库仑晶体的计算复杂性与能量景观

Paco Navarro[1] 和 Michael Emmerich[2]1 *Department of Physics, University of California, Santa Barbara, California 93106, USA*
[2] *Faculty of Information Technology, University of Jyväskylä, Finland*（日期：2026年11月22日）

模拟退火广泛用于搜索囚禁离子库仑晶体和球面电荷系统（汤姆孙问题）的基态。我们表明，复杂性取决于实例所指定的内容。对于固定离子阱中的相同离子，系统仅由离子数确定。当离子数采用一元编码、能量阈值采用二进制表示时，该判定问题属于 P/poly；除非多项式层次崩塌，否则它不可能是 NP困难问题。若精度参数为对数级，近似构型搜索也存在一个 FP/poly 解函数。这两个结果同样适用于汤姆孙问题。这些非一致界并未提供一致的搜索算法，也不保证实际效率。在最多包含 100 个离子的模拟中，找到的不同极小值数量以及到达已知最佳极小值所需的时间都近似呈指数增长。对于固定在预设候选位点上的离子，在二维和三维中对占据位点上的库仑能进行最小化是 NP困难的；其有限精度承诺版本为 NP完全问题。所有离子都相同，且仅有裸库仑排斥；困难性完全源于位置点坐标。我们将 Emmerich约化从平面三次图上的伊辛问题推广至库仑排斥；该约化原先针对黎兹势（ $s \geq 2$）建立，而库仑排斥对应（$s = 1$）。所得能量景观中，近简并极小值之间存在高势垒。势垒树揭示了这种结构；在立方体示例中，模拟退火会被困在高于基态的位置。在实验室参数下，若能单独调节势阱深度，则这种编码在半填充方形晶格上数值上仍然成立。对于多普勒冷却锶离子，这要求使用刚性势阱，阱间距为数微米至数十微米，与电极阱阵列中的情况相同。

arXiv:2611.30657v1 [cs.CG] 23 Nov 2026

I. 引言

射频阱和彭宁阱中的激光冷却离子会结晶形成库仑晶体，其结构由约束势与相互库仑排斥之间的平衡决定 [1–3]。这种结构对于大型离子寄存器的量子模拟与计算、结构相变和摩擦研究 [4, 5], , 以及与激光冷却原子离子共同囚禁的分子离子的共振冷却和光谱研究都至关重要；如今，光谱研究已能达到单分子的转动分辨率 [6, 7]。

寻找基态结构通常被视为一个困难的全局优化问题。分子动力学模拟结合模拟退火是标准工具 [8, 9]: Kiesenhofer 等人对每组参数进行 500 次退火，以收集含有 100 多个离子的二维晶体的低能构型 [10], ; R¨uffert 和 Mehlst¨aubler 则以操作性方式定义三维晶体的基态，即至少被找到十次的最低能构型 [5]。汤姆孙问题中球面 [11, 12], 上的 N个电荷也面临同样的困难 1985 [13] ; 该问题自 1985 [13] 以来一直采用模拟退火方法求解，其局部极小值的数量经数值观察发现会随 N [14–18]呈指数增长。

这种困难通常归因于计算复杂性。例如，汤姆孙问题曾被描述为“已知是 NP困难” [19], , 并引用了 Wille 和 Vennik 的研究 [13, 20]。然而，Wille 和 Vennik 证明的是在具有依赖位置的权重的晶格上形成团簇时的问题困难性；Adib 后来指出，他们的论证不适用于仅依赖距离的成对势 [19], ; Adib 自己的困难性结果则使用了作为输入给定的阶跃势。。与本文讨论的情形更为接近的是，Adamson等人证明，从给定的有限排列中移除离子以使其能量最小化这一问题，对于短程参数作为输入给定的 Buckingham–库仑势，以及仅考虑库仑势但电荷正负兼有且大小无界的情形，均为 NP 困难；其证明通过从背包问题归约而来 [22]。对于一类参数作为输入组成部分的有限程成对势，其周期版本 $\mathbb{Z}^d$ 也是 NP 困难的 [23]。在这些结果中，困难性来自电荷或力场参数，而非仅仅来自位置。近期研究表明，在一般度量空间中，选择使 Riesz能量 $\sum r^{-s}$ 最小的点 k 是 NP 困难的；在平面上，当 s 作为输入的一部分时也是如此 [24], ; Emmerich 还证明了平面上固定指数 $s = 2$ [25]的情形同样如此。文献 [25] 还指出，该论证可推广至固定的 $s > 2$，此时势的尾部衰减更快。在线上，该问题可在多项式时间内求解 [26]。对于相同电荷，相关于离子的库仑指数情形$s = 1$尚未涵盖：文献 [24]将固定指数列为开放问题，而下文

$s = 2$参考文献 [25] 中的尾部估计反而变得更困难，而不是更容易。

在这里，我们探讨这些结果对离子晶体意味着什么，并区分两类问题（图 1）。

- **自由晶体。** 对于固定离子阱中的相同离子，物理系统由离子数指定。采用一元离子计数和二进制能量阈值，通过简单的建议论证可知其属于 P/poly，因此除非多项式层次坍缩，否则它不是 NP困难（定理 1）；同样的论证也适用于 Thom-

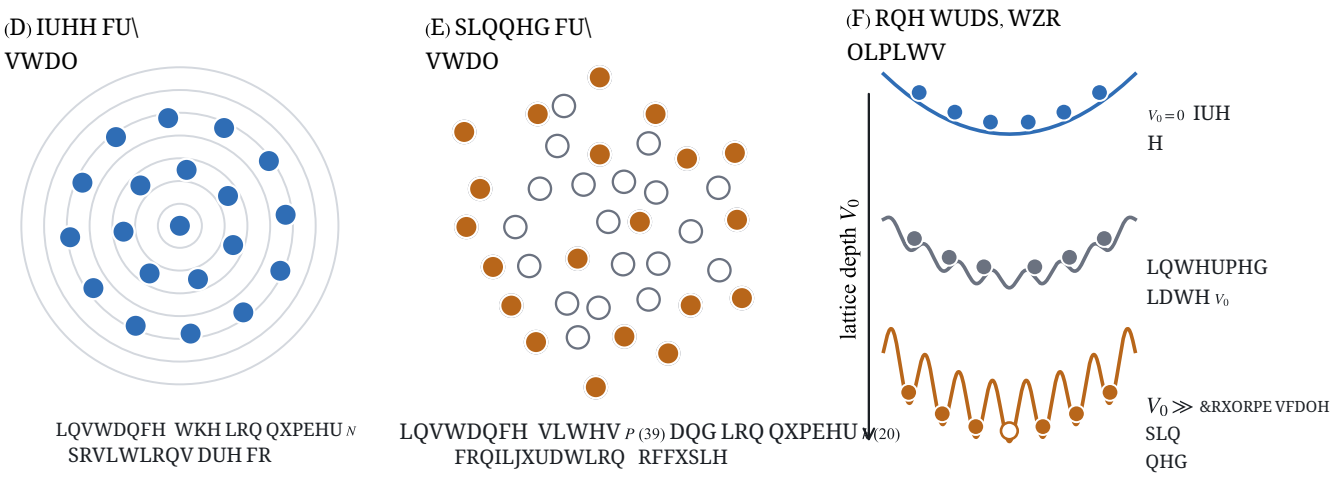

图 1. 自由离子晶体与钉扎离子晶体（定义 1）。(a) 自由晶体：在二维谐振子陷阱中， $N = 20$ 个离子所能找到的最低能量构型（圆圈表示等势线）。离子位置是连续的，问题实例仅为数字 N。(b) 钉扎晶体：势能给出一个预设的 P 势阱集合（空心圆），而构型则是选择哪些 k 个势阱被占据（实心圆；图中所示为在 39 个位点上放置 $k = 20$ 个离子所能找到的最低能量构型）。此时，实例包含整个位点集合。(c) 两者都是同一种物理情形的极限：平滑的离子阱加上深度为 V_0的晶格势。没有晶格势时，离子位于库仑排斥决定的位置；当晶格势远深于库仑能标度时，离子便被锁定在势阱中，唯一剩下的自由度就是选择填满哪些势阱（此处留空一个势阱）。

son 问题的判定版本。采用一元离子计数和精度参数，在固定球面上或固定正定谐阱中的近似库仑构型搜索（ACCS）同样具有属于 FP/poly 的解函数（命题1）。这些简单的界限澄清了编码方式，但并未提供统一搜索算法；我们将在其他部分单独量化实际难度（第 II B 节）。

•钉扎晶体。 当候选位置属于输入的一部分时，该问题在二维和三维中是 NP困难的（定理 2）。其有限精度版本是 NP完全的（定理 3）；精确问题是否属于 NP 仍未解决，因为要精确检验一个构型，就意味着比较平方根之和。源编码、选择器、导线、目标盒以及场补偿机制均来自 Emmerich 的$s = 2$归约 [25]。为证明 $s = 1$，我们推导了库仑角定律和四次场项，加强了关于耦合扰动和树一致性的估计，并针对无理能量尺度选取了一个有理阈值（第三节 E）。我们在第三节从物理角度解释该构造，并在附录 A 汇总 $s = 1$ 估计。

• 景观。 对于 K_4 的互不相交副本，近简并极小值的数量随源顶点数呈指数增长，且极小值之间由高势垒隔开（推论 1）。我们还利用势垒树以及在立方体图上的模拟退火，进一步研究了这些势垒（第四节）。

• 实验室参数。 证明中的构件远小于任何可实现的势阱间距。数值模拟表明，即使位点构成半填充方格晶格，只要各势阱深度可单独调节，编码仍然成立；对于多普勒冷却的 Sr^+，这要求势阱具有刚性，间距为几微米至几十微米，与电极阱阵列中的情况相同。

归约的逻辑框架已在 Lean 4 中经过机器检查（附录 B）；几何估计由人工证明，其中最精确的估计则通过区间算术认证。

II. 自由晶体与钉扎晶体

基态问题的复杂性取决于问题实例具体规定了什么。我们区分离子晶体的两种理想化模型（图 1）。

定义 1（自由晶体与钉扎晶体）。 考虑由外部势能 U 束缚的 N 个离子 $\mathbb{R}^d$，它们通过库仑相互作用彼此排斥。

（i）如果 U 是固定的、平滑的约束势，且对每个问题实例都相同（例如给定保罗阱的赝势），则该晶体称为自由晶体。离子位置是连续变量，问题实例仅由离子数指定（对于混合晶体，还需指定固定种类集合中每种离子的数量）。

（ii）如果 U 由一个给定有限集合 $P \subset \mathbb{R}^d$ 的势阱组成，且与所有库仑能和间距相比，这些势阱既深又窄，并且 P 是实例的一部分，则该晶体是钉扎的。此时，每个离子都位于一个势阱的底部，每个势阱至多容纳一个离子，而一个构型就是 $S \subseteq P$ 被占据势阱的集合。

这两个概念分别对应同一物理情形 [图1(c)]的两个相反极限。在自由晶体中，结构信息来自相互作用本身；而在钉扎晶体中，结构信息则由景观提供。这一差异决定了复杂性。

A. 基本非一致界

我们给出固定自由晶体族的基本非一致界。这些界旨在限定在所述输入编码下关于 NP 困难性的主张；它们并未提供求解基态的算法。

固定维数 d和连续约束势 $U:\ \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$，其中 $U(x) \to \infty$ as $|x| \to \infty$。对于 N 个相同离子，令

$$E_N(x_1,\dots,x_N) = \sum_{i=1}^{N} U(x_i) + \sum_{i<j} \frac{1}{|x_i - x_j|}, \quad (1)$$

在 $q^2/4\pi\varepsilon_0 = 1$的单位制下，并令 $E^\star(N) = \inf\ E_N$。判定语言为

$$L_U = \{\langle 1^N, \tau\rangle : \tau \in \mathbb{Q},\ E^\star(N) \le \tau\},$$

其中 N 采用一元编码，τ 采用二进制编码。因此，输入长度按 N 及 τ的位长计量；离子阱不属于输入的一部分。

如果存在一个多项式时间算法，能够借助长度为多项式的建议串求解某个判定问题，那么该问题属于 P/poly；该建议串由所有长度为 [27]的输入共享。建议串可以依赖于输入长度，但不能依赖于具体输入；同时，不要求存在构造该建议串的算法。

定理1（基本判定界）。对于每个固定维数 d 和固定约束势 U，$L_U \in \mathrm{P/poly}$。如果 L_U 在多项式时间图灵归约下是 *NP*困难的，那么 $\mathrm{NP} \subseteq \mathrm{P/poly}$，且$\mathrm{PH} = \Sigma_2^p$。

证明。令 $\mathbb{Q}_n$ 为所有二进制编码长度至多为 n 位的有理数。对于每个 $N \le n$，存储满足 $E^\star(N) \le a_N$ 的最小 $a_N \in \mathbb{Q}_n$；若不存在，则存储 $\perp$。此表包含 $O(n^2)$ 位。对于长度为 n 的有效输入 $\langle 1^N,\ \tau\rangle$，有 $\tau \in \mathbb{Q}_n$，并且

$$E^\star(N) \le \tau \quad\Longleftrightarrow\quad a_N \neq \perp \text{ and } a_N \le \tau.$$

因此，只需查表并进行有理数比较；格式错误的输入将被拒绝。如果 SAT 可在多项式时间内归约到 L_U，则将所有多项式有界查询长度对应的建议串表拼接起来，得到 SAT $\in$P/poly。由 Karp–Lipton定理可得 PH $=$ Σ_2^p [28]。 □

