 $f = 0.05$ （实心蓝色）和 $f \to 0$ （黑色虚线）[53]。 x 轴上的标记标示了 $f = 0.05$ 分布中的峰值（位于标记右侧），每个峰值分别对应插图（右上）中由局域构型指示的场。将所有位于给定标记右侧且具有 J_i 的自旋搁置后，(b) 初始 x态 $(E_x - E_{\rm c})/|E_x|$的超额能量密度会降低，降低量大致与被搁置自旋所占的比例成正比；QMC 对 $\Delta = 0$的结果证实了这一点。(c) 使用 cDTWA 的动力学模拟证实了 (b) 中由 QMC 得出的压缩相图。将搁置自旋的比例从 1.5%（红色）提高到 35%（蓝色），会得到低于 1 且随搁置后二聚体系统尺寸 N 增大而降低的最佳压缩参数 ξ^2。我们滤除了 $\xi^2(t)$ 中由二聚体 [53] 引起的快速振荡。

自旋的能量，增幅为 $\sim (1-\Delta) \times f$ 每个自旋。当这一能量超过典型自旋之间的相互作用尺度$h \sim f^{3/2}$（该尺度稳定 XY序）时，系统会被加热至高于其有序温度（$T_x > T_{\rm c}$），从而阻碍压缩。令这两个尺度相等，可得渐近相边界 $1-\Delta \sim \sqrt{f}$为 $f \to 0$。这一形式与量子蒙特卡罗中观察到的压缩区域缩小趋势一致，见 [图 1c], ，但无法捕捉到观察到的线性相边界。

为理解线性相边界，我们考虑前渐近的中间f 区域，其中$J_{\rm typ} = O(1)$。于是有 $h \gtrsim E_{\rm gap}/2$，微扰分析得出 $\delta E \propto E_{\rm gap}^2/h$。将其代入相同的加热判据，得到交叉边界$1-\Delta \sim f$，这与图中量子蒙特卡洛数据一致。1c。更多细节请参见 SM [53]。

固态色心系综中的可扩展自旋压缩。——我们的分析适用于多种具有无序偶极子的实验平台，包括，

例如，光学晶格中的超冷极性分子（$f \sim 0.2$） [58] 以及固态色心系综（$f \sim 0.001$） [26, 27, 39]。在此，我们聚焦于后者，并探究在金刚石中强相互作用的氮空位（NV）色心系综中实现可扩展自旋压缩的前景[59]; NV 色心是量子传感的领先平台之一 [33–38, 60] 且近期已有自旋压缩的演示 [32]。然而，由于自然各向异性（$\Delta = -1$） [61] 和强无序，这种压缩远未达到可扩展的状态。

确定二聚体是实现可扩展压缩的主要障碍后，我们研究了一种受实验启发的策略，通过动态“搁置”一部分 NV 中心来克服这一挑战 [32]。搁置的作用是将强耦合二聚体从压缩动力学中移除。在实践中，可以通过均匀极化系统中二聚体自旋所经历的异常大局域场来识别它们，其表达式为$J_i := \sum_{j\neq i} J_{ij}$。因此，我们生成一组无序构型，并对每种构型计算$J_i$，然后移除所有满足 $J_i > J_0$ 的自旋。当f不为零时， J_i 上的分布会因晶格常数而呈现若干特征，这些特征自然提示了设置截断值的位置，即 J_0。图3a中的几何标记标示了每个特征及其对应的截断值。这些特征在 $f \to 0$ 极限下消失， [图3a]中的黑色虚线所示。

为证明搁置对于恢复可扩展自旋压缩的可行性，我们针对这些截断值执行量子蒙特卡罗（$\Delta = 0.0$, $f = 0.05$），并计算临界能量密度 E_c。将这些临界能量密度与 x极化态的临界能量密度进行比较后， E_x我们发现，必须搁置约 25% 的自旋，才能恢复可扩展压缩 [图 3b]。近期一项关于高密度 NV 系综的实验 [32] 展示了这一大致程度的搁置。

尽管图 3b 表明通过充分搁置可以实现可扩展压缩，但仍需从 x极化态的淬火动力学中直接验证这一点。为此，我们使用簇离散截断维格纳近似（离散截断维格纳近似）直接模拟不同搁置截断值下的淬火动力学 [53, 57, 62]。我们用 Wineland 压缩参数量化压缩，$\xi^2 \equiv N$最小值$_{\hat{n}\perp\hat{x}}$方差 $\left[\hat{n}\cdot\vec{S}\right]/\langle S^x\rangle^2$，其中 $\vec{S} = \sum_i \vec{s}_i$ 为总自旋算符，且 $\xi^2 < 1$ 表示计量压缩 [63]。对于最小程度的搁置（1.5% 的自旋，图 3c中的红色曲线）， ξ^2 在短时间内迅速增加，即使系统尺寸很大也不表现出自旋压缩， $N \sim 10^4$。相比之下，对于中等程度的搁置，即 $E_x < E_c$ （35% 的自旋，图 3c中的蓝色曲线），我们发现 ξ^2 的动力学随系统尺寸发生显著变化，并且对于 $N \gtrsim 10^3$确实恢复了可扩展压缩。

结论与展望——我们的工作开启了许多引人入胜的未来研究方向。首先，尽管我们聚焦于偶极相互作用，但许多实验量子模拟平台在二维系统中呈现较短程相互作用（例如范德华相互作用 [64, 65]或接触相互作用 [66]），在有限温度下，这类系统仅存在代数长程序 [67, 68]。研究无序在这些情形下对自旋压缩的作用将会很有意义。其次，除了淬火无序，研究动态无序也很自然，因为动态无序是巡游偶极系统固有的特性 [30, 31, 69, 70]。最后，我们提出的克服无序的实验方案，是通过调控哈密顿量来提高 XY序的临界温度。不过，也可以探索另一条途径：通过绝热制备一个能量密度较低的初始（弱纠缠）态。

致谢。——我们衷心感谢 Maxwell Block、Emily Davis、Che Liu、Markus M¨uller、Rahul Nandkishore、Tasuku Ono、Haopu Yang 和 Bingtian Ye 提供的见解并与我们进行讨论。本研究部分由美国能源部 BES资助（编号：DE-SC0019241；用于平均场簇展开计算）以及陆军研究办公室通过 MURI计划（编号：W911NF-20-1-0136；用于量子蒙特卡罗模拟）提供支持。L.P. 感谢德国科学基金会（DFG，德国研究联合会）依据德国卓越战略提供的资助——EXC-2111，项目编号 390814868。C.R.L. 感谢马克斯·普朗克复杂系统物理研究所的 Gutzwiller Fello wship，以及 SFB 1143 和 ct.qmat 提供的部分支持。J.N.H. 感谢瑞典—美国基金会提供的支持。N.Y.Y. 感谢 Brown Investigator 奖提供的支持。

* 这些作者对本项工作贡献相同。[1] V. Giovannetti、S. Lloyd 和 L. Maccone，《自然·光子学》5，222（2011）。[2] C. L. Degen、F. Reinhard 和 P. Cappellaro，《现代物理评论》89，035002（2017）。[3] L. Pezz`e、A. Smerzi、M. K. Oberthaler、R. Schmied 和 P. Treutlein，《现代物理评论》90，035005（2018）。[4] D. J. Wineland、J. J. Bollinger、W. M. Itano、F. L. Moore 和 D. J. Heinzen，《物理评论A》46，R6797（1992）。[5] M. Kitagawa 和 M. Ueda，《物理评论A》47，5138（1993），出版方：美国物理学会。[6] V. Meyer、M. A. Rowe、D. Kielpinski、C. A. Sackett、W. M. Itano、C. Monroe 和 D. J. Wineland，《物理评论快报》86，5870（2001）。[7] J. Ma、X. Wang、C. P. Sun 和 F. Nori，《物理学报告》509，89（2011）。[8] J. Est`eve、C. Gross、A. Weller、S. Giovanazzi 和 M. K. Oberthaler，《自然》455，1216（2008）。[9] I. D. Leroux，《物理评论快报》104，10 1103 104 073602 2010 . /PhysRevLett. . ( )。

[10] C. Gross、T. Zibold、E. Nicklas、J. Est`eve 和 M. K. Oberthaler，《自然》464，1165（2010）。[11] M. F. Riedel、P. B¨ohi、Y. Li、T. W. H¨ansch、A. Sinatra 和 P. Treutlein，《自然》464，1170（2010）。[12] C. D. Hamley、C. S. Gerving、T. M. Hoang、E. M. Book-jans 和 M. S. Chapman，《自然·物理》8，305（2012）。[13] C. F. Ockeloen、R. Schmied、M. F. Riedel 和 P. Treut-lein，《物理评论快报》111，143001（2013）。[14] J. G. Bohnet、B. C. Sawyer、J. W. Britton、M. L. Wall、A. M. Rey、M. Foss-Feig 和 J. J. Bollinger，《科学》352，1297 2016( )。[15] O. Hosten、N. J. Engelsen、R. Krishnakumar 和 M. A. Kasevich，《自然》529，505（2016）。[16] B. Braverman、A. Kawasaki、E. Pedrozo-Pe¯nafiel、S. Colombo、C. Shu、Z. Li、E. Mendez、M. Yamoah、L. Salvi、D. Akamatsu、Y. Xiao 和 V. Vuleti´c，《物理评论快报》122，223203（2019）。[17] M. A. Perlin、C. Qu 和 A. M. Rey，《物理评论快报》125，223401（2020），arXiv:2006.00723 [量子物理]。[18] T. Comparin、F. Mezzacapo 和 T. Roscilde，《物理评论A》105，022625（2022），电子预印本：2103.07354。[19] T. Comparin、F. Mezzacapo、M. Robert-de-Saint- Vincent 和 T. Roscilde，《物理评论快报》129，113201 2022( )。[20] M. Block、B. Ye、B. Roberts、S. Chern、W. Wu、Z. Wang、L. Pollet、E. J. Davis、B. I. Halperin 和 N. Y. Yao，《自然·物理》20，1575（2024），出版方：自然出版集团。[21] N. U. Koyluoglu、S. V. Rajagopal、G. L. Moreau、J. A. Hines、O. Markovi´c 和 M. Schleier-Smith，《利用局域相互作用自旋逼近海森堡极限》（2025），arXiv:2506.16973 [量子物理]。[22] G. Valtolina、K. Matsuda、W. G. Tobias、J.-R. Li、L. De Marco 和 J. Ye，《自然》588，239（2020）。[23] T. Comparin、F. Mezzacapo 和 T. Roscilde，《物理评论快报》129，150503（2022）。[24] C. Chen、G. Bornet、M. Bintz、G. Emperauger、L. Leclerc、V. S. Liu、P. Scholl、D. Barredo、J. Hauschild、S. Chatterjee、M. Schuler、A. M. L¨auchli、M. P. Zaletel、T. Lahaye、N. Y. Yao 和 A. Browaeys，《自然》616，691（2023）。[25] L. Su、A. Douglas、M. Szurek、R. Groth、S. F. Ozturk、A. Krahn、A. H. H´ebert、G. A. Phelps、S. Ebadi、S. Dick-erson、F. Ferlaino、O. Markovi´c 和 M. Greiner，《自然》622，724（2023）。[26] R. Gong、G. He、X. Gao、P. Ju、Z. Liu、B. Ye、E. A. Henriksen、T. Li 和 C. Zu，《自然-通讯》14，3299（2023）。[27] L. B. Hughes、S. A. Meynell、W. Wu、S. Parthasarathy、L. Chen、Z. Zhang、Z. Wang、E. J. Davis、K. Mukherjee、N. Y. Yao 和 A. C. B. Jayich，《物理评论X》15，021035 2025( )，出版方：美国物理学会。[28] J. Franke、S. R. Muleady、R. Kaubruegger、F. Kranzl、R. Blatt、A. M. Rey、M. K. Joshi 和 C. F. Roos，《自然》621，740（2023）。[29] G. Bornet、G. Emperauger、C. Chen、B. Ye、M. Block、M. Bintz、J. A. Boyd、D. Barredo、T. Comparin、F. Mezzacapo、T. Roscilde、T. Lahaye、N. Y. Yao 和 A. Browaeys，《自然》 **621**, 728 2023 2303 08053 ( ), [ ] arXiv: 量子物理 。[30] T. Bilitewski、L. De Marco、J.-R. Li、K. Matsuda、W. G. Tobias、G. Valtolina、J. Ye 和 A. M. Rey，《物理评论快报》126，113401（2021）。[31] A. Douglas、V. Kaxiras、L. Su、M. Szurek、V. Singh、O. Markovi´c 和 M. Greiner，Physical Review X，（2025）。[32] W. Wu、E. J. Davis、L. B. Hughes、B. Ye、Z. Wang、D. Kufel、T. Ono、S. A. Meynell、M. Block、C. Liu、H. Yang、A. C. B. Jayich 和 N. Y. Yao，《金刚石中氮空位中心系综的自旋压缩》（2025），arXiv:2503.14585 [量子物理]。[33] J. R. Maze、P. L. Stanwix、J. S. Hodges、S. Hong、J. M. Taylor、P. Cappellaro、L. Jiang、M. V. G. Dutt、E. Togan、A. S. Zibrov、A. Yacoby、R. L. Walsworth 和 M. D. Lukin，《自然》455，644（2008）。[34] R. Schirhagl、K. Chang、M. Loretz 和 C. L. Degen，《物理化学年度评论》65，83（2014）。[35] S. Kolkowitz、A. Safira、A. A. High、R. C. Devlin、S. Choi、Q. P. Unterreithmeier、D. Patterson、A. S. Zibrov、V. E. Manucharyan、H. Park 和 M. D. Lukin，《科学》347，1129（2015）。[36] F. Casola、T. van der Sar 和 A. Yacoby，《自然评论：材料》3，17088（2018）。[37] A. Jenkins、S. Baumann、H. Zhou、S. A. Meynell、Y. Daipeng、K. Watanabe、T. Taniguchi、A. Lucas、A. F. Young 和 A. C. Bleszynski Jayich，《物理评论快报》129，087701（2022）。[38] J. Rovny、S. Gopalakrishnan、A. C. B. Jayich、P. Maletinsky、E. Demler 和 N. P. de Leon，《自然评论：物理》6，753（2024）。[39] G. He、R. Gong、Z. Wang、Z. Liu、J. Hong、T. Zhang、A. L. Riofrio、Z. Rehfuss、M. Chen、C. Yao、T. Poirier、B. Ye、X. Wang、S. Ran、J. H. Edgar、S. Zhang、N. Y. Yao 和 C. Zu，《自然-通讯》16，8162（2025）。[40] G. Kucsko、P. C. Maurer、N. Y. Yao、M. Kubo、H. J. Noh、P. K. Lo、H. Park 和 M. D. Lukin，《自然》500，54（2013）。[41] D. Le Sage、K. Arai、D. R. Glenn、S. J. DeVience、L. M. Pham、L. Rahn-Lee、M. D. Lukin、A. Yacoby、A. Komeili 和 R. L. Walsworth，《自然》496，486（2013）。[42] N. Aslam、H. Zhou、E. K. Urbach、M. J. Turner、R. L. Walsworth、M. D. Lukin 和 H. Park，《自然评论：物理》5，157（2023）。[43] C. Zu、F. Machado、B. Ye、S. Choi、B. Kobrin、T. Mittiga、S. Hsieh、P. Bhattacharyya、M. Markham、D. Twitchen、A. Jarmola、D. Budker、C. R. Laumann、J. E. Moore 和 N. Y. Yao，《自然》597，45（2021）。[44] J. J. Alonso 和 B. All´es，《物理评论B》82，064425（2010）。[45] J. C. Andresen、H. G. Katzgraber、V. Oganesyan 和 M. Schechter，《物理评论X》4，041016（2014）。[46] M. P. Kwasigroch 和 N. R. Cooper，《物理评论A》96，053610（2017），arXiv:1708.06676 [cond-mat]。[47] C. Zhang 和 B. Capogrosso-Sansone，《物理评论A》98，013621（2018）。[48] C. Gannarelli、D. Silevitch、T. Rosenbaum、G. Aeppli 和 A. Fisher，《物理评论B》86，014420（2012）。[49] 我们注意到，已有研究使用量子蒙特卡罗探索了相图的有限切片，针对 $\Delta = 0$、-3.5 [47]，也使用半经典方法研究了低填充率下的情况$\Delta = 0$ [46]。[50] I. Fr´erot、P. Naldesi 和 T. Roscilde，《物理评论B》95，245111（2017）。[51] B. Sbierski、M. Bintz、S. Chatterjee、M. Schuler、N. Y. Yao 和 L. Pollet，《物理评论B》109，144411（2024），arXiv:2305.03673 [cond-mat, physics:physics]。[52] N. Sadoune 和 L. Pollet，SciPost Physics Codebases，9（2022）。[53] 详细的数值方法（量子蒙特卡罗和 cDTWA）信息见补充材料。，推导

