arXiv:2602.02665v1 [cond-mat.str-el] 2 Feb 2026

借助神经网络量子态逼近热力学极限

Luciano Loris Viteritti, [1], * Riccardo Rende, [2], * Subir Sachdev, [2,3] 和 Giuseppe Carleo[1]

[1] *Institute of Physics, École Polytechnique Fédérale de Lausanne (EPFL), CH-1015 Lausanne, Switzerland*

[2] *Center for Computational Quantum Physics, Flatiron Institute, 162 5th Avenue, New York, NY 10010*

[3] *Department of Physics, Harvard University, Cambridge MA 02138, USA*（日期：2026年2月4日）

要获取强关联量子物质的热力学极限性质，需要在超大晶格上进行模拟；对于数值方法而言，这一领域仍然极具挑战性，尤其是在受挫二维系统中。我们提出 *Spatial Attention mechanism*，这是一种针对神经网络量子态的极简且具有明确物理意义的归纳偏置，通过在 Transformer架构中引入一个可学习的长度尺度来实现。该偏置可稳定大规模优化，并在变分蒙特卡洛框架下，通过对前所未有尺寸的系统进行高精度模拟，探索热力学极限物理。将此方法应用于自旋$\frac{1}{2}$ 三角晶格海森堡反铁磁体后，我们在多达 42×42 个格点的团簇上取得了最先进的结果。模拟如此大的系统，使我们能够对能量和序参量进行受控的有限尺寸标度分析，从而提取自旋波速度和均匀磁化率等与实验相关的物理量。进而，我们发现，外推得到的热力学极限能量系统性地优于张量网络方法（如无限投影纠缠对态）的结果。所得磁化强度受到显著重整化， $\mathcal{M}_0 = 0.148(1)$（约为经典值的 30%），这表明精度较低的变分态会系统性地高估磁序。对优化后波函数的分析进一步表明，其符号结构本质上具有非局域性，这意味着无法通过局域基变换消除符号问题。最后，我们通过在 J_1-J_2 海森堡模型中获得最先进的能量结果，证明了该方法的普适性；该模型位于 20×20 正方晶格上，结果优于残差卷积神经网络。

I. 引言

提取强关联量子系统的热力学极限性质是凝聚态物理学的核心目标[1, 2]：要进行受控有限尺寸标度，并可靠地提取序参量、激发能隙或关联长度等热力学极限量，就必须采用足够大的晶格[3, 4]。尽管过去几十年取得了重大进展，现有数值方法仍难以兼顾精度与可扩展性，尤其是在二维受挫系统中，符号问题或纠缠约束使大规模计算难以实现 [5–8]。

在为解决这一问题而发展的众多方法中，神经网络量子态（NQS） [9, 10]已成为一类特别有前景的变分 Ansatz¨–14]。借助现代深度学习架构的强大表达能力，NQS 能够高效表示高度纠缠的量子态 [15–17] ，并捕捉传统方法难以企及的复杂符号结构 [11, 18–20]。

与更广泛的机器学习领域一样，神经量子态的成功依赖于归纳偏置 [21, 22]：架构先验引导模型利用有限数据和噪声梯度，学习物理上相关的解。这自然引出了这样一个问题：对于基态的变分描述，哪些归纳偏置最为重要？物理哈密顿量通常包含局域相互作用，它们会限制关联的衰减方式以及信息的传播方式 [23]。这种行为可通过集团性质来形式化描述：随着算符之间的间隔（无论是空间上还是时间上）增大，它们之间的关联会消失 [24]。重要的是，哈密顿量的局域性并不意味着相应基态中的关联是短程的：无能隙相和临界点会呈现代数关联和长程纠缠。这一区别对于设计恰当的变分态至关重要。因此，局域性启发偏置可以作为一种有价值的优化先验，而不必施加有限关联长度或面积律截断等严格的表征约束。

在此，我们提出一种受团簇性质启发、适用于 Transformer 神经量子态的归纳偏置。这种偏置通过空间注意力机制实现：它是对注意力机制的一种简洁且具有物理动机的改进[12, 13, 25], ，通过一个由单一长度尺度参数控制的显式距离依赖核对注意力权重进行重新加权（见第II节）。此前已有研究提出了能够显式编码空间偏置或距离依赖偏置的注意力机制变体，并成功应用于不同的机器学习场景[26–28]。关键的是，我们提出的归纳偏置与哈密顿量无关：它仅编码普适的几何偏置，而非特定于模型的信息。通过实证研究，我们发现，仅凭这一要素，便能从随机初始化出发，稳定大规模二维晶格上的优化

*这些作者贡献相同。通信请联系 rrende@flatironinstitute.org 和 lu- ciano.viteritti@洛桑联邦理工学院.ch

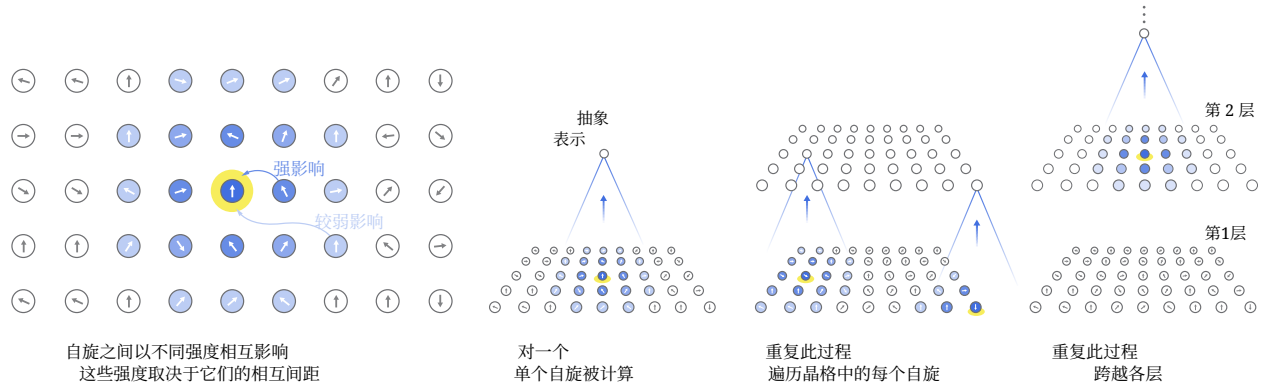

图 1. 空间注意力机制示意图。对于每个输入自旋，通过汇总所有其他自旋的贡献形成抽象表示，并根据它们的空间分离进行加权：邻近自旋的贡献更强，而远处格点的贡献则逐渐受到抑制。该操作在每个晶格格点上独立进行，从而为每个自旋生成新的表示。该过程在连续的 Transformer层中反复执行。

，且无需提供有关符号结构的先验信息[29]，，即可对含有数千个自旋的受挫系统进行精确计算；这是现有神经量子态架构尚无法实现的能力。

为展示这一方法的有效性，我们将其应用于自旋$\frac{1}{2}$海森堡模型的三角晶格体系。这是受挫磁体的典型例子，其几何约束使得无法采用无符号问题的量子蒙特卡罗方法[4, 30, 31]。尽管人们普遍认为其基态呈现 120° N´eel 磁序，但对磁化强度的定量估计却存在很大差异 $0.16 \lesssim \mathcal{M}_0 \lesssim 0.28$ [32–48] （见表II）。这种差异反映了在较大系统尺寸下兼顾高变分精度与受控有限尺寸标度的困难。我们的方法克服了这一障碍：我们将团簇尺寸扩展至 42×42，获得了当前最先进的变分能量，并发现迄今报道的最低热力学极限磁化强度 $\mathcal{M}_0 = 0.148$（1），约为经典值的 30%，凸显了强量子涨落的作用。此外，我们表明，精度较低的变分近似会系统性地高估磁化强度，从而为以往结果中的部分差异提供了具体解释。通过对能量和磁化强度进行有限尺寸标度，我们提取出低能自旋激发的速度和磁化率[49–51] 并将其与线性自旋波理论[52–54] 以及施温格玻色子方法 [35]进行比较。

大规模访问还使我们能够系统分析基态符号结构，这是受挫系统中的核心问题。利用优化后的变分态，我们明确检验了针对该模型提出的候选符号规则 [55]，，发现符号重叠随系统尺寸呈指数下降。这表明，即便是扩展的局域符号规则，也会迅速无法复现精确结构。虽然这并不构成一条不可行定理，否定所有可能的局域基变换，但它为符号结构具有高度非局域性提供了定量证据，并支持这样一种观点：三角晶格上的海森堡反铁磁体存在内禀符号问题。

最后，为了证明我们的方法并不局限于特定模型，我们研究了正方晶格上的 J_1-J_2 海森堡模型 [56, 57]，并取得了优于所有其他现有变分方法的当前最佳结果[11]。

综合来看，这些结果表明，在 Transformer-NQS 中嵌入最简且具有物理动机的归纳偏置，可以显著提升优化的稳定性与可扩展性，从而实现对受挫二维量子磁体热力学极限的可控探索。

II. 空间注意力机制

基于神经量子态的变分方法通过将自旋构型 $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_1, \ldots, \sigma_N)$（其中 $\sigma_i = \pm 1$）映射为复振幅 $\Psi_\theta(\boldsymbol{\sigma})$，来表示多体波函数；这些振幅由带有参数 θ的神经网络参数化。期望值通过变分蒙特卡洛（VMC）[31]，计算，参数 θ 则通过随机重构（SR）[11, 20, 31, 58]进行优化。在针对受挫量子磁体提出的各种架构中，视觉 Transformer（ViT）波函数[12, 13, 59–63] 在二维系统中展现出了很高的精度。

Transformer架构的核心组件是注意力机制 [64]，，它处理由 n 个输入向量（$\mathbf{x}_1, \ldots, \mathbf{x}_n$）组成的序列，其中 $\mathbf{x}_i \in \mathbb{R}^d$，并生成长度相同的输出序列（$\mathbf{A}_1, \ldots, \mathbf{A}_n$），称为注意力向量，其中 $\mathbf{A}_i \in \mathbb{R}^d$。关于如何构造输入向量 $\mathbf{x}_i$ 的详细说明

由自旋构型 $\boldsymbol{\sigma}$ 见第 VB节。

在本工作中，我们引入了空间注意力机制，该机制通过距离依赖核对注意力权重进行软偏置。所得的注意力向量由下式给出

$$\mathbf{A}_i = \sum_{j=1}^{n} \frac{e^{-\gamma d(i,j)}}{\sum_{j'=1}^{n} e^{-\gamma d(i,j')}} \alpha_{ij} V \mathbf{x}_j \ , \tag{1}$$

其中，注意力系数 α_{ij} 与值矩阵 V为可训练参数。与先前的注意力机制 [12, 13, 65, 66]相比，关键修改是依赖于距离d（i, j）的乘性因子，该距离定义为晶格点 i 与 j之间的欧几里得距离，以及逆长度尺度 $\gamma > 0$，后者在优化过程中学习得到，并控制关联的特征空间范围。

尽管优化后的 Transformer 波函数通常会随着空间分离的增大而表现出注意力权重的有效衰减[13, 66–68], ，但从随机初始化学习这种距离依赖性会随着系统尺寸的增大而变得越来越困难。通过显式编码这一具有物理动机的结构，空间注意力机制显著增强了大系统区间内的优化稳定性。

至关重要的是，所提出的修改构成一种软性且可学习的几何先验，它保留了全局连通性，并且当逆长度尺度消失时，该架构会连续退化为标准注意力。通过采用多头注意力机制引入了更大的灵活性[64], ，其中每个头都关联一个独立的长度尺度参数，从而使试探波函数能够同时表示多种关联尺度[68]。通过采用深层架构，相继的层可以进一步细化有效关联长度。参见图1 以了解该机制的图示。

从操作上看，式（1）构成对标准注意力机制的一种简单修改，并且可以作为视觉变换器架构中的一行改动来实现 [69]。

III. 海森堡三角晶格

作为我们方法的一个具体且具有物理相关性的应用，我们研究三角晶格上自旋-$\frac{1}{2}$ 海森堡哈密顿量的基态性质

$$\hat{H} = J \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{\boldsymbol{S}}_i \cdot \hat{\boldsymbol{S}}_j \ , \tag{2}$$