该表已经编码了阈值判定结果；证明并未给出计算表中各项的步骤。事实上，将 $E^\star(N)$ 换成任意 固定序列$f(N)$，无论其是否可计算，同样的论证都成立。因此，这也涵盖了固定单位球面上的汤姆孙判定问题，并可推广到具有一元编码计数的固定数量离子种类。假设多项式层次不会坍缩，则这些判定问题在所述归约下并非 NP困难。这使得诸如参考文献 [19] 中针对这种编码的 NP 困难性主张需要有所限定。

注1。一元编码 N 是一种建模选择，与显式列出 dN 坐标相兼容。采用二进制编码 N时，建议串表可能大到呈指数级。显式构型也可能包含指数多个坐标，并不会自动构成多项式规模的 NP 证书。该论证并未对这种编码或离子阱随输入变化的模型进行分类。

近似构型搜索。在近似库仑构型搜索（ACCS）中，输入为（$1^N, 1^q$），输出为能量至多为 $E^\star(N) + 2^{-q}$的有理构型。N 和精度参数 q 均采用一元编码，因此输入长度为 $\Theta(N+q)$。在固定球面上，输出点必须精确地位于 S^2上。另一个问题是，精度足够高的构型是否具有多项式长度的描述。

命题1 (初等搜索界)。对于固定单位球面 S^2上的汤姆孙问题，或固定谐振子陷阱 $U(x) = \frac{1}{2}x^\top A x$ 中的问题，在固定维数 d下，且 $A \in \mathbb{Q}^{d\times d}$为固定的对称正定矩阵时，*ACCS* 存在一个FP/poly解函数：即在多项式时间内，借助多项式长度的建议串求解。

证明。我们首先估计能量误差至多为 2^{-m} 的构型的描述长度。对于 $N \ge 2$，令 $B = \binom{N}{2}$。

球面。球面上的两个相互独立的均匀点具有平均库仑能 1，因此 $E^\star(N) \le B$。所以，极小化构型中的任意一对点之间的距离至少为 B^{-1}。将每个点移动至多 $\eta \le (4B)^{-1}$，会使总成对能量的变化至多为 $4B^3\eta$。利用 $O(\log(1/\eta))$ 位，对有理点进行取整，可以使球面上的有理点逼近任意点至距离 η：对两个立体投影映射中的有界参数 $|u|, |v| \le 1$ 进行取整

$$(u,v) \longmapsto \frac{(2u,\ 2v,\ \pm(1-u^2-v^2))}{1+u^2+v^2}.$$

这些映射在参数正方形上的导数一致有界。取 $\eta = 2^{-m}/(4B^3)$，即可用 $O(N(m + \log N))$ 位达到所需的误差。

谐振子陷阱。令 $\lambda, \Lambda > 0$ 为 A 的极端特征值，并令 $C_N = (\Lambda+1)N^3$。试探点$x_i = ie_1$给出 $E^\star(N) \le C_N$。因此，由能量项的正性，在极小化构型处有

$$|x_i| \le R_N := \sqrt{2C_N/\lambda}, \qquad |x_i - x_j| \ge C_N^{-1}.$$

对于范数至多为 $\eta \le (4C_N)^{-1}$ 的位移，成对能量的变化至多为 $4BC_N^2\eta$，而离子阱能量的变化至多为 $N\Lambda(R_N\eta + \eta^2/2)$。因此，总变化至多为 $L_N\eta$，其中

$$L_N = 4BC_N^2 + N\Lambda(R_N + 1) = O(N^8).$$

由于 $L_N \geq 4C_N$，在 $\eta = 2^{-m}/L_N$ 内进行二进制舍入是可行的，且误差至多为 2^{-m}。半径和精度界再次要求 $O(N(m+\log N))$ 位，其中常数取决于固定陷阱和维数。对于 $N = 1$，使用球面上的一个固定有理点或陷阱原点。

对于输入长度 m，建议串会为每个 $N \leq m$ 存储一个这样的构型，总共使用 $O(m^3)$ 位。对于输入 $(1^N,\ 1^q)$，返回为 N 存储的构型。其误差至多为 $2^{-m} \leq 2^{-q}$。 □

这里，建议串明确包含近似解。近似估计证明了它们具有多项式描述长度；后续查表则很简单。若在多项式时间预言机归约下，对每个 有效的 ACCS 输出均能成功的 NP 困难性成立，则意味着 NP $\subseteq$ P/poly，进而意味着 PH $= \Sigma_2^p$ [28]。这一论证无法解决关于运行时间为 $N+\log(1/\varepsilon)$ 多项式的统一算法的问题，也无法解决一般约束势能下的搜索界问题。Smale 第七问题涉及近最小对数能构型的统一构造，同样不受影响 [12]。

与二次规划的比较。二次规划即使只有一个负特征值也可能是 NP 困难的，但该结果中的约束会随具体实例而变化 [29]。对于库仑势，

$$\nabla^2 |z|^{-1} = |z|^{-3}(3uu^\top - I_d), \qquad u = z/|z|.$$

对于 $d \geq 2$，横向曲率为负，但仅有非凸性并不能证明 NP 困难性。在一维中，每个 $(x_j - x_i)^{-1}$ 在 $x_1 < \cdots < x_N$ 上都是凸的，因此凸的 U 会使该处的能量函数呈凸性。钉扎问题通过预先指定的位置点坐标提供变化的实例数据（第 III 节）。

我们的结果既不能证明，也不能排除当有理正定陷阱矩阵 A和空间维数 d属于输入时的 NP 困难性。

B. 实际上，计算自由晶体有多困难?

定理1有条件地排除了所述判定问题的 NP 困难性，但这并不意味着求解自由晶体的基态很容易。一种自然的衡量指标是随机搜索 [30] 的求解时间(TTS)。如果一次尝试（从随机初始点进行一次局部极小化，或进行一次退火运行）耗时 $t_1(N)$，且达到基态的概率为 $p(N)$，那么找到基态的预期时间为

$$\mathrm{TTS}(N) = \frac{t_1(N)}{p(N)}. \tag{2}$$

我们通过重复运行来估算这两个量。由于真实基态未知，我们将 $p(N)$ 与 已知最佳极小值进行比较，即在全部 4000 次局部最小化和 160 次退火运行中为每个 找到的最低能量；如果某次运行的能量与该极小值的相对容差为 10^{-7}，则将其计为成功。

图 2(a,b) 展示了二维各向同性陷阱中 $N \leq 100$ 个离子对应的采样极小值和成功概率 [31]；(c) 图展示了相应的求解时间估算。在这一范围内，一批 400 次淬火所发现的不同极小值数量（这是亚稳晶体数量的下限）大致按 $e^{N/25}$ [增长，如图 2(a) 所示]，；从随机初始点开始进行局部极小化而达到已知最佳极小值的概率，则从接近 1 降至约 1%，如图 2(b) 所示 $N = 100$ []。这一变化并非单调，例如 $N = 60$ 等“幻数”离子数对应的已知最佳极小值具有异常大的吸引域。测得的单次尝试时间大致按 $N^{0.7}$增长，因此 p 的下降是求解时间增长的主要原因。在所研究的范围内，该关系可由以下形式很好地描述：

$$\mathrm{TTS}(N) \approx \text{多项式}(N)\ e^{\kappa N}, \qquad \kappa \approx 0.046, \tag{3}$$

对于随机淬火，每增加十倍就增加 ~ 50 个离子；退火数据给出 $\kappa \approx 0.061$ [图2(c)]。幻数使单个数据点相对于拟合值最多偏离约 ~ 6 倍。这表明在 $N \leq 100$ 范围内存在指数缩放，但不能证明渐近指数缩放。

这些观察结果解释了为什么要使用全局随机搜索。单次最小化成功的概率会随着 N 迅速下降，这与如下景观相符：其中存在许多近乎简并的亚稳态晶体，其能隙会随着 N [9, 17] 缩小。模拟退火 [8] 使热涨落能够在降温过程中带着系统越过吸引域之间的势垒，从而使搜索更倾向于进入最低的吸引域。在我们的运行中，与随机淬火相比，模拟退火每次尝试达到已知最佳极小值的频率更高[图2(b)]，，但每次尝试的成本也更高；对于 $N \leq 100$，这两种方法的缩放都近似呈指数形式。

III. 钉扎晶体

A. 问题与结果

对于具有等深势阱的钉扎晶体 [定义1(ii)] ，占据模式 $S \subseteq P$ 的能量除一个常数外，等于被占据位点的库仑能；若势阱深度不等，或像图 1(c) 那样具有平滑的束缚包络，则会增加一个单体项 $\sum_{p\in S} U(p)$，

$$E_1(S) = \sum_{\{p,q\}\subseteq S} \frac{1}{|p-q|}. \tag{4}$$

下标 1 指的是 Riesz能量 $\sum |p-q|^{-s}$ 的指数 $s = 1$ 。

定义 2 （库仑-子集$_d$）。 输入：一个有限的 $P \subset \mathbb{Q}^d$ 候选位点集合、一个整数 $k \leq |P|$以及 $\tau \in \mathbb{Q}$。

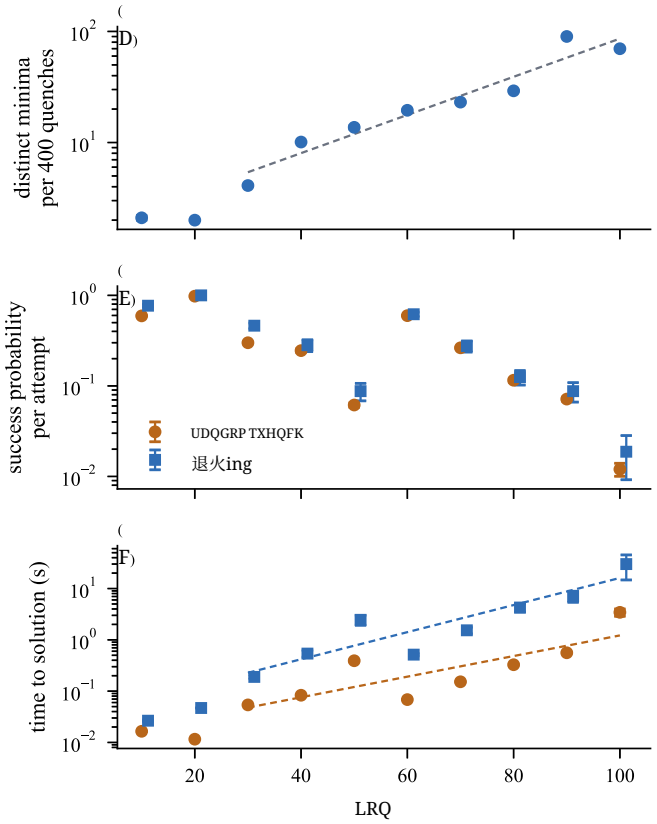

图2. 自由晶体的实际难度：二维各向同性谐振陷阱中的 N 个离子，$\sum_{i<j} r_{ij}^{-1}$ 。数据由每个 的独立批次组成，每批次包含从随机初始点开始的400次局部最小化（L-BFGS）和16次模拟退火运行。(a) 每批次发现的不同极小值的平均数量。(b) 在相对容差 10^{-7}内达到已知最佳极小值的平均概率；该极小值是在该 N下所有尝试中发现的最低能量。这并非经认证的基态。(c) 求解时间估计值，按式(2)计算，即每次尝试的平均时间除以平均成功概率。在(b,c)中，橙色圆圈表示随机淬火，蓝色方块表示退火；为便于观察，两者在水平方向略微错开。(a,b)中的误差条表示批次间的标准误差；(c)中的误差条则反映成功概率的不确定性，并假定每次尝试的平均时间固定。虚线为 $N \geq 30$的指数拟合。

问题：是否存在一个占据模式 $S \subseteq P$，其中有 $|S| = k$ 个离子，且 $E_1(S) \leq \tau$?

定理 2（钉扎晶体是 NP 困难的）。库仑-子集$_2$ 在多项式时间多对一归约下是 *NP* 困难的。因此，对于每个固定的 $d \geq 2$，库仑-子集$_d$ 都是 *NP* 困难的，尤其是在三维中。

该定理是参考文献 [25]，中针对 $s = 2$ 的类似论断所采用的构造的 $s = 1$ 情形；我们在第 IIIB–III D 节中解释该构造，并在附录 A 中给出 $s = 1$ 证明。推广到 $d \geq 2$ 可通过附加零坐标实现。在直线上，该问题可在多项式时间 [26]，内求解，因此除非 P = NP，否则困难性转变发生在 $d = 1$与 $d = 2$之间。

Coulomb-Subset$_d$ 也属于 NP 吗？对于“是”的回答，有一个简短的证书，即集合 S；但要验证它，就需要将有理数倒数平方根之和与 τ 进行比较。这是平方根和问题的一个实例，目前尚不清楚该问题是否属于 NP [32]；已知的最佳上界表明，Coulomb-Subset$_d \in \mathrm{NP}^{\mathrm{PosSLP}} \subseteq$CH $\subseteq$ PSPACE [33]。在 $s = 2$ 所有能量都是有理数，不存在这一障碍 [25]。然而在物理上，能量始终只能以有限精度获知，而有限精度版本是 NP完全的。我们采用承诺问题的标准约定 [34]，，所有数值均以二进制编码。由于 E_1 是 -1次齐次的，因此只需考虑相对精度 ε/τ；在我们的实例中，它与输入规模成反比的多项式量级。我们不对常数因子近似作任何主张。

定理 3（有限精度：NP完全）。考虑承诺问题 *Gap-Coulomb-Subset*$_d$：输入为（P、k、τ、ε），其中 $\varepsilon > 0$ 为有理数；若存在某个 $|S| = k$ 满足 $E_1(S) \leq \tau$，则回答是；若每个 $|S| = k$ 都满足 $E_1(S) > \tau+\varepsilon$，则回答否。对于每个 $d \geq 2$，该问题都是 *NP*完全问题。

证明。属于 NP：证书为 S。对于 $\binom{k}{2} < k^2/2$ 个数对中的每一对，使用牛顿迭代计算 $1/|p-q|$ 的有理数近似值，绝对误差至多为 $\varepsilon/(2k^2)$；所需时间关于 $|p-q|^2$ 的位长及 $\log(k^2/\varepsilon)$ 均为多项式。近似和 $\tilde{E}$ 满足 $|\tilde{E} - E_1(S)| < \varepsilon/4$。若 $E \leq \tau + \varepsilon/2$，则接受：对于是实例，~有见证 S，$E < \tau+\varepsilon/4$；对于否实例，每个 S 都满足 ~ $E > \tau+3\varepsilon/4$。困难性：在归约产生的实例中，对于每个 S，否实例均满足 $E_1(S) > \tau+1.6\lambda$，其中显式有理数 b 对应 $\lambda > 7b^4$（附录 A 7）。令 $\varepsilon = 7b^4$，即可使所有产生的实例都满足承诺。 □

B. 参考文献 [25]中的构造

NP 困难性通过一种归约来证明：该归约是一种多项式时间过程，可将一个已知为 NP 困难的问题的任意实例转换为一个答案相同（是或否）的固定晶体实例。遵循参考文献 [25]，源问题是平面三正则图上的最大独立集 [35, 36]：给定一个图 G和一个整数K，是否存在一个包含 K 个顶点的集合，使得其中任意两个顶点之间都没有边相连?