平均场理论、簇展开和二聚体修正的推导，以及对 $f \to 0$ 极限的解析处理。[54] J. M. Yeomans, *Statistical mechanics of phase transitions*（克拉伦登出版社，英国牛津，1992）。[55] R. Kubo, 《日本物理学会杂志》17, 1100（1962）。[56] J. Oitmaa、C. Hamer 和 W. Zheng, *Series Expansion Methods for Strongly Interacting Lattice Models*（剑桥大学出版社，2006）。[57] A. Braemer、J. Vahedi 和 M. G¨arttner, 《物理评论B》110，054204（2024）。[58] S. A. Moses、J. P. Covey、M. T. Miecnikowski、B. Yan、B. Gadway、J. Ye 和 D. S. Jin, 《科学》350，659（2015）。[59] M. W. Doherty、N. B. Manson、P. Delaney、F. Jelezko、J. Wrachtrup 和 L. C. Hollenberg, 《物理学报告》528，1（2013）。[60] H. Gao、L. S. Martin、L. B. Hughes、N. T. Leitao、P. Put、H. Zhou、N. U. Koyluoglu、S. A. Meynell、A. C. B. Jayich、H. Park 和 M. D. Lukin, 《自然》646，68（2025）。[61] 我们指出，各向异性可通过弗洛凯工程调节至任意$\Delta > -1$ [77, 78]，实验上已在[79]中得到验证。[62] J. Schachenmayer、A. Pikovski 和 A. M. Rey, 《物理评论X》5，011022（2015）。[63] D. J. Wineland、J. J. Bollinger、W. M. Itano 和 D. J. Heinzen, 《物理评论A》50，67（1994）。[64] W. J. Eckner、N. Darkwah Oppong、A. Cao、A. W. Young、W. R. Milner、J. M. Robinson、J. Ye 和 A. M. Kaufman, 《自然》621，734（2023）。[65] J. A. Hines、S. V. Rajagopal、G. L. Moreau、M. D. Wahrman、N. A. Lewis、O. Markovi´c 和 M. Schleier-Smith, 《物理评论快报》131，063401（2023）。[66] Y. K. Lee、M. Block、H. Lin、V. Fedoseev、P. J. D. Crow-ley、N. Y. Yao 和 W. Ketterle, 《物理评论快报》135，023402（2025）。[67] A. Cuccoli、V. Tognetti 和 R. Vaia, 《物理评论B》52，10221（1995）。[68] G. Giachetti、A. Trombettoni、S. Ruffo 和 N. Defenu, 《物理评论B》106，014106（2022）。[69] D. Wellnitz、M. Mamaev、T. Bilitewski 和 A. M. Rey, 物理评论研究6，L012025（2024）。[70] A. N. Carroll、H. Hirzler、C. Miller、D. Wellnitz、S. R. Muleady、J. Lin、K. P. Zamarski、R. R. W. Wang、J. L. Bohn、A. M. Rey 和 J. Ye, 《科学》388，381（2025）。[71] M. Wallerberger、S. Iskakov、A. Gaenko、J. Kleinhenz、I. Krivenko、R. Levy、J. Li、H. Shinaoka、S. Todo、T. Chen、X. Chen、J. P. F. LeBlanc、J. E. Paki、H. Terlet-ska、M. Troyer 和 E. Gull, 《ALPS 项目核心库更新》（2018），arXiv:1811.08331 [计算物理]。[72] A. Gaenko、A. Antipov、G. Carcassi、T. Chen、X. Chen、Q. Dong、L. Gamper、J. Gukelberger、R. Igarashi、S. Iskakov、M. K¨onz、J. LeBlanc、R. Levy、P. Ma、J. Paki、H. Shinaoka、S. Todo、M. Troyer 和 E. Gull, 《计算机物理通讯》213，235（2017）。[73] N. V. Prokof'ev、B. V. Svistunov 和 I. S. Tupitsyn, 《实验与理论物理学杂志》87，310（1998）。[74] M. P. Allen 和 D. J. Tildesley, *Computer Simulation of Liquids*，第二版（牛津大学出版社，英国牛津，2017）。[75] N. Defenu、T. Donner、T. Macrì、G. Pagano、S. Ruffo 和 A. Trombettoni, 《现代物理评论》95，035002（2023）。[76] C. Lemieux，控制变量，载于 *Wiley StatsRef: Statistics Reference Online*（John Wiley & Sons, Ltd，2017）第 1–8 页。[77] J. Choi、H. Zhou、H. S. Knowles、R. Landig、S. Choi 和 M. D. Lukin, 《物理评论X》**10**，031002（2020）。[78] H. Zhou、J. Choi、S. Choi、R. Landig、A. M. Douglas、J. Isoya、F. Jelezko、S. Onoda、H. Sumiya、P. Cappel- laro、H. S. Knowles、H. Park 和 M. D. Lukin, 《物理评论X》**10**，031003（2020）。[79] L. S. Martin、H. Zhou、N. T. Leitao、N. Maskara、O. Makarova、H. Gao、Q.-Z. Zhu、M. Park、M. Tyler、H. Park、S. Choi 和 M. D. Lukin, 《物理评论快报》**130**，210403（2023），arXiv:2209.09297 [量子物理]。

补充材料

二聚体的磁化率。——在强无序情况下，我们将临界温度对 Δ 的依赖归因于强耦合二聚体的作用。事实上，T_c 的峰值源自二聚体磁化率的峰值，如图 2d 所示。该二聚体磁化率通过式（2）以平均场层次进入计算。下文将对其进行显式计算，并研究其极限行为。

考虑场作用下二聚体相互作用的哈密顿量：

$$H_{ij} = -J_{ij}(s_i^x s_j^x + s_i^y s_j^y + \Delta s_i^z s_j^z) + h\left(s_i^x + s_j^x\right). \quad (6)$$

我们关注二聚体的磁化率χ，它表示在临界温度下，二聚体对来自系统其余部分的场 h 所引发的 XY 序的响应。这可表示为：

$$\chi = \left.\frac{\langle s_i^x + s_j^x\rangle}{\partial h}\right|_{h=0} = \frac{2\left(1 - e^{-E_{\rm gap}/T}\right)/E_{\rm gap}}{1 + e^{-J_{ij}/T} + 2e^{-E_{\rm gap}/T}}. \quad (7)$$

其中，期望值是在温度 T 下按 H_{ij} 所对应的热分布计算的。能隙 $E_{\rm gap} = (1-\Delta)J_{ij}/2$ 隐含地依赖于 Δ。注意，用式（2）的表述方式，该二聚体磁化率为 $\chi = \chi_{ii} + \chi_{ij} + \chi_{ji} + \chi_{jj}$。

对于我们感兴趣的温度范围（接近 T_c），二聚体由 $J_{ij} \gg J_{\rm typ} \sim T$ 定义。在此范围内，能量最高的状态——单重态——的占据数为 $O\left(e^{-J_{ij}/T}\right)$，因此可以忽略。根据能隙 $E_{\rm gap}$，二聚体进一步分为两类：

1. 冻结二聚体，满足 $E_{\rm gap} \gg T$。这是范弗莱克区间（$\chi \sim 1/E_{\rm gap}$），虚激发占主导：

$$\chi_{\text{Van Vleck}} = \frac{2}{E_{\rm gap}} + O\left(e^{-E_{\rm gap}/T}\right) + O\left(e^{-J_{ij}/T}\right).$$

2. 未冻结二聚体，满足 $E_{\rm gap} \ll T$。这是居里区（$\chi \sim 1/T$），热激发占主导：

$$\chi_{\text{Curie}} = \frac{1}{T}\left(\frac{2}{3} + O\left(\frac{E_{\rm gap}}{T}\right)\right) + O\left(e^{-J_{ij}/T}\right).$$

这两个区间在图 2d中清晰可见。冻结的二聚体与 XY 序相隔一个能隙，因为实现 XY 序需要占据能量较高、受到热抑制的三重态。未冻结的二聚体则表现为$S = 1$ 自旋，完全能够形成 XY 序。然而，如果 E_{gap} 过小，这种极化就会因热涨落而不稳定。冻结与

当 E_{gap} 过大（远低于海森堡点）时会导致.....，而当它过小（非常接近海森堡点）时则会发生热混合，两者共同使 χ 在$E_{\mathrm{gap}}/T = 1.0356\ldots$处出现峰值。此时，磁化率达到最大值 $\chi/\chi_H = 1.0926\ldots$，其中$\chi_H$ 是 χ 在海森堡点（$\Delta = 0$）处的值。

补充材料

目录

I. 量子蒙特卡罗 1
A. 算法细节 B. 临界温度的提取 C. 临界能量的提取 1 2 4

II. 局域场分布 4

III. 簇离散截断维格纳近似 (cDTWA) 5

IV. 平均场理论与量子关联修正 6
A. 平均场理论 B. 高温簇展开 C. 一阶簇展开 D. 平均场的二聚体修正 E. 二阶簇展开 7 8 10 13 14

V. 强无序极限的解析处理 14
A. 渐近 $\Delta_c \sim 1-\sqrt{f}$ 行为B. 非渐近 $\Delta_c \sim 1-f$ 行为 15 17

参考文献 20

I. 量子蒙特卡罗

A. 算法细节

为了研究温度为 T 时 H_{XXZ} （正文中的公式 1）的平衡性质，我们采用带有蠕虫型更新的路径积分量子蒙特卡罗（QMC）方法，该方法基于参考文献 [1] 中的代码库进行了调整。代码使用了 ALPSCore 核心库 [2, 3], ，其量子蒙特卡罗算法基于参考文献 [4] ，并进行了两项显著改动。

我们对参考文献 [1] 中代码所做的第一项改动，是使用埃瓦尔德求和来计算二维系统 [5] 的 $1/r^3$ 相互作用。相互作用表示为:

$$J_{ij} = \sum_{\vec{n}\in\mathbf{Z}^2} \frac{J}{|\vec{r}_{ij} + L\vec{n}|^3}, \tag{S1}$$

其中， $\vec{n} \in \mathrm{Z}^2$ 遍历所有有序整数对（m， n），因此自旋 i 会与无限复制系统中自旋 j 的每个周期映像发生相互作用。我们发现，与开放边界条件或周期边界条件相比，这种选择能够改善收敛性。