其中，$\hat{} \ \boldsymbol{S}_i = (S_i^x, S_i^y, S_i^z)$ 是位点 i 上的自旋-1/2 算符，而 $J > 0$ 是最近邻之间的反铁磁耦合。所有计算均在周期性边界条件下的 $L \times L$ 团簇上进行，并将 L 选为 3 的倍数，

Size	试探波函数	能量	Ref.
18×18	投影BCS	$-0.53570(1)$	[70]
	Jastrow-Gutzwiller	$-0.54542(1)$	[71]
	EPS	$-0.5459(1)$	[72]
	RVB	$-0.54716(3)$	[73]
	RNN	$-0.54861(1)$	[46]
	ViT	-0.551703(1) 本工作	
	零方差	-0.55200(1) 本工作	
24×24	RNN	$-0.54810(1)$	[46]
	ViT	-0.551602(1) 本工作	
	零方差	-0.55189(1) 本工作	
30×30	Jastrow-Gutzwiller	-0.545348	[71]
	RNN	$-0.54793(1)$	[46]
	ViT	-0.551528(1) 本工作	
	零方差	-0.55180(1) 本工作	
42×42	**ViT**	-0.551429(1) 本工作	
	零方差	-0.55171(1) 本工作	

表 I. 变分能量。 不同试探态和系统尺寸下的每格点基态能量，系统尺寸范围为 $L = 18$ 至 $L = 42$。本工作的结果通过施加平移和 C_{6v} 点群对称性得到（参见第 V B节）。此外，还报告了每种系统尺寸下零方差外推得到的能量，以供比较（参见第 VC节）。

以确保与三子晶格 120°N´eel 有序态 [37, 74] 相容。

A. 能量和磁化强度

为了评估基于空间注意力机制的 ViT 波函数的定量表现，我们首先将其与领先的变分试探¨态进行基准比较。如表 I所示，在所有可研究的系统尺寸下，ViT 得到的能量显著低于古茨维勒投影态 [70, 71] 以及近期基于循环神经网络（RNN）的神经网络波函数 [75] 。值得注意的是，在所研究的最大团簇（42×42）上，其变分能量低于此前报告的该 18×18 团簇最佳值。总体而言，与其他方法相比，ViT 将相对能量精度提高了一个数量级以上。

接下来，我们利用可达到的大尺寸，对能量进行受控有限尺寸标度。对于二维反铁磁体，热力学极限能量的主导修正项预计按以下方式标度：$1/L^3$ [52, 76–78]（更多详情请参见第 IIIC 节和补充信息）。如图 2a所示，每格点变分能量的数值数据随 $1/L^3$ 呈线性标度，适用于 $L \geq 24$ （紫色三角形），从而能够可靠地外推至$L \to +\infty$。我们将外推结果与通过无限投影纠缠对态计算直接在热力学极限下、以有限键维数获得的最精确张量网络估算进行比较

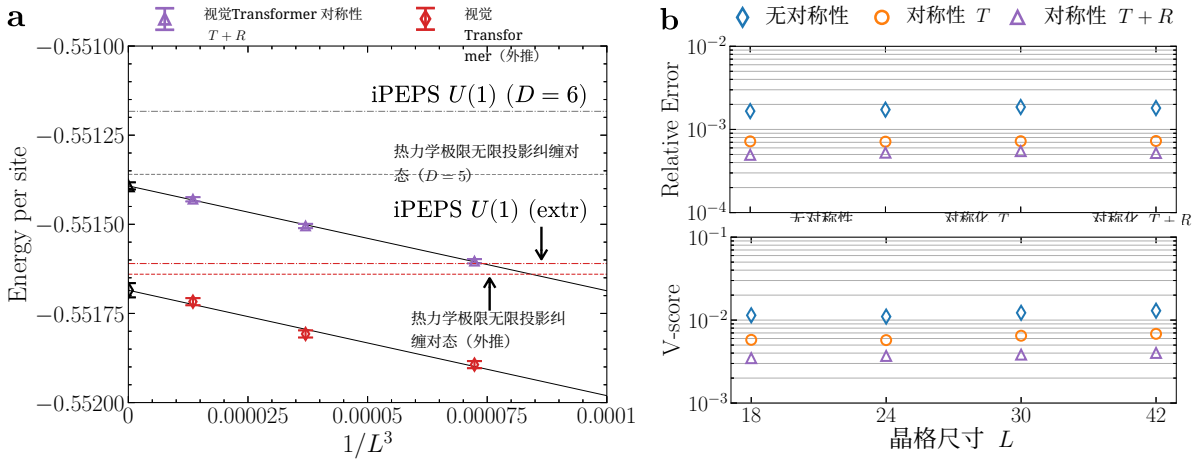

图 2。 能量标度与尺寸一致精度。a. 基态每格点变分能量随 $1/L^3$变化的有限尺寸外推， $L=24$、30和42 号晶格尺寸的数据。完全对称化的视觉变换器波函数所得结果以紫色三角形表示，红色菱形表示零方差外推所得的能量（详情见第 VC 节）。这些结果与最新且最准确的热力学极限估计进行比较，这些估计来自无限投影纠缠对态计算，包括热力学极限无限投影纠缠对态 [48] 和无限投影纠缠对态 $U(1)$ [47]。对于最佳变分能量高于 -0.551的方法，不显示外推能量。 **b.** 上图：不同对称性投影下，变分能量相对于零方差外推值的相对误差随系统尺寸 L的变化：不进行对称性投影（无对称性，蓝色菱形）、平移对称性投影（对称化 T，橙色圆形），以及平移和旋转对称性投影（对称化 $T+R$，紫色三角形）。下图：对应的 V 分数值。

极限下的结果进行比较，有限键维数为 D （黑色水平虚线）[47, 48]。值得注意的是，我们的结果在达到 $L=42$ 之前均低于无限投影纠缠对态的估算，并在热力学极限下达到当前最先进水平。此外，对于每种系统尺寸，我们都进行了能量-方差外推（见第 VC节），并将外推后的能量（红色菱形）与在 $D\to+\infty$极限下得到的无限投影纠缠对态外推结果（红色水平虚线）进行比较。通过这一分析，我们估算每格点的热力学极限能量为 -0.55168(2)，低于相应的无限投影纠缠对态估算值。

在图 2**b** 中，我们报告了对变分态精度的估计。上图展示了三种对称性恢复程度（无、仅平移、完整点群 C_{6v}）下，相对能量误差随系统尺寸的变化；误差是相对于相应的零方差外推计算的（见第 VC节）。同一图的下图还给出了 V 分数 [79], ，这是一种无需参考值的变分方法精度指标。随着系统尺寸增大，这两项指标基本保持稳定。重要的是，这一结果是在参数数量近似固定的情况下实现的，$P\approx 4.5\times10^5$，对于所有 L（见第 VB节），这表明精度并不依赖于随晶格尺寸扩大网络。对于可扩展的变分试探波函数而言，尺寸一致性 是一项关键要求；然而在实践中，许多变分态在小晶格上精度很高，但随着团簇尺寸增大，性能会呈现系统性下降[19]。

现在，我们来研究磁性性质——

性质可通过静态自旋结构因子 $C(\boldsymbol{q})=\sum_{\boldsymbol{R}}e^{i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{R}}\langle\hat{\boldsymbol{S}}_{\boldsymbol{0}}\cdot\hat{\boldsymbol{S}}_{\boldsymbol{R}}\rangle$ 来评估，其中期望值是在变分态上计算的。对于周期性团簇 $L\times L$，120° N´eel 序的序参量由 $\mathcal{M}^2(L)=C(\boldsymbol{Q})/L^2$ with$\boldsymbol{Q}=(4\pi/3,0)$ [46, 73] 检测。在图 3a 中，我们展示了序参量 $\mathcal{M}(L)$ 随 $1/L$ 的变化，以及其向热力学极限的外推。我们的数据得出热力学极限下的磁化强度 $\mathcal{M}_0=0.148(1)$，这是所有现有估计值中最小的（以往计算结果汇总见表 II）。尤其值得强调的是，线性自旋波理论（自旋波）预测的磁化强度为 0.239 [52–54], ，相对于全量子结果的相对误差约为 62%。这与正方晶格海森堡模型显著不同；对于后者，自旋波理论预测的磁化强度误差仅约为 1%[77, 80]。这一比较表明，尽管三角晶格海森堡模型存在磁序，要实现定量准确的全量子描述仍极具挑战。为阐明不同方法所得磁化强度估计值为何差异很大（参见表 II），我们在图3b中追踪了 $L=30$ 优化过程中的序参量。随着能量降低、波函数变得更加准确，磁化强度单调减小 [13]。这直接表明，有限的变分精度可能导致对磁序的系统性高估，也凸显了在受挫系统中进行高精度波函数优化的重要性。

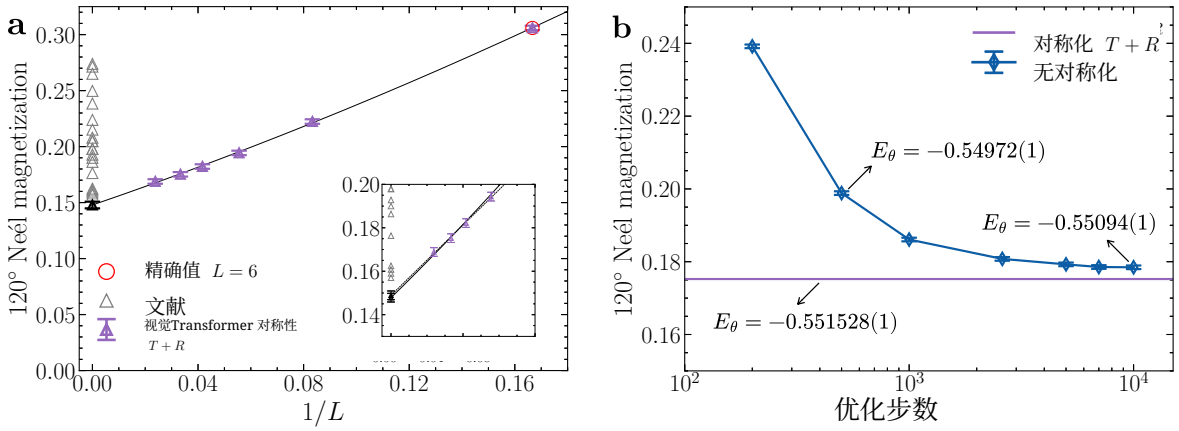

图3. 磁化强度的尺寸标度。a. 将正文中定义的磁化序参量有限尺寸外推至热力学极限（紫色三角形）。文献中所有可用结果均列出以供比较（灰色三角形），并汇总于表 II 第 VA节中。 插图： 同一物理量在 $1/L \to 0$ 中的放大图，其中展示了不同的外推方式：二次（实线）和线性（虚线）。 b. 磁化序参量随优化步数的变化，针对 $L = 30$ 团簇，将完全对称化视觉Transformer（紫色水平线）与非对称化视觉Transformer（蓝色菱形）进行比较。图中还显示了选定优化步数下基态变分能量的参考值，以及完全对称化态的最终能量。

B. 有限尺寸标度

无限投影纠缠对态等张量网络方法可直接在热力学极限下运作，并且在描述基态能量和局域可观测量方面取得了显著成功[47, 48, 81–85]。与此同时，完全局限于无限系统的研究方式也有其固有限制：无法获取依赖有限尺寸标度的量。相比之下，在大型周期性晶格上定义的高精度变分波函数，能够对能量和序参量进行受控有限尺寸标度分析，从而直接获取具有物理意义的性质。对于反铁磁三角晶格，可以推导出主要有限尺寸修正的解析表达式，并用其对数值数据进行定量拟合。

在低能量和长距离下，三角晶格上的自旋涨落可由参数化来刻画

$$\boldsymbol{S}_i(\tau) = \mathcal{M}_0 \left[\boldsymbol{n}_1(\boldsymbol{x}_i,\tau)\cos(\boldsymbol{Q}\cdot\boldsymbol{x}_i) + \boldsymbol{n}_2(\boldsymbol{x}_i,\tau)\sin(\boldsymbol{Q}\cdot\boldsymbol{x}_i)\right], \tag{3}$$