这个类比是直接的：选定的顶点之间可能并不相邻，而被占据的位点会相互排斥。显而易见的编码方式是为每个顶点放置一个位点，使相邻顶点彼此靠近，并填充 K 位点。由于库仑相互作用具有长程性，这种方式会失败。$\binom{K}{2}$ 远距离的点对会产生取决于整个构型的能量，其影响可能超过单个近距离点对；而若要让近距离点对占主导，就必须使非相邻顶点之间的距离远大于相邻顶点之间的距离，这只有不相交的团的并集才能实现。

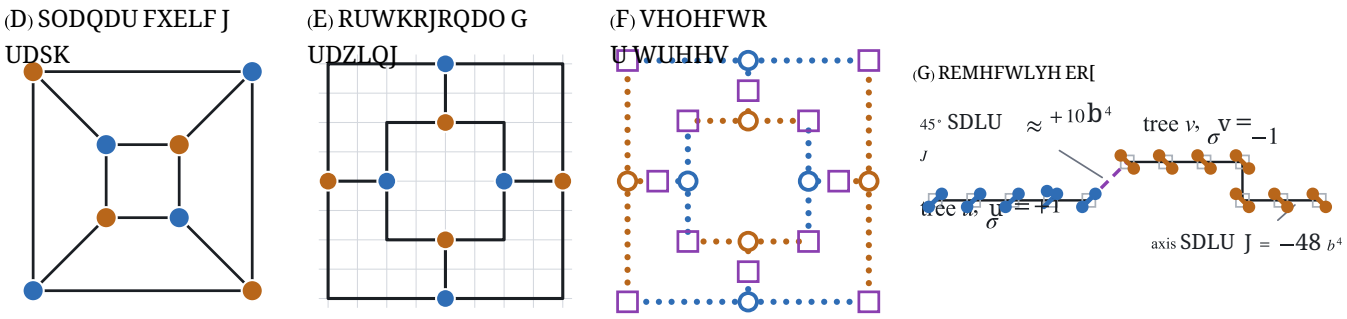

图3。参考文献 [25], 中构造的立方体图 Q_3示意图。(a) 一个由源能量 H_B的基态着色的平面三次图：蓝色顶点表示已选中（$\sigma_v = +1$），并构成最大独立集；橙色顶点表示未选中。(b) 整数网格上的无交叉正交绘图。(c) 每个顶点变为一个由选择器组件构成的三分支树，按单位间距排列（点），每条边均由一个目标框切断（方框）。(d) 目标框的细节。每个选择器是由四个候选位点组成的正方形，其中两个离子位于同一条对角线上；该对角线编码比特。沿轴对齐的邻居以铁磁方式耦合（实线），并沿导线复制比特；特殊的 45° 对以反铁磁方式耦合（虚线），产生边项 $\lambda\sigma_u\sigma_v$。所示耦合值为领先阶近似。选择器的尺寸经过夸大处理。

Emmerich 的思想不是根据每个二进制变量是否占据一个位点来编码，而是根据固定数量的离子如何排列来编码 [25]。如果两种备选构型具有相同的电荷和偶极矩，那么它们只有在四极矩阶上存在差异；因此，它们对远距离变量的影响衰减得比库仑相互作用本身快得多。这一构造使用了三个构件，并将它们沿着该图的无交叉绘图放置（图3）：

- 一个选择器 是由四个位点组成的小正方形，其中恰有两个离子位于两条对角线中的一条上。对角线的选择就是一个自旋 $\sigma = \pm 1$。
- 一条导线 是由间距为单位长度的选择器串成的链。沿轴相邻的选择器倾向于选择相同的对角线，因此导线能够将一个自旋传递很远。图中的每个顶点都对应一棵由三条导线组成的树。
- 一个目标框 在 45°处连接两个相邻顶点的导线，此处相邻的选择器倾向于选择相反的对角线。这会对同时选中一条边两端的顶点施加惩罚。

用自旋表示时，$\sigma_v = +1$ 对于一个选定顶点，独立集问题就转化为 Barahona 的伊辛哈密顿量 [37],的基态问题。

$$H_B(\sigma) = \sum_{uv \in E} \sigma_u \sigma_v + \sum_{v \in V} \sigma_v, \tag{5}$$

如果 G存在大小为 K的独立集，其最小值不高于阈值 H_0；否则至少为 $H_0 + 4$（附录 A 1）。钉扎晶体必须以某个能量单位 $\lambda > 0$准确地再现 λH_B，以保留这一能隙。这需要满足四个性质，每个性质都是能量尺度之间的一个不等式：

(P1) 合法性：每个低能构型都在每个选择器的一条对角线上放置两个离子。

(P2) 一致性：每个低能构型都将一个顶点树的所有选择器置于同一条对角线上。(P3)模拟：一致构型的能量为一个常数加上 λH_B，误差不超过 (P4) 中的余项。(P4)小余项：其余一切，包括长程尾项，均低于 $\lambda/20$。

一个简短的逻辑论证（定理 4）将其转化为所需的「是／否」等价关系。选择器的尺寸确保其合法性：其半尺寸 b 在多项式意义上很小，因此内部能量 $\sim b^{-1}$ 支配选择器之间的所有相互作用。

C. 将选择器视为四极子：$s = 1$处的角向定律

一旦每个选择器都合法，整个构型就可用每个选择器对应的一个自旋 $\sigma_i = \pm 1$ 来描述。对于中心差为 $R = r(\cos\theta, \sin\theta)$ 的两个选择器，它们所含四个离子之间的库仑能 $F_R(\sigma, \sigma')$ 是两个二进制变量的函数，因此可以精确写为 [25]

$$F_R(\sigma, \sigma') = A_R + h_R^{(1)}\sigma + h_R^{(2)}\sigma' + J_R\,\sigma\sigma', \tag{6}$$

其中 $J_R = \frac{1}{4}(F_{++} - F_{+-} - F_{-+} + F_{--})$ 和 $h_R^{(1)} = \frac{1}{4}(F_{++} + F_{+-} - F_{-+} - F_{--})$。对所有成对项求和，任意合法构型的能量都精确地等于一个伊辛能量：一个常数项，加上场 $h_i\sigma_i$，再加上耦合 $J_{ij}\sigma_i\sigma_j$。这一结论不涉及多极截断；展开仅用于计算和界定 h与 J。

h 和 J 的标度关系可通过计算多极矩得到。翻转选择器不会改变其电荷（$2e$）和偶极矩（为零，因为两条对角线都具有中心对称性）

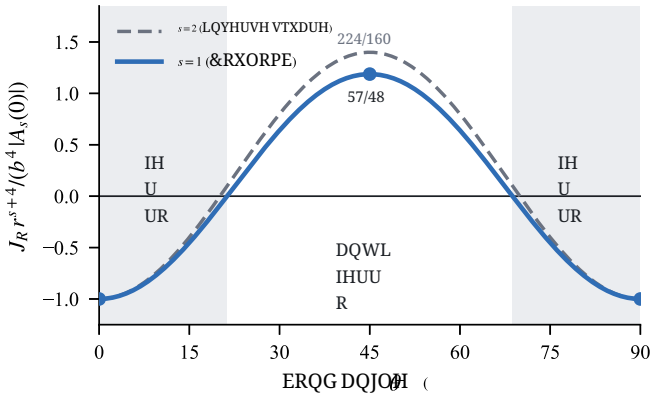

图4. 两个选择器之间的主阶耦合 J_R 随连接它们的向量 θ 的角度变化，并以其轴向值的大小归一化：库仑情形（$s=1$，实线）和反平方情形（$s=2$，虚线；参考文献 [25]）。阴影部分：库仑情形下用于导线的铁磁扇区； 45° 处的反铁磁峰用于边。

。其主要变化体现在四极矩上， $\Delta Q_{xy}=4b^2$ 以离子电荷为单位。场h 表示该四极矩变化与另一个选择器的电荷相互作用，因此 $h\sim b^2r^{-3}$；耦合 J 表示两个四极矩变化相互作用，因此 $J\sim b^4r^{-5}$。在 $s=2$处，同样的计数得到 b^2r^{-4} 和 b^4r^{-6} [25]。

引理1 (角向定律，取 $s=1$)。 对于未受扰动的选择器，若 $t=b/r\le 10^{-8}$,

$$J_R = A(\theta)\,b^4r^{-5}+\mathcal{R}_J, \qquad A(\theta)=\tfrac{9}{2}-\tfrac{105}{2}\cos 4\theta, \tag{7}$$

$$h_R^{(1)}=h_R^{(2)}=\frac{6\sin 2\theta\, b^2}{r^3}+\frac{20\sin 2\theta\, b^4}{r^5}+\mathcal{R}_h, \tag{8}$$

若 $|\mathcal{R}_J|$、$|\mathcal{R}_h|\le 6\times10^4\,b^5r^{-6}$。在轴上， $h_R=0$ 精确成立，且 $J_R<-47.99\,b^4r^{-5}$；在 45°处， $J_R>56.99\,b^4r^{-5}$。

附录 A 3 直接推导了库仑势的这两个系数。单个选择器场中的四次项，既来自一个选择器的四阶矩，也来自两个选择器各自的二阶矩。这两项贡献都进入用于补偿的场。 $A(\theta)$的符号正是构件能够发挥作用的关键（图 4）：沿着轴 $J<0$ （铁磁），因此导线中的相邻自旋会彼此复制；而在 45° $J>0$（反铁磁），因此目标框中的一对自旋会反向排列。参考文献 [25] 在 $s=2$ 处发现的这种符号结构，在 $s=1$ 处依然成立，但反铁磁峰相对于轴向值较弱（为 $57/48$ ，而不是 $224/160$），且耦合衰减得慢一个幂次。

D. 为什么库仑尾不会破坏编码

二维阵列的总库仑能会随其尺寸增大而发散：半径为 r 的圆环包含数量级为 r 个选择器，每个贡献 $\sim r^{-1}$，因此每个圆环的贡献都大致相当。在整个平面上， r^{-p} 的总和仅在 $p>2$时收敛。尽管如此，这种编码仍然有效，因为只有构型之间的能量差异 才决定基态，而发散部分不会影响这些差异。公式（6）中的各项分为四类：

- 电荷 (r^{-1})：每个选择器在任一状态下都包含两个离子，因此每对离子的能量中的单极子部分对于所有合法构型都相同。它完全包含在常数 A_R 中，这些常数加起来构成一个与构型无关的偏移量 E_0。

- 偶极子(r^{-2})：在两种状态下均为零，因此这些项恒等于零。

- 场(b^2r^{-3})：这些项会使选择器偏向某一条对角线。按照参考文献 [25], ，这些项虽不受界定，却会被抵消：每个选择器上的总场是一个有限和，可由归约计算得出；将选择器的一条对角线拉伸一个微小量 η_i ，会使其在一种状态下的内部能发生变化，变化量经过选取，恰好抵消该总和。在每棵树的根部进行相同的拉伸，可提供公式（5）的场项。

- 耦合(b^4r^{-5})：它们承载逻辑。布局会抑制无关构件之间的耦合：任意一对这类构件之间的距离至少为 D ，因此其绝对耦合总和至多为$57.01\,b^4M^2/(2D^5)$。采用公式（A1）中的布局参数， $M^2/D^5=O(L^{-4})$（引理 9）。只有树内部及其附近的耦合需要计算实际的晶格和，而这些和按 ζ(4) 收敛。

这与参考文献 [25], 中的结构相同，其中单极子和 $\sum r^{-2}$ 在平面上本身也呈对数发散，并同样被吸收到常数中。在 $s=1$ 处，自旋相关项的衰减速度慢一个幂次；这对远场无碍，但会使两项近场估计变得更严格。

E. 当 $s=1$时有哪些变化

除角向定律外，参考文献 [25]中的证明只需对常数进行重新缩放（附录 A），即可逐步照搬；唯一需要改变的参数是布局的网格尺度，从 10^5L^2 改为 $W=10^6L^2$。不过，有两项估计变得过于宽松，必须予以替换。