第二项改动是对稀释晶格的无序实现进行平均。给定底层正方晶格的边长 L ，以及该底层晶格上独立占据格点的填充率 f ，我们随机选择 $N = fL^2$ 个晶格点（取整到最近的奇数）来填充自旋。随后，我们对足够多的无序实现进行平均，以便使所关注可观测量的直方图达到收敛。随着填充率降低，为保持样本均值的不确定度不变，所需的无序实现数量会增加。例如，对于 $f = 0.5$ ，每个点均对 80 个无序实现进行平均；而对于 $f = 0.05$ ，每个点均对 300 个无序实现进行平均。

我们注意到，该算法针对晶格情形进行了优化，并不适用于强无序极限，即自旋随机分布在连续空间中的情况。在这一极限下，蠕虫很容易“卡住”，在两个强相互作用的自旋之间来回跳跃，从而导致每个蒙特卡罗步所需的计算时间变长。因此，本研究能够达到的最低填充率为 $f = 0.05$。

B. 临界温度的提取

我们的任务是求出临界温度 T_c 以及相应的能量密度 E_c。为此，我们使用量子蒙特卡罗计算每个自旋的面内磁化强度，

$$m_{xy}^2 = \frac{1}{N}\sum_{ij}\langle s_i^x s_j^x + s_i^y s_j^y\rangle. \tag{S2}$$

该磁化强度遵循有限尺寸标度形式，

$$m_{xy}^2 L^\eta \sim F\left(L/\xi\right), \tag{S3}$$

其中 F是一个非普适标度函数，而 $\xi \sim |\beta-\beta_c|^{-\nu}$是在逆温度 $\beta = 1/T$下的关联长度。我们采用平均场估计 $\eta = \nu = 1$ [6]，这些估计似乎确实能使不同系统尺寸的数据 [在图 S1a]的插图中塌缩。在临界温度处，关联长度发散，且 $m_{xy}^2 L^\eta$ 变得与 L无关，因此我们可以根据这一交点确定临界点，如图 S1a所示。

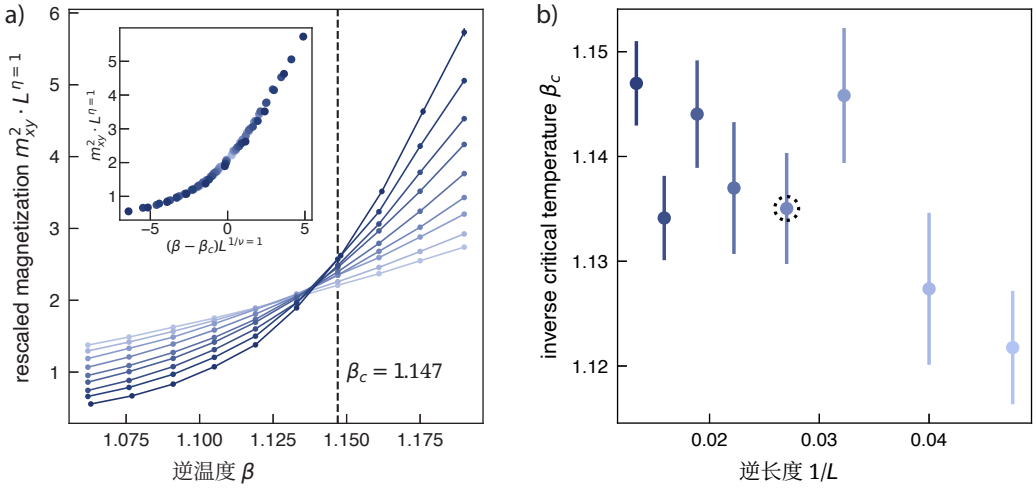


图 S1. 临界温度的 QMC 测量。(a) 提取 $f = 0.5$, $\Delta = 0.0$ 的逆临界温度。每个数据点均取 80 次无序实现的平均值。蓝色越深表示系统尺寸越大，尺寸取值 $L = 21,25,31,37,45,53,63,75,89$。（插图）根据方程（S3）对曲线进行标度塌缩。(b) (a) 中相邻系统尺寸对的交点所对应的 β_c 的漂移。如正文所述，我们报告圆圈标记点的 β_c 。

我们采用控制变量法 [7] 来改进对 m_{xy}^2 的估计。具体而言，我们发现测得的磁化强度与平均两两相互作用 $\overline{J} = \frac{1}{N(N-1)}\sum_{j>i} J_{ij}$ 强相关。磁化强度必须通过蒙特卡罗无序实现进行统计计算，而 $\langle \overline{J_{ij}} \rangle$ 在无序实现上的平均值则计算简单得多，因此可以得到更精确的结果。如果我们对 $\overline{J}$ 的样本均值（在无序实现上取平均）偏离真实均值，就可以利用这一偏差，根据其与$\overline{J}$ 的协方差来修正 m_{xy}^2 的样本均值，具体采用如下修正估计量：

$$\widetilde{m}_{xy}^2 = m_{xy}^2 - \frac{\mathrm{Cov}\left(m_{xy}^2, \overline{J}\right)}{\mathrm{Var}\left(\overline{J}\right)}\left(\overline{J} - \langle \overline{J}\rangle\right), \tag{S4}$$

其中尖括号平均值和（协）方差均在无序平均下计算。简言之，这种方法通过校正异常偏弱或偏强的相互作用，提高了不同无序实现的直方图收敛性（图 S2）。

令 $\beta_c(N_1,\ N_2)$ 为 $m_{xy}^2 L^\eta$ 在两个系统尺寸 $N_1 < N_2$下的交点。随着两者增大，我们预期交点将收敛于真实的临界点 β_c。实际上，$\beta_c(N_1,\ N_2)$ 会随系统尺寸漂移，并且我们始终观察到 $N \lesssim 500$呈非单调变化。当 N 大于此值时，我们发现 β_c 在误差条范围内已收敛。因此，我们始终将 $\beta_c(N_1 = 675,\ N_2 = 1000)$ 报告为临界点（图 S1b中圈出的点），并将误差条加倍——误差条由对无序样本进行自助法计算得出——以计入系统误差。

对于图中所示的大系统尺寸 S1，只有在 β 中搜索恰好位于 $\Delta = 0$的交点时，计算上才可行。这是因为此时无需为每次蒙特

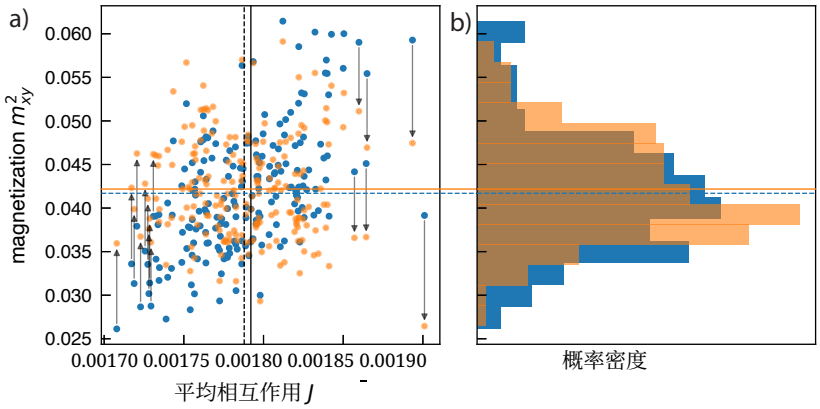


图 S2. 控制变量法。(a) 在 $f = 0.2$, $\Delta = -0.5$, $L = 71$, $\beta = 4.5$，进行量子蒙特卡罗计算，展示了m_{xy}^2 与平均两两相互作用J之间的关系，该结果来自 200 次无序实现。蓝色点表示原始数据，蓝色和黑色虚线分别表示沿各轴的样本均值。黑色实线表示J的真实均值。根据式（S4），利用该均值进行校正，得到橙色点，其新的样本均值由橙色虚线表示。箭头表示偏差最大的点的移动方向。(b) 面板 (a) 中数据的直方图，共用一个 y轴。均值移动了 1%，我们使用移动后的（橙色）均值$\tilde{m}_{xy}^2$ 作为估计值。

卡洛移动计算对角能量，因此运行时间显著缩短。在 $\Delta \neq 0$处，我们依靠从较小系统尺寸得出的初始猜测来缩小搜索范围。该策略如图 S3所示，包含三个步骤：

1. 对于一系列各向异性 $-3 < \Delta < 1$，我们测量 $\beta_c(N_1 = 250, N_2 = 500; \Delta)$，并在 β 中使用线性插值来寻找交点。

2. 恰好在 $\Delta = 0$，我们还测量了 $\beta_c(N_1 = 675, N_2 = 1000; \Delta = 0)$。它与较小$N$的比值为较大 N下 $\Delta \neq 0$提供了初始猜测：我们猜测 $\beta_c(N_1 = 675, N_2 = 1000; \Delta)$ 接近$\beta_c(N_1 = 675, N_2 = 1000; \Delta = 0)$ $\beta_c($ ~~$N_1 = 250, N_2 = 500; \Delta = 0$~~) $\beta_c($~~N_1~~ $= 250, N_2 = 500; \Delta)$

3. 我们使用这些初始猜测，按照步骤 1 的方法计算 $\beta_c(N_1 = 675, N_2 = 1000; \Delta)$，但在 β 中缩小搜索范围。我们强调，此处仅使用第一性原理数据。

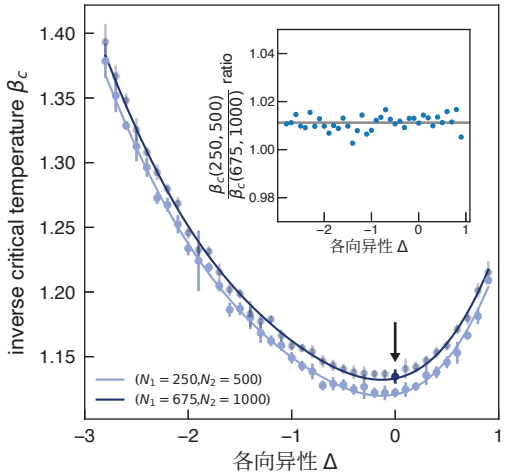


图 S3. 将 β_c 外推至更大的系统尺寸。图中显示了由两个较小系统尺寸计算得到的逆临界温度（浅蓝色点）和由两个较大系统尺寸计算得到的逆临界温度（深蓝色点）。注意，两条曲线的 β_c 之比与 Δ 无关（见插图）。浅蓝色曲线是对浅蓝色数据进行的高斯拟合，而深蓝色曲线则是将同一条曲线按 $\Delta = 0$ 处两点之比进行缩放后的结果（黑色箭头）。然而，后者曲线在所有 Δ 下仍然紧密跟随真实值，从而能够为这些系统尺寸下的量子蒙特卡罗提供精确的初始猜测。

C. 临界能量的提取

为了得到正文中的图 1c，我们对附近的 β 处的量子蒙特卡罗每自旋能量进行线性插值，以计算E_c 在测得的 β_c 处的值。这些临界能量如图 S4所示。在较低温度下，蒙特卡罗步耗时更长，因为蠕虫需要探索的虚时间窗口（大小为 β）不断增大。因此，对于每个 f，我们只考察足够低的温度，以观察到 E_c 降至 E_x以下。

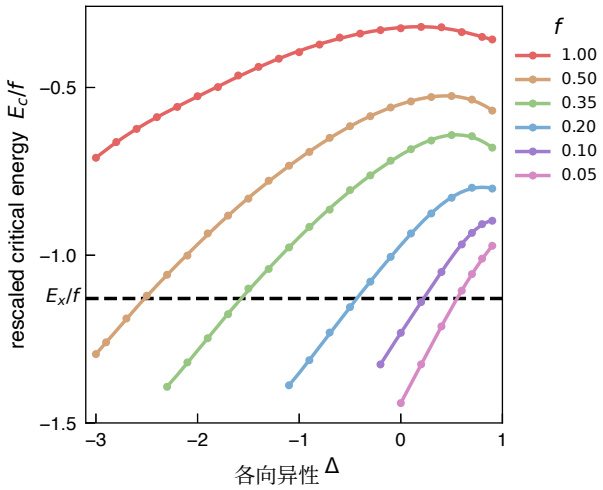


图 S4. 临界能量的 QMC 测量。所用数据与正文图 1c 相同，其中可扩展压缩的相边界由 QMC 临界能量曲线与 x态的能量曲线（黑色虚线）的交点确定。图中展示的 E_c 曲线（其他图中的 T_c 曲线也类似）是通过高斯过程拟合得到的，仅供视觉参考。

II. 局域场分布

本节分析稀释晶格模型中局域场 J_i 的分布：$=\sum_{j\neq i} J_{ij}$ 对于具有 $J_{ij} = Jr_{ij}^{-3}$ 的模型。在 $f = 0.05$ [正文图 3a], 中，分布呈现出多个峰，每个峰都对应晶格上附近自旋的一种特定构型。这些构型由水平、垂直和对角邻居的特定排列定义，它们决定了局域场的最小阈值，因为与更远处自旋的耦合只会增大 J_i。正文图 3a 横轴上的标记表示这些阈值场，其数值列于表S1；这些自旋之外的随机环境会使相应峰的位置向更大的J_i移动。

在 $f \to 0$ 极限下，典型间距远大于晶格尺度 $r_{\mathrm{typ}} \gg a$，与晶格结构相关的峰消失。在此极限下，可以精确计算分布：我们定义自旋密度，

$$\rho = \frac{f}{a^2}, \tag{S5}$$

其中 a 为晶格常数。自旋 i 上的局域场由其到最近邻的距离 r_{nn} 决定，表达式为

$$J_i = \int_{r_{\mathrm{nn}}}^{\infty} 2\pi r \rho \frac{J}{r^3} dr = \frac{2\pi\rho J}{r_{\mathrm{nn}}}. \tag{S6}$$