其中 $\mathcal{M}_0$ 是无限晶格中的基态有序磁矩， $\boldsymbol{Q} = (4\pi/3, 0)$是有序波矢，而 $\boldsymbol{n}_1$、$\boldsymbol{n}_2$ 是随空间（$\boldsymbol{x}$）和虚时间（τ）缓慢变化的函数，并满足约束$|\boldsymbol{n}|_1^2 = |\boldsymbol{n}_2|^2 = 1$、$\boldsymbol{n}_1 \cdot \boldsymbol{n}_2 = 0$。可用单位长度复旋量$z \equiv (z_1, z_2)$、$|z_1|^2 + |z_2|^2 = 1$来求解这些约束，参数化形式为$n_{1a} + in_{2a} = z_\gamma \varepsilon_{\gamma\alpha}\sigma^a_{\alpha\beta} z_\beta$，其中 α、$\beta = 1$、2、 ε 是单位反对称矩阵， $a = x$、 y、 z和 σ^a 是泡利矩阵[87–89]。根据有序态的对称性，我们得到低能描述，它是一个非-线性 σ模型 [88, 89]

$$\mathcal{S} = \int d^2x d\tau \sum_{\mu=\boldsymbol{x},\tau} \frac{1}{g_\mu}\left[\partial_\mu z^\dagger \partial_\mu z - \frac{\gamma_\mu}{4}\left(z^\dagger\partial_\mu z - \partial_\mu z^\dagger z\right)^2\right]. \tag{4}$$

对于有序态附近的小涨落，我们通过写成以下形式来求解单位长度约束：$z_1 = \sqrt{1-\pi_1^2-\pi_2^2-\pi_3^2} + i\pi_1$ 以及 $z_2 = \pi_2 + i\pi_3$ 其中$\pi_\ell (\ell = 1、2、3)$是三个实场。将其代入式（4），并展开至二次阶，我们得到包含三个自旋波模的谐理论

$$\mathcal{S}_{\rm SW} = \int d^2x d\tau \sum_{\ell=1}^{3}\left[\frac{m_\ell}{2}\left\{(\partial_\tau\pi_\ell)^2 + c_\ell^2(\nabla\pi_\ell)^2\right\}\right]. \tag{5}$$

耦合由两个自旋波速度$c_1 = c_\parallel$、 $c_2 = c_3 = c_\perp$ 以及均匀磁化率定义

$$\chi_\perp = \frac{1}{2g_\tau} = \frac{m_2}{4} = \frac{m_3}{4} \qquad \chi_\parallel = \frac{1}{2g_\tau}(1+\gamma_\tau) = \frac{m_1}{4}. \tag{6}$$

如补充信息所示，自旋波理论 $\mathcal{S}_{\rm SW}$ 的计算得出了基态能量和磁化强度平方（由等时结构因子测得）的有限尺寸修正如下

$$\frac{E}{L^2} = e_0 + \left(\sum_{\ell=1}^{3}\frac{c_\ell}{2}\right)\frac{\mathcal{C}_1}{L^3} + \ldots \tag{7}$$

$$\mathcal{M}^2(L) = \mathcal{M}_0^2\left[1 + \left(\sum_{\ell=\parallel,\perp}\frac{1}{2c_\ell\chi_\ell}\right)\frac{\mathcal{C}_2}{L}\right] + \ldots \tag{8}$$

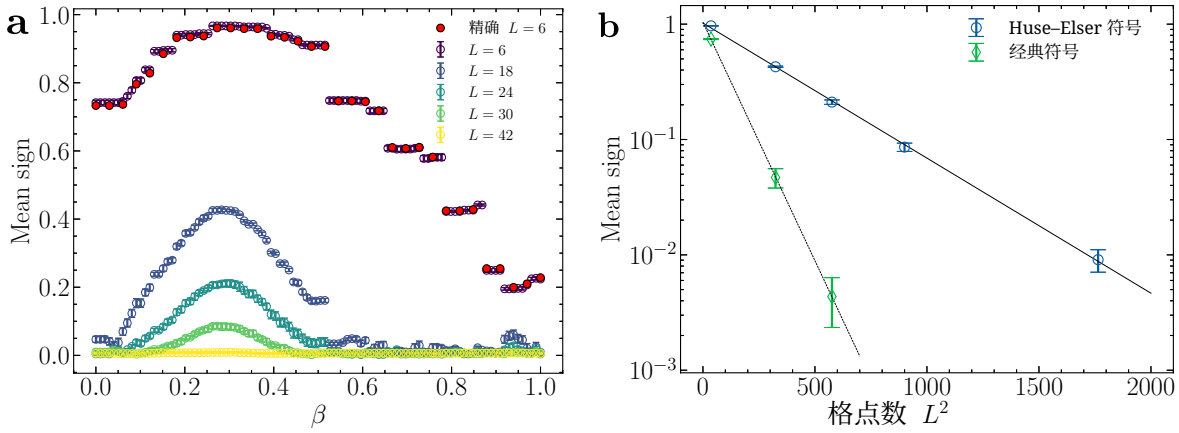

图 4. 基态符号结构。a. 平均符号重叠 [定义见方程（11）] ViT 态与 Huse–Elser 方案之间的重叠 [55, 86] 随其变分参数 β的变化。对于 $L = 6$，给出了精确结果；此时 ViT 波函数与精确基态之间的符号重叠为 $\langle s\rangle = 0.99999707$。 b. 平均符号重叠随格点数 L^2 的变化，其中比较了 Transformer 波函数与经典符号结构（绿色圆圈）或 Huse–Elser 波函数 [55] 在最优 $\beta \approx 0.27$ 处（蓝色圆圈）。

这里， L 是晶格的线性尺寸， e_0 和 $\mathcal{M}_0$ 分别是无限晶格上的每格点基态能量和有序磁矩。常数 $\mathcal{C}_1$ 和 $\mathcal{C}_2$是仅取决于晶格大尺度几何性质的普适数值，并已在补充信息[90]中明确计算得出。

利用方程（L ）和（7）拟合我们的数值大尺寸8数据，得到 $\bar{c} \approx 3.88$和 $c\chi \approx 0.061$，其中 $\bar{c} = c_{\parallel} + 2c_{\perp}$ 和 $c\chi = \left(\frac{1}{2\chi_{\parallel}c_{\parallel}} + \frac{1}{2\chi_{\perp}c_{\perp}}\right)^{-1}$。这些数值与线性自旋波值 $\bar{c}_{\mathrm{SW}} \approx 3$。14, $c\chi_{\mathrm{SW}} \approx 0.086$ [52, 53]（详见 补充信息 ）及 Schwinger 玻色子估计值不同。结合磁化强度的强烈重整化（参见第 $\bar{c}_{\mathrm{SB}} \approx 3.15$ [35] 节），这表明，要对三角晶格海森堡反铁磁体进行定量可靠的描述，必须纳入 SW 未能捕捉到的强量子效应，这与正方晶格的情形相反。重要的是，自旋波速度和磁化率是可通过实验测量的量，因此本文报告的数值为实现三角晶格海森堡模型的候选材料提供了严格的基准 [50, 51, 91, 92]。

C. 非局域符号结构

除能量和序参量之外，受挫磁体还提出了一个关于基态结构的根本问题：符号问题究竟是一种可消除的基底假象，还是反映了真正的非局域符号结构？对于二分晶格上的纯海森堡模型，Marshall–Peierls 符号规则提供了一种局域基底变换，使基态变为非-负的计算基 [93]。对于三角晶格，尚无已知的类似方案。

这一方向上的一个重要尝试由 Huse 和 Elser 提出，他们引入了一种扩展的符号构造，将经典的三子晶格相位因子

$$T_{\mathrm{class}}(\boldsymbol{\sigma}) = \exp\left[i\frac{2\pi}{6}\left(\sum_{i\in \mathrm{B}}\sigma_i^z - \sum_{i\in \mathrm{C}}\sigma_i^z\right)\right], \qquad (9)$$

其中 和 分别表示三角晶格的三个子晶格中的两个，并加入了额外的三体贡献

$$T_{\mathrm{3body}}(\boldsymbol{\sigma}) = \exp\left(i\frac{\beta}{8}\sum_{\langle i,j,k\rangle}\gamma_{ijk}\sigma_i^z\sigma_j^z\sigma_k^z\right), \qquad (10)$$

从而得到符号规定。这里， 是唯一的变分参数，系数 和 的选取旨在保持经典 Néel 态的对称性。

为量化符号结构之间的一致性，我们遵循文献 ，并将变分态 的平均符号重叠定义为

$$\langle s\rangle = \sum_{\boldsymbol{\sigma}} |\Psi_\theta(\boldsymbol{\sigma})|^2 \,\mathrm{sgn}\{\Phi_{\mathrm{HE}}(\boldsymbol{\sigma})\Re[\Psi_\theta(\boldsymbol{\sigma})]\}\,. \qquad (11)$$

可通过从$|\Psi_\theta(\boldsymbol{\sigma})|^2$中进行采样来随机估计。在我们的情形中，使用 $\Psi_\theta(\boldsymbol{\sigma}$的实部是合理的，因为相位分布在 0 附近高度集中，并且 π 对于优化态也是如此（见第 VD节）。在图 4a中，我们展示了平均符号重叠

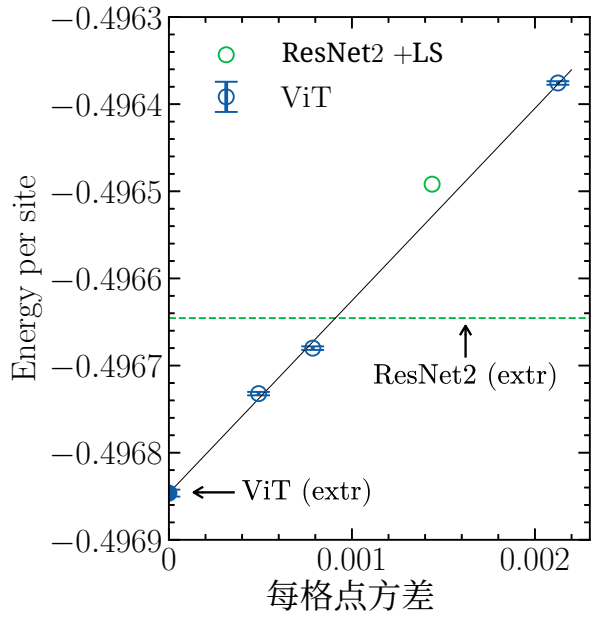

图 5。能量 J_1-J_2 海森堡模型。以下为 J_1-J_2 海森堡模型在 $J_2/J_1 = 0.5$ 一个20×20 团簇上的变分能量，采用周期性边界条件，并绘制为每格点方差的函数。三个蓝色空心点对应以下 ViT 波函数：无对称性、平移对称性，以及完全恢复点群对称性。将这些点线性外推至零方差，得到能量 $-0.49684(1)$（蓝色实心圆）。绿色圆点表示采用一步 Lanczos 步的 ResNet2 试探波函数所得到的变分能量，以及零方差外推值（见绿色虚线），该结果报告于参考文献 [11]。

随 β变化时，视觉Transformer 与 Huse–Elser 态之间的关系。此外，对于 $L = 6$，我们还与精确基态进行了比较；视觉Transformer 实现了近乎完美的符号重叠，$\langle s \rangle = 0.99999707$，这证实该架构在较小尺寸下能够表示正确的符号结构。对于 $L = 6$，Huse–Elser 符号规则与精确符号高度吻合（对于 $\beta \approx 0.27$，$\langle s \rangle \approx 0.96$）[86]，但随着系统尺寸增大，这种吻合度会迅速下降。在图 4**b** 中，我们测量了平均符号重叠随格点数 L^2的变化；对于每种尺寸，我们选择使重叠最大化的最优 β。重叠随系统尺寸呈指数衰变。因此，学习到的符号结构与经典方法以及 Huse 和 Elser 提出的方案[55]，都存在显著差异，这表明，随着尺寸增大，无法由扩展的局域方案捕捉到的符号信息变得愈发重要。有趣的是，我们观察到经典方法（$\beta = 0$）与 Huse–Elser 符号规则具有不同的衰变速率。这一行为表明，系统地纳入更高阶的多体贡献可以进一步提高重叠度。同时，这也说明三角晶格的符号结构可能是其本质上是非局域的，因此在计算基下不存在能够使波函数变为正定的幺正旋转 [94]。