场补偿。 抵消场的伸缩形变 η_i 也会扰动耦合。在 $s=2$ 处，伸缩形变为 $O(Mb^5)$，因此只需对与 $|\eta_i|+|\eta_j|$ 成正比的扰动施加界限即可满足 [25]。在 $s=1$ 处，内部能更柔和而场更强，因此伸缩形变为 $O(Mb^4)$，同样的界限将允许总耦合漂移达到 M^3b^4 量级；无论 b取何值，这都远大于 λ 。解决方法仍然是多极展开计数：一次伸缩使同一条对角线上的两个离子对称地分开，从而不改变电荷和偶极子，只改变四极矩，变化量为 量级。

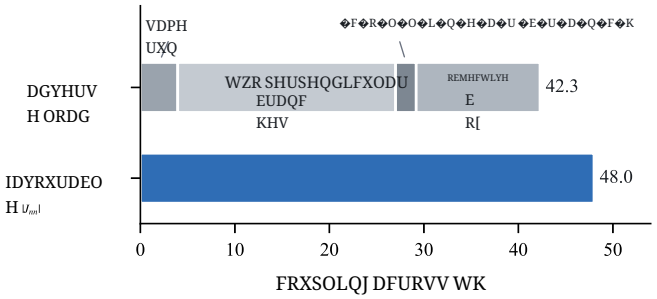

图 5. 在 $s = 1$ 处的最紧估计：树的最坏割上的不利耦合（表 II）与有利的最近邻耦合相比，差距为 12%。将文献 [25] 中的均匀估计与库仑系数 $|A(\theta)| \le 57$ 结合，使用其中采用的初等求和估计，结果约为 $57\,b^4$；即使使用精确的晶格和，差距也不到 2%。

使同一条对角线上的两个离子对称地分开，从而不改变电荷和偶极子，只改变四极矩，变化量为 $b\eta$量级。

引理 2 (扰动敏感性)。 对于距离为 $r \ge 1$、满足 $t = b/r \le 10^{-8}$ 和 $|\eta_i|$ 的选择器，$|\eta_j| \le 10^{-6} b$、$|\tilde{J}_{ij} - J_{ij}| \le 80\, b^3 r^{-5}(|\eta_i| + |\eta_j|)$ 以及 $|\tilde{h}_{ij} - h_{ij}| \le 10\, b\, r^{-3}(|\eta_i| + |\eta_j|)$，其中波浪号表示扰动值。

树的一致性。 树可能带有畴壁，即相邻选择器意见不一致的位置。与参考文献 [25], 中一样，只需翻转畴壁一侧的所有内容即可消除畴壁；这样可从畴壁处获得 $2|J_{nn}|$，而其他所有跨割配对的绝对耦合总和所造成的损失至多是其两倍。如果最近邻耦合大于所有可能割面上不利耦合的总和，翻转就会降低能量。在 $s = 2$，这一条件有很大余量。在 $s = 1$，这则是证明中最紧的一步（图 5）。按照参考文献 [25],中的统一估算，对每一对都采用最大的角系数 $|A(\theta)| \le 57$，结合该文使用的初等晶格和估算，得到约 $57\,b^4$ 的不利负载，超过了 $|J_{nn}| \approx 48\, b^4$；即使使用精确的晶格和，统一界限的余量也不足 2%。逐对解析 J的角度依赖性，并用区间算术认证所得的和，可得以下结果。

引理 3 (割预算)。 对于每棵树的每个割，跨越该割的绝对耦合（不包括割边）低于 $42.23\, b^4$，而割边具有 $|J_{nn}| \ge 47.999\, b^4$。

有了引理 1–3，剩余步骤（强制选择器、目标系数 $\lambda \approx 10.5\, b^4$、远程相互作用、场补偿以及有理阈值）均可遵循参考文献 [25]。由于能量现在是无理数，阈值选择为宽度为 2λ 的窗口内的一个有理数，而不是精确计算得出。完整论证见附录 A。

IV. 困难实例的能量景观

该归约还揭示了困难实例的特征：它们呈玻璃态。源能量的不同极小化构型编码了在整个顶点树上都不同的构型。它们的库仑能可能略有差异，但任何连接它们的单离子路径都必须离开合法选择器状态。

推论 1 （高势垒后的简并极小值）。在所构造的实例中，H_B 的所有极小化构型所对应的构型之间能量差均在 $\lambda/10$ 以内；其他每个无畴壁构型的能量至少高出 3.9λ，而每个含畴壁构型的能量至少比其修复后的无畴壁构型高出 $11\, b^4$。不同的极小化构型至少相差移动 $2D$个离子。它们之间的任何单离子移动路径都会跨越至少为 $0.07\, b^{-1}$的能垒，该能垒与 λ 之比的数量级为 M^{15}。对于 G 个完全图 K_4的不相交并 $n/4$，存在 $10^{n/4}$ 个这样的极小化构型（其中$4^{n/4}$ 个为独立集）。

证明。前几个结论由式 (A3)、$2H_B \equiv n$ （模 8）（引理 4）以及引理 8 得出，其中（模 8）使 H_B 的取值间隔为 4。通过单离子移动改变选择器的对角线时，必然会经过一个非法选择器状态；根据引理 6，该状态存在一种单离子移动，可使能量降低超过 $0.1\, b^{-1} - 3M$，因此其能量至少比全局最小值高 $0.1\, b^{-1} - 3M$。每个端点的能量都不超过该最小值以上 $\lambda/10$；因此，根据式 (A1)，高于任一端点的势垒都超过 $0.1\, b^{-1} - 3M - \lambda/10 > 0.07\, b^{-1}$。从合法构型出发进行任何单离子移动，都会得到非法构型。在 K_4 的每个副本中，$q - |x|$（引理 4）的最小值，即 -1，恰好由四个单顶点和六条边取得。 □

A. 立方体图实例

图3中的立方体图只有两个最大独立集，即其两个二分部类。我们使用相应的基态来说明推论 1中的势垒。该示例阐释了这一机制，但并不能独立证明渐近困难性。

我们使用示例参数 $b = 0.02$、$D = 8$ 和网格尺度 12，构建了图 3 中立方体图的实例，其参数远比证明中所用的温和。该实例包含 680 个选择器，即分布在 2 720 个位点上的 1 360 个离子。所有耦合和场均直接根据公式 (4) 计算，未采用远场截断，并按照引理10对场进行了补偿。图6展示了全部 256 个无畴壁构型相对于 H_B 的精确库仑能。它们塌缩到 $E_0 + \lambda H_B$ 的能级上，其中 $\lambda = 10.474\, b^4$（目标框求和给出 $10.478\, b^4$），最大偏差为 $0.0061\,\lambda$，远低于证明所要求的 $\lambda/20$。$H_B = -12$ 处的两个基态在这一精度下是简并的。

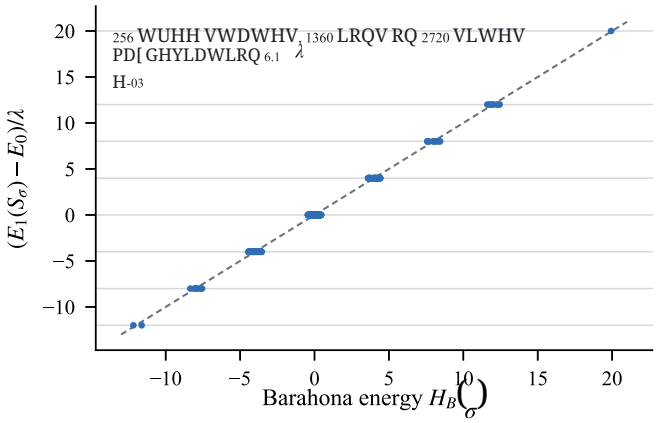

图 6. 由立方体图 [图 3] 构建的固定实例中，所有 2^8 无畴壁构型的精确库仑能相对于源能量 H_B 的关系图（数据点沿水平方向略作抖动）。如式 (A3) 所预测，能量与直线 $E_0 + \lambda H_B$（虚线）的偏差约在 0.0061λ 以内。

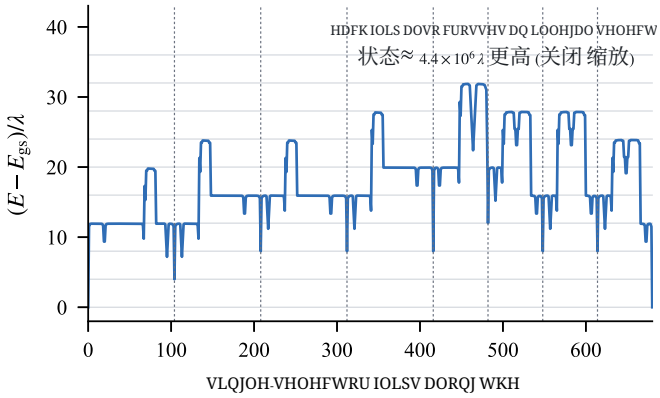

图 7. 连接两个源基态的无畴壁实现构型的一条单选择器翻转路径上的能量。此处及图 8 中，E_{gs} 表示 256 个无畴壁构型中的最小值。点线分隔出八棵树，每棵树都从叶节点向内翻转。水平线标示 H_B的各能级间距 4λ的整数倍。

沿着图7中的路径，我们一次反转一个选择器，从每棵树的一个叶节点开始。在直导线中产生一个孤立畴壁的代价为 $2\sum_{k\ge1} k|J_k| \approx 104\,b^4 \approx 9.9\lambda$。当每个选择器均以单步方式反转时，两个基态之间的路径上升 31.86λ 。

在进行单选择器翻转的 24 次模拟退火运行中，我们在 3000 个扫描步数内，将 T从 $200\,b^4$ 按几何级数降至 $0.05\,b^4$（图 8）。所有运行结束时的能量都高于该参考最小值，且存在 3–11 个畴壁，过剩能量为 24–82λ。在直导线中，将畴壁移动一个选择器的代价小于 $0.01\,b^4$。在弯折处、树根和目标框通道处，一步移动的代价为 20–120 b^4，因此残存的畴壁被困在那里。

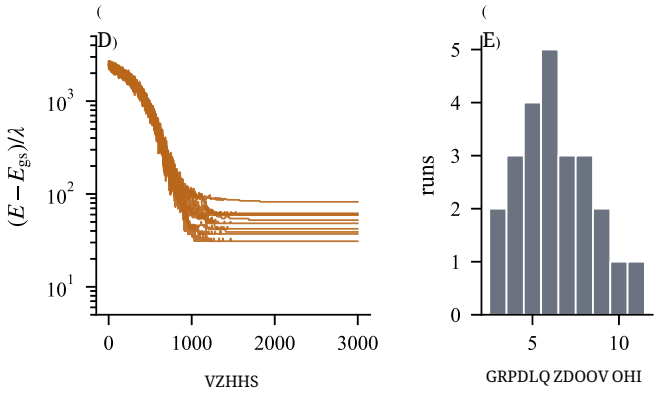

图 8. 对钉扎立方体图实例进行模拟退火。(a) 相对于图 7 所定义的参考最小值的能量，以 λ为单位，共进行十次运行；没有一次达到该值。(b) 24 次运行结束时，各棵树中剩余的畴壁数量。

B. 固定立方体中的单离子势垒

现在，我们将图 7 中每次选择器翻转拆解为两次单离子移动。任一离子都可以先移至任一空置角点。这四种中间能量中最低者决定了该次翻转的鞍点。在势垒树（图 9）中，两个构型会在连接它们的最低能量阈值处汇合 [38]。沿这条路径，它们汇合处的高度就是二者之间最高的鞍点。

最高鞍点位于反转 435 处，它给出了完整构型图中两个端点之间势垒的上界。每条路径还必须访问每个端点的一个邻点。我们考察了两端的所有 $1\,360^2$单离子移动，并取两个最低邻点能量中较大者作为下界。相对于初始能量，所得区间为$[4.28536,\,4.36686]\times10^6\lambda$（双精度，向外取整）。以 $e^2/4\pi\varepsilon_0 a$为单位，在 a 器件间距下，该区间为 7.18–7.32；其上端与将选择器中的一个离子从对角线移动到侧边的代价相差不到 0.1%，即 $(\tfrac12-\tfrac{1}{2\sqrt2})\,b^{-1} = 7.32\,e^2/4\pi\varepsilon_0 a$。因此，以 λ 为单位的势垒按 $0.014\,b^{-5}$缩放；其在此处的大小为 10^6 ，反映了 λ 在 $b = 0.02$处有多小。该演示实例不满足支撑推论 1 中界限 $0.07\,b^{-1}$ 的假设$b < 0.01/M$ ；对于此实例，势垒由上述计算确定。配套的 GitHub 研究还包括更多概览图、态密度、数值数据和脚本（协作者可访问）。

V. 迈向实验室参数

证明中的实例与实验室相去甚远。它们的选择器半尺寸为 $b \sim M^{-3}$ ，以器件间距 a为单位，因此，一个选择器的四个位点彼此之间的距离远小于任何可实现的势阱排列。这是证明所必需的，以压制随