因此，我们需要求出 r_{nn} 的分布。这可以根据区域 A 为空的概率 $P_{\mathrm{empty}}(A)$ 来计算。将该区域划分为 n 个区域，在极限 $n \to \infty$ 下，其中一个区域非空的概率为$\rho \times A/n$。因此，

$$P_{\mathrm{empty}}(A) = \lim_{n\to\infty} \left(1 - \frac{\rho A}{n}\right)^n = e^{-\rho A}. \tag{S7}$$

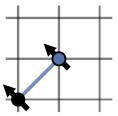
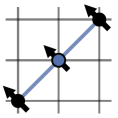
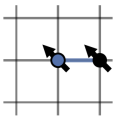
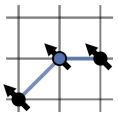
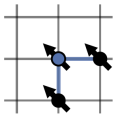
最近邻自旋	阈值 J_i	图示
一个对角邻居	$2^{-3/2} = 0.353\ldots$	
两个对角邻居	$2 \times 2^{-3/2} = 0.707\ldots$	
一个水平/垂直邻居	1	
一个水平/垂直邻居 和一个对角邻居	$1 + 2^{-3/2} = 1.353\ldots$	
两个水平/垂直邻居	2	

表 S1. 在正文的图 3a 中观察到的、导致 J_i 分布峰值的自旋局域构型。中间列给出的数值是中心自旋上的局域场，也是分布中相应特征的阈值。

$r_{\rm nn}$ 的概率密度为，

$$p_{nn}(r_{\rm nn}) = \frac{d}{dr}\overbrace{\left(1 - P_{\rm empty}\left(\pi r_{\rm nn}^2 - \pi a^2\right)\right)}^{\text{probability of spins within radius } r} = 2\pi r_{\rm nn}\rho\, e^{-\rho(\pi r_{\rm nn}^2 - \pi a^2)}. \tag{S8}$$

利用公式（S6）中的关系，可以将其转换为局域场的概率密度：

$$p_J(J_i) = p_{\rm nn}\left(r_{\rm nn} = \frac{2\pi\rho J}{J_i}\right)\left|\frac{dr_{\rm nn}}{dJ_i}\right| = \frac{8\pi^3\rho^3 J^2}{J_i^3} e^{-\rho(4\pi^3\rho^2 J^2/J_i^2 - \pi a^2)} \tag{S9}$$

注意， $r_{\rm typ}$ 根据公式（S8）中的分布定义为典型的最近邻距离。对此，一个常用的度量是几何平均值，表示为：

$$r_{\rm typ} \propto e^{\langle \log(r_{\rm nn})\rangle_{p_{\rm nn}}} = e^{-\gamma/2}\frac{a}{\sqrt{\pi f}}, \tag{S10}$$

其中欧拉常数为 $\gamma = 0.577\ldots$。这证实了预期 $r_{\rm typ} \sim 1/\sqrt{f}$。

III. 簇离散截断维格纳近似（CDTWA）

为捕捉压缩动力学，我们采用与文献 [8]，中相同的 cDTWA 算法，该算法本身改编自文献 [9, 10]。根据实空间匹配算法，将所有自旋聚成对；该算法迭代地将距离最近的两个自旋配对，并将其移出待处理集合，直到所有自旋都完成配对。簇内相互作用采用量子力学方法处理，而簇间相互作用则在平均场层次上处理，同时从对应于初始 x 态的离散维格纳分布中抽样轨迹。该方法能够有效捕捉压缩动力学，并且在低填充率下结合无序平均，可实现高达 $N \sim 10^4$ 的系统尺寸。

我们使用 cDTWA 计算 Wineland 压缩参数， $\xi^2 = N\min_{\hat{n}\perp\hat{x}}\mathrm{Var}\left[\hat{n}\cdot\vec{S}\right]/\langle S^x\rangle^2$，其中 $\vec{S} = \sum_i \vec{s}_i$为总自旋算符。 $\xi^2 < 1$ 表示计量压缩 [11]。我们还可以计算磁化强度 m_{xy}^2；对于 $E_x < E_c$，它应热化至非零有限值，而对于 $E_x > E_c$，则会衰减至零。结果如

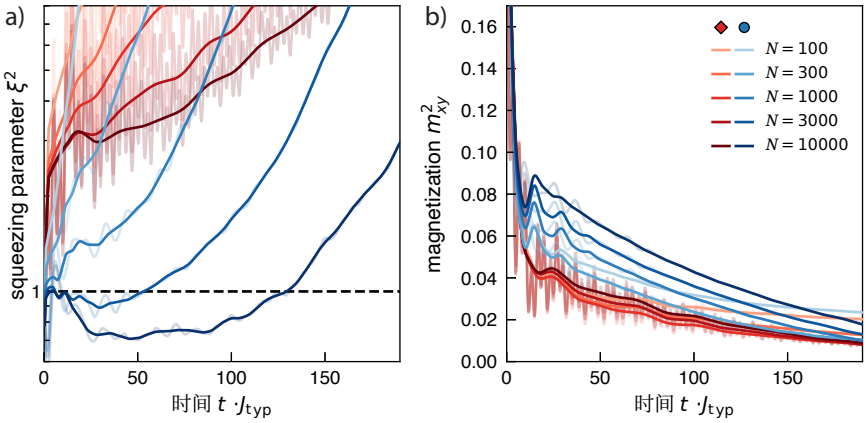


图 S5。cDTWA 下的动力学演化。(a) 与正文中的图 3c 一样，我们展示了在 $f = 0.05$、$\Delta = 0$ 35 时 ξ^2 的时间演化，此时搁置了 1.5%（红色，金刚石）和 %（蓝色，圆形）的自旋。实线曲线由原始数据（浅色曲线）经滤除二聚体振荡后计算得到。(b) 与面板 (a) 相同数据得到的磁化强度 m_{xy}^2。

图 S5所示，其中比较了轻微和显著的二聚体搁置。面板 (a) 中的数据与正文图 3c 的数据相对应。

图 S5b 中的两种情况均未在 m_{xy}^2中显示出平台，这是因为我们只考察了发生压缩的早期预热化时间。不过，我们确实看到，只有在显著搁置、使得 m_{xy}^2 的情况下，随着系统尺寸增大， $E_x < E_c$ 才会增长（见正文中的图 3b），并且预计在晚时间达到平台。另一方面，对于搁置程度最低、使得 $E_x > E_c$ 的情况，我们发现其随系统尺寸快速收敛，并且预计收敛后的曲线会衰减至 0。

在低填充率下，除了压缩动力学之外，还存在与二聚体相关的更快振荡。例如，当制备在 x态时，最近的二聚体（在晶格上相距 1）以频率 $\frac{1}{4\pi}$振荡。次近的二聚体（相距 $\sqrt{2}$，即对角邻居）以频率 $\frac{1}{4\pi}\frac{1}{2^{3/2}}$振荡，依此类推。对最快的 3 种二聚体振荡应用陷波滤波器后，得到平滑曲线。

IV. 平均 场理论与量子关联修正 S

本节中，我们推导平均场理论以及若干用于描述不同主导阶量子关联的修正。我们采用与正文], 中的 H_{XXZ} [式 (1) 相同的哈密顿量，但将其改写为把各向异性吸收到相互作用矩阵中：

$$H = -\frac{1}{2}\sum_{ij}\sum_{a\in\{x,y,z\}} s_i^a J_{ij}^a s_j^a, \qquad J_{ij}^a = [1 + (\Delta - 1)\delta_{az}]\,(1 - \delta_{ij})J_{ij}, \quad J_{ij} = Jr_{ij}^{-3} \tag{S11}$$

其中，对 i, j 的求和是对自旋而非晶格点进行的，且只有其中的比例 f 被占据。

所有这些工作的出发点都是第 IVA 节中的纯平均场理论，该理论无法捕捉任何量子涨落。因此，它预测的是 $T_c \sim f$ 而不是 $T_c \sim f^{3/2}$，并且不依赖于伊辛各向异性 Δ。

为捕捉少体量子关联，我们进行了高温簇展开，该展开在第 IVB 节中推导。在第 IVC 节中，我们使用该展开显式计算了 T_c 的一阶结果。该计算确实引入了Δ依赖性，同时还呈现出强无序极限和弱无序极限下两种不同 f 标度之间的交叉。因此，事实证明它在 $f = 1$ 附近表现良好，但在 $f \to 0$ 极限下失效，原因在于 T_c 在该极限下仍然以不正确的方式随 f 标度，并且 Δ_{peak} 中峰值的位置 T_c 不会向海森堡点移动。

在第 IVD 节中，我们通过纳入相互作用最强的成对粒子的精确关联（即“二聚体”），研究了对平均场假设的另一种扩展。这一修正对于 $f \to 0$表现良好，因为数值结果给出了 T_c 随 f变化的正确标度，并且成功再现了 T_c 峰值向海森堡点移动的现象。

最后，在第 IVE节中，我们回到簇展开并推导二阶贡献。结果表明，这也足以捕捉 T_c 随 Δ 变化时峰值的正确偏移，尽管无法用它绘制完整的 T_c 曲线。

A. 平均场理论

这里我们推导 T_c 的平均场估计，并说明它无法捕捉其对 Δ和f的正确依赖关系。平均场计算使用变分态 ρ_0，该变分态用总自旋算符 $S^a = \sum_i s_i^a$表示为

$$\rho_0 = \frac{1}{Z_0} e^{-\beta H_0}, \qquad Z_0 = \mathrm{Tr}\left(e^{-\beta H_0}\right), \qquad H_0 = -hS^x \tag{S12}$$

其中， H_0 是变分哈密顿量， Z_0 是相应的配分函数。相对于该态的期望值记为 $\langle O\rangle_0 = \mathrm{Tr}(\rho_0 O)$。

变分自由能为真实自由能提供了一个上界

$$F_0 = \langle H\rangle_0 - TS_0 \tag{S13}$$

其中，熵采用通常的形式 $S_0 = -\mathrm{Tr}(\rho_0 \ln(\rho_0))$。注意，变分量可写为

$$F_0 = \langle H_{\mathrm{diff}}\rangle_0 - T\ln(Z_0), \qquad \text{with} \qquad H_{\mathrm{diff}} = H - H_0. \tag{S14}$$

通过对变分参数 h最小化 F_0 ，可以得到系统的近似相图。在 $h = 0$ 处的极小值对应顺磁相，而 $|h| > 0$ 对应长程 XY 有序。因此，当 $h = 0$ 从极小值变为极大值时，就会出现临界点 $T_c = 1/\beta_c$：

$$\left.\frac{\partial^2 F_0}{\partial h^2}\right|_{h=0} = 0. \tag{S15}$$

我们将分别处理方程（S14）中的两项，而这需要引入零场磁化率，

$$\chi_{ij}^{ab} = \int_0^\beta d\tau\, \langle s_i^a(0) s_j^b(\tau)\rangle_{00} = \frac{\beta}{4}\delta_{ij}\delta_{ab}, \tag{S16}$$

其中，我们为算符 O 引入了记号 $\langle O\rangle_{00} = \langle O\rangle_0|_{h=0}$，而 $O(\tau) = e^{-\tau H_0} O e^{\tau H_0}$ 是在 H_0作用下经虚时间演化的海森堡绘景算符。由最后一个等式可见，在平均场理论中，磁化率完全是对角的。

该磁化率满足如下关系：

$$\left.\frac{\partial\langle s_i^a\rangle_0}{\partial h}\right|_{h=0} = \int_0^\beta d\tau\, \langle s_i^a(0) S^x(\tau)\rangle_{00} = \sum_j \int_0^\beta d\tau\, \langle s_i^a(0) s_j^x(\tau)\rangle_{00} = \sum_j \chi_{ij}\delta_{ax} \tag{S17}$$

$$\text{with } \chi_{ij} := \chi_{ij}^{xx} = \frac{\beta}{4}\delta_{ij}. \tag{S18}$$

现在，式（S14）中第一项的导数为：

$$\begin{aligned}
\partial_h^2 \langle H_{\mathrm{diff}}\rangle_0\big|_{h=0} &= -\frac{1}{2}\sum_{ij}\sum_{a\in\{x,y,z\}} \partial_h^2 \left(\langle s_i^a\rangle_0 J_{ij}^a \langle s_j^a\rangle_0\right)\Big|_{h=0} + \partial_h^2\left(h\sum_i \langle s_i^x\rangle_0\right)\Big|_{h=0} \\
&= -\sum_{ij}\sum_{a\in\{x,y,z\}} \left.\frac{\partial\langle s_i^a\rangle_0}{\partial h}\right|_{h=0} J_{ij}^a \left.\frac{\partial\langle s_j^a\rangle_0}{\partial h}\right|_{h=0} + 2\sum_i \left.\frac{\partial\langle s_i^x\rangle_0}{\partial h}\right|_{h=0} \\
&= -\sum_{ijkl} \chi_{ij} J_{jk} \chi_{kl} + 2\sum_{ij}\chi_{ij}.
\end{aligned} \tag{S19}$$

对于第二行，根据 $\langle s_i^a\rangle_{00} = 0$ 的对称性，我们只保留了乘积法则中仍然存在的项 $s_i^a \to -s_i^a$ （ H [式（S11）] 处于 $h = 0$时）。

我们还有，

$$\begin{aligned}
\partial_h^2(-T\ln Z_0)\big|_{h=0} &= -T\partial_h \left(Z_0^{-1}\partial_h Z_0\right)\big|_{h=0} \\
&= -T\partial_h \int_0^\beta d\tau\, \langle S^x(\tau)\rangle_0\Big|_{h=0} \\
&= -\sum_i \left.\frac{\partial\langle s_i^x\rangle_0}{\partial h}\right|_{h=0} = -\sum_{ij}\chi_{ij}.
\end{aligned} \tag{S20}$$