IV. J_1-J_2 海森堡正方晶格

空间注意力机制带来的提升并不局限于三角几何结构，也不限于仅包含最近邻相互作用的哈密顿量。由于它完全依赖于几何信息，预计其背后的物理原理在广泛的模型中依然有效。

为展示这种普适性，我们考虑具有周期性边界条件的 20×20 正方晶格上的自旋-1/2 J_1-J_2 海森堡模型，

$$\hat{H} = J_1 \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{\boldsymbol{S}}_i \cdot \hat{\boldsymbol{S}}_j + J_2 \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} \hat{\boldsymbol{S}}_i \cdot \hat{\boldsymbol{S}}_j, \tag{12}$$

在高度受挫点 $J_2/J_1 = 0.5$，多项数值研究提出此处可能存在量子自旋液体 [56, 57]。强受挫区域中的竞争相互作用，使该模型成为检验任何变分试探波函数的严苛基准。

我们计算变分能量，并获得了当前最先进的结果，优于参考文献 [11] 中采用经 Lanczos 步增强的深度残差卷积神经网络（ResNet2）所得到的结果。在图 5 中，我们报告了随着对称性恢复程度逐步提高所得到的能量：无对称性 $[-0.496375(1)]$，平移对称性 $[-0.496698(1)]$，以及完整点群（C_{4v}）对称性 $[-0.496732(1)]$。零方差外推得到的能量为 $-0.49684(1)$（详见第 VC 节） [56, 95]。完全对称的状态达到约 0.0019 [79] 的 V 分数，相对于外推值的相对误差为$\Delta\varepsilon \approx 2.3 \times 10^{-4}$，表明即使在强受挫区域也具有很高的精度。

值得注意的是，仅具有平移对称性的视觉 Transformer 试探态，其能量已经低于采用一步 Lanczos 步的 ResNet2 结果[95] 以及文献 [11] 报道的零方差外推估计。这进一步表明，所提出的方法并不局限于三角晶格海森堡模型，还能自然地推广到其他具有挑战性的量子多体哈密顿量。

五、讨论

本工作为将变分方法扩展到以往无法触及的晶格尺寸，确立了一条具体路径。我们引入了空间注意力机制，这是视觉变换器架构中一种极简的几何归纳偏置，从根本上改变了神经网络量子态在实践中可适用的范围：它使大规模

优化趋于稳定，从而即使在受挫二维系统中，也能进行受控的有限尺寸标度分析。对于三角晶格海森堡反铁磁体，这一能力使我们得以高精度估算热力学极限量，例如基态能量、磁化强度，以及自旋波速度和磁化率等可通过实验测量的参数。它还阐明了早期序参量估算中一个系统性差异来源：精度较低的变分态往往会高估磁有序，导致磁化强度看似有所增强。

我们的结果表明，进一步扩展到更大的系统尺寸，主要受限于可用计算资源，而非概念或方法上的局限。展望未来，硬件的持续进步有望大幅提升可用计算能力。此外，变分蒙特卡洛框架天然具有并行结构，因此当前方法非常适合在大型 GPU集群上高效运行，使模拟能够在不对方法进行根本性修改的情况下，以相近精度扩展至更大的晶格尺寸。未来值得探索的方向包括提高优化效率 [96], 改进采样策略 [97], 以及通过采用混合精度算法降低可观测量估计的计算成本 [98]和受控近似 [99] 从而实现向越来越大系统的扩展。

我们预计，我们的变分方法将成为发现和表征奇异物态（如量子自旋液体）的重要工具 [6, 100]。除自旋模型外，一个自然的拓展方向是将这一架构用作费米子波函数的回流试探波函数 [99, 101, 102]。在这一背景下，能够处理极大的系统尺寸，对于解决长期悬而未决且备受争议的问题至关重要，例如二维哈伯德模型中超导性的涌现 [102–104], ，因为这使得我们能够直接计算距离越来越远处的配对关联函数。最后，我们引入的偏置完全不依赖于哈密顿量，为未来的发展提供了灵活的基础，使变分模拟能够拓展至日益复杂的哈密顿量，远超本文所研究的模型。

方法	磁化强度	最大尺寸	年份	Ref.
SB	0.2739	TL	2015	[32]
VMC	0.2715(30)	324	2014	[33]
VMC	0.265	576	2009	[34]
SWT	0.24974	TL	2009	[32]
SWT	0.2386	TL	2015	[32]
无限投影纠缠对态	0.2327	TL	2022	[105]
SB+1/N	0.224	432	2018	[35]
CC	0.21535	10^*	2016	[36]
DMRG	0.208(8)	312	2024	[45]
GFMC	0.205(10)	144	1999	[37]
DMRG	0.205(15)	≈ 140	2007	[38]
RNN	0.198(2)	900	2025	[46]
CC	0.198(5)	10^*	2015	[39]
SE	0.198(34)	TL	2015	[41]
ED	0.193	36	2004	[40]
SE	0.19(2)	TL	2006	[41]
CC	0.1865	10^*	2014	[42]
FNE	0.1765(35)	324	2006	[43]
FN	0.1625(30)	324	2006	[43]
PESS	0.161(5)	TL	2022	[44]
无限投影纠缠对态	0.159(6)	TL	2025	[47]
无限投影纠缠对态	0.157	TL	2025	[48]
ViT	0.148(1)	**1764**	2025年	本工作

表 II. 磁化强度表。 三角晶格自旋-$\frac{1}{2}$ 海森堡模型在热力学极限下的基态磁化强度，采用多种方法得到。SB、耦合簇方法、自旋波理论、变分蒙特卡洛、固定节点蒙特卡洛和带有效哈密顿量的固定节点蒙特卡洛分别表示舒温格玻色子平均场理论、耦合簇方法、自旋波理论、变分蒙特卡洛、固定节点蒙特卡洛以及带有效哈密顿量的固定节点蒙特卡洛。对于三项耦合簇方法研究， [36, 39, 42],所用的最大参数 n 列于基于晶格动物的子系统（LSUBn）方案中，并以右上标（$*$）标示。对于所有其他方法，表中列出计算所用的最大系统尺寸（格点数）。直接在热力学极限下进行计算的方法标记为 TL。本表改编自参考文献 [44] ，并更新纳入了最新结果。

此外，在基于有限尺寸计算的方法中，我们的研究采用了迄今为止考虑过的最大团簇尺寸。

方法

A. 磁化强度估算的文献综述

本节汇总文献中采用多种数值和解析方法得到的热力学极限下基态磁化强度参考值。这些估算值汇总于表 II 中，并按磁化强度从大到小排列。值得注意的是，在目前文献报道的所有数值中，我们的结果给出的磁化强度最小。

B. 架构与优化细节

本工作采用的视觉 Transformer 架构包含 $h = 12$ 个注意力头、 $n_l = 8$ 层，嵌入维度为 $d = 72$；针对从 $L = 18$ 到 $L = 42$的不同系统尺寸，可训练参数约为 $P \approx 4.5 \times 10^5$ 。输入自旋构型 $\boldsymbol{\sigma}$ 被划分为 n 个大小为$b \times b$ [13]的互不重叠图像块，每个图像块通过

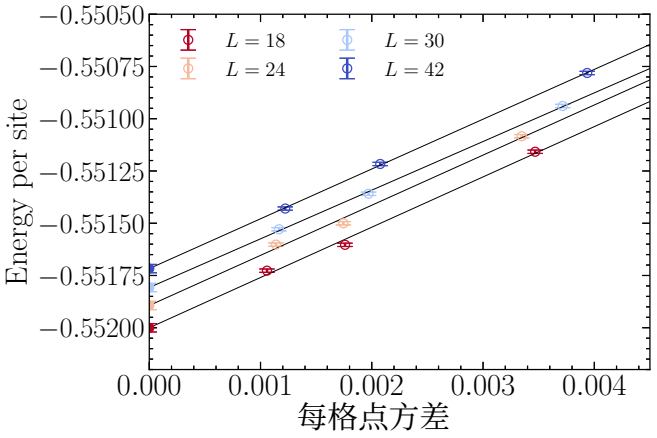

图 6. 能量-方差外推。三角晶格海森堡模型在系统尺寸为 $L = 18$、24、30 和 42 时，变分能量随每格点方差的变化。对于每种尺寸，图中均显示三个点，分别对应未投影ViT波函数、恢复平移对称性的态，以及具有完整点群对称性的态。对零方差极限进行线性外推，可得各系统尺寸下精确基态能量的估计值。

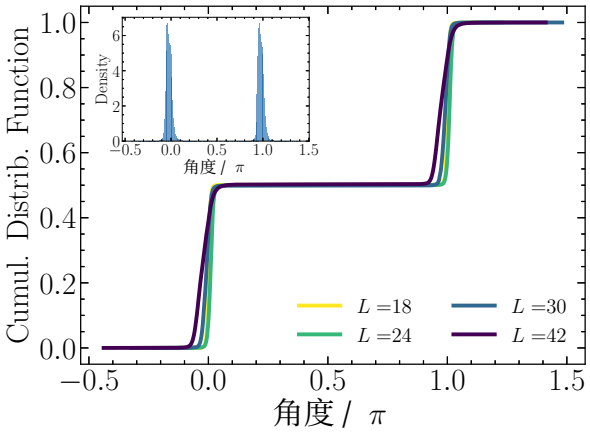

图 7. 相位振幅的分布。对从优化后的变分态中抽取的样本进行评估，得到神经网络振幅相位的累积分布函数，图中展示了系统尺寸为 $L = 18$、24、30 和 42 时的结果。插图： $L = 42$ 对应的相位直方图。

可学习线性变换嵌入到C_{6v} 中，生成序列$\boldsymbol{x}_i$，其中 $i = 1$、.....、 n，且 $n = L^2/b^2$。具体而言，对于三角晶格，我们设定 $b = 3$，这与 N´eel 120° 反铁磁序相容；对于正方晶格，则设定 $b = 4$（见第 IV 节）。文献 [13]详细介绍了该架构中不同超参数的作用。我们令注意力权重在图像块之间具有平移不变性，并通过平凡表示扇区[106]中的投影算符，施加其余所有晶格对称性，包括图像块内的平移、旋转和反射（对于三角晶格为C_{6v} 群，对于正方晶格为 C_{4v} ）。与文献 [13] 所述的标准架构相比，唯一的改动是加入空间注意力机制，并将控制特征相关范围的变分参数初始化为 $\gamma = 3$，适用于所有注意力头和层 [（见公式（1））]。采用 $M = 2^{14}$ 个样本进行随机估计的变分蒙特卡洛（VMC）优化，通过随机重构（SR）[58] 实现；其中，线性代数技巧处于 $P \gg M$ [11, 20] 区间，并借助 SPRING [107]加以增强。优化分为三个阶段：首先进行 5000 步，不进行对称性求和；随后进行 500 步，纳入平移对称性；最后进行 100 步，恢复旋转和反射对称性。初始学习率设为 $\eta = 5 \times 10^{-3}$，并在训练过程中逐步降低。

C. 能量-方差外推

有限尺寸哈密顿量的本征态可以根据系统的对称性量子数进行分类。尽管神经网络波函数在参数足够多的极限下是通用逼近器，原则上能够表示给定哈密顿量的任一本征态，但随机优化不会自动强制满足这些对称性。因此，优化后的变分态通常无法精确满足对称性约束。

对称性恢复可以通过事后进行量子数投影[106, 108]。这一过程不仅能强制满足哈密顿量的精确对称性，还能系统地改进变分态，降低能量并减小方差。我们可以利用这一系列经过对称性投影的态，进行受控的方差外推。事实上，对于一系列经过系统改进的态，很容易证明 $\varepsilon_\theta \approx \varepsilon_0 + \text{常数} \times \sigma_\theta^2$，其中 $\varepsilon_\theta = \langle\Psi_\theta|\hat{}H|\Psi_\theta\rangle/L^2$ 和 $\sigma_\theta^2 = [\langle\Psi_\theta|\hat{}H^2|\Psi_\theta\rangle - \langle\Psi_\theta|\hat{}H|\Psi_\theta\rangle^2]/L^2$ 分别是归一化态 $|\Psi_\theta\rangle$ [56, 95]的每格点能量和每格点方差。因此，精确的每格点能量 ε_0 可以通过拟合 ε_θ 关于σ_θ^2的函数得到。