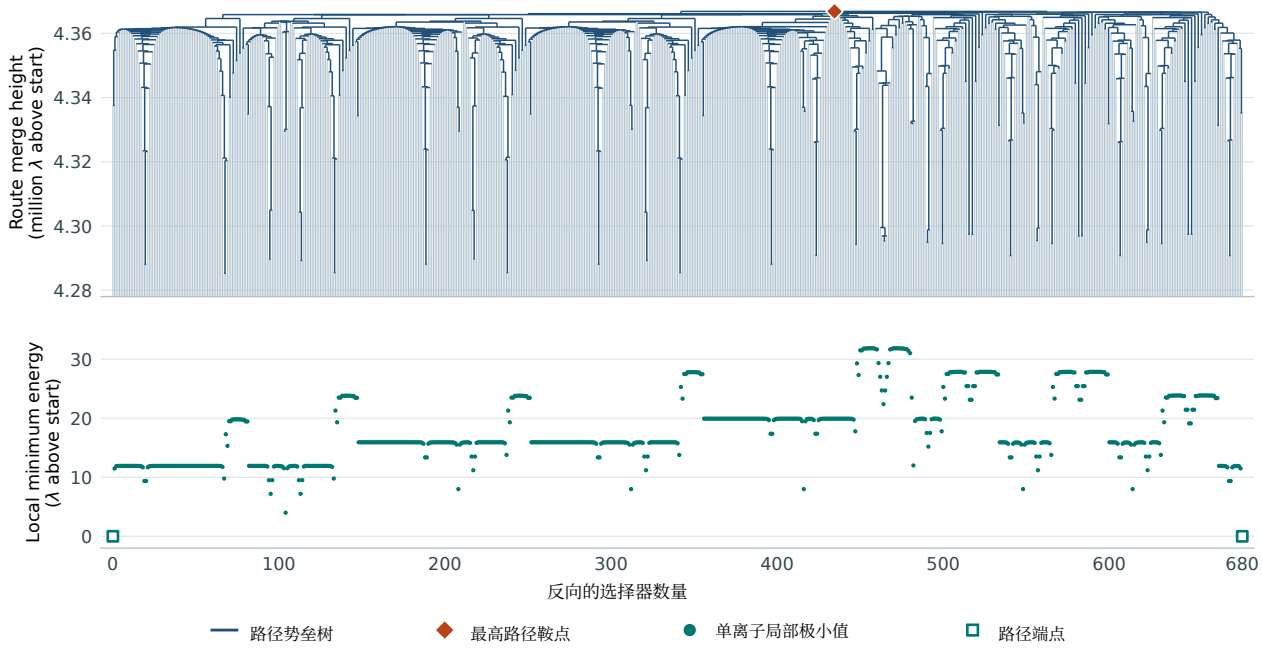

图 9. 钉扎立方体路径的单离子势垒树（3 401 个构型）。上图显示了以 $10^6\lambda$ 为单位的 680 个路径鞍点。菱形标记最高点。下图显示了 681 个严格局部极小值；每个极小值均针对所有单离子移动进行了检查，能量单位为 λ。两幅图均以相对于起点的能量为衡量标准。空心方块标记端点。在上图中，两条分支在使路径连接起来的最低鞍点高度处合并。

实例规模增长的影响，例如大型阵列中离子向边缘漂移的影响，并控制多极展开余项。为了了解该机制本身能够在多大程度上保持有效，我们回到第 IV 节的立方体图实例，增大 b，并使用直接库仑能求和检验三个数值诊断：（i） 2^8 树状态坍缩至 $E_0 + \lambda H_B$ 以内，误差为 $\lambda/20$；（ii）每条树边均满足引理 3 的割判据，该判据使用精确的耦合和残余场进行评估；（iii）从能量最低的无畴壁构型出发进行任何单离子移动都不会降低能量。最后一项检查仅确立了局部稳定性；它并不能排除具有非法选择器的更低能量构型。

图 10(a) 展示了三种钉扎势控制程度下的结果。

- 裸库仑位点，如定理 2 所述：该实例在不超过 $b = 0.03$ 时均可运行。超过这一范围后，一个离子会从阵列内部移动到边缘附近的选择器处，从而降低能量。

- 每个选择器一个深度偏移，其值等于其他选择器的平均库仑势的负值；通过调节一个对角线的深度而非拉伸该对角线来抵消场。两者都不会改变任何耦合。该实例可运行至 $b = 0.12$。现在的限制因素是导线端点和弯曲处的局部场梯度，它会将一个离子从对角线推到其自身选择器的一侧。

- 每个势阱深度均可调，设置为抵消该位置的平均库仑势：该实例可运行至 $b = 0.33$。

在整个过程中，塌缩始终保持在 0.01λ 以内，且割判据以超过 12% 的裕度成立；首先失效的是单离子稳定性。在 $b = 0.25$ 处，各位点形成间距为 $a/2$ 的均匀方形晶格，并填充一半；因此，借助位点分辨的深度控制，编码在类晶体几何结构中仍然有效。这些单体偏移不会改变库仑耦合，但会扩大实例的类别；而具有任意位点依赖势能的困难性，是第 I 节 [20, 21] 所讨论的较容易情形。因此，数值结果确定了该构造的物理窗口；它们并不是关于有界间距下困难性的结果。

真实势阱并非无限刚性。我们将每个位置建模为频率为 ω_w 的谐势阱，并在线性响应下计入每个离子在其他离子的合力 F_i 作用下通过弛豫获得的能量 $-|F_i|^2/2m\omega_w^2$，再减去随平均势移除的平均力。弛豫主要会重新归一化边缘耦合，而场校准会吸收这一影响；重新校准后，塌缩仍保持在 0.004λ以内。要求弛豫对λ 的改变小于 10%，则在 $b = 0.25$、 $\omega_w \geq 16\,\omega_a$时有 $\omega_a = (e^2/4\pi\varepsilon_0 m a^3)^{1/2}$；对于更小的 b （在 $b = 0.1$时为$\omega_w \geq 63\,\omega_a$），这一要求会提高。热能必须低于能量单位，即在 $\lambda = 0.047\,e^2/4\pi\varepsilon_0 a$ 时

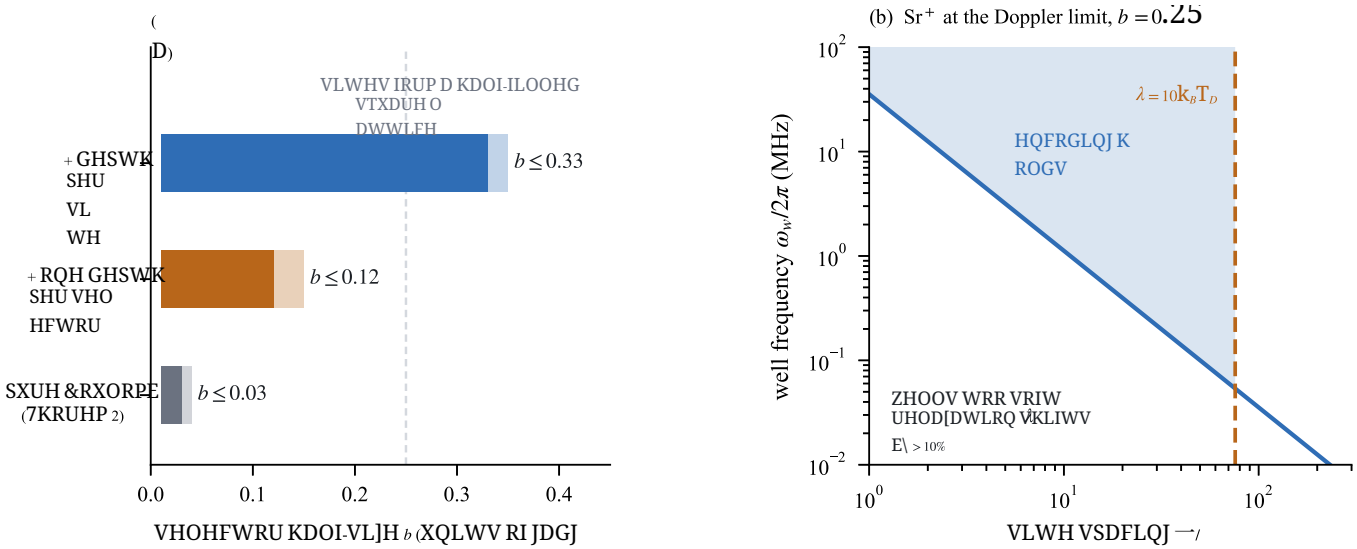

图10。对于立方体图实例（680 个选择器），该构造向实验室参数推进到何种程度后仍能保持有效。(a) 选择器半尺寸 b 的范围，在此范围内该实例通过以下三项诊断 [在 $\lambda/20$内发生坍缩、引理 3 的割判据，以及不存在降低能量的单离子移动]，；这里采用定理 2 中的裸库仑位点，每个选择器设置一个深度偏移，并且每个势阱的势阱深度均可调。浅色线段标示出测试中实例首次失效的数值。在 $b = 0.25$ （虚线）处，位点组成间距为 $a/2$、填充一半的均匀方形晶格。(b) $b = 0.25$ 处的实验室窗口：$^{88}\mathrm{Sr}^{+}$ 位于多普勒极限 $T_D \approx 0.52$ mK 下的谐势阱中。在实线以上，离子在其势阱中的弛豫使 λ 的变化小于 10%；在虚线左侧，$\lambda > 10\,k_B T_D$。

$b = 0.25$。对于在 422 nm 跃迁上进行多普勒冷却的 $^{88}\mathrm{Sr}^{+}$ 离子，$T_D = \hbar\Gamma/2k_B \approx 0.52$ mK；对于间距为 $a/2 < 77\ \mu$m 的位置，$\lambda > 10\,k_B T_D$。

图 10(b) 显示了所得窗口。当位点间距为 5 μm 时，$\lambda \approx 150\,k_B T_D$，但势阱必须达到 $\omega_w \approx 2\pi \times 3.2$ MHz。在 20 μm 时，$\lambda \approx 40\,k_B T_D$ 和$\omega_w \approx 2\pi \times 0.4$ MHz 即已足够；此时均方根热偏移约为 90 nm，相对于位点间距可以忽略。因此，物理上的要求是：以几至几十微米为间距的二维阵列，其中每个刚性势阱均可单独调谐，并且多普勒冷却足以满足要求。这属于分段式电极囚禁和表面电极离子阱阵列的工作区域 [39]，，而不是光学晶格的工作区域；后者的势阱浅得多（第 VI 节）。这里有两点需要注意。这些窗口针对 680 个选择器中的一个实例；一旦平均势被抵消，关闭窗口的机制就是局部的，但我们尚未证明这些窗口与实例规模无关。此外，势阱还必须足够深，以便将每个离子 удерж住而不受其邻居影响，而谐势阱模型只在势阱极小值附近适用。

VI. 讨论

在 NP 意义下，寻找离子晶体基态是否困难，取决于结构信息存在于何处。对于固定离子阱，输入是一元编码的离子计数和二进制能量阈值；简单的 P/poly 界表明，除非多项式层次崩溃，否则这种判定表述不可能是 NP 困难。对于固定球面和固定正定谐振子陷阱，简单的论证也表明，对于采用一元编码离子计数和精度参数的 ACCS，可使用多项式长度建议（命题1）。这些观察针对的是输入编码，并未提供寻找构型的统一多项式时间算法。尽管如此，自由晶体在实际中确实难以处理；在我们模拟的范围内，其难度近似呈指数增长（图2），这也是采用退火和其他全局搜索方法的原因。对于钉扎晶体，我们保留了 Emmerich 的平方反比归约中的选择器、导线、目标盒和场补偿机制 [25]。新的库仑估计和有理数阈值构造（第 III E 节）将这一归约扩展到 $s = 1$，从而证明有限精度承诺版本具有 NP 困难性且为 NP 完全。进一步的能景分析表明，推论 1 中的这一族存在指数多个近简并极小值；并利用势垒树解析了立方体示例中的势垒。

离子的钉扎势已通过叠加在离子晶体上的光学晶格 [40, 41]，、离子晶体的光学俘获 [42]，以及具有许多势阱的分段电极阵列 [39] 得以实现；如下文所述，目前只有电极阵列达到了定义1(ii)中的深度钉扎极限。固定陷阱中的混合物种晶体属于自由晶体，适用定理1。例如，在单分子光谱学中，分子离子被置于激光冷却原子离子之间，并通过晶体的运动读出其内部态 [6, 7]；分子离子所处的位置是一个构型问题，但在固定陷阱中，这是一个自由晶体问题；对于这些实验所用的小型晶体，

可以通过直接枚举来解决。定理2和定理3表明，除非 P =NP，否则无法保证在多项式时间内找到任意钉扎景观的最优装载模式：对于归约中的实例，最优模式加上精确到$\lambda/2$的能量评估，就能判定独立集问题。

钉扎极限在实验上需要什么条件？两个单电荷离子相距 a 时的库仑能，在 $a = 5$ μm处为 $e^2/4\pi\varepsilon_0 a \approx k_B \times 3.3$ K。定义1(ii)要求每个势阱都能将其离子固定在位点上，使其不被邻居带离：势阱深度必须超过离子离开其位点后可能获得的最大库仑能。对于最小位点间距 $a_{\min}$，该能量至少为 $e^2/4\pi\varepsilon_0 a_{\min}$ 量级；而对于能够完全离开阵列的离子，该能量将增大到其所在位点处整个晶体的库仑势——对于间距为 a、含有 k 个离子的晶体，其量级为$\sqrt{k}\, e^2/4\pi\varepsilon_0 a$ 。势阱还必须具有足够的刚性。在频率为ω_w 的势阱中，净库仑力会使每个离子发生位移，从而产生构型依赖能量；该能量比库仑尺度小一个约为（ω_C/ω_w）^{2}, 的因子，其中对于位于 $a_{\min} = 5$ μm处的 $^{88}\mathrm{Sr}^+$，$\omega_C = (e^2/4\pi\varepsilon_0 m a_{\min}^3)^{1/2} \approx 2\pi \times 0.57$ MHz。方程（4）给出了极限 $\omega_w \gg \omega_C$。在囚禁阵列中，电极定义的势阱通常比这一极限深得多，其间距为几十微米。在微米级间距下，离子的光学势通常比 $e^2/4\pi\varepsilon_0 a$ 浅得多；在当前的光学实验中，光学势要么使由电极阱保持的晶体产生起伏，要么用平滑的约束势取代离子阱，因此这些实验处于这两个极限之间，或处于自由极限。证明中构造的实例还具有另一种理想化特征：其选择器的位点间隔为 $2b \ll 1$ （以器件间距为单位），远小于任何可实现的势阱图案。因而，定理 2 讨论的是由钉扎景观提出的计算问题，而不是声称能够在实验室中构造出其最困难的实例。不过，第五节表明，这种编码机制本身能够在具有可调势阱深度的半填充方格晶格中保留下来，其参数处于电极阱阵列可达到的范围内。

