arXiv:2611.31242v1 [cond-mat.str-el] 23 Nov 2026

拓扑平带中由量子几何调控的莫特转变与涌现重费米子

Ya-Hui Zhang[1]
[1]约翰斯·霍普金斯大学 *William H. Miller III* 物理与天文学系，美国马里兰州巴尔的摩 *21218*
(日期：2026年11月24日)

具有非零陈数的平带不存在局域化的瓦尼尔轨道，因此引出了一个问题：莫特物理是否仍有可能实现？我们在相干轨道上引入哈伯德相互作用 U；这些轨道虽局域化，但数量过完备，并据此为该模型建立了单格点动力学平均场理论（DMFT）。仅考虑平带时，DMFT 无需诉诸狄拉克复现或远端能带电子，便能重现实验观测到的级联和逆压缩率锯齿结构。在非零整数填充时，我们发现绝缘体-金属转变受 s^2调控；该参数表示承载贝里曲率的布里渊区比例。对于 $N_f = 8$ 种味，填充为 $\nu = -2$时的莫特转变发生在 $s_c^2 \approx 0.025$，此时下哈伯德带顶到达费米能级，局域磁矩受到 Kondo 屏蔽，形成重费米液体（HFL）。重费米液体延伸至空穴掺杂侧 $\nu = -2 - x$；但在高于较小近藤温度 T_K 时，体系处于一种没有费米面的非相干坏金属态。在低温下，反洪德耦合 $J_A \sim 0.1U$ 会使重费米液体转变为赝能隙金属；该态具有小费米面，在较小的 x下以自旋极化子激发为主。我们提出，这种赝能隙金属是扭转双层石墨烯中超导的母态。这一框架也可能适用于其他拓扑能带，例如扭转 WSe_2中的能带。

引言。—莫特物理通常以局域瓦尼尔轨道上的哈伯德模型来表述，而对于拓扑能带来说，这是不可能的 [1]。然而，魔角扭转双层石墨烯（MATBG） [2], 的平带具有拓扑性质 [3–5], 却呈现出莫特物理的现象学特征：关联绝缘体和超导 [6–10], 具有高熵的局域磁矩 [11, 12], 每逢整数填充便发生级联相变 [13, 14] 以及隧穿中的赝能隙 [15–17]。在手征极限下，其能带是理想的陈能带，接近最低朗道能级 [5, 18–20], 这类能带能够承载分数陈绝缘体 [21–31], 而在陈基底中采用哈特里–福克理论，可以解释整数填充下的对称性破缺绝缘体 [32–39]。

在魔角双层石墨烯中，瓦尼尔障碍是脆弱的 [3, 4, 40, 41] ，可通过添加远端能带消除，由此得到拓扑重费米子模型 [42–44]: 局域 f 轨道与远端能带中的巡游 c 电子杂化。该模型推动了近藤晶格 [45–49]和动力学平均场理论（DMFT） [50–53]研究。将模型投影到平带后，巡游电子便不复存在，因此莫特物理和重费米子物理是否仍然存在并不显而易见。近期研究讨论了扭转双层石墨烯中的莫特物理，包括电荷中性处的莫特半金属 [54–59] ，以及与 Hubbard-I [53, 54, 57, 58, 60] 和 Hubbard-III [61–64]近似等效的结果。这些描述大多聚焦于单电子自能，未能充分纳入局域自旋磁矩。当哈伯德能带与局域磁矩解耦或仅与其弱耦合时，这些描述是成立的。作者近期的一项研究 [65] 指出，电荷载流子通过近藤交换 $J_K \sim U$与局域磁矩耦合，因此 Hubbard-I 和 Hubbard-III近似可能并不成立。于是问题随之而来：当非平庸的动量选择性哈伯德能带与局域磁矩强耦合时，什么理论框架能够同时描述二者?

我们通过考察相干轨道上的哈伯德模型来探讨这一问题。相干轨道由局域轨道投影到平带上得到，类似于最低朗道能级的相干态 [66, 67]（另见 [68, 69]）。这些轨道是局域的，但彼此过完备且非正交，其重叠由 s^2 决定，即布里渊区中承载贝里曲率的部分所占的比例。我们基于这些轨道建立了动力学平均场理论（DMFT） [70]，其浴完全源自这种重叠，量级为 s^2。我们的 DMFT 计算再现了光谱学中的级联现象 [14, 71, 72]以及逆压缩率中的锯齿结构 [12, 13, 73–77] ，这些现象在扭转双层石墨烯中均有观测到；计算还再现了偏离整数填充的逆压缩率极大值 [76]。因此，我们认为，这些现象或许不需要来自远端能带的巡游电子，也不需要狄拉克复现 [13]。由于模型仅保留平带，其数值计算成本低于此前包含远端能带的 DMFT 研究 [50–53], ，且更容易提取其核心物理。