对于三角晶格上的海森堡模型，逐步改进的态包含三个层次的对称性恢复：未投影态、投影到平移对称性的态，以及投影到完整点群对称性的态（C_{6v} 群）。如图 6所示，波函数的精度在这一序列中逐步提高，从而能够针对每个系统尺寸进行可靠的零方差外推，系统尺寸范围从 $L = 18$ 到 $L = 42$。我们还要强调，

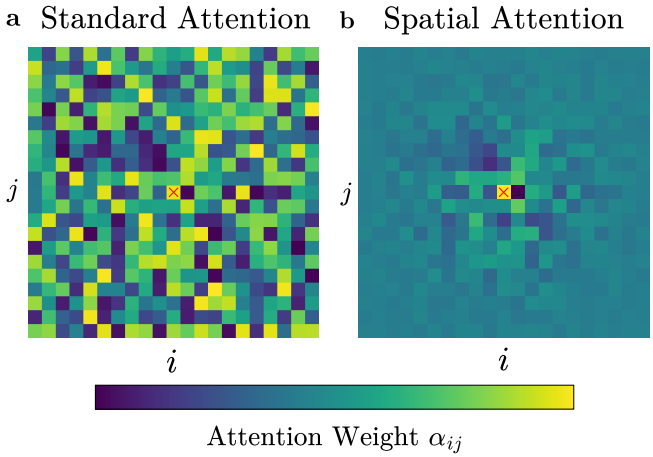

图 8. 初始化时的注意力权重。 用于 α_{ij} *at initialization* 计算中心块向量（红色叉号标记）的更新表示的注意力权重。 **a.** 标准因式分解 Transformer 注意力 [67] 分配的权重没有空间结构，将中心图像块均匀地与其他所有图像块相连。 **b.** 空间注意力引入了可学习长度尺度，从而抑制远处图像块的贡献。颜色深浅表示 α_{ij}的幅度。

随着系统尺寸增大，每格点方差仍保持显著稳定，这表明变分试探态具有尺寸一致性（第 IIIA节中也讨论了这一点）。

D. 相位幅值的分布

满足时间反演对称性的哈密顿量允许其基态在计算基中取为实数；等价地，其多体振幅的相位仅限于 0 或 π，但整体相位除外。尽管如此，我们仍使用复值变分波函数，因为在复平面中表示符号结构可显著简化优化过程。不过，我们预计优化后的态在收敛时会恢复其实数特性 [19]。

在图 7 中，我们给出了与从优化后的变分态中采样得到的构型相关联的神经网络振幅的相位累积分布函数。比较从 $L = 18$ 到 $L = 42$的不同系统尺寸可见，相位分布仍高度集中在 0 和π附近。尽管这些峰的宽度随系统尺寸增大而略有增加，但 $L = 42$ 的整体分布仍呈现显著的双峰形态，且极其狭窄，这表明优化后的波函数在极高精度下可视为实值（见图 7的插图）。

E. 标准注意力机制与空间分解注意力机制在初始化时的比较

在图8中，我们比较了 α_{ij} 初始化时的注意力权重。对于中心图像块（以红色叉号标出）的更新表示，这些权重决定了各个图像块的贡献。比较对象包括分解注意力机制[67] 以及本工作提出的空间加权变体。在标准机制中（见图8**a**），注意力权重 α_{ij} 没有空间结构：所有图像块的贡献强度都相近。这类缺乏结构的长程参数在大型晶格上会越来越难以优化。相比之下，在空间注意力机制中（见图8**b**），式（1）中的指数核会调制注意力权重，使邻近图像块系统性地获得更大的权重，同时根据可学习长度尺度 γ抑制远处图像块的贡献。这种做法在架构层面直接嵌入了晶格的空间结构，从而稳定了大型系统尺寸下的优化过程。

致谢

我们感谢 F. Becca、A. Georges、C. Batista、J. Hasik、S. Zhang 和 A. Sandvik 的宝贵讨论。我们感谢 A. Parola 提醒我们关注文献 [76]。我们感谢 L. Reading-Ikkanda（西蒙斯基金会）绘制图1。LLV 获得 SEFRI 的资助，项目编号 MB22.00051（NEQS - Neural Quantum）。本工作作为“瑞士人工智能倡议”的一部分，获得瑞士国家超级计算中心（CSCS）通过 Alps 上的项目 ID a117 提供的资助。RR 和 LLV 感谢通过 ISCRA 计划获得 CINECA 奖项，从而得以使用高性能计算资源并获得支持。RR 感谢 Flatiron Institute 的支持。Flatiron Institute 是西蒙斯基金会的一个部门。本工作中的数值实验使用了 25000 GPU 小时的 GH200 GPU。不过，我们指出，采用其他变分方法（例如 Gutzwiller 投影态和循环神经网络波函数，见表 I）得到的前述结果，所需 GPU 时间不到 1000 小时。

[1]P. W. Anderson，铜氧化物中的共振价键态$_2$及$_4$ 超导性，《科学》**235**，1196（1987）。

[2] S. Sachdev， *Quantum Phase Transitions*，第2版（剑桥大学出版社，2011）。[3] H. Neuberger 和 T. Ziman，海森堡反铁磁体中的有限尺寸效应，《物理评论B》**39**，2608（1989）。

[4] A. W. Sandvik，《量子自旋系统的计算研究》，载于 *AIP Conference Proceedings*，第 1297 卷（ AIP Publishing，2010），第 135–338 页。[5] M. Troyer 和 U.-J. Wiese，费米子量子蒙特卡罗模拟的计算复杂性与根本局限，物理评论快报 94，170201（2005）。[6] L. Balents，受挫磁体中的自旋液体，《自然》464，199（2010）。[7] J. Eisert、M. Cramer 和 M. B. Plenio，纠缠熵的面积定律，《现代物理评论》82，277（2010）。[8] U. Schollw¨ock，矩阵乘积态时代的密度矩阵重整化群，《物理学年鉴》326，96（2011）。[9] G. Carleo 和 M. Troyer，利用人工神经网络求解量子多体问题，《科学》355，602（2017）。[10] H. Lange、A. Van de Walle、A. Abedinnia 和 A. Bohrdt，从架构到应用：神经量子态综述，《量子科学与技术》9，040501（2024年）。[11] A. Chen 和 M. Heyl，通过高效优化增强深度神经量子态，《自然·物理学》20，1476（2024年）。[12] L. L. Viteritti、R. Rende 和 F. Becca，用于阻挫量子自旋系统的 Transformer 变分波函数，物理评论快报 130，236401（2023）。[13] L. L. Viteritti、R. Rende、A. Parola、S. Goldt 和 F. Becca，用于二维受挫磁体的 Transformer 波函数：Shastry-Sutherland模型中自旋液体相的涌现，《物理评论B》111，134411（2025年）。[14] C. Roth、A. Szab´o 和 A. H. MacDonald，利用深度神经网络对受挫磁体进行高精度变分蒙特卡罗，《物理评论B》108，054410（2023）。[15] Y. Levine、O. Sharir、N. Cohen 和 A. Shashua，深度学习架构中的量子纠缠，物理评论快报 122，065301（2019）。[16] O. Sharir、A. Shashua 和 G. Carleo，神经张量收缩与深度神经量子态的表达能力，《物理评论B》106，205136（2022）。[17] X. Gao 和 L.-M. Duan，利用深度神经网络高效表示量子多体态，《自然·通讯》8，10.1038/s41467-017-00705-2（2017）。[18] A. Szab´o 和 C. Castelnovo，神经网络波函数与符号问题，《物理评论研究》2，033075（2020）。[19] L. Viteritti、F. Ferrari 和 F. Becca，受限玻尔兹曼机对一维$J_1 - J_2$ 海森堡模型的精度，SciPost Phys. 12，166（2022）。[20] R. Rende、L. L. Viteritti、L. Bardone、F. Becca 和 S. Goldt，一种用于优化大规模神经网络量子态的简单线性代数恒等式，Communications Physics 7，10.1038/s42005-024-01732-4（2024）。[21] T. M. Mitchell，学习泛化所需的偏置（2007）。[22] S. D'Ascoli、H. Touvron、M. L. Leavitt、A. S. Mor- cos、G. Biroli 和 L. Sagun，ConViT：通过软卷积归纳偏置改进视觉 Transformer，载于 *Proceedings of the 38th International Conference on Machine Learning*，《机器学习会议论文集》研究，第139卷，M. Meila 和 T. Zhang 编（PMLR，2021），第2286–2296页。[23] E. H. Lieb 和 D. W. Robinson，量子自旋系统的有限群速度，《数学物理通讯》28，251（1972）。[24] M. B. Hastings 和 T. Koma，谱隙与关联的指数衰减，《数学物理通讯》265，781（2006）。[25] K. Sprague 和 S. Czischek，使用大型分块 Transformer进行变分蒙特卡洛，arXiv预印本 arXiv:2306.03921（2023），arXiv:2306.03921 [quant-ph]。[26] C. Wu、F. Wu 和 Y. Huang，Da-transformer：距离感知Transformer（ 2021 2010 06925 ），[ ] arXiv：. cs.CL .[27] J. Sun、G. Zhong、D. Zhou、B. Li 和 Y. Zhong，局部性至关重要：一种用于自动语音识别的局部性偏置线性注意力（ 2022 2203 15609 ），[ ] arXiv：. cs.SD .[28] C. Zhang 和 J. von Delft，强关联电子的可解释人工智能（AI）分析（2025年），arXiv:2510.26864 [cond-mat.str-el]。[29] X. Liang、M. Li、Q. Xiao、J. Chen、C. Yang、H. An 和 L. He，异构硬件上量子多体系统的深度学习表示，《机器学习：科学与技术》4，015035（2023）。[30] A. W. Sandvik，带算符环更新的随机级数展开方法，《物理评论B》59，R14157（1999）。[31] F. Becca 和 S. Sorella，*Quantum Monte Carlo Approaches for Correlated Systems*（剑桥大学出版社，2017）。[32] E. A. Ghioldi、A. Mezio、L. O. Manuel、R. R. P. Singh、J. Oitmaa 和 A. E. Trumper，XXZ三角反铁磁模型中的磁振子与激发连续谱：在 ba$_3$cosb$_2$o$_9$，中的应用，《物理评论B》91，134423（2015）。[33]R. Kaneko、S. Morita 和 M. Imada，扩展自旋1/2三角海森堡模型中的无隙自旋液体相，《日本物理学会志》83，093707（2014）。[34] D. Heidarian、S. Sorella 和 F. Becca，各向异性三角晶格上的自旋-$\frac{1}{2}$ 海森堡模型：从磁性到一维自旋液体，《物理评论B》80，012404（2009）。[35] E. A. Ghioldi、M. G. Gonzalez、S.-S. Zhang、Y. Kamiya、L. O. Manuel、A. E. Trumper 和 C. D. Batista，三角反铁磁体的动力学结构因子：超越平均场的施温格玻色子理论，《物理评论B》98，184403（2018）。[36] O. G¨otze、J. Richter、R. Zinke 和 D. Farnell，任意自旋量子数 s 的三角晶格海森堡反铁磁体基态性质，《磁学与磁性材料期刊》397，333 341 2016–（）。[37] L. Capriotti、A. E. Trumper 和 S. Sorella，三角海森堡模型中的长程奈尔序，物理评论快报82，3899（1999）。[38] S. R. White 和 A. L. Chernyshev，方格与三角晶格海森堡模型中的奈尔序，物理评论快报99，127004（2007）。[39] P. H. Y. Li、R. F. Bishop 和 C. E. Campbell，具有竞争键的三角晶格自旋-$\frac{1}{2}$ 海森堡反铁磁体中的准经典磁序及其消失