一些问题仍未解决。当位点图案的最小间距与晶格常数相当时，无论是否具有位置依赖的势阱深度，困难性是否仍作为定理成立？对于具有有限势阱深度且带有谐包络的情形，其中离子可能离开位点，这一性质是否仍然成立？此外，NP中的精确归属也是一个悬而未决的问题，它与平方根和问题有关；计数基态是否为#P-困难同样如此。该归约并不保持解的数量，因为带有内部边的选择也可以达到 $\min H_B$。

致谢

关于人工智能和其他计算工具的披露。P. Navarro 使用 Anthropic Claude（通过 Claude Code）进行库仑归约、数值估算、展开式，脚本编写和手稿准备。在第二作者将参考文献 [25] 中的逆平方归约改编为库仑情形期间，Claude 提出了常数和估算值，随后由两位作者审阅并完善。M. Emmerich 使用 OpenAI Codex 进行对抗性证明审查和编程辅助，并使用 Mathematica（Wolfram）和 Python 进行计算验证。研究问题建立在第二作者长期以来关于 Riesz 能量子集选择计算复杂度的研究基础之上。研究成果由作者共同完成，所有由人工智能生成的建议均经过作者严格审阅和修改；作者对数学内容承担全部责任。

库仑晶体代码库包含代码、数值结果、Lean证明以及非技术性说明。

P. Navarro感谢他的导师David Patterson对这项工作的支持。

附录 A： $s = 1$处定理 2 的证明

我们逐步遵循文献 [25] ，并指出每一步在其中对应的结果。表I汇总了所使用的符号。图3展示了本证明中使用的布局。

1. 源问题与间隙转移

这些陈述与参考文献 [25], 第 3 节中的陈述相同。用 $x_v \in \{0,1\}$ 表示“选定顶点 v”，用 $\sigma_v = 2x_v - 1$、$|x| = \sum_v x_v$ 表示选定顶点数，用 q 表示两端均被选定的边数。

引理 4 （计数恒等式）。 若 G 是三次图，则$H_B(\sigma) = n/2 + 4(q - |x|)$。

证明。 代入 $\sigma_u\sigma_v = 4x_u x_v - 2x_u - 2x_v + 1$。对各边求和得到 $\sum_{uv} x_u x_v = q$, $\sum_{uv}(x_u + x_v) =$

表I. 约化的记号。

符号	含义
$G = (V, E)$, n	平面三次源图， $n = \|V\|$ 个顶点
$\alpha(G)$, K	独立数；目标大小
$x_v \in \{0,1\}$	顶点 v 已选中（1）或未选中（0）
$\sigma_v = 2x_v - 1$	与自旋相同的比特， ± 1
H_B, H_0	源能量，公式（5）；其阈值
T_v	表示顶点 v 的选择器树
M, $k = 2M$	选择器数量；离子数量
b	选择器正方形的半尺寸
η_i	选择器 i的一条对角线的小幅扩张
$R = r$（cos θ, sin θ）	两个选择器中心之间的向量
$t = b/r$	膨胀参数， $t \le 10^{-8}$
J_R, h_R	两个选择器之间的耦合和场
λ	编码源问题的能量单位
L、W、D	绘图尺寸、网格尺度、特征间距
E_0	与配置无关的能量偏移

$3|x|$，以及 $|E| = 3n/2$，因此边项为 $4q - 6|x| + 3n/2$。场项为 $2|x| - n$。 □

引理 5 (贪心独立集)。 每个选定顶点集合 A 都包含一个独立集 I，满足 $|I| \geq |A| - q(A)$。

证明。 我们对 $|A|$ 作归纳。若 A 是独立集，则取 $I = A$。若 A 包含一条边 uv，则 $A' = A \setminus \{u\}$ 少一个顶点，且至少少一条内部边，因此 $|A'| - q(A') \geq |A| - q(A)$，归纳假设给出的 A' 的独立集也适用于 A。 □

推论 2 (阈值与间隙)。 设 $H_0 = n/2 - 4K$。若 $\alpha(G) \geq K$，则某个 σ 满足 $H_B(\sigma) \leq H_0$。若 $\alpha(G) \leq K - 1$，则每个 σ 都满足 $H_B(\sigma) \geq H_0 + 4$。

证明。选取一个大小为 $\geq K$ 的独立集，使得 $q = 0$ 且 $|x| \geq K$。反过来，引理 5 给出 $|x| - q \leq \alpha(G)$，而引理 4 给出 $H_B \geq H_0 + 4$。 □

下一个陈述提炼了参考文献 [25],第 10–11 节中的逻辑，并以一种可适用于无理能量尺度的形式表述。

定理 4 (间隙转移)。 设 $\mathcal{C}$ 是一组构型，其能量为 E，且 $H : \{\pm 1\}^V \to \mathbb{Z}$ 是源能量。假设存在实数 E_0 和 $\lambda > 0$，以及三个映射，

- $\mathrm{nf} : \mathcal{C} \to \mathcal{C}$，用于修复构型，
- $\mathrm{dec} : \mathcal{C} \to \{\pm 1\}^V$，用于读出其自旋，
- $\mathrm{enc} : \{\pm 1\}^V \to \mathcal{C}$，用于根据自旋构造构型，

使得对所有 $c \in \mathcal{C}$ 和 $\sigma \in \{\pm 1\}^V$，

$$E(\mathrm{nf}\, c) \leq E(c), \tag{i}$$
$$|E(\mathrm{nf}\, c) - E_0 - \lambda H(\mathrm{dec}\, \mathrm{nf}\, c)| < \lambda/20, \tag{ii}$$
$$|E(\mathrm{enc}\, \sigma) - E_0 - \lambda H(\sigma)| < \lambda/20. \tag{iii}$$

换言之：修复操作绝不会提高能量，且重新配对后的构型和编码后的构型的能量均在 $E_0 + \lambda H$ 以内。进一步假设，H 在 H_0 之上存在间隙：要么 $\min H \leq H_0$，要么 $\min H \geq H_0 + 4$。那么，对于窗口中的每个阈值 τ

$$E_0 + \lambda(H_0 + 1) \leq \tau \leq E_0 + \lambda(H_0 + 3),$$

晶体问题与源问题的答案相同：

$$\exists c : \; E(c) \leq \tau \iff \exists \sigma : \; H(\sigma) \leq H_0.$$

证明。 ($\Leftarrow$) 如果 $H(\sigma) \leq H_0$，那么根据 (iii)，$E(\mathrm{enc}\, \sigma) < E_0 + \lambda H_0 + \lambda/20 < \tau$。

($\Rightarrow$) 我们证明其逆否命题。如果没有任何 σ 具有 $H(\sigma) \leq H_0$，则由间隙可得 $\min H \geq H_0 + 4$。于是，对于每个 c，根据 (i) 和 (ii)，

$$E(c) \geq E(\mathrm{nf}\, c) > E_0 + \lambda(H_0 + 4) - \lambda/20 > \tau.$$

□

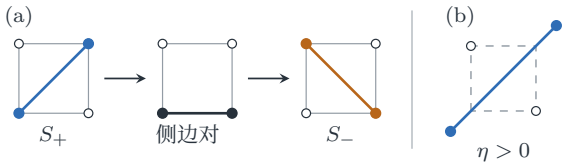

图11。（a）两次单离子移动通过一个侧边对，使未拉伸选择器反转。实心圆表示离子。（b）正 η 使两个 S_+ 位点从虚线正方形向外移动。图中夸大了拉伸程度。

2. 选择器强制

中心为 $c \in \mathbb{Z}^2$、半尺寸为 b的选择器由四个候选位点组成：$c \pm (b + \eta)(1,\ 1)$ 和 $c \pm b(1,\ -1)$。它的两种合法状态是对角线 $S_+(c) = \{c \pm (b + \eta)(1,\ 1)\}$ 和 $S_-(c) = \{c \pm b(1,\ -1)\}$。对于未拉伸选择器 ($\eta = 0$)，位于边上的两个离子耗能为 $1/(2b)$；位于对角线上的两个离子耗能为 $1/(2\sqrt{2}\, b)$。图 11 展示了翻转和拉伸。

引理 6 (四选二强制；参见文献[25],引理 4.1)。 设 M 个选择器的中心两两距离为 ≥ 1，令 $k = 2M$、$|\eta_i| \leq 10^{-6} b$ 和 $b \leq (40M)^{-1}$。那么，对于任何一种离子排布，只要并非每个选择器的对角线上恰好有两个离子，就存在一种单离子移动，能严格降低 E_1。

证明。 不同选择器中的位点之间距离为 $\geq 1 - 2\sqrt{2}(b + \text{最大值}\, |\eta|) > 0.92$，因此插入一个离子会使选择器之间的能量增加不到 $2M/0.92 < 3M$，而移除一个离子则会使其降低。如果某个选择器中的离子少于两个，就从一个离子多于两个的选择器移出一个离子。占据数变化 $(3,1) \to (2,2)$、$(3,0) \to (2,1)$、$(4,1) \to (3,2)$ 和 $(4,0) \to (3,1)$ 所对应的最小内部增益分别为 $(1 - \frac{1}{2\sqrt{2}})b^{-1}$、$b^{-1}$、$b^{-1}$ 和 $(1 + \frac{1}{2\sqrt{2}})b^{-1}$。用对角线替换一对侧边对，可获得增益 $(\frac{1}{2} - \frac{1}{2\sqrt{2}})b^{-1} > 0.146\, b^{-1}$。扩张 η 使每个内部成对能量的变化都小于 $10^{-6} b^{-1}$，因此每项增益都大于 $0.1\, b^{-1} \geq 4M > 3M$。 □

3. 引理1和引理2的证明

引理*1*的证明。图4绘出了本文推导出的耦合的角度依赖关系。令 $f(R) = 1/r, d_\sigma = (1, \sigma)$ 和 $D_\sigma = d_\sigma \cdot \nabla$，其中导数在平面内取值。对于自旋 σ, σ'，四个成对能量为 $f(R + b(\epsilon' d_{\sigma'} - \epsilon d_\sigma))$，其中 $\epsilon, \epsilon' = \pm 1$。对两种符号求和会消去所有奇次幂 b。保留至四次项，得到

$$F_R^{(\leq 4)} = 4f + 2b^2 (D_\sigma^2 + D_{\sigma'}^2) f + b^4 \left[\tfrac{1}{6} (D_\sigma^4 + D_{\sigma'}^4) + D_\sigma^2 D_{\sigma'}^2 \right] f.$$

在 J_R的带符号平均中，只有混合四次项保留下来。其算子为 $b^4 (D_+^2 - D_-^2)^2 / 4 = 4 b^4 \partial_x^2 \partial_y^2$。

取 $u=\sin 2\theta = 2xy/r^2$后，得到$(105u^2-48)b^4/r^5$，如公式（7）所示。

对于 $h_R^{(1)}$，二次算子为 $4b^2\partial_x\partial_y$。以 b^4为单位时，纯四次项的贡献为（$D_+^4 - D_-^4$）/12；混合项的贡献为（$D_+^4 - D_-^4$）/4。它们的和为 $\frac{8}{3}\partial_x\partial_y\Delta$，其中 $\Delta = \partial_x^2+\partial_y^2$。由于 $\Delta f = r^{-3}$ 和$\partial_x\partial_y r^{-3} = 15xy/r^7$，两个四次贡献以 b^4/r^5为单位时分别为 $5u$ 和 $15u$。这证明了公式（8）中的系数 $20u$。交换选择器会在另一端得到相同的场。在一条轴上，反射会同时交换两个对角态，并使所有距离保持不变，因此每个场都严格为零。

我们也对余项进行界定，以便用于灵敏度估计。写作 $e_i=\eta_i/b$、$e_j=\eta_j/b$，并将每个+ 对角方向分别乘以其选择器处的 $1+e_i$ 或 $1+e_j$。对于复数 $|e_i|$，$|e_j|\le 1/10$，每个所得的位移差 v 的范数至多为$2.2\sqrt{2}$。令$n = R/r$，并将 $t=b/r$ 替换为 z。归一化对项为（$1+w$）$^{-1/2}$，其中 $w = 2z\,n\cdot v + z^2 v\cdot v$，且点积是双线性的。在 $|z|=1/10$ 上有$|w| < 0.72$，因此每个归一化傅里叶系数的模至多为$4/\sqrt{1-0.72} < 8$。该级数关于 z是偶函数。根据柯西估计，其从六次项开始的尾项（以能量单位计）有界为

$$\frac{8}{r}\frac{(10t)^6}{1-(10t)^2} < \frac{9\cdot 10^6}{r}t^6.$$

在 $t\le 10^{-8}$ 处，这就得出了未拉伸选择器所述的余项。□

引理 *2* 的证明。令 $a_i = 1+e_i$, $a_j = 1+e_j$ 和 $u = \sin 2\theta$。在刚得到的泰勒展开中，在相应的选择器处将 D_+替换为 a_iD_+ 或 a_jD_+。定义无量纲导数

$$P = r^5 D_+^4 f = 105u^2 + 30u - 39,$$
$$Q = r^5 D_+^2 D_-^2 f = 57 - 105u^2.$$