其中，在第三行中，我们用到了以下事实：对于任意算符 O，$\langle O(\tau)\rangle = \langle O\rangle$。

将方程（S19）与（S20）相加，在临界温度下有：

$$\left.\frac{\partial^2 F_0}{\partial h^2}\right|_{h=0} = -\sum_{ijkl}\chi_{ij}\,J_{jk}\,\chi_{kl} + \sum_{ij}\chi_{ij} = 0 \tag{S21}$$

将 χ_{ij} 的形式代入方程（S18），得到临界温度：

$$T_{\mathrm{c}}^{\mathrm{MF}} = \frac{1}{4}\frac{1}{N}\sum_{ij} J_{ij} \tag{S22}$$

同样地，我们实际上是在对自旋而非晶格点求和；在无限系统中，可以将其转换为对所有晶格点（定义为集合 Λ）求和，从而直接进行计算。定义 f_i：占据的晶格点取 1，空的晶格点取 0，

$$\begin{aligned}
\frac{1}{N}\sum_{ij} J_{ij} &= \frac{1}{fN_\Lambda}\sum_{ij\in\Lambda} f_i f_j J_{ij} && (N_\Lambda = L^2)\\
&= \frac{1}{f}\left\langle f_i \sum_{j\in\Lambda} f_j J_{ij}\right\rangle_{i\in\Lambda} = \frac{1}{f} f\left\langle N_\Lambda \langle f_j J_{ij}\rangle_{j\in\Lambda}\right\rangle_{i\in\Lambda} && (\ \langle f_i\rangle_{i\in\Lambda} = f\ )\\
&= N_\Lambda\left\langle \langle f_j\rangle_{j\in\Lambda}\langle J_{ij}\rangle_{j\in\Lambda}\right\rangle_{i\in\Lambda} = N_\Lambda f\langle J_{ij}\rangle_{ij\in\Lambda}\\
&= f\left\langle \sum_{j\in\Lambda} J_{ij}\right\rangle_{i\in\Lambda},
\end{aligned} \tag{S23}$$

其中，我们利用了 f_i 与晶格点无关这一性质，将晶格点上的平均值进行因式分解。

后一个对晶格点的求和，对于任意 $i\in\Lambda$ 都可以精确地写成

$$\sum_{j\in\Lambda} J_{ij} = 4J\sum_{n=1}^{\infty}\sum_{m=0}^{\infty}(n^2+m^2)^{-3/2} = 9.03\ldots \tag{S24}$$

将该求和式代入方程（S22），得到平均场临界温度：

$$T_{\mathrm{c}}^{\mathrm{MF}} \approx 2.25\ldots \times Jf. \tag{S25}$$

对 T_{c} 的这一估计未能体现任何 Δ 依赖性，其标度为 $\sim f$ 而非 $\sim f^{3/2}$，因此需要进行修正。

B. 高温簇展开

本节将阐述高温簇展开的形式体系，该展开能够捕捉少体关联对平均场理论的修正。按照此处的介绍，在第IVC 节和第IVE 节中，我们将分别推导完整的一阶和二阶修正。

平均场临界温度远高于 J_{typ}，因此，为了将量子关联纳入平均场处理的修正，我们对变分自由能关于 β的幂次进行高温（累积量）簇展开 [12, 13]。我们首先写出新的变分试探态，

$$H_\lambda = H_0 + \lambda H_{\mathrm{diff}} \tag{S26}$$

其中我们引入展开参数 $0\le\lambda\le 1$，使其能够在平均场哈密顿量H_0 与真实哈密顿量 $H_1 = H$之间进行调节。具体而言，我们希望以微扰方式重新引入在 H_0中被忽略的 H关联。鉴于 $\beta_{\mathrm{c}}H \ll 1$这一观察，我们通过按 λ的幂次展开来实现这一点，并进行截断（因为 λ 的每个幂次都伴随 βH的一个幂次），同时取 $\lambda\to 1$。我们使用下标 λ 替代下标 0，以表示新的试探态。

利用恒等式 $\partial_\lambda \ln(Z_\lambda) = -\beta\langle H_{\mathrm{diff}}\rangle_\lambda$，我们得到变分自由能，

$$F_\lambda = \langle H - H_\lambda\rangle_\lambda - T\ln(Z_\lambda) = -T\left[(1-\lambda)\partial_\lambda\ln(Z_\lambda) + \ln(Z_\lambda)\right]. \tag{S27}$$

我们使用时间序展开，

$$e^{-\beta H_\lambda} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-\lambda)^n}{n!} \int_0^\beta d\tau_1 \cdots \int_0^\beta d\tau_n \mathcal{T}\left[H_{\text{diff}}(\tau_1)\cdots H_{\text{diff}}(\tau_n)\right] e^{-\beta H_0}$$

其中 $\mathcal{T}$ 表示时间排序，海森堡绘景下的时间演化仍受 H_0控制。由此可写为，

$$\frac{Z_\lambda}{Z_0} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-\lambda)^n}{n!} C_n \quad \text{with} \quad C_n = \int_0^\beta d\tau_1 \cdots \int_0^\beta d\tau_n \left\langle \mathcal{T}\left[H_{\text{diff}}(\tau_1)\cdots H_{\text{diff}}(\tau_n)\right]\right\rangle_0 . \tag{S28}$$

其中，矩 C_n 是 H_{diff}的 n 点关联函数。

那么，ln(Z_λ)可写为，

$$\ln\left(\frac{Z_\lambda}{Z_0}\right) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-\lambda)^n}{n!} K_n, \quad \text{with} \quad K_n = \sum_{k=0}^{n} (-1)^{k-1}(k-1)!\, \mathcal{B}_{n,k}(C_1, \cdots, C_{n-k+1}), \tag{S29}$$

其中， K_n 是相应的累积量，即 n点连通关联函数。这里将其表示为矩 $\{C_n\}$ 的函数，并通过不完全贝尔多项式 $\mathcal{B}_{n,\,k}$给出。我们只会用到最高至 $n = 3$的项，因此所关注的累积量为，

$$K_0 = 0, \quad K_1 = C_1, \quad K_2 = C_2 - C_1^2, \quad K_3 = C_3 - 3C_2C_1 + 2C_1^3. \tag{S30}$$

代入式 (S27，即可得到关于 λ的自由能展开，从而得到 n 阶近似，

$$F_\lambda^{(n)} = \sum_{m=0}^{n} \frac{(-\lambda)^m}{m!} F_m \quad \text{with} \quad F_m = \begin{cases} T(K_1 - \ln Z_0) & m = 0 \\ T(K_{m+1} + (m-1)K_m) & m > 0 \end{cases} \tag{S31}$$

其中， F_0 就是平均场自由能（式 (S14）。

计算临界温度需要计算二阶导数 F''_λ，这意味着我们需要能够对任意给定的关联函数 C_n 求导。关联函数及其导数都可以用以下对象表示:

$$A_{n,m} = \frac{1}{D} \int_0^\beta d\tau_1 \cdots \int_0^\beta d\tau_{n+m} \mathrm{Tr}\left(\mathcal{T}\left[H_{\text{diff}}(\tau_1)\cdots H_{\text{diff}}(\tau_n) H'_{\text{diff}}(\tau_{n+1})\cdots H'_{\text{diff}}(\tau_{n+m})\right] e^{-\beta H_0}\right), \tag{S32}$$

其中 $D = 2^N$ 为希尔伯特空间维数，并注意到 $H'_{\text{diff}} = -H'_0 = S^x$，因为 H 与 h无关。事实上，该对象关于 h的导数满足递推关系:

$$A'_{n,m} = nA_{n-1,m+1} + A_{n,m+1}, \tag{S33}$$

这可 以通过对乘积法则各项进行计数得到。

如果导数作用于 $H_{\text{diff}}(\tau)$, 则其变为 $H'_{\text{diff}}(\tau)$，因此 $n \to n-1$，并且 $m \to m+1$，其中有 n项属于此类。这是方程（S33）的第一项。另一方面，如果导数作用于 $H'_{\text{diff}}(\tau)$，则其为零（因为 $H'_0 = -S^x$不含 h依赖）。最后，如果导数作用于时间演化，我们使用积分恒等式

$$\partial_h e^{-\tau H_0} = \int_0^\tau d\tau' e^{-\tau' H_0}(-H'_0)e^{-(\tau-\tau')H_0} = \int_0^\tau d\tau' H'_{\text{diff}}(\tau') e^{-\tau H_0} \tag{S34}$$

可以看到，额外引入了一个 $H'_{\text{diff}}(\tau)$，并采用了适当的时间序，因此 $m \to m+1$。这是式（S33）的第二项。

我们可以通过考察式 (S33) 的递推关系遍历 $\{n, m\}$ A_n、$_m$ 对象的 k晶格所经过的路径，来计算高阶导数。$m \to m+k$ 阶导数取 $n \to n-p$ 和 p，其中 k从 0 到 p。对于给定的 $\binom{k}{p}$，通过连续求导，从 (n, m) 到 $(n-p,$ $m+k)$ 有 p 条路径，这些路径对应于 k 个步骤中哪些步骤贡献了式 (S33) 的第一项。每一步都带有一个因子，即当前的 n，所有因子相乘后得到 $n!/(n-p)! = p!\binom{n}{p}$。由此可得 k阶导数的一般公式，

$$\frac{\partial^k A_{n,m}}{\partial h^k} = \sum_{p=0}^{k} p! \binom{k}{p} \binom{n}{p} A_{n-p,m+k}. \tag{S35}$$

由于我们希望在求导后令 $h=0$，因此使用以 $h=0$ 为中心的泰勒级数展开会很有帮助，

$$A_{n,m}=\sum_{k=0}^{\infty}\frac{h^k}{k!}A^{(k)}_{n,m}\quad\text{with}\quad A^{(k)}_{n,m}:=\left.\frac{\partial^k A_{n,m}}{\partial h^k}\right|_{h=0}=\sum_{p=0}^{k}p!\binom{k}{p}\binom{n}{p}A^{(0)}_{n-p,m+k},\tag{S36}$$

其中，上标 (k) 表示取 k 阶导数，然后令 $h=0$，因此我们隐式地定义了 $A^{(0)}_{n,\,m}=A_{n,\,m}|_{h=0}$。

我们可以将式（S28）中的关联函数与这些量联系起来，

$$C_n=\frac{A_{n,0}}{A_{0,0}}=\frac{\sum_{k=0}^{\infty}\frac{h^k}{k!}\sum_{p=0}^{k}p!\binom{k}{p}\binom{n}{p}A^{(0)}_{n-p,k}}{\sum_{k=0}^{\infty}\frac{h^k}{k!}A^{(0)}_{0,k}},\tag{S37}$$

因此 h 的依赖关系是显式的。

现在我们只需计算 $A^{(0)}_{n,\,m}=A_{n,\,m}|_{h=0}$。回到式（$A_{n,\,m}$ 中 S32 的定义，由于$H_0|_{h=0}=0$，我们有 $H_{\rm diff}(\tau)|_{h=0}=H_{\rm diff}|_{h=0}=H$，以及 $H'_{\rm diff}(\tau)|_{h=0}=H'_{\rm diff}|_{h=0}=S^x$。尽管所有算符在虚时间中都保持不变，但由于它们不对易，时间序仍然很重要，因此我们有，

$$A^{(0)}_{n,m}=\frac{1}{D}\beta^{n+m}\mathrm{Tr}\left(\overline{H^n(S^x)^m}\right),\tag{S38}$$

其中，上划线表示对 $n+m$ 算符排序的所有排列取平均（不过，由于迹的缘故，许多排列是等价的）。

我们可以立即计算出它的一些值。如果 m 为奇数，则 $A^{(0)}_{n,\,m}=0$，因为迹内的乘积在 S^z 基底中是非对角的（该基底由 H 守恒），因此迹为零。我们还有 $A^{(0)}_{0\,,\,0}=1$，以及 $A^{(0)}_{1\,,\,0}=0$，因为 H 无迹。

将这些规则应用于方程（C_n）中 S37 的导数，我们得到：

$$C_n|_{h=0}=A^{(0)}_{n,0},\tag{S39a}$$
$$C'_n|_{h=0}=0,\tag{S39b}$$
$$C''_n|_{h=0}=A^{(0)}_{n,2}-A^{(0)}_{n,0}A^{(0)}_{0,2}+2nA^{(0)}_{n-1,2}+n(n-1)A^{(0)}_{n-2,2}.\tag{S39c}$$

C. 一阶簇展开

现在我们证明，对于 λ 的一阶项，围绕平均场 $T_{\rm c}$ 进行簇展开会引入 Δ 依赖，并且在 $f=1$ 附近是有效的。结合方程 S30 和 S39，可得以下（广延、无量纲）量：

$$\frac{1}{\beta^2 N}K''_1|_{h=0}=\beta B_1+2B_0,\tag{S40a}$$
$$\frac{1}{\beta^2 N}K''_2|_{h=0}=\beta^2 B_2+4\beta B_1+2B_0,\tag{S40b}$$

其中，我们定义了方程（S38）中各对象的全连接部分，并进行了重新缩放，使其 β 无关且为广延量，

$$B_0=N^{-1}\beta^{-2}A^{(0)}_{0\,2}\,,\qquad=\frac{1}{4},\tag{S41a}$$
$$B_1=N^{-1}\beta^{-3}A^{(0)}_{1\,2}\,,\qquad=-\frac{1}{16}f\frac{1}{L^2}\sum_{ij\in\Lambda}J_{ij},\tag{S41b}$$
$$B_2=N^{-1}\beta^{-4}\left(A^{(0)}_{2,2}-A^{(0)}_{2,0}A^{(0)}_{0,2}\right)\qquad=\frac{1}{64}\left(2f^2\frac{1}{L^2}\sum_{ijk\in\Lambda}J_{ij}J_{jk}-\frac{2}{3}(4+\Delta+\Delta^2)f\frac{1}{L^2}\sum_{ij\in\Lambda}J_{ij}^2\right).\tag{S41c}$$