–

，《物理评论B》91 ，014426 (2015)。

[40] J. Richter、J. Schulenburg、A. Honecker 和 D. Schmal- fuß，《星形晶格上的自旋-1/2海森堡反铁磁体不存在磁序》，《物理评论B》70，174454（2004）。[41] W. Zheng、J. O. Fjærestad、R. R. P. Singh、R. H. McKenzie 和 R. Coldea，《自旋-$\frac{1}{2}$ 三角晶格海森堡反铁磁体的激发谱》，《物理评论B》74，224420（2006）。[42] D. J. J. Farnell、O. G¨otze、J. Richter、R. F. Bishop 和 P. H. Y. Li，《阿基米德晶格上的量子 $s = \frac{1}{2}$ 反铁磁体：从半经典磁序到非磁性量子态的途径》，《物理评论B》89，184407（2014）。[43] S. Yunoki 和 S. Sorella，《空间各向异性三角晶格海森堡模型中的两个自旋液体相》，《物理评论B》74，014408（2006）。[44] Q. Li、H. Li、J. Zhao、H.-G. Luo 和 Z. Y. Xie，《三角晶格上自旋-$\frac{1}{2}$ 海森堡反铁磁体的磁化强度》，《物理评论B》105，184418（2022）。[45] J. Huang、X. Qian 和 M. Qin，《自旋-1/2三角晶格海森堡模型中120°序的磁化强度：重新审视密度矩阵重整化群》，《物理学杂志：凝聚态》36，185602（2024）。[46] M. S. Moss、R. Wiersema、M. Hibat-Allah、J. Car- rasquilla 和 R. G. Melko，《利用神经网络波函数中的递归，对三角晶格上的海森堡反铁磁体进行大规模模拟》（2025），arXiv:2505.20406 [cond-mat.str-el]。[47] J. Hasik 和 P. Corboz，《三角晶格上自旋-1⁄2海森堡模型的螺旋iPEPS研究》，物理评论快报 133，176502（2024）。[48] J. Naumann、J. Eisert 和 P. Schmoll，《三角晶格上投影纠缠对态的变分优化》（2025），arXiv:2510.04907 [cond-mat.str-el]。[49] J. Ma、Y. Kamiya、T. Hong、H. B. Cao、G. Ehlers、W. Tian、C. D. Batista、Z. L. Dun、H. D. Zhou 和 M. Matsuda，《自旋-1/2 等边三角晶格反铁磁体 $ba_3cosb_2o_9$，的静态与动力学性质》，物理评论快报 116，087201（2016）。[50] T. Xie、A. A. Eberharter、J. Xing、S. Nishimoto、M. Brando、P. Khanenko、J. Sichelschmidt、A. A. Tur- rini、D. G. Mazzone、P. G. Naumov、L. D. Sanjeewa、N. Harrison、A. S. Sefat、B. Normand、A. M. L¨auchli、A. Podlesnyak 和 S. E. Nikitin，《自旋-1/2三角晶格反铁磁体 $csybse_2$，的完整场诱导谱响应》，npj Quantum Materials 8，48（2023）。[51] A. O. Scheie、E. A. Ghioldi、J. Xing、J. A. M. Paddison、N. E. Sherman、M. Dupont、L. D. Sanjeewa、S. Lee、A. J. Woods、D. Abernathy、D. M. Pajerowski、T. J. Williams、S.-S. Zhang、L. O. Manuel、A. E. Trumper、C. D. Pemmaraju、A. S. Sefat、D. S. Parker、T. P. Dev- ereaux、R. Movshovich、J. E. Moore、C. D. Batista 和 D. A. Tennant，《三角反铁磁体 $kybse_2$，中的邻近自旋液体与分数量子化》，《自然·物理学》20，74（2024）。[52] A. Chubukov、S. Sachdev 和 S. Todadri，《三角晶格量子反铁磁体的大S展开》，《物理学杂志：凝聚态》6，8891（1999）。[53] A. L. Chernyshev 和 M. E. Zhitomirsky，《三角晶格反铁磁体中的自旋波：衰变、谱重整化与奇异性》，《物理评论B》79，144416（2009）。[54] A. E. Trumper、L. Capriotti 和 S. Sorella，三角海森堡模型的有限尺寸自旋波理论，《物理评论B》61，11529（2000）。[55] D. A. Huse 和 V. Elser，二维自旋 1⁄2 海森堡反铁磁体的简单变分波函数，物理评论快报 60，2531（1988）。[56] W.-J. Hu、F. Becca、A. Parola 和 S. Sorella，通过挫败 Néel 反铁磁性直接证实无能隙 Z_2 自旋液体，《物理评论B》88，060402（2013）。[57] Y. Nomura 和 M. Imada，利用改进的量子多体求解器，结合神经网络波函数、关联比和能级谱学揭示狄拉克型节点自旋液体，Physical Review X 11，031034（2021）。[58] S. Sorella，变分蒙特卡洛方法中的波函数优化，《物理评论B》71，241103（2005）。[59] R. Rende、S. Goldt、F. Becca 和 L. L. Viteritti，神经网络量子态的精细调优，Physical Revie w Research 6，10.1103/physrevresearch.6.043280（2024）。[60] R. P. Nutakki、A. Shokry 和 F. Vicentini，面向受挫磁体的深层平移对称神经量子态设计原则，Physical Review Research 7，10.1103/ybgv-35jm（2025）。[61] R. Rende、L. L. Viteritti、F. Becca、A. Scardicchio、A. Laio 和 G. Carleo，作为多个哈密顿量统一试探波函数的基础神经网络量子态，《自然·通讯》16，10.1038/s41467-025-62098-x（2025）。[62] L. L. Viteritti、R. Rende、G. B. Testasecca、J. Niedda、R. Moessner、G. Carleo 和 A. Scardicchio，通过基础神经网络量子态研究二维无序海森堡模型中的量子自旋玻璃（2025），arXiv:2507.05073 [cond-mat.dis-nn]。[63] A. Chen、V. D. Naik 和 M. Heyl，卷积Transformer波函数（2025），arXiv:2503.10462 [cond-mat.dis-nn]。[64] A. Vaswani、N. Shazeer、N. Parmar、J. Uszkoreit、L. Jones、A. N. Gomez、L. Kaiser 和 I. Polosukhin，注意力机制就是你所需的一切（2023），arXiv:1706.03762 [cs.CL]。[65] R. Rende、F. Gerace、A. Laio 和 S. Goldt，Transformer学习动力学中的分布简单性偏差，载于 *Advances in Neural Information Processing Systems* 37，，第卷，由 A. Globerson、L. Mackey、D. Belgrave、A. Fan、U. Paquet、J. Tomczak 和 C. Zhang 编（Curran Associates, Inc.，2024），第 96207–96228 页。[66] R. Rende、F. Gerace、A. Laio 和 S. Goldt，注意力机制与广义 Potts 模型的映射，《物理评论研究》6，023057（2024）。[67] R. Rende 和 L. Loris Viteritti，查询和键是否始终相关？Transformer 波函数案例研究，《机器学习：科学与技术》6，010501 2025( )。[68] Y. Gu、W. Li、H. Lin、B. Zhan、R. Li、Y. Huang、D. He、Y. Wu、T. Xiang、M. Qin、L. Wang 和 D. Lv，利用神经量子态求解 Hubbard 模型（2025），arXiv:2507.02644 [cond-mat.str-el]。[69]参见 NetKet 教程[https://netket.readthedocs.io/en/latest/tutorials/ ViT-wave-function.html。[70] S. Yunoki 和 S. Sorella，空间各向异性三角海森堡模型中的两个自旋液体相，《物理评论B》74，014408（2006）。[71] E. Ghorbani、L. F. Tocchio 和 F. Becca，关于各向异性三角晶格上 $s = \frac{1}{2}$ 海森堡模型的变分波函数

：自旋液体与螺旋序，《物理评论B》93，085111（2016）。[72] F. Mezzacapo 和 J. I. Cirac，三角晶格上自旋反铁磁海森堡模型的基态性质：基于纠缠plaquette态的变分研究，新物理学杂志 12，103039 2010( )。[73] D. Heidarian、S. Sorella 和 F. Becca，各向异性三角晶格上的自旋-$\frac{1}{2}$ 海森堡模型：从磁性到一维自旋液体，《物理评论B》80，012404（2009）。[74] S. R. White 和 A. L. Chernyshev，正方晶格和三角晶格海森堡模型中的 Néel 序，物理评论快报 99，127004（2007）。[75] M. S. Moss、R. Wiersema、M. Hibat-Allah、J. Carrasquilla 和 R. G. Melko，利用神经网络波函数中的递归，对三角晶格海森堡反铁磁体进行大规模模拟，《物理评论B》112，134449（2025）。[76] D. S. Fisher，量子反铁磁体的普适性、低温性质与有限尺寸标度，《物理评论B》39，11783（1989）。[77] A. W. Sandvik，二维海森堡模型基态参数的有限尺寸标度，《物理评论B》56，11678（1997）。[78] A. W. Sandvik，正方晶格上二维自旋 1/2 海森堡模型基态参数的高精度计算，arXiv 预印本（2026），arXiv:2601.20189 [cond-mat.str-el]。[79] D. Wu、R. Rossi、F. Vicentini、N. Astrakhantsev、F. Becca、X. Cao、J. Carrasquilla、F. Ferrari、A. Georges、M. Hibat-Allah、M. Imada、A. M. L¨auchli、G. Mazzola、A. Mezzacapo、A. Millis、J. R. Moreno、T. Neupert、Y. Nomura、J. Nys、O. Parcollet、R. Pohle、I. Romero、M. Schmid、J. M. Silvester、S. Sorella、L. F. Tocchio、L. Wang、S. R. White、A. Wietek、Q. Yang、Y. Yang、S. Zhang 和 G. Carleo，量子多体问题的变分基准，《科学》386，296（2024），https://www.science.org/doi/pdf/10.1126/science.adg9774

[80] J.-i. Igarashi，《零温下二维海森堡反铁磁体热力学量的1/s展开》，《物理评论B》46，10763（1992）。[81] P. C. G. Vlaar 和 P. Corboz，《利用投影纠缠对态模拟三维量子系统》，《物理评论B》103，205137（2021）。[82] P. Corboz、M. Lajk´o、A. M. L¨auchli、K. Penc 和 F. Mila，《蜂窝晶格上的自旋轨道量子液体》，Physical Review X 2，041013（2012）。[83] P. Corboz，《利用无限投影纠缠对态进行变分优化》，《物理评论B》94，10 1103 94 035133 2016。/physrevb. .（）。[84] J. Jordan、R. Or´us、G. Vidal、F. Verstraete 和 J. I. Cirac，《二维空间中无限尺寸量子晶格系统的经典模拟》，Physical Review Letters 101，10.1103/physrevlett.101.250602（2008）。[85] F. Verstraete 和 J. I. Cirac，《二维及高维量子多体系统的重整化算法》（2004 0407066），[ ] arXiv:cond-mat/ cond-mat.str-el 。[86] L. Capriotti、A. E. Trumper 和 S. Sorella，《三角海森堡模型中的长程´Néel序》，物理评论快报82，3899（1999）。