因此，在 $[-1,1]$上有 $|P|\le 96$, $|Q|\le 57$和 $|(P-Q)/2|\le 72$。令 J_4, h_4 表示以 b^4/r^5为单位、在选择器 i处取场时的四次系数。对带符号平均下的纯算子和混合算子求导，得到

$$\partial_{e_i} J_4 = \tfrac{1}{2}a_i(a_j^2 P - Q),$$
$$\partial_{e_i} h_4 = \tfrac{1}{3}a_i^3 P + \tfrac{1}{2}a_i(a_j^2 P + Q),$$
$$\partial_{e_j} h_4 = \tfrac{1}{2}a_j(a_i^2 P - Q).$$

J_4在 e_j中的导数可通过交换 i,j得到。对于 $|e_i|,|e_j|\le 10^{-6}$，耦合导数的绝对值小于 72.01（记作 $a_j^2P-Q = (P-Q) + (a_j^2-1)P$），且两个场导数的绝对值均小于 110。二次耦合对所有拉伸值均为零。以 b^2/r^3 为单位的二次场为 $6u + (1+3u)(a_i^2-1)$，因此任一导数的绝对值均小于 8.001。

前述证明对$|e_i|$，$|e_j|\le 1/10$上的每个尾项都给出了统一界。在任一实数拉伸值周围半径为 0.09 的圆上应用柯西估计，可得该变量下的导数界为 $10^8 t^6/r$。从 e 到 η 的变化需除以 b。以 b^3/r^5 为单位，耦合导数因此至多为 $72.01 + 10^8 t^2 < 73$；以 b/r^3 为单位，场导数至多为 $8.001 + 110t^2 + 10^8 t^4 < 8.01$。从零拉伸开始对两个偏导数积分，得到常数 73 和 8.01，从而得到所述界；由对称性，对选择器 j 处的场也成立。□

参考文献 [25], 式（33）对每个傅里叶系数都采用了较粗略的界100($|\eta_i|+|\eta_j|$)，这在 $s=2$ 处足够，但在 $s=1$ 处则不够（第三节E）。

4. 布局和目标系数

这些构件沿着 G 的无交叉正交网格图放置，该图的多项式总边长为 L_0，在多项式时间内 [43, 44] 计算得到，并按 W进行缩放，完全遵循参考文献 [25], 第7–8节的方法。每个顶点 v 都变为一棵树 T_v，其选择器沿三个半边以单位间距排列；图中的各个特征之间至少保持 D的间距。我们设

$$L = L_0 + n + 1, \quad W = 10^6 L^2, \quad D = W/100, \\ M \le 10LW, \quad b = (10^8 M^3)^{-1}. \tag{A1}$$

只有 W 不同于参考文献 [25]（其中 10^5L^2）。在每个目标框中，两棵树分别以直线前缀 p_i =（$-i$,0）和 q_j =（$1+j$, 1）结束，$0\le i,j\le D$，因此最近的一对（p_0, q_0）位于 45° [图3(d)]；前缀之后，q树通过一个单位步长返回其通道。我们采用参考文献 [25]的路径布置所保证的两个性质：局部几何形状仅包括直线段、直角弯折、三分支根节点、目标框前缀以及这些单位步长；并且其他任意一对选择器之间的距离至少为 D。两个前缀之间的总耦合定义了能量单位，$\lambda = \sum_{i\ ,j=0}^{D} J_{q_j - p_i}$。

引理7（目标系数；参见 [25],引理8.1）。 $7.0\,b^4 < \lambda < 13.1\,b^4$, 且两个前缀之间的总绝对耦合低于 $13.1\,b^4$。

证明。特定配对贡献 $57\cdot 2^{-5/2}b^4 = 10.076\,b^4$，上限为 $10^{-3}b^4$。其他每一对的向量均为（k, 1），其中 $k = i+j+1 \ge 2$，在有限前缀中至多由 k 对达到，且 $|J|\le 57.01\,b^4 r^{-5}$。将 $\sum_{k\ge 2} k\,(k^2+1)^{-5/2}$的前五项与 $\int_6^\infty x^{-4}dx$相加进行界定，得到0。05234，因此余项低于 $2.984\,b^4$。□

5. 割预算和树一致性

翻转一组 C 自旋会使任意伊辛能量恰好改变 $-2\sum_{i\in C,\ j\notin C} J_{ij}\sigma_i\sigma_j - 2\sum_{i\in C} h_i\sigma_i$；这一恒等式及由此得到的收益与风险判据均已通过机器验证（附录 B）。

引理 *3* 的证明。每一对中心间距为 R =(i,j) 的离子都满足 $|J_R|\le w(i,j)\,b^4 r^{-5}$，其中 $w = |A(\theta)| + 6\times$

10^{-4}，根据引理1；对于晶格向量 $|A(\theta)|$ ，它是一个精确有理数，因为 $\cos 4\theta = 1 - 8i^2j^2/(i^2+j^2)^2$。最坏割（见图12，能量比较见图5）将树的根与一条垂直于另外两条分支的分支连接起来。跨越该割的点对分为以下五类，这细化了文献 [25],第9节中的估计：

- 同一直线路径：最多 k 对的路径距离为$k \geq 2$，上限为 48。0006（$\zeta(4) - 1$）；
- 两条垂直分支：$2\sum_{i,\ j\geq 1} w(i,\ j)(i^2+j^2)^{-5/2}$，其中包含距离根最近的两对反铁磁45° 对；
- 相对共线分支：$48.0006\sum_{i,\ j\geq 1}(i+j)^{-5} = 48.0006(\zeta(4) - \zeta(5))$；
- 路径远端：路径距离为 $\geq 2D$ 的特征，由 $2 \cdot 57.0006 \cdot \frac{2}{3}\sum_{i\geq 2D} i^{-4}$ 界定；
- 一个目标框：由引理7界定。

表 II 同时涵盖全部五类电荷，因此也涵盖其他根部几何结构和弯折；距离根更远的切口只涉及这些求和中的子集。在目标框的单位步长处切开时，臂间求和 $\sum_{(i,j)\neq(0,0)} w(i+j, 1)\ ((i+j)^2+1)^{-5/2} \leq 21.56$ 取代了垂直扇区和共线分支，总和低于 $38.55\, b^4$。每项求和均通过区间算术并采用向外舍入进行认证（附录 C）：有限部分以区间形式精确求和，扇区和计算至 $i, j \leq 300$，尾项则作为区间 $[0, T]$ 加入，并使用解析界，例如扇区的 $T \leq 2{\cdot}57.0006{\cdot}\frac{2}{3}\sum_{i>300} i^{-4} < 3\times 10^{-6}$。有利耦合满足 $|J_{nn}| \geq (48 - 6\times 10^{-4})\, b^4$。 □

引理 8 (树归一化；参见文献[25],引理 9.1)。 对于任何具有合法选择器的构型，通过有限次严格降低能量的树分支翻转，可使每棵树都无畴壁，同时不改变离子数量。

证明。 以每棵树的顶点选择器为根，并翻转不一致边 ab的叶侧 C 。根据翻转恒等式，缺陷边贡献 $-2|J_{ab}|$，而其他所有项

表 II. 树的最坏割（图12）两侧绝对耦合的经认证上界，单位为 b^4。每个条目都是区间算术包络的上端点，其中包括每一对离子的多极展开余项以及解析尾项界。

跨割配对	经认证的界
同一直线路径	3.9516
根部的两条垂直分支 23。0566	
相对共线分支	2.1791
路径远端	$< 10^{-9}$
一个目标框（引理7）	13.0377
总计	42.2248

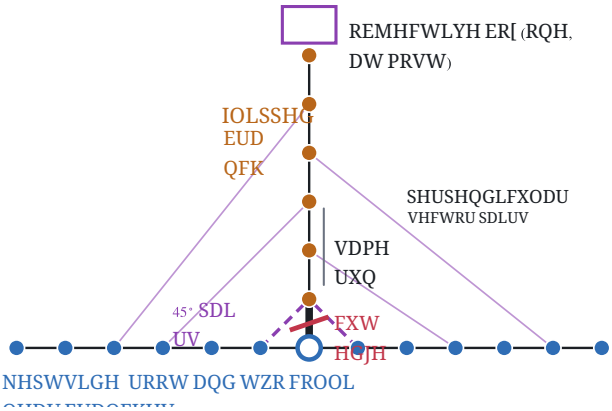

图12。顶点树的最坏割。割边（红色标记）将根（空心圆）与一条分支相连，该分支垂直于两条保留分支。翻转该分支（橙色）会改变它与保留侧（蓝色）之间的每一处耦合：同一条直线上的配对、两个垂直扇区中的配对（浅色线；虚线所示的 45° 个最靠近根的配对为反铁磁），以及该分支末端至多一个目标框。

均由引理 3 的割负载、引理 9 的远程耦合，以及引理 10 的残余场和耦合漂移所界定。以 b^4 为单位，

$$\begin{aligned}\frac{\Delta E}{2b^4} &\leq -\frac{|J_{nn}|}{b^4} + \Lambda_{\text{cut}} + \Lambda_{\text{rem}} + \Lambda_{\text{field}} + \Lambda_{\text{drift}} \\ &\leq -47.999 + 42.225 + 10^{-4} + 3\times 10^{-5} + 10^{-5} \\ &< -5.77.\end{aligned} \tag{A2}$$

因此，每次翻转都会使能量降低超过 $11\, b$；由于构型数量有限，该过程最终会终止。 □

6. 远场与场补偿

引理 9 （远程相互作用；参见文献 [25], 公式（46））。引理 *7* 和引理 *3* 未涵盖的选择器对，其绝对耦合总和小于 $10^{-4}b^4$。

证明。所有此类对之间的距离均为 $\geq D$，其数量少于 $M^2/2$ ，且每对的耦合至多为 $57.01\, b^4 D^{-5}$。根据公式（A1），总和至多为$2.9\times 10^{13} L^2 W^{-3} b^4 = 2.9\times 10^{-5} L^{-4} b^4$。 □

选择器的内部场为 $B(\eta) = \frac{1}{4\sqrt{2}}[(b+\eta)^{-1} - b^{-1}]$，斜率为 $\beta = -1/(4\sqrt{2}\, b^2)$。令 G_i 为选择器 i 上的未扰动场总和，则 $|G_i| \leq 6.01\, Mb^2$。目标场 g_i 在每棵树的根处为 λ，这给出了公式（5）中的项 $\lambda\sum_v \sigma_v$，在其他位置则为 0。

引理10 （有理场补偿；参见文献 [25],引理6.1）。 选择在 $\delta = 10^{-4}b^6/M$ 的 η_i 范围内的有理数 $(g_i - G_i)/\beta$。那么 $|\eta_i| \leq 35Mb^4$，总残差场低于 $3\times 10^{-5}b^4$，总耦合漂移低于 $10^{-5}b^4$，并且 η_i 可在多项式时间内计算得到。

证明。选择器 i 处的残差由 B的曲率（至多为 $0.18\,b^{-3}\eta_i^2 \le 221 M^2 b^5$）、舍入误差$|\beta|\delta \le 1.8\times10^{-5} b^4/M$ 以及引理2中的场漂移（至多为 $700 M^2 b^5$）组成。这里 $|\eta_i| \le 4\sqrt{2}\,b^2(\lambda + 6.01 M b^2) + \delta < 34.1\, M b^4$，这也给出了所需的 $|\eta_i| \le 10^{-6} b$，正如引理6和引理2所要求的那样。对满足$M^3 b = 10^{-8}$的 M 个选择器求和，总残差至多为 $921 M^3 b^5 + 1.8\times10^{-5} b^4 < 2.8\times10^{-5} b^4$。耦合漂移至多为 $80 b^3 \cdot 70 M b^4 \cdot M^2/2 = 2800 M^3 b^7 = 2.8\times10^{-5} b^6$。计算 η_i 需要将 G_i 和 λ 计算到精度 $|\beta|\delta/2$，这需要对有理数的倒数平方根进行多项式次计算，使其精确到 $O(\log M)$ 位。$\square$

7. 组装

令 S_σ 为这样一种构型：将 T_v 的每个选择器都放置在对角线 σ_v 上。利用公式（6）展开 $E_1(S_\sigma)$，每棵树内部的常数和耦合（均带有 $\sigma_i\sigma_j = +1$）归入 E_0，根场给出 $\lambda\sum_v \sigma_v$，每个目标框给出 $\lambda\sigma_u\sigma_v$。其余项由引理 9 和 10 界定。因此

$$E_1(S_\sigma) = E_0 + \lambda H_B(\sigma) + \mathcal{R}(\sigma), \tag{A3}$$

其中 $|\mathcal{R}| < 2\times10^{-4} b^4 < \lambda/20$，由此确立了且满足 (P3)(P4)。

给定 (G, K)，构造带有 $k = 2M$ 的 $4M$ 个位点，并应用定理 4：nf 是引理 6 和 8 中的修复过程，dec 读取树的自旋，$\mathrm{enc}(\sigma) = S_\sigma$，而间隙由推论 2 给出。我们将阈值置于 $E_0 + \lambda(H_0 + \tfrac{5}{4})$ 附近，使其既处于定理 4 的窗口内，也处于 Lean 形式化所用的更窄窗口内（附录 B）。由于 $H_B(-1) = n/2$，该点等于 $E_1(S_{-1}) + \lambda(\tfrac{5}{4} - 4K) - \mathcal{R}(-1)$。输出一个有理数 $\tilde\tau$，使其与 $E_1(S_{-1}) + \lambda(\tfrac{5}{4} - 4K)$ 的距离在 $\lambda/16$ 以内；通过将 $E_1(S_{-1})$ 中少于 $2M^2$ 个成对项逐一计算到绝对误差 $b^4/(64M^2)$，并将 λ 计算到绝对误差 $b^4/(64(4K+2))$，即可在多项式时间内完成。由 $|\mathcal{R}(-1)| < \lambda/20$ 可知，$\tilde\tau$ 与 $E_0+\lambda(H_0+\tfrac{5}{4})$ 的距离在 0.12λ 以内。在否实例中，每种构型的能量都高于 $E_0 + \lambda(H_0 + 4) - \lambda/20 > \tilde\tau + 1.6\lambda$，这是定理 3 中使用的裕量。所有坐标均为有理数，具有 $O(\log M)$ 位和 $M \le 10^7 L^3$，因此该归约在多项式时间内运行。 $\square$