对 s^2 进行微扰展开，可恢复 Hubbard-I 和 Hubbard-III近似，并得出直观涌现的重费米子图像：能带电子与正交费米子 F 杂化，而后者又通过近藤交换与局域磁矩耦合

变化 $J_K \sim U$。自洽动力学平均场理论在定性上不同于 Hubbard-I 和 Hubbard-III 近似，对于 $s^2 \gtrsim 0.02$ 发现了在非整数填充处发生的莫特转变，超过该转变后，局域磁矩

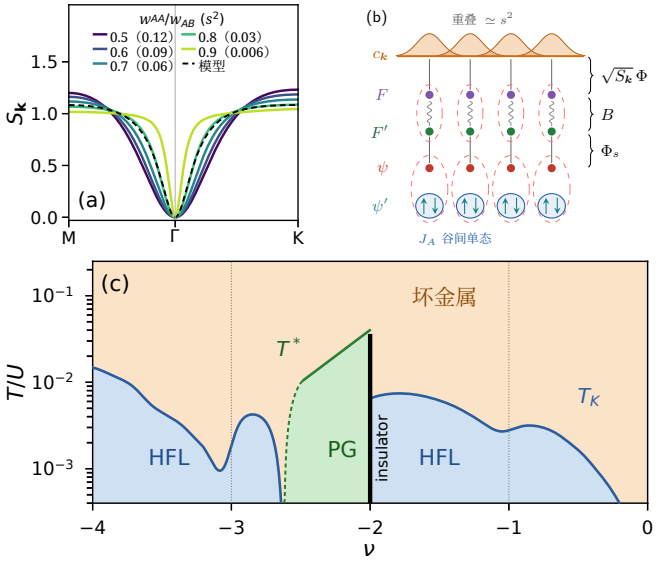


图 1. (a) 魔角双层石墨烯中相干轨道的权重 $S_{\boldsymbol{k}}$，对应若干个 w_{AA}/w_{AB}，括号内为 s^2。虚线表示 $s^2 = 0.03$处的洛伦兹纹理。(b) 方程 (8) 和 (10) 中的辅助粒子理论。能带电子 $c_{\boldsymbol{k}}$（叶瓣，相干轨道）与正交费米子 F耦合，F与携带磁矩 [65, 78], 的自旋子 F'耦合，而 F'与自旋极化子 ψ耦合。来自 J_A的谷间单态记为 ψ'。(c) 对于 $N_f = 8$、$s^2 = 0.05$和 $J_A^d = 0.1U$，不存在味序时的相图。随着降温，坏金属在近藤温度 T_K以下转变为重费米液体（HFL）；或者，在 $\nu = -2 - x$处，低于 T^*时转变为赝能隙金属（PG）。绿色实线表示动力学平均场理论（DMFT）得出的 T^*（附录 F 2），其虚线延伸部分为示意图。T_K来自不包含 J_A 的 DMFT。粗线标示 $\nu = -2$处的绝缘体。

会受到 Kondo屏蔽。对于 $s^2 = 0.05$，对于 TBG 的一个现实值 [见图 1(a)], , 低于近藤温度$T_K \lesssim 0.01U$ 的态在整个掺杂范围内都是重费米液体（HFL）。高于 T_K 时，它是没有费米面的坏金属，其自能可由辅助费米子理论拟合，其中包含 F和自旋子 F' [见图 1(b)]。在 $\nu = -2-x$处，小的反洪德耦合 $J_A \sim 0.1U$ 取代了 HFL，使其成为赝能隙金属；在低相干温度 $T_{\rm coh} \sim U/800$以下，该赝能隙金属变为第二种费米液体（sFL） [78–81] ，并具有小费米面。为了对这一 sFL相进行解析描述，我们需要引入另一对辅助费米子 ψ 和 ψ'。我们的理论描述了 TBG 的正常态 [见图 1(c)], 并确立了由量子几何而非动能调控莫特转变的可能性。

模型与动力学平均场理论。—我们考虑 N_f 种味，每种味都有一条陈数为 $C = \pm 1$的严格平带。每个格点 $\boldsymbol{R}_i$上的局域轨道，其布洛赫态上的形状因子为 $\mu_f(\boldsymbol{k})$，权重为 $w_f = |\mu_f|^2$，其布里渊区平均值为 W_f，定义了相干轨道

$$\hat{f}_i = \frac{1}{\sqrt{N_M}} \sum_{\boldsymbol{k}} e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}_i} \frac{\mu_f(\boldsymbol{k})}{\sqrt{W_f}} c_{\boldsymbol{k}}, \qquad S_{\boldsymbol{k}} = \frac{w_f(\boldsymbol{k})}{W_f}, \quad (1)$$