[87] A. Angelucci，受挫量子海森堡模型的路径积分分析，《物理评论B》44，6849（1991）。[88] A. V. Chubukov、T. Senthil 和 S. Sachdev，二维受挫量子反铁磁体的普适磁性，物理评论快报 72，2089（1994）。[89] A. V. Chubukov、S. Sachdev 和 T. Senthil，受挫量子反铁磁体中的量子相变，Nuclear Physics B 426，601–643（1994）。[90] J. M. Borwein、M. L. Glasser、R. C. McPhedran、J. G. Wan 和 I. J. Zucker，*Lattice Sums Then and Now*，《数学及其应用百科全书》（剑桥大学出版社，2013）。[91] T. Susuki、N. Kurita、T. Tanaka、H. Nojiri、A. Matsuo、K. Kindo 和 H. Tanaka，s=1/2 三角晶格海森堡反铁磁体 $Ba_3CoSb_2O_9$，中的磁化过程与集体激发，《物理评论快报》110，267201（2013）。[92] A. O. Scheie、Y. Kamiya、H. Zhang、S. Lee、A. J. Woods、M. O. Ajeesh、M. G. Gonzalez、B. Bernu、J. W. Villanova、J. Xing、Q. Huang、Q. Zhang、J. Ma、E. S. Choi、D. M. Pajerowski、H. Zhou、A. S. Sefat、S. Okamoto、T. Berlijn、L. Messio、R. Movshovich、C. D. Batista 和 D. A. Tennant，菱方矿结构近邻量子自旋液体候选材料 KYbSe2 中的非线性磁振子与交换哈密顿量，《物理评论B》109，014425（2024）。[93] W. Marshall，反铁磁性，《伦敦皇家学会会刊 A辑：数学与物理科学》232，48（1955）。[94] G. Torlai、J. Carrasquilla、M. T. Fishman、R. G. Melko 和 M. P. A. Fisher，通过自动微分实现波函数正定化，《物理评论研究》2，032060（2020）。[95] F. Becca、W.-J. Hu、Y. Iqbal、A. Parola、D. Poilblanc 和 S. Sorella，用 Lanczos 步骤改进变分波函数，《物理学杂志：会议系列》640，012039（2015）。[96] A. Shokry、A. Santini 和 F. Vicentini，少即是多：利用块结构近似量子几何张量（2025），arXiv:2510.08430 [quant-ph]。[97] A. Misery、L. Gravina、A. Santini 和 F. Vicentini，另辟蹊径：通过重要性采样改进变分蒙特卡洛梯度（2025），arXiv:2507.05352 [quant-ph]。[98] M. Solinas、A. Valenti、N. Bou-Rabee 和 R. Wiersema，混合精度下的神经量子态（2026），arXiv:2601.20782 [quant-ph]。[99] A.-J. Liu 和 B. K. Clark，高效优化用于 *abinitio* 量子化学的神经网络回流，《物理评论B》112，155162（2025）。[100] L. Savary 和 L. Balents，量子自旋液体：综述，《物理学进展报告》80，016502（2016）。[101] J. Robledo Moreno、G. Carleo、A. Georges 和 J. Stokes，基于神经网络约束隐态的费米子波函数，美国国家科学院院刊119，10 1073 2122059119 2022 . /pnas.（）。[102] C. Roth、A. Chen、A. Sengupta 和 A. Georges，神经量子态揭示二维 Hubbard 模型中的超导性（2025），arXiv:2511.07566 [cond-mat.supr-con]。

[103] M. Qin、C.-M. Chung、H. Shi、E. Vitali、C. Hubig、U. Schollw¨ock、S. R. White 和 S. Zhang（西蒙斯多电子问题合作组），纯二维 Hubbard 模型中不存在超导性，Physical Review X **10**，031016（2020年）。[104] H. Xu、C.-M. Chung、M. Qin、U. Schollw¨ock、S. R. White 和 S. Zhang，Hubbard 模型中超导性与部分填充条纹共存，《科学》**384**，10.1126/science.adh7691 （2024年）。[105] R. Chi、Y. Liu、Y. Wan、H.-J. Liao 和 T. Xiang，具有各向异性的自旋-1/2 三角晶格海森堡反铁磁体的自旋激发谱，物理评论快报 **129**，227201 (2022年)。[106] Y. Nomura，通过恢复对称性，以量子态表示改进受限玻尔兹曼机，《物理学杂志：凝聚态》**33**，174003 (2021年)。[107] G. Goldshlager、N. Abrahamsen 和 L. Lin，受卡茨马尔兹启发的方法，用于加速神经网络波函数的优化，《计算物理学杂志》**516**，113351 (2024年)。[108] T. Mizusaki 和 M. Imada，路径积分重整化群方法中的量子数投影，《物理评论B》**69**，125110 (2004年)。

补充信息

目录

I. 量子反铁磁体中的有限尺寸修正 1
A. 记号 1B. 基态能量 2C. 基态磁化强度 3

II. 线性自旋波理论的数值结果 6

参考文献 6

I. 量子反铁磁体中的有限尺寸修正

A. 记号

给定一个由 $\boldsymbol{a}_1$ 和 $\boldsymbol{a}_2$生成的环面上的、包含 $L\times L$ 个自旋的二维晶格，我们将该环面视为无限晶格的晶胞，其晶格矢量为 $\boldsymbol{A}_1 = L\boldsymbol{a}_1$和 $\boldsymbol{A}_2 = L\boldsymbol{a}_2$，晶格点为 $\boldsymbol{R} = n_1\boldsymbol{A}_1 + n_2\boldsymbol{A}_2$，其中 n_1、$n_2 \in \mathbb{Z}$。超胞面积为

$$V = |\boldsymbol{A}_1 \times \boldsymbol{A}_2| = L^2|\boldsymbol{a}_1 \times \boldsymbol{a}_2| \tag{1}$$

相应的倒格矢定义为

$$\boldsymbol{B}_1 = \frac{2\pi}{V}(\boldsymbol{A}_2 \times \hat{\boldsymbol{z}}) \qquad \boldsymbol{B}_2 = \frac{2\pi}{V}(\hat{\boldsymbol{z}} \times \boldsymbol{A}_1)\,, \tag{2}$$

并满足 $\boldsymbol{A}_i \cdot \boldsymbol{B}_j = 2\pi\,\delta_{ij}$。因此，允许的倒格矢为 $\boldsymbol{G} = m_1\boldsymbol{B}_1 + m_2\boldsymbol{B}_2$，其中 m_1、$m_2 \in \mathbb{Z}$。引入原始倒格矢 $\boldsymbol{b}_i$（满足 $\boldsymbol{B}_i = \frac{2\pi}{L}\boldsymbol{b}_i$）较为方便，使得 $\boldsymbol{a}_i \cdot \boldsymbol{b}_j = \delta_{ij}$。于是，$\boldsymbol{G}$ 的范数可写为

$$|\boldsymbol{G}| = \frac{2\pi}{L}|\boldsymbol{m}|_g \qquad |\boldsymbol{m}|_g = \sqrt{\boldsymbol{m}^T g\,\boldsymbol{m}}\,, \tag{3}$$

其中，倒空间中的度量张量定义为 $g_{ij} = \boldsymbol{b}_i \cdot \boldsymbol{b}_j$。倒易晶胞面积满足

$$\sqrt{\det g} = |\mathbf{b}_1 \times \mathbf{b}_2| = \frac{1}{|\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2|}\,, \tag{4}$$

因此，方程（1）也可以等价地写成 $V = L^2/\sqrt{\text{行列式}\,g}$。

B. 基态能量

本节提取环面上二维量子反铁磁体基态能量的主导有限尺寸修正。在连续极限下，三角反铁磁体在 $T=0$ 处的基态能量密度为

$$e_0 = \left(\sum_{\ell=1}^{3}\frac{c_\ell}{2}\right)\int_{|\mathbf{k}|<\Lambda}\frac{d^2k}{4\pi^2}|\mathbf{k}|\ , \tag{5}$$

其取决于紫外截断 Λ。参照文献 [1], ，我们计算有限尺寸修正，它们与截断无关。根据量纲分析和标度，体积为 $V\propto L^2$ 的环面上的能量具有如下标度形式

$$\frac{E}{L^2} = e_0 + \left(\sum_{\ell=1}^{3}\frac{c_\ell}{2}\right)\frac{\mathcal{C}_1}{L^3} + \dots\ . \tag{6}$$

这里， e_0 取决于 Λ ，且是非普适的；而 $\mathcal{C}_1$ 是普适的：它仅取决于环面的模参数，与自旋所在的底层晶格无关。

在离散情形下，单位体积能量可表示为（应用泊松求和公式后）

$$\frac{E}{V} = \left(\sum_{\ell=1}^{3}\frac{c_\ell}{2}\right)\frac{1}{V}\sum_{\boldsymbol{G}}|\boldsymbol{G}| = \left(\sum_{\ell=1}^{3}\frac{c_\ell}{2}\right)\int_{\mathbb{R}^2}\frac{d^2k}{4\pi^2}\sum_{\boldsymbol{R}}e^{i\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{R}}|\mathbf{k}|\ . \tag{7}$$

对 $|\mathbf{k}|$ 进行傅里叶变换，并利用式（4），可得:

$$\frac{E}{L^2} = e_0 - \frac{1}{\sqrt{\det g}}\left(\sum_{\ell=1}^{3}\frac{c_\ell}{2}\right)\sum_{\boldsymbol{R}\neq\mathbf{0}}\frac{1}{2\pi|\boldsymbol{R}|^3}\ . \tag{8}$$

对于三角晶格，我们选取 $\boldsymbol{a}_1=(1,\ 0)$和 $\boldsymbol{a}_2=(-\frac{1}{2},\ \frac{\sqrt{3}}{2})$。于是 $|\bar{\boldsymbol{R}}|^3 = L^3(n_1^2+n_2^2-n_1n_2)^{3/2}$ ，得到

$$\frac{E}{L^2} = e_0 - \left(\sum_{\ell=1}^{3}\frac{c_\ell}{2}\right)\left[\frac{S_\triangle}{2\pi\sqrt{\det g}}\right]\frac{1}{L^3}\ , \tag{9}$$

其中我们定义了 $S_\triangle=\sum_{(n_1,\ n_2)\neq\mathbf{0}}(n_1^2+n_2^2-n_1n_2)^{-3/2}$。最后一个表达式的形式与公式（6）相同，其中 $\mathcal{C}_1=-S_\triangle/(2\pi\sqrt{\det g})$，其中 $S_\triangle = 6\,\zeta\left(\frac{3}{2}\right)L\left(\chi_{-3},\ \frac{3}{2}\right) = 11.03417573$。这里， $\zeta(\cdot)$ 是黎曼 ζ函数，而 $L(\chi_{-3},\ \cdot)$ 是与狄利克雷特征 L-函数相关联的狄利克雷 χ_{-3} [2]。最后，我们得到

$$\boxed{\mathcal{C}_1 = -\frac{S_\triangle}{2\pi\sqrt{\det g}} = -1.52086497}\ . \tag{10}$$

对于正方晶格，取 $\boldsymbol{a}_1=(1,\ 0)$ 和 $\boldsymbol{a}_2=(0,\ 1)$、速度 $c_1=c_2=c$ 及 $\sqrt{\det g}=1$，也可以进行类似的计算。在这种情况下 [2]

$$S_\square = \sum_{(n_1,n_2)\neq\mathbf{0}}\frac{1}{(n_1^2+n_2^2)^{3/2}} = 4\,\zeta\left(\tfrac{3}{2}\right)\beta\left(\tfrac{3}{2}\right) = 9.03362168\ , \tag{11}$$

其中 $\beta(\cdot)$ 是狄利克雷贝塔函数。我们得到 $\mathcal{C}_1 = -S_\square/(2\pi) = -1.437745$，这与参考文献 [1, 3, 4]一致。

C. 基态磁化强度

本节确定环面上的二维量子反铁磁体基态磁化强度的主导有限尺寸修正。正如正文所述，三角晶格上的磁化强度由两个正交单位向量 $\boldsymbol{n}_1$ 和 $\boldsymbol{n}_2$表征，它们与 z_α 的关系为

$$(n_1)^a + i\,(n_2)^a = z_\gamma\,\varepsilon_{\gamma\alpha}\,\sigma^a_{\alpha\beta}\,z_\beta, \tag{12}$$

我们通过参数化 $\sum_\alpha |z_\alpha|^2 = 1$ 来求解约束

$$z_1 = \sqrt{1-\pi_1^2-\pi_2^2-\pi_3^2} + i\pi_1, \qquad z_2 = \pi_2 + i\pi_3, \tag{13}$$

其中 π_ℓ 是三个实场（$\ell = 1$、2和3）。对 π_ℓ取二阶，式（12）中的关系意味着

$$\boldsymbol{n}_1 = \begin{pmatrix} 1-2\left(\pi_1^2+\pi_2^2\right) \\ -2\pi_1 - 2\pi_2\pi_3 \\ -2\pi_2 + 2\pi_1\pi_3 \end{pmatrix} + \cdots, \qquad \boldsymbol{n}_2 = \begin{pmatrix} 2\pi_1 - 2\pi_2\pi_3 \\ 1-2\left(\pi_1^2+\pi_3^2\right) \\ -2\pi_3 - 2\pi_1\pi_2 \end{pmatrix} + \cdots. \tag{14}$$