方程（S41）中的最终表达式是直接由方程（S38）通过对全连接图求和得到的，本节余下部分将对此作出解释。H 和 S^x 是自旋算符的求和，只有以下项的迹

非零：所有算符要么成对作用于具有相同自旋分量的自旋上，要么以三元组形式作用于自旋上，且每个自旋分量各一个（例如 $\mathrm{Tr}(s_i^x s_i^x)$ 或 $\mathrm{Tr}(s_i^x s_i^y s_i^z)$）。在图示语言中，我们将每个单格点算符表示为一个点；对于 $A_n^{(0)},\ m$，共有 $2n+m$ 个点。如果一个算符的指标为 i，而另一个的指标为 j，则用克罗内克δ函数 δ_{ij} 表示这两个算符必须作用于同一格点，我们用连接它们的黑线来表示这一点。如果两个算符来自 H，它们也不能作用于同一格点，这用一个包围它们的椭圆表示。算符的顺序很重要，并且由于迹的性质，该顺序是循环的。

我们使用另外两种线型来表示仅保留全连接图所需的条件。全连接图是指由于对易规则导致的符号翻转，而无法分解为等价子图乘积的图。我们用红色锯齿线表示 $(1-\delta_{ij})$——对于那些作用于同一格点的算符会改变对易规则、从而使图变成非连通图之一的情况，这是必要的。另一方面，也可能出现这样的情况：作用于同一格点且属于不同自旋分量的多个算符，会由于对易规则使原本非连通的图变为连通图。在这些情况下，我们用双线表示两对算符作用于相同的格点；此时必须先减去相应的、未被抵消的非连通图，再加上连通图的贡献。（同样，我们用三线表示另一对彼此作用于同一格点、但与单线或双线不同的算符。）

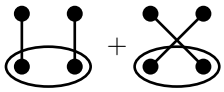
出现的最简单图对应于：

$$B_0 = \beta^{-2} A_{0,2}^{(0)} = D^{-1}\mathrm{Tr}(S^x S^x) = D^{-1}\sum_{nm}\mathrm{Tr}(s_n^x s_m^x)$$

$$= \bullet\!\!-\!\!\bullet = \frac{1}{4}\sum_{nm}\delta_{nm} = \frac{1}{4}N.$$

当 t　算符多于两个时，我们必须计算它们配对的不同方式：

$$B_1 = \beta^{-3} A_{1,2}^{(0)} = D^{-1}\mathrm{Tr}(HS^x S^x) = -D^{-1}\frac{1}{2}\sum_{ij}\sum_{\alpha\in\{x,y,z\}}\sum_{nm} J_{ij}^{\alpha}\mathrm{Tr}\left(s_i^\alpha s_j^\alpha s_n^x s_m^x\right)$$

$$=$$  $$+$$

$$= -\frac{1}{16}\frac{1}{2}\sum_{ij}\sum_{\alpha\in\{x,y,z\}}\sum_{nm} J_{ij}^{\alpha}(\delta_{in}\delta_{jm}\delta_{\alpha x} + \delta_{im}\delta_{jn}\delta_{\alpha x}) = -\frac{1}{16}\sum_{ij} J_{ij}.$$

最后，我们转向 B_2，并直接枚举相关的图。对于每组图对应的方程，我们默认对其中出现的所有指标求和，其中拉丁字母表示自旋指标，希腊字母表示泡利指标。注意，迹中的算符有两种不等价的排列顺序：$\mathrm{Tr}\left(HHS^x S^x\right) = \frac{2}{3}\mathrm{Tr}(HHS^x S^x) + \frac{1}{3}\mathrm{Tr}(HS^x HS^x)$。第一项对应的图见表 S2，第二项对应的图见表 S3。将所有图中按相应权重加权的贡献求和，即得 B_2 在式（S41c）中给出的最终表达式。

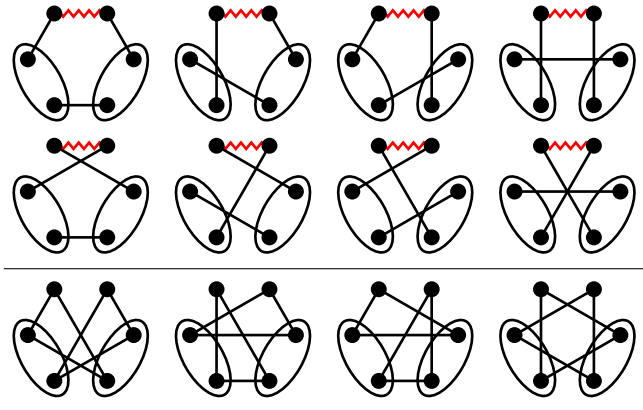
	$D^{-1}\frac{1}{4}\sum J_{ij}^{\alpha}J_{kl}^{\beta}\frac{1}{64}\delta_{in}\delta_{jk}\delta_{ml}\delta_{\alpha x}\delta_{\beta x}(1-\delta_{nm})$ $= \frac{1}{64}\frac{1}{4}\left(\sum_{ijk} J_{ij}J_{jk} - \sum_{ij} J_{ij}^{\ 2}\right)$
	$D^{-1}\frac{1}{4}\sum J_{ij}^{\alpha}J_{kl}^{\beta}\frac{1}{64}\delta_{in}\delta_{kn}\delta_{jm}\delta_{lm}(\delta_{\alpha y}\delta_{\beta z} + \delta_{\alpha z}\delta_{\beta y})$ $= \frac{1}{64}\frac{1}{4}\left(i^2 + (-i)^2\right)\Delta\sum_{ij} J_{ij}^2 = -\frac{1}{64}\frac{1}{2}\Delta\sum_{ij} J_{ij}^2$

表 S2. 对应于 $\mathrm{Tr}(HHS^x S^x)$ 中全连接贡献的各图及其单独求值，如 $A_{2\,2}^{(0)}$ 所示，(S38)

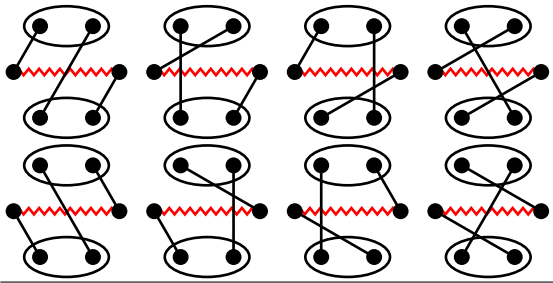
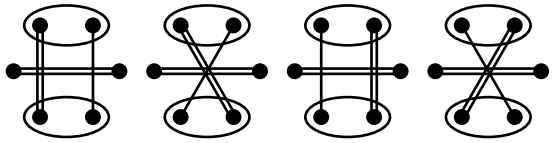
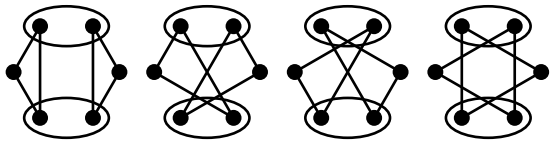
	$D^{-1}\frac{1}{2}\sum J_{ij}^{\alpha}J_{kl}^{\beta}\frac{1}{64}\delta_{in}\delta_{jk}\delta_{ml}\delta_{\alpha x}\delta_{\beta x}(1-\delta_{nm})$ $= \frac{1}{64}\frac{1}{4}\left(\sum_{ijk} J_{ij}J_{jk} - \sum_{ij} J_{ij}^2\right)$
	$D^{-1}\frac{1}{4}\sum J_{ij}^{\alpha}J_{kl}^{\beta}\frac{1}{64}\delta_{ik}\delta_{jl}\delta_{nm}\delta_{in}\delta_{\alpha\beta}$ $\times(-(\delta_{\alpha x}+\delta_{\alpha y}+\delta_{\alpha z}) + (\delta_{\alpha x}-\delta_{\alpha y}-\delta_{\alpha z}))$ $= \frac{1}{64}\frac{1}{4}(-2-2\Delta^2)\sum_{ij} J_{ij}^2 = -\frac{1}{64}\frac{1}{2}(1+\Delta^2)\sum_{ij} J_{ij}^2$
	$D^{-1}\frac{1}{2}\sum J_{ij}^{\alpha}J_{kl}^{\beta}\frac{1}{64}\delta_{in}\delta_{kn}\delta_{jm}\delta_{lm}(\delta_{\alpha y}\delta_{\beta z}+\delta_{\alpha z}\delta_{\beta y})$ $= \frac{1}{64}\frac{1}{4}\left(i(-i) + (-i)i\right)\Delta\sum_{ij} J_{ij}^2 = \frac{1}{64}\frac{1}{2}\Delta\sum_{ij} J_{ij}^2$

表 S3. Tr(的图HS^xHS^x)，展示方式与表 S2 相同。

按照式（S23）的思路，对 J_{ij} 相互作用乘积的自旋求和可改写为对晶格格点 Λ 求和，唯一的变化是 $n-1$ 对 f 指标求和时需要乘以填充率因子 n。

根据公式 (S31)，自由能的簇展开一阶项为：

$$F_\lambda^{(1)} = T(K_1 - \ln Z_0 - \lambda K_2). \tag{S42}$$

利用公式 (S20) 和 (S40)，计算单位点自由能 $f = F/N$ 关于 λ 的一阶项，其在$h=0$ 处的二阶导数为：

$$\begin{aligned}\left.\frac{\partial^2 f_\lambda^{(1)}}{\partial h^2}\right|_{h=0} &= -\overbrace{\beta/4}^{T\ln Z_0} + \overbrace{\beta^2 B_1 + 2\beta B_0}^{TK_1} - \lambda\overbrace{(\beta^3 B_2 + 4\beta^2 B_1 + 2\beta B_0)}^{TK_2} \\ &= \beta/4 + \beta^2 B_1 - \lambda(\beta/2 + 4\beta^2 B_1 + \beta^3 B_2).\end{aligned} \tag{S43}$$

其中，上括号表示相应的项 $F_\lambda^{(1)}$，每个贡献均由该项推导而来；对于最后一行，我们将公式 (S41a) 代入 B_0

令公式 (S43) 等于 0，即可求出按 β_c 的各阶展开中的逆临界温度 λ。结果为：

$$\beta_c^{(\lambda)} = -\frac{1}{4B_1} + \lambda\frac{-8B_1^2 + B_2}{16B_1^3} + O(\lambda^2).$$

截断至 $O(\lambda)$，然后取 $\lambda \to 1$，我们得到平均场逆临界温度$\beta_c^{\mathrm{MF}} = (T_c^{\mathrm{MF}})^{-1}$的一阶簇展开（CE1）修正，

$$\begin{aligned}\beta_c^{\mathrm{CE1}} &= \left(3 - \frac{2\frac{1}{L^2}\sum_\Lambda J_{ij}J_{jk} - \frac{2}{3}(4+\Delta+\Delta^2)f^{-1}\frac{1}{L^2}\sum_\Lambda J_{ij}^2}{\left(\frac{1}{L^2}\sum_\Lambda J_{ij}\right)^2}\right)\beta_c^{\mathrm{MF}} \\ &= \left(1 + \frac{2(4+\Delta+\Delta^2)f^{-1}\frac{1}{L^2}\sum_\Lambda J_{ij}^2}{3\left(\frac{1}{L^2}\sum_\Lambda J_{ij}\right)^2}\right)\beta_c^{\mathrm{MF}}\end{aligned}$$

其中 $\sum_\Lambda$ 隐式地表示 所有晶格点上的所有指标。对于第二行，我们利用了以下事实：

$$\frac{1}{L^2}\sum_{ijk\in\Lambda} J_{ij}J_{jk} = \frac{1}{L^2}\sum_{j\in\Lambda}\left(\sum_{i\in\Lambda} J_{ij}\right)^2 = \left\langle\left(\sum_{i\in\Lambda} J_{ij}\right)^2\right\rangle_{i\in\Lambda} = \left\langle\sum_{i\in\Lambda} J_{ij}\right\rangle_{i\in\Lambda}^2 = \left(\frac{1}{L^2}\sum_{ij\in\Lambda} J_{ij}\right)^2$$

由于在无限系统中，这些求和与所平均的参考格点无关。我们也可以$L^{-2}\sum_{\Lambda} J_{ij}^2$采用与方程（S24）相同的方法计算 $i \in \Lambda$,

$$\sum_{j\in\Lambda} J_{ij}^2 = 4\sum_{n=1}^{\infty}\sum_{m=0}^{\infty}\left((n^2+m^2)^{-3/2}\right)^2 = 4.658\ldots. \tag{S44}$$

因此，我们得到了临界温度的数值结果,

$$T_{\mathrm{c}}^{\mathrm{CE1}} = \left(1 + 0.0381\ldots \times \frac{4+\Delta+\Delta^2}{f}\right)^{-1} T_{\mathrm{c}}^{\mathrm{MF}} \tag{S45}$$

注意，唯一依赖于 Δ 的是因子 $4+\Delta+\Delta^2$，它与 f 无关，并在 $\Delta_{\mathrm{peak}}^{\mathrm{CE1}} = -0.5$ 处达到极值。我们还注意到， $T_{\mathrm{c}}^{\mathrm{CE1}}$ 在 f 下的表现不同，具体取决于括号中哪一项占主导。对于弱无序极限（$f \approx 1$），第一项占主导，且 $T_{\mathrm{CE1c}} \sim T_{\mathrm{MFc}} \sim f$；而对于强无序极限（$f \ll 1$），第二项占主导，且 $T_{\mathrm{CE1c}} \sim f^2$。实际的强无序标度 $f^{3/2}$ 介于两者之间。在弱无序下的初始 $T_{\mathrm{c}} \sim f$ 标度——此时一阶簇展开的效果最佳——解释了为什么正文图 2a 中的量子蒙特卡罗曲线会随着 f 减小而先上升，之后才由 $T_{\mathrm{c}} \sim f^{3/2}$ 标度主导。