附录 B：机器检验组件

以下命题均使用 Lean 4 和 Mathlib 证明（源代码位于随附的代码仓库中）；#print axioms 仅报告标准公理 propext、Classical.choice 和 Quot.sound。

- 引理 4、引理 5 和推论 2（twiceHB eq、exists_indepSet_large、barahona yes、barahona gap）。
- 定理 4（Simulation.reduction 正确性）。
- 引理 6 中未经扰动（$\eta = 0$）的内部选择器不等式（gain 31 22、gain 30 21、gain 41 32、gain 40 31、gain_side to diag、强制条件）。
- 公式 (6)（two spin fourier）、精确翻转恒等式，以及引理 8 背后的翻转支配判据（energy flip、flip decreases）。
- 定理 2 的组装：给定一个针对 $(G,\ K)$ 的 GeometricReduction 对象，当且仅当 $\alpha(G) \ge K$ (GeometricReduction.correct) 时，该实例是一个是实例。

GeometricReduction 将一个有限点集 $P \subset \mathbb{R}^2$, k、一个有理数 τ、一个作用于 P 的 k-子集且绝不增加能量的修复映射，以及一个模拟界打包在一起。Lean 使用取整数值的 $2H_B$（gap 8），因此其能量单位为 $\lambda/2$；所需的模拟界因此为 $|\mathcal{R}| < \lambda/40$，而且 τ 必须属于 $[E_0 + \lambda(H_0 + \tfrac{1}{2}),\ E_0 + \lambda(H_0 + \tfrac{3}{2})]$。附录 A 第 7 节的构造满足这两项要求。这是一个条件 正确性定理：Lean 不会构造该几何对象；几何估计（布局、超出不等式所涵盖范围的选择器强制、引理 1–3、7、9 和 10）则是手工证明的。这些估计是关于 M、b、D 和 W 的显式不等式、泰勒界，以及带解析尾项的有限格点和，因此原则上将其形式化并不复杂；其中余量最紧的晶格和已通过区间算术（附录 C）完成认证。

附录 C：数值方法

角向定律通过将 16 个离子对项进行六阶符号展开得到，并在 $b = 10^{-4}$ 处以相对精度 10^{-8} 与精确能量进行了验证。

表 II 和引理7中的晶格和通过区间算术（mpmath, 30 位有效数字，向外舍入）进行了认证。每一对均由 $(|A(\theta)| + 6\times10^{-4})\ b^4 r^{-5}$ 界定，其中 $|A(\theta)|$ 作为精确有理数计算，而 r^{-5} 则作为区间封闭。有限部分全部求和，扇区和求和至 $1 \le i,\ j \le 300$，一维和求至 2000 项。尾项以区间形式 $[0, T]$ 加入，并采用解析界 $\sum_{k\ge n} k^{-p} \le (n-1)^{1-p}/(p-1)$ 和 $\sum_{j\ge1}(i^2+j^2)^{-5/2} \le \tfrac{2}{3} i^{-4}$。每个封闭区间的宽度均小于 10^{-5}，其上端点列于表 II 中。

图6–8中的固定实例对所有选择器对采用公式(4)的精确成对求和，并进行四个牛顿步的场补偿。对于图2中的自由晶体，局部最小化从高斯随机初始位置出发，使用 L-BFGS，并以能量在相对容差 10^{-7}内相同来识别极小值。模拟退火采用单离子梅特ropolis移动，使用从 $T = 0.05$ 到 10^{-5} 的几何调度（以 $q^2/4\pi\varepsilon_0\ell$为单位，其中$\ell = (q^2/4\pi\varepsilon_0 m\omega^2)^{1/3}$ 是图2的长度单位），历经

4000个扫描步数，随后使用L-BFGS。求解时间以单核墙钟时间进行测量。

对于图10，立方体图实例在每个 b 处都以相同布局重建。对于裸库仑位点，通过在伸展量 η_i 上执行八个牛顿步来抵消场（截断于 $|\eta_i| \le b/2$）；对于深度偏移，$\eta_i = 0$ 且偏移量是精确计算的。坍缩量是 2^8 树状态在 H_B中的线性拟合下的最大偏差；割判据为 $|J_{av}| > \sum |J_{ij}| + \sum_{i \in C} |h_i - g_i|$ 对每条树边，均需与所有其他跨割配对进行比较；合法性是从基态移动到空位点的所有单离子移动中，能量变化的最小值。对于有限刚度，计算了所有 2^8 树状态的弛豫能，并用 λ 重新拟合，且每棵树各有一个自由场；阈值刚度是在对数网格（每个数量级5个点）上使 λ 变化小于10%的最小值。随附代码仓库中包含自由晶体模拟以及 $b = 0.02$ 钉扎立方体研究的脚本和保存结果。

[1] D. H. E. Dubin 和 T. M. O’Neil，囚禁非中性等离子体、液体和晶体（热平衡态），《现代物理评论》**71**，87（1999）。[2] M. Drewsen，离子库仑晶体，《物理学B辑》**460**，105（2015）。[3] R. C. Thompson，离子库仑晶体，《当代物理学》**56**，63（2015）。[4] J. Kiethe、R. Nigmatullin、D. Kalincev、T. Schmiran- der 和 T. E. Mehlst¨aubler，有限自组织系统中的纳米摩擦与Aubry型特征探测，《自然·通讯》**8**，15364（2017）。[5] L. A. R¨uffert 和 T. E. Mehlst¨aubler，三维离子库仑晶体中的壳层形成与二维纳米摩擦，《物理评论研究》**8**，033044（2026）。[6] A. Calvin、S. Eierman、Z. Peng、M. Brzeczek、L. Sat- terthwaite 和 D. Patterson，气相中的单分子红外光谱学，《自然》**621**，295（2023）。[7] A. Calvin、S. Kresch、M. Brzeczek、E. Lane、L. Sat- terthwaite、D. Hawkins 和 D. Patterson，单个多原子分子的转动分辨光谱学，《物理评论快报》**134**，153002（2025）。[8] S. Kirkpatrick、C. D. Gelatt 和 M. P. Vecchi，通过模拟退火进行优化，《科学》**220**，671（1983）。[9] P. Ludwig、S. Kosse 和 M. Bonitz，球形三维库仑晶体的结构，《物理评论E》**71**，046403（2005）。[10] D. Kiesenhofer、H. Hainzer、A. Zhdanov、P. C. Holz、M. Bock、T. Ollikainen 和 C. F. Roos，在整体式射频离子阱中控制含有100多个离子的二维库仑晶体，《PRX量子》**4**，020317 2023( )。[11] J. J. Thomson，论原子结构，《哲学杂志》**7**，237（1904）。[12] S. Smale，下个世纪的数学问题，《数学情报员》**20**，7（1998）。[13] L. T. Wille 和 J. Vennik，通过模拟退火实现静电能最小化，《物理学杂志A辑》**18**，L1113（1985）。[14] T. Erber 和 G. M. Hockney，球面上N个等量电荷的平衡构型，《物理学杂志A辑》**24**，L1369（1991）。[15] D. J. Wales 和 S. Ulker，针对汤姆孙问题表征的球形晶体结构与动力学，《物理评论B辑》**74**，212101（2006）。[16] M. Calef、W. Griffiths 和 A. Schulz，广义Thomson问题中稳定构型数量的估计，《统计物理学杂志》**160**，239（2015）。[17] P. Amore、V. Figueroa、E. Diaz、J. A. L’opez 和 T. Vin- cent，探索汤姆孙问题的能量景观：局部极小值与稳态，《统计物理学杂志》。《物理评论》**192**, 132 (2025)。[18] F. H. Stillinger，固有结构的指数级多重性，《物理评论E》**59**, 48 (1999)。[19] P. Amore 和 U. Zarate，圆盘中的汤姆孙问题，《物理评论E》**108**, 055302 (2023)。[20] L. T. Wille 和 J. Vennik，原子簇基态确定的计算复杂性，《物理学杂志A辑》**18**, L419 (1985)。[21] A. B. Adib，重新审视簇最小化问题的 NP 困难性，《物理学杂志A辑》**38**, 8487 (2005)。[22] D. Adamson、A. Deligkas、V. V. Gusev 和 I. Potapov，晶体结构预测中能量最小化的困难性，《基础信息学》**184**, 181 (2021), arXiv:1910.12026。[23] D. Adamson、A. Deligkas、V. V. Gusev 和 I. Potapov，周期性能量最小化的复杂性，载于 *International Symposium on Mathematical Foundations of Computer Science (MFCS 2022)* 241，LIPIcs，第（2022）卷，第 8:1–8:?? 页。[24] M. Emmerich、K. Pereverdieva 和 A. Deutz，欧几里得空间与超度量空间中最小 Riesz s能量子集选择的复杂性（2026），arXiv:2605.04715。[25] M. Emmerich，欧几里得平面上的 Riesz 能量子集选择是 NP困难的：从平面三次图上的伊辛模型归约而来（2026），arXiv:2608.23506。[26] M. Emmerich，直线上的有序点集及 ℓ_1阶梯上的 Riesz 能量子集选择的多项式时间算法（2026），arXiv:2606.16946。[27] S. Arora 和 B. Barak，*Computational Complexity: AModern Approach*（剑桥大学出版社，剑桥，2009）。[28] R. M. Karp 和 R. J. Lipton，非一致复杂性类与一致复杂性类之间的一些联系，载于 *Proceedings of the 12th ACM Symposium on Theory of Computing* 1980 302 （ACM，纽约，）第 . 页。[29] P. M. Pardalos 和 S. A. Vavasis，具有一个负特征值的二次规划是 NP困难的，《全球优化杂志》**1**, 15 (1991)。[30] T. F. Rønnow、Z. Wang、J. Job、S. Boixo、S. V. Isakov、D. Wecker、J. M. Martinis、D. A. Lidar 和 M. Troyer，量子加速的定义与检测，《科学》**345**, 420 2014( )。[31] V. M. Bedanov 和 F. M. Peeters，经典有限二维系统中带电粒子的有序排列与相变，《物理评论B辑》**49**, 2667 (1994)。[32] M. R. Garey、R. L. Graham 和 D. S. Johnson，一些 NP完全几何问题，载于 *Proceedings of the 8th ACM Symposium on Theory of Computing*（ACM，

纽约，1976）第 10 页。[33] E. Allender、P. B ̈urgisser、J. Kjeldgaard-Pedersen 和 P. B. Miltersen，数值分析复杂性，《SIAM计算杂志》**38**, 1987 (2009)。[34] O. Goldreich，承诺问题综述，载于 *Theoretical Computer Science: Essays in Memory of Shimon Even* 3895，《计算机科学讲义》，第（Springer，柏林，2006）卷，第 254 页。[35] M. R. Garey、D. S. Johnson 和 L. Stockmeyer，一些简化的NP完全图问题，《理论计算机科学》**1**, 237 (1976)。[36] B. Mohar，顶点图的面覆盖与亏格问题，《组合理论杂志B辑》**82**, 102 (2001)。[37] F. Barahona，伊辛自旋玻璃模型的计算复杂性，《物理学杂志A辑》**15**, 3241 (1982)。[38] C. Flamm、I. L. Hofacker、P. F. Stadler 和 M. T. Wolfinger，简并景观的势垒树，《物理化学杂志》**216**, 155 (2002)。[39]M. Mielenz、H. Kalis、M. Wittemer、F. Hakelberg、U. Warring、R. Schmied、M. Blain、P. Maunz、D. L. Moehring、D. Leibfried 和 T. Schaetz，适用于二维量子模拟的独立控制离子阵列，《自然·通讯》**7**，11839（2016）。[40] R. B. Linnet、I. D. Leroux、M. Marciante、A. Dantan 和 M. Drewsen，利用腔内光学晶格固定离子，《物理评论快报》**109**，233005（2012）。[41] A. Bylinskii、D. Gangloff 和 V. Vuleti´c，逐个原子调节离子晶体模拟器中的摩擦，《科学》**348**，1115 2015( )。[42] J. Schmidt、A. Lambrecht、P. Weckesser、M. Debatin、L. Karpa 和 T. Schaetz，离子库仑晶体的光学俘获，《物理评论 X》**8**，021028（2018）。[43] R. Tamassia 和 I. G. Tollis，线性时间的平面网格嵌入，《IEEE 电路与系统汇刊》**36**，1230（1989）。[44] A. Papakostas 和 I. G. Tollis，节省面积的正交绘图算法，《计算几何》**9**，83（1998）。