根据这一参数化以及正文中 π_ℓ 的作用量，我们得到

$$c_1 = c_\parallel, \qquad c_2 = c_3 = c_\perp, \tag{15}$$

π_1 是面内模，而$\pi_{2,\ 3}$ 是两个面外模。

我们在体积为 V的环面上计算结构因子，

$$\frac{\mathcal{M}^2}{\mathcal{M}_0^2} = \frac{1}{V}\int d^2x\,\langle \boldsymbol{n}_1(x,\tau)\cdot\boldsymbol{n}_1(0,\tau)\rangle \tag{16}$$

$$= 1 + \frac{4}{V}\sum_{\ell=1}^{2}\int\frac{d\omega}{2\pi}\left(\frac{1}{m_\ell\omega^2} - \sum_{\boldsymbol{G}}\frac{1}{m_\ell(\omega^2+c_\ell^2|\boldsymbol{G}|^2)}\right) \tag{17}$$

$$= 1 - \frac{2}{V}\left(\sum_{\ell=1}^{2}\frac{1}{m_\ell c_\ell}\right)\sum_{\boldsymbol{G}\neq 0}\frac{1}{|\boldsymbol{G}|}. \tag{18}$$

减去无限体积结果后，我们得到

$$\mathcal{M}^2 - \mathcal{M}_0^2 = -\mathcal{M}_0^2\left(\sum_{\ell=1}^{2}\frac{2}{m_\ell c_\ell}\right)\left(\frac{1}{V}\sum_{\boldsymbol{G}\neq 0}\frac{1}{|\boldsymbol{G}|} - \int_{|\boldsymbol{k}|\le\Lambda}\frac{d^2k}{4\pi^2}\,\frac{1}{|\boldsymbol{k}|}\right). \tag{19}$$

极限 $\Lambda\to+\infty$ 在相减之后应当存在；实践中可以引入平滑截断。由此得到如下形式的结果

$$\mathcal{M}^2(L) = \mathcal{M}_0^2 + \mathcal{M}_0^2\left(\sum_{\ell=1}^{2}\frac{2}{m_\ell c_\ell}\right)\frac{\mathcal{C}_2}{L}\ , \tag{20}$$

类似于式 (6)。此处 $\mathcal{C}_2$ 是一个仅依赖于环面模参数的普适数。

为提取 $\mathcal{C}_2$ ，我们计算式（19中离散倒格子和与相应连续积分之差。每一项都发散，但它们的差是有限的。

我们采用两种互补的正则化方法来验证结果。首先，引入指数调节子 [5] ，并定义

$$\Delta_\eta(L) \equiv \frac{1}{V}\sum_{\mathbf{G}\neq\mathbf{0}} \frac{e^{-\eta\,|\mathbf{G}|}}{|\mathbf{G}|} - \int_{\mathbb{R}^2} \frac{d^2\mathbf{k}}{4\pi^2}\,\frac{e^{-\eta\,|\mathbf{k}|}}{|\mathbf{k}|}\ . \tag{21}$$

利用 $\mathbf{k}$ 的极坐标可以显式地计算连续积分。

$$\int_{\mathbb{R}^2} \frac{d^2\mathbf{k}}{4\pi^2}\,\frac{e^{-\eta\,|\mathbf{k}|}}{|\mathbf{k}|} = \frac{1}{2\pi\eta}\ . \tag{22}$$

引入无量纲调节器 $\varepsilon \equiv (2\pi\eta)/L$ ，并利用式（4）和式（3），可得以下无量纲表达式：

$$\Delta_\varepsilon(L) \equiv \frac{1}{2\pi L}\left[\sqrt{\det g}\sum_{\mathbf{m}\neq\mathbf{0}} \frac{e^{-\varepsilon|\mathbf{m}|_g}}{|\mathbf{m}|_g} - \frac{2\pi}{\varepsilon}\right]\ . \tag{23}$$

对于小-ε 展开，我们预期

$$\sum_{\mathbf{m}\neq\mathbf{0}} \frac{e^{-\varepsilon|\mathbf{m}|_g}}{|\mathbf{m}|_g} \underset{\varepsilon\to0}{\sim} \frac{2\pi}{\varepsilon\sqrt{\det g}} + C + O(\varepsilon)\ . \tag{24}$$

因此，我们可以将有限部分提取为 $\varepsilon\to 0$：

$$\Delta_\varepsilon(L) \underset{\varepsilon\to0}{\sim} \frac{1}{2\pi L}\left[\sqrt{\det g}\left(\frac{2\pi}{\varepsilon\sqrt{\det g}} + C + O(\varepsilon)\right) - \frac{2\pi}{\varepsilon}\right] = \frac{1}{2\pi L}\sqrt{\det g}\,C + O(\varepsilon)\ . \tag{25}$$

最终，有限贡献可以改写为

$$\mathcal{C}_2 \equiv -\frac{\sqrt{\det g}\,C}{2\pi}\ . \tag{26}$$

后者可以通过计算若干个 ε 值下离散求和与积分之差，并将结果外推至 $\varepsilon\to 0$，从而得到 $\mathcal{C}_2 \approx 0.670583$ （见图1）。

作为另一种方法，我们采用ζ函数正则化 [6], ，得到解析结果。我们首先定义方程（23）中出现的格点和

$$Z_g = \sqrt{\det g}\sum_{\boldsymbol{m}\neq\mathbf{0}} \frac{1}{|\boldsymbol{m}|_g} = \sum_{(m_1,m_2)\neq\mathbf{0}} \frac{1}{(m_1^2+m_2^2+m_1m_2)^{1/2}}\ . \tag{27}$$

这里我们使用了 $|\boldsymbol{m}|_g = \frac{2}{\sqrt{3}}\,(m^2+n^2+mn)^{\,1/2}$和 $\sqrt{\det g} = \frac{2}{\sqrt{3}}$。

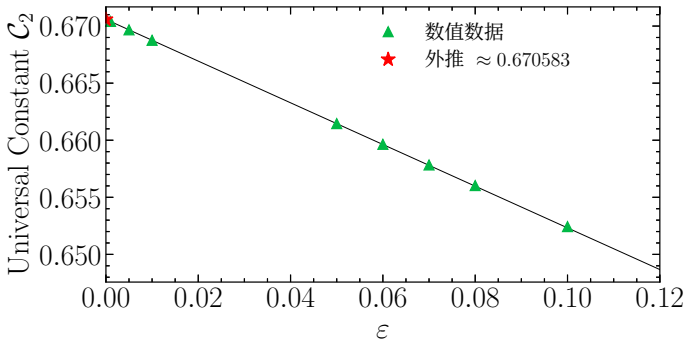

图 1. 从离散倒格子和与相应连续积分之间的受调节差值中提取的基态磁化强度有限尺寸贡献 $\mathcal{C}_2$，以调节子 ε为函数绘出。

式（27）中的级数是发散的。然而，它可以通过解析延拓并借助三角晶格Epstein ζ函数 [2],

$$Z_{\triangle}(s) = \sum_{(m_1,m_2)\neq\mathbf{0}} \frac{1}{(m_1^2 + m_1 m_2 + m_2^2)^s} , \qquad s \in \mathbb{C},\ \mathrm{Re}(s) > 1 . \tag{28}$$

该函数 可进行解析延拓，并满足一个函数方程。可以得到如下因式分解 n

$$Z_{\Delta}(s) = 6\,\zeta(s)\,L(\chi_{-3}, s) , \tag{29}$$

其中 $\zeta(\cdot)$ 是黎曼ζ函数，而 $L(\chi_{-3}, \cdot)$ 是与狄利克雷特征 L相关的狄利克雷 χ_{-3} [2]函数。注意，方程（29）可亚纯延拓至复平面，并在 $s = 1$处有唯一的简单极点。通过解析延拓可得，对于 $s = 1/2$

$$Z_{\Delta}\left(\tfrac{1}{2}\right) = 6\,\zeta\left(\tfrac{1}{2}\right)\,L\left(\chi_{-3}, \tfrac{1}{2}\right) = -4.213422636136906890 03 . \tag{30}$$

通过这一方法，我们可以直接提取级数的有限部分，而无需减去发散项 [6]，并得到

$$\boxed{\mathcal{C}_2 = -\frac{Z_{\triangle}(\frac{1}{2})}{2\pi} = 0.670587039} . \tag{31}$$

请注意，采用后一种方法得到的结果与采用指数截断正则化得到的结果一致（见图 1）。

对于正方晶格，也可以进行类似的计算，定义

$$Z_{\square}(s) = \sum_{(m_1,m_2)\neq\mathbf{0}} \frac{1}{(m_1^2 + m_2^2)^s} , \tag{32}$$

可通过解析方法推导为 $Z_{\square}(s) = 4\,\zeta(s)\,\beta(s)$，并在 $s = \frac{1}{2}$ 处求值得到 $Z_{\square}(\frac{1}{2})$ – $= -3.900264920001$，进而得到 $\mathcal{C}_2 = -Z_{\square}(s)/(2\pi) = 0.62074644$，与参考文献 [3, 4] 一致。

II. 线性自旋波理论的数值结果

我们考虑三角晶格上的自旋 $\frac{1}{2}$ 海森堡反铁磁体。本节报告依据参考文献 [7] 采用线性自旋波理论得到的结果，并始终令 $S=\frac{1}{2}$， $J=1$， $a=1$。两个独立的自旋波速度为

$$c_{\parallel}^{0}=\frac{3\sqrt{3}}{2}JSa \qquad c_{\perp}^{0}=\frac{3\sqrt{3}}{2\sqrt{2}}JSa\ . \tag{33}$$

计入 $1/S$ 修正后，重整化速度为

$$c_{\mathrm{SW}\parallel}=c_{\parallel}^{0}\left(1-\frac{0.115}{2S}\right) \qquad c_{\mathrm{SW}\perp}=c_{\perp}^{0}\left(1+\frac{0.083}{2S}\right)\ . \tag{34}$$

对于$S=\frac{1}{2}$，可得

$$c_{\mathrm{SW}\parallel}=1.1496487235238424 \qquad c_{\mathrm{SW}\perp}=0.9947990217878181\ . \tag{35}$$

均匀磁化率为

$$\chi_{\mathrm{SW}\perp}=\frac{2}{9\sqrt{3}Ja^{2}}\left(1-\frac{0.285}{2S}\right) \qquad \chi_{\mathrm{SW}\parallel}=\frac{2}{9\sqrt{3}Ja^{2}}\left(1-\frac{0.449}{2S}\right)\ . \tag{36}$$

对于 $S=\frac{1}{2}$，可得

$$\chi_{\mathrm{SW}\parallel}=0.07069333296077418 \qquad \chi_{\mathrm{SW}\perp}=0.09173454277124056\ . \tag{37}$$

非线性 σ模型中涉及的相应质量为 $m_1=4\chi_{\parallel}$, $m_2=m_3=4\chi_{\perp}$， 利用关系式$c_1=c_{\parallel}$, $c_2=c_3=c_{\perp}$， 基态能量有限尺寸修正中的系数为

$$\bar{c}=c_{\parallel}+2c_{\perp}=3.1392467670994786\ . \tag{38}$$

类似地，控制磁化强度有限尺寸标度的系数为

$$\frac{1}{\overline{c\chi}_{\mathrm{SW}}}=\frac{1}{2}\left(\frac{1}{c_{\mathrm{SW}\parallel}\chi_{\mathrm{SW}\parallel}}+\frac{1}{c_{\mathrm{SW}\perp}\chi_{\mathrm{SW}\perp}}\right)=11.631148207320964\ , \tag{39}$$

因此，结果为 $\overline{c\chi}_{\mathrm{SW}}=0.08597603453$。

---

[1] D. S. Fisher，《物理评论B》**39**，11783 (1989)。[2] J. M. Borwein、M. L. Glasser、R. C. McPhedran、J. G. Wan 和 I. J. Zucker，*Lattice Sums Then and Now* 2013，《数学及其应用百科全书》（剑桥大学出版社，）。[3] A. W. Sandvik，《物理评论B》**56**，11678 (1997)。[4] A. W. Sandvik，arXiv 电子预印本（2026），arXiv:2601.20189 [cond-mat.str-el]。[5] 这等价于对式（19）采用硬动量截断，但能提高数值收敛速度。[6] S. W. Hawking，《数学物理通讯》**55**，133 (1977)。[7] A. Chubukov、S. Sachdev 和 S. Todadri，《物理学杂志：凝聚态》**6**，8891 (1999)。