D. 对平均场的二聚体修正

本节不再像簇展开那样，捕捉所有距离上的少体关联的主导贡献，而是优先考虑关联最强的自旋对。将这些二聚体的量子关联直接引入平均场试探态 H_0，可修正 T_{c} 估计，从而成功捕捉其对 f 和 Δ 的 $f \to 0$ 依赖性。

因此，我们采用修正后的平均场哈密顿量,

$$H_d = -h\sum_i s_i^x - \sum_{(ij)\in D}\sum_{\alpha\in\{x,y,z\}} s_i^\alpha J_{ij}^\alpha s_j^\alpha, \tag{S46}$$

其中 J_{ij}^α 如 H (S11) 中所示，并将 D 定义为二聚体对的集合，即构成二聚体的自旋的无序对（ij）。我们稍后将回到数值计算中用于确定这些配对的精确条件，但该条件应能体现这样的想法：当 $ij \in D$ 时， $J_{ij} \gg J_{\mathrm{typ}}$。注意，与 H_0 前文类似，对于一个算符 O，$\langle O\rangle_d = \mathrm{Tr}(\rho_d O)$，且 $\langle O\rangle_{d0} = \langle O\rangle_d|_{h=0}$。

接下来的计算与原始平均场计算相同，但由于二聚体关联， χ_{ij} 不再是纯对角形式。现在它的形式为,

$$\chi_{ij}^{(d)} = \int_0^\beta d\tau\, \langle s_i^x(0) s_j^x(\tau)\rangle_{d0} = \begin{cases} \dfrac{1}{J_{ij}(1-\Delta^2)}\dfrac{\Delta(1-x_{ij})+(1+x_{ij}-y_{ij})}{1+x_{ij}+y_{ij}} & (ij)\in D \\ \dfrac{1}{J_{ik}(1-\Delta^2)}\dfrac{\Delta(1+x_{ik}-y_{ik})+(1-x_{ik})}{1+x_{ik}+y_{ik}} & i=j,\ \exists\, k \text{ such that } (ik)\in D \\ \dfrac{1}{4}\beta\delta_{ij} & \text{otherwise} \end{cases} \tag{S47}$$

其中 $x_{ij} = e^{-\beta J_{ij}}$ 且 $y_{ij} = 2e^{-\beta J_{ij}(1-\Delta)/2}$。值得注意的是，必须调整式（S21），以考虑在 H_{diff} 中排除二聚体关联:

$$\left.\frac{\partial^2 F_d}{\partial h^2}\right|_{h=0} = -\sum_{\substack{ijkl \\ (jk)\notin D}} \chi_{ij}^{(d)} J_{jk} \chi_{kl}^{(d)} + \sum_{ij}\chi_{ij}^{(d)} = 0. \tag{S48}$$

我们对该方程进行数值求解，并像量子蒙特卡罗一样对无序实现取平均，同时对所有 f 使用固定的$N = 1000$ 自旋。相互作用仍通过埃瓦尔德求和计算。为了指定二聚体对 D，我们实际上将所有自旋两两配对，使用与 c DTWA 簇相同的匹配算法。对于满足$J_{ij} \lesssim J_{\mathrm{typ}}$的自旋，将这些项纳入 H_d 几乎没有影响，因此主要的 Δ 依赖性仍来自耦合最强的二聚体。

我们还在 H_d 的基础上进行了 一阶簇展开，但在取 $\lambda \to 1$后发现，修正项在一阶近似下并未得到良好控制，导致 T_{c} 曲线表现不佳。

E. 二阶簇展开

回到簇展开（不含二聚体项），我们还展示了二阶展开的结果。事实证明，在一系列 f 范围内，它能准确描述弱无序极限下的 Δ_{peak}。这与一阶计算形成对比；在一阶计算中，$\Delta_{\text{peak}} = -0.5$ 与 f无关。

We n现在除了方程（S40）和（S41）之外，还必须包含以下高阶项：

$$\frac{1}{\beta^2 N} K_3''|_{h=0} = \beta^3 B_3 + 6\beta^2 B_2 + 6\beta^3 B_1, \tag{S49}$$

$$B_3 = N^{-1}\beta^{-5}\left(A^{(0)}_{3,2} - A^{(0)}_{3,0}A^{(0)}_{0,2} - 3A^{(0)}_{3,0}A^{(0)}_{1,2}\right) \tag{S50}$$

$$= \frac{1}{256}\left(-6f^3\frac{1}{L^2}\sum_{ijkl\in\Lambda} J_{ij}J_{jk}J_{kl} + 2(4+\Delta^3)f^2\frac{1}{L^2}\sum_{ijk\in\Lambda} J_{ij}J_{jk}J_{ki}\right.$$

$$\left. +4(4+\Delta+\Delta^2)f^2\frac{1}{L^2}\sum_{ijk\in\Lambda} J_{ij}^2 J_{jk} - 2(3+4\Delta+\Delta^2)\frac{1}{L^2}\sum_{ij\in\Lambda} J_{ij}^3\right).$$

最后一行是对表 S4和 S5中所示图的贡献求和得到的，这些图对 $\mathrm{Tr}\left(HHHS^xS^x\right) = \frac{1}{2}\mathrm{Tr}(HHHS^xS^x) + \frac{1}{2}\mathrm{Tr}(HHS^xHS^x)$ 的贡献权重相同。单位点自由能与方程-（S43）相同，但增加了二阶修正：

$$\left.\frac{\partial^2 f_\lambda^{(2)}}{\partial h^2}\right|_{h=0} = \beta/4 + \beta^2 B_1 - \lambda(\beta/2 + 4\beta^2 B_1 + \beta^3 B_2) + \frac{\lambda^2}{2}(\beta/2 + 10\beta^2 B_1 + 7\beta^3 B_2 + \beta^4 B_3). \tag{S51}$$

求解逆临界温度后，我们现在得到：

$$\beta_c^{(\lambda)} = -\frac{1}{4B_1} + \lambda\frac{-8B_1^2 + B_2}{16B_1^3} + \lambda^2\frac{-128B_1^4 + 36B_1^2B_2 - 4B_2^2 + B_1B_3}{128B_1^5} + O(\lambda^3). \tag{S52}$$

截断至 $O(\lambda^2)$ 并取 $\lambda \to 1$，我们发现这一近似的控制并不理想，因为对于所有 Δ，系数中都看不到尺度层级。若改为直接求方程（S52）在 $O(\lambda^2)$ 处的极值，然后取 $\lambda \to 1$，该近似便能成功捕捉 Δ_{peak}的弱无序行为。由此可得：

$$\Delta_{\text{peak}}^{\text{CE2}} = -\frac{1}{2} + \frac{9}{16}\frac{f^{-1}\frac{1}{L^2}\sum_\Lambda J_{ij}^3 - \frac{1}{L^2}\sum_\Lambda J_{ij}J_{jk}J_{ki}}{\left(\frac{1}{L^2}\sum_\Lambda J_{ij}\right)\left(\frac{1}{L^2}\sum_\Lambda J_{ij}^2\right)} \tag{S53}$$

我们已经计算出分母中的两个求和式（式（S24）和（S44）），并可将分子中的第一个求和式计算为：

$$\frac{1}{L^2}\sum_{ij\in\Lambda} J_{ij}^3 = 4\sum_{n=1}^{\infty}\sum_{m=0}^{\infty}\left((n^2+m^2)^{-3/2}\right)^3 = 4.191\ldots. \tag{S54}$$

我们在具有开放边界条件的有限系统上对分子中的第二个求和式进行数值估算，并以 $1/L$ 为自变量进行线性外推，以求得 $1/L \to 0$ 极限。如图 S6所示，我们得到

$$\frac{1}{L^2}\sum_{ijk\in\Lambda} J_{ij}J_{jk}J_{ki} \approx 2.390. \tag{S55}$$

代入这些数值后，我们在图 S7 中比较了由式（S53）的二阶簇展开得到的 Δ_{peak} 与二聚体修正的平均场结果以及量子蒙特卡罗数据。二阶簇展开在弱无序极限下效果良好，而二聚体修正在强无序极限下效果良好。

V. 强无序极限的解析处理

在本节中，我们在 $f \to 0$渐近极限（强无序）下对可扩展压缩的相边界进行解析处理。具体而言，我们确定可实现可扩展压缩的临界值 Δ_c。需要强调的是

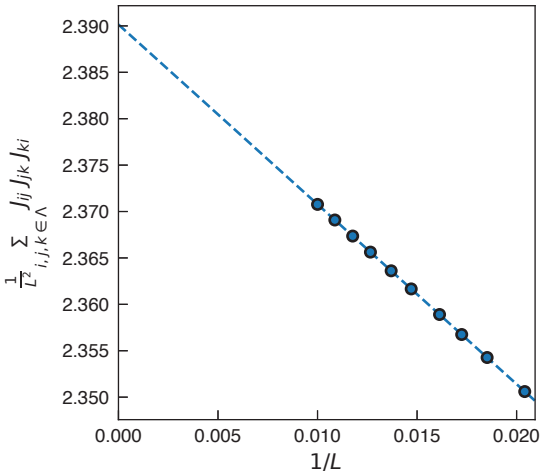


图 S6. $\frac{1}{L^2}\sum_{\Lambda} J_{ij}J_{jk}J_{ki}$ 随 $L \to \infty$变化的计算结果，见方程（S53）。我们采用关于 $1/L$ 的线性外推，估算截距处的值 ≈ 2.390（即热力学极限）。

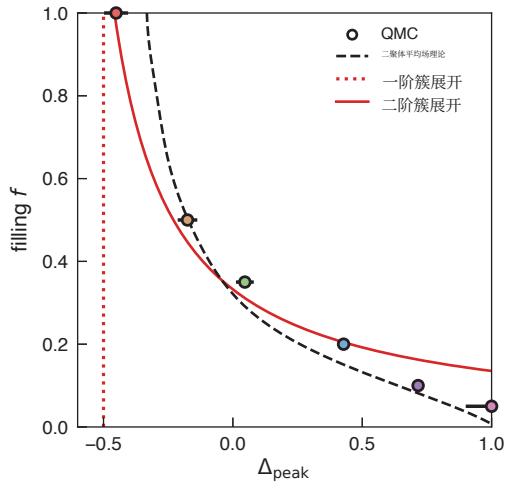


图 S7. 各种近似下 Δ_{peak} 与 f 的比较。圆圈表示量子蒙特卡罗的数据。红线表示一阶（红色点线）和二阶（红色实线）簇展开（“CE”）。黑色虚线表示带有二聚体修正的平均场理论（“二聚体平均场理论”）。二阶簇展开适用于弱无序极限，而二聚体修正适用于强无序极限。

Δ_c 标志着压缩行为的边界，而非热力学相变，因此并不对应于临界温度或能量密度，例如 T_c 或 E_c。

我们的核心结果是，当 $f \to 0$时，耦合最强的二聚体决定了 E_c 相对于 Δ 的变化，并导致$1-\Delta_c \sim \sqrt{f}$。因此，对于任意有限的 f，在足够接近海森堡点时，都可能实现可扩展压缩。此外，在前渐近区间中，若考虑其他自旋对二聚体产生的场，这条相边界就会变为线性，且 $1-\Delta_c \sim f$，与量子蒙特卡罗数值结果相符，见正文中的 [图 1c]。

A. 渐近 $\Delta_c \sim 1-\sqrt{f}$ 行为

我们的主要近似是采用单步键消除：所有间距为 $r_{ij} < r_{\text{typ}} := a/\sqrt{\pi f}$[式（S10）] 的自旋对均视为孤立子系统。它们形成具有强内部耦合$J_{ij} > J_{\text{typ}}$ 的有效自旋-1二聚体，其余所有位置均为单体。这些有效自旋（二聚体或单体）之间的相互作用为 $\lesssim J_{\text{typ}}$。二聚体内键长按照式（S8）分布。在这一图像中，计算激发能只需对二聚体的内部谱以及由其他有效自旋产生的偶极平均场取平均

由其他有效自旋产生。

按照正文中的论证，当 $E_c > E_x$ 时，可实现可扩展压缩。此外， E_c 会随各向异性 Δ变化，而 E_x 则不会，因此临界各向异性为

$$E_c(\Delta_c) = E_x. \tag{S56}$$

E_x 可通过连续空间近似估算为，

$$E_x = -\frac{1}{8}\int_a^\infty 2\pi r\rho \frac{J}{r^3} dr = -\frac{\pi J}{4a^3} f, \tag{S57}$$

与第 II 节中一样， $\rho = f/a^2$ 表示自旋密度，而 a 表示晶格常数。

恰好在海森堡点 $\Delta = 1$， x态实际上既是二聚体基态，也是多体基态。由于在此点，自旋1二聚体的各态之间没有内部能隙（回想一下 $E_{\text{gap}} = J_{ij}(1-\Delta)/2$），因此 T_c 处每个自旋的激发能就是来自其他自旋的平均局域场 h，

$$E_c^{(\Delta=1)} - E_x \sim h = \int_{r_{\text{typ}}}^\infty 2\pi r\rho \frac{J}{r^3} dr = \frac{2\pi\rho J}{r_{\text{typ}}} = 2J_{\text{typ}} \sim f^{3/2}, \tag{S58}$$

其中， r_{typ} r 处的下截断值 反映了所有短程相互作用都已并入自旋1二聚体这一事实。这一标度关系已由量子蒙特卡罗直接证实

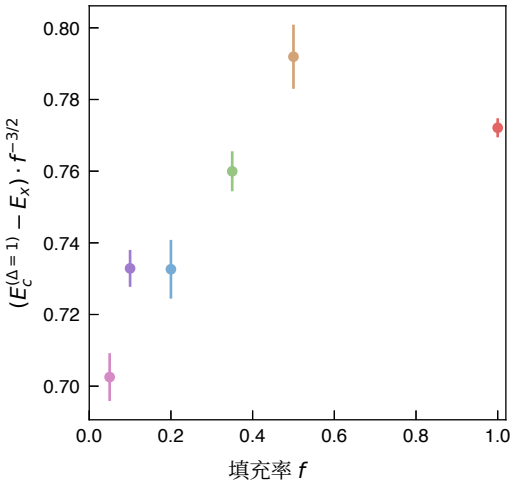


图 S8。 $E_c - E_x$ ver 的标度关系 sus f at $\Delta = 0.9$，在海森堡点附近。$(E_c - E_x) \cdot f^{-3/2}$ 趋近于一个常数值，这表明 $f \to 0$ indicate 因此，方程（S58）给出了正确的标度关系。

现在考虑将 Δ 扰动到海森堡点以下的情况。 E_x 不受影响，但 E_c 的计算会发生变化。具体而言，在磁序的临界能量密度下，耦合最强的二聚体将具有大于 T_c 的激发能隙，因此会被冻结在其基态中

$$E_{\text{gs}} = -\frac{1}{4}(2-\Delta)J_{ij}. \tag{S59}$$

E_c 对 Δ 的主导依赖完全源自二聚体的内能变化：有效格点之间的相互作用仍为 $\sim J_{\text{typ}}$，因此仍仅在 O 阶（$f^{3/2}$）上产生贡献。

我们按如下方式估算 E_c 的变化。我们假设，若二聚体满足 $E_{\text{gap}} > T_c$，则会在 E_c 时被冻结，这对应于对二聚体间距的一个条件

$$r_{ij} < r_F := \left(\frac{(1-\Delta)J}{2T_c}\right)^{1/3}. \tag{S60}$$

将所有此类二聚体的贡献相加，我们得到 E_c 的变化：

$$E_c - E_c^{(\Delta=1)} = \frac{1}{2}\int_a^{r_F} 2\pi r\rho \left(E_{\text{gs}}(r) - E_{\text{gs}}^{(\Delta=1)}(r)\right) dr = -\frac{\pi J(1-\Delta)f}{4a^3} + O(f^{3/2}), \tag{S61}$$

其中我们假设 $a \ll r_{\mathrm{F}} \ll r_{\mathrm{typ}}$。

要求该 $O(f)$位移抵消海森堡点的激发能 $E_{\mathrm{c}} - E_x \sim h \sim f^{3/2}$，即可确定$\Delta_{\mathrm{c}}$的标度，

$$\frac{\pi J(1-\Delta)f}{4a^3} \sim h \implies 1 - \Delta_{\mathrm{c}} \sim \sqrt{f}. \tag{S62}$$

如正文图 1c 所示，这是 $f \to 0$ 极限下相边界的标度，其中前因子经过选取，使其与最低 f处的量子蒙特卡罗数据点相匹配。

注意，在 Δ_{c}且当 $f \to 0$时，式（S60）给出 $r_{\mathrm{F}} \sim af^{-1/3}$，这满足 $a \ll r_{\mathrm{F}} \ll r_{\mathrm{typ}} \sim af^{-1/2}$。因此，我们确认在求解式（S61）时所用的近似是一致的。

B. Δ_{c} 1 − f 的前渐近行为

我们注意到，稍微更加仔细的处理能够捕捉到数值计算 [正文图 1c]中观察到的前渐近 $\Delta_{\mathrm{c}} \sim 1 - f$ 行为。

在前渐近区间内，我们可以将与其他自旋的相互作用建模为作用于二聚体的场 h，此时该场尚未被耦合尺度所主导：也就是说，$J_{ij}(1-\Delta)$ 与 h 可能处于相近的尺度。计及这两个尺度，二聚体基态能量为

$$E_{\mathrm{gs}} = -\left(J_{ij}/4 + \sqrt{h^2 + [J_{ij}(1-\Delta)/4]^2}\right). \tag{S63}$$

我们注意到，对于 $r_{ij} \gg r_{\mathrm{F}}$，能量变化 $E_{\mathrm{gs}} - E_{\mathrm{gs}}^{(\Delta=1)}$ 会迅速趋于零：

$$E_{\mathrm{gs}} - E_{\mathrm{gs}}^{(\Delta=1)} = O(r_{\mathrm{F}}^6/r_{ij}^6), \tag{S64}$$

因此，无需手动计及冻结效应，临界性处的能量变化为

$$E_{\mathrm{c}} - E_{\mathrm{c}}^{(\Delta=1)} = \frac{1}{2}\int_a^\infty 2\pi r\rho\left(E_{\mathrm{gs}}(r) - E_{\mathrm{gs}}^{(\Delta=1)}(r)\right)dr = -\frac{1}{2}\pi f h\left(1 - {}_2F_1\left(-\frac{1}{2}, -\frac{1}{3}, \frac{2}{3}, -\frac{(1-\Delta)^2J^2}{16a^6h^2}\right)\right) \tag{S65}$$

其中，${}_2F_1$ 是普通超几何函数。

在较小 h 的最低阶近似下，我们恢复了先前的标度关系（S61），

$$E_{\mathrm{c}} - E_{\mathrm{c}}^{(\Delta=1)} \sim -\frac{J(1-\Delta)f}{a^3}. \tag{S66}$$

然而，在较小 $1-\Delta$ 处展开可得

$$E_{\mathrm{c}} - E_{\mathrm{c}}^{(\Delta=1)} \sim -\frac{J^2(1-\Delta)^2 f}{ha^6} \tag{S67}$$

在这两个极限之间，随着 $1-\Delta$ 增大，$E_{\mathrm{c}} - E_{\mathrm{c}}^{(\Delta=1)}$ 只是平滑地从渐近前$\sim (1-\Delta)^2$ 行为过渡到渐近 $(1-\Delta)$ 行为。

与之前一样，要实现压缩，我们要求这一变化不超过 E_{c} 的 $\Delta = 1$ 激发（相对于 E_x）。具体而言，当 $E_x < E_{\mathrm{c}}$ 时，我们处于压缩区域

$$|E_{\mathrm{c}} - E_{\mathrm{c}}^{(\Delta=1)}| \lesssim E_{\mathrm{c}}^{(\Delta=1)} - E_x \sim h \tag{S68}$$

令这些项相等，即可得到临界 Δ_{c}

$$\frac{J^2(1-\Delta_{\mathrm{c}})^2 f}{ha^6} \sim h \implies 1 - \Delta_{\mathrm{c}} \sim f \tag{S69}$$

这里我们利用了在临界性处 $h \sim J_{\mathrm{typ}} \sim Jf^{3/2}/a^3$这一条件。

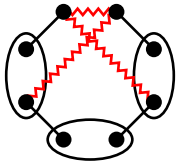
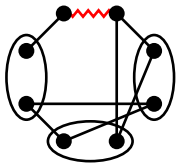
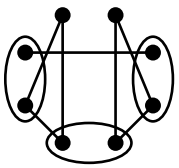
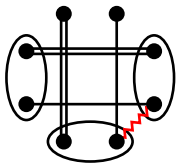
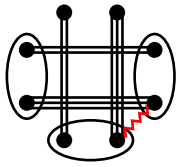
 $\times 48$	$-\frac{1}{256}6\left(\sum_{ijkl} J_{ij}J_{jk}J_{kl} - 2\sum_{ijk} J_{ij}^2 J_{jk} + \sum_{ij} J_{ij}^3 - \sum_{ijk} J_{ij}J_{jk}J_{ki}\right)$
 $\times 4$	$\frac{1}{256}4\Delta\left(\sum_{ijk} J_{ij}^2 J_{jk} - \sum_{ij} J_{ij}^3\right)$
 $\times 16$	$\frac{1}{256}2\Delta(1+\Delta)\sum_{ijk} J_{ij}J_{jk}J_{ki}$
 $\times 8$	$\frac{1}{256}4(1+\Delta^2)\left(\sum_{ijk} J_{ij}^2 J_{jk} - \sum_{ij} J_{ij}^3\right)$
 $\times -2$	$\frac{1}{256}2\sum_{ij} J_{ij}^3$

表 S4。对 $\mathrm{Tr}(HHHS^xS^x)$ 有贡献的图，其贡献为 $A_{3}^{(0)}{}_{,\,2}$ [方程（S38)], 左侧展示一个代表图以表示等价图，右侧则展示所有等价图的总和。请注意，通常右栏图的计算中包含对自旋分量的求和，但左栏的计数中不包含。有些例外情况：在 H（椭圆）之间置换自旋分量会导致精确抵消，这种情况已计入左侧的计数。无论如何，最右栏的总和给出了总值。最后一行是必需的，因为减去 $3A_{3}^{(0)}{}_{,\,0}A_{1\,2}^{(0)}{}_{,}$ 时，该图会被重复计数：该项将此图计数三次，而 $A_{3\,2}^{(0)}{}_{,}$ 只计数一次。

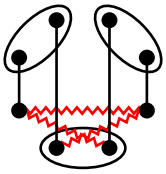
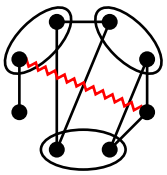
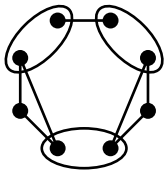
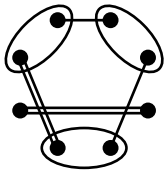
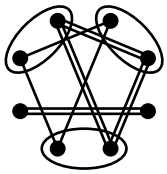
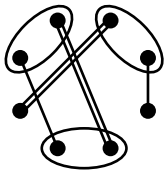
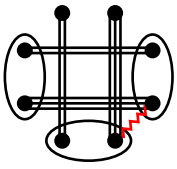
 $\times 48$	$-\frac{1}{256}6\left(\sum_{ijkl} J_{ij}J_{jk}J_{kl} - 2\sum_{ijk} J_{ij}^2 J_{jk} + \sum_{ij} J_{ij}^3 - \sum_{ijk} J_{ij}J_{jk}J_{ki}\right)$
 $\times 4$	$\frac{1}{256}4\Delta\left(\sum_{ijk} J_{ij}^2 J_{jk} - \sum_{ij} J_{ij}^3\right)$
 $\times 16$	$-\frac{1}{256}2\Delta(1+\Delta)\sum_{ijk} J_{ij}J_{jk}J_{ki}$
 $\times 16$	$\frac{1}{256}4(1+\Delta^3)\sum_{ijk} J_{ij}J_{jk}J_{ki}$
 $\times 16$	$-\frac{1}{256}8\Delta\sum_{ij} J_{ij}^3$
 $\times 16$	$\frac{1}{256}4(1+\Delta^2)\sum_{ijk} J_{ij}^2 J_{jk}$
 $\times -2$	$\frac{1}{256}2\sum_{ij} J_{ij}^3$

表 S5. Tr(的图HHS^xHS^x)，呈现方式与表 S4相同。

[1] N. Sadoune 和 L. Pollet，SciPost Physics Codebases，9（2022）。[2] M. Wallerberger、S. Iskakov、A. Gaenko、J. Kleinhenz、I. Krivenko、R. Levy、J. Li、H. Shinaoka、S. Todo、T. Chen、X. Chen、J. P. F. LeBlanc、J. E. Paki、H. Terletska、M. Troyer 和 E. Gull，ALPS 项目的更新核心库（2018），arXiv:1811.08331 [计算物理]。[3] A. Gaenko、A. Antipov、G. Carcassi、T. Chen、X. Chen、Q. Dong、L. Gamper、J. Gukelberger、R. Igarashi、S. Iskakov、M. K¨onz、J. LeBlanc、R. Levy、P. Ma、J. Paki、H. Shinaoka、S. Todo、M. Troyer 和 E. Gull，《计算物理通讯》213，235（2017）。[4] N. V. Prokof'ev、B. V. Svistunov 和 I. S. Tupitsyn，《实验与理论物理学杂志》87，310（1998）。[5] M. P. Allen 和 D. J. Tildesley，*Computer Simulation of Liquids*，第二版（牛津大学出版社，英国牛津，2017）。[6] N. Defenu、T. Donner、T. Macrì、G. Pagano、S. Ruffo 和 A. Trombettoni，《现代物理评论》95，035002（2023）。[7] C. Lemieux，控制变量，载于 *Wiley StatsRef: Statistics Reference Online*（John Wiley & Sons, Ltd，2017），第1–8页。[8] W. Wu、E. J. Davis、L. B. Hughes、B. Ye、Z. Wang、D. Kufel、T. Ono、S. A. Meynell、M. Block、C. Liu、H. Yang、A. C. B. Jayich 和 N. Y. Yao，金刚石中氮空位中心系综的自旋压缩（ 2025 2503 14585），[ ] arXiv: . 量子物理 . [9] J. Schachenmayer、A. Pikovski 和 A. M. Rey，《物理评论X》5，011022（2015）。[10] A. Braemer、J. Vahedi 和 M. G¨arttner，《物理评论B》110，054204（2024）。[11] D. J. Wineland、J. J. Bollinger、W. M. Itano 和 D. J. Heinzen，《物理评论A》50，67（1994）。[12] R. Kubo，《日本物理学会杂志》17，1100（1962）。[13] J. Oitmaa、C. Hamer 和 W. Zheng，*Series Expansion Methods for Strongly Interacting Lattice Models*（剑桥大学出版社，2006）。