它是归一化的，$\langle S_{\boldsymbol{k}} \rangle_{\boldsymbol{k}} = 1$，但与相邻轨道重叠：$\{\hat{f}_i, \hat{f}_j^\dagger\} = S_{ij} = N_M^{-1} \sum_{\boldsymbol{k}} e^{i\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{R}_i - \boldsymbol{R}_j)} S_{\boldsymbol{k}}$，其中$S_{ii} = 1$。在陈能带中，$\mu_f$ 会在一点 $\boldsymbol{k}_0 = 0$处消失，其周围的相位绕转 [66, 67]。在该点附近，$w_f(\boldsymbol{k}) \simeq k^2/(k^2 + k_*^2)$，而 $s^2 = \pi k_*^2/\Omega_{\rm BZ}$ 是满足 $w_f < 1/2$的区域占整个布里渊区的比例。一个轨道与所有其他轨道的总重叠为 $\eta_S^2 = \sum_{j \neq i} |S_{ij}|^2 = \langle S_{\boldsymbol{k}}^2 \rangle_{\boldsymbol{k}} - 1 \simeq s^2$。空间变化磁场中的最低朗道能级可实现此能带，其中 $s^2 \simeq \bar{B}/B_0$ 对应于 $B_0 \gg \bar{B}$，即平均场与格点处磁场之比（附录 A）。在魔角双层石墨烯中，f 可以是投影到平带上的拓扑重费米子模型 [42] 的 f 轨道，也可以直接由连续体平带构造。随后，s^2 随层间隧穿比值 w_{AA}/w_{AB} 从 $s^2 = 0.09$ 降至 $s^2 = 0.03$，此时 w_{AA}/w_{AB}从 0.6 变为 0.8 [图 1(a)]。我们只在这些轨道上加入 Hubbard 相互作用 U，

$$H = -\mu \sum_{\boldsymbol{k}} c_{\boldsymbol{k}}^\dagger c_{\boldsymbol{k}} + \frac{U}{2} \sum_i \left(\hat{n}_{fi} - \frac{N_f}{2} \right)^2, \quad (2)$$

其中 $\hat{n}_{fi} = \sum_\alpha \hat{f}_{i\alpha}^\dagger \hat{f}_{i\alpha}$。这里，$n_c$ 是每格点能带填充，且 $\nu = n_c - N_f/2$。动力学平均场理论将自能视为在 $\hat{f}$轨道上局域：$\Sigma_f(z) \sum_i \hat{f}_i^\dagger \hat{f}_i = \Sigma_f(z) \sum_{\boldsymbol{k}} S_{\boldsymbol{k}} c_{\boldsymbol{k}}^\dagger c_{\boldsymbol{k}}$。对于 $\zeta = z + \mu$，能带电子和局域轨道随后按如下方式传播：

$$G_c(\boldsymbol{k}, z) = \frac{1}{\zeta - S_{\boldsymbol{k}} \Sigma_f(z)}, \qquad G_f^{\rm loc}(z) = \langle S_{\boldsymbol{k}} G_c(\boldsymbol{k}, z) \rangle_{\boldsymbol{k}}. \quad (3)$$

$\hat{}$动力学平均场理论的杂质位点是一个 f 轨道，具有相同的哈伯德相互作用以及一个额外的浴 $\Delta_f(z)$。要求其格林函数$G_f^{\rm imp} = (\zeta - \Delta_f - \Sigma_f)^{-1}$等于 $G_f^{\rm loc}$，即可得到自洽 $\Delta_f = \zeta - \Sigma_f - 1/G_f^{\rm loc}$。正交归一轨道的浴为零，$S_{\boldsymbol{k}} \equiv 1$：它仅来自混合态，$0 < S_{\boldsymbol{k}} < 1$。我们采用杂化展开连续时间量子蒙特卡罗（CT-HYB）的片段形式 [82–85] 求解杂质位点，适用于 $U/3200 \leq T \leq U$。所有结果均针对$N_f = 8$ 和 $S_{\boldsymbol{k}} = W_f^{-1} k^2/(k^2 + k_*^2)$，并按照式（A4）在三角晶格上进行正则化。

在 s^2 及涌现重费米子方面的拓展。—在$s^2 = 0$，每个格点都是一个孤立的 SU(N_f) 原子。当μ 处于其某个电荷能隙内时，它具有整数电荷 n_f。当 $q = n_f/N_f$时，原子自能有一个单极点，

$$\Sigma_{\rm at}(z) = \Sigma_\infty + \frac{\Phi^2}{z - \epsilon_F}, \qquad \Phi^2 = U^2 q(1-q). \quad (4)$$

上述自能可由辅助费米子框架中的平均场理论生成 [57, 58, 65, 78], 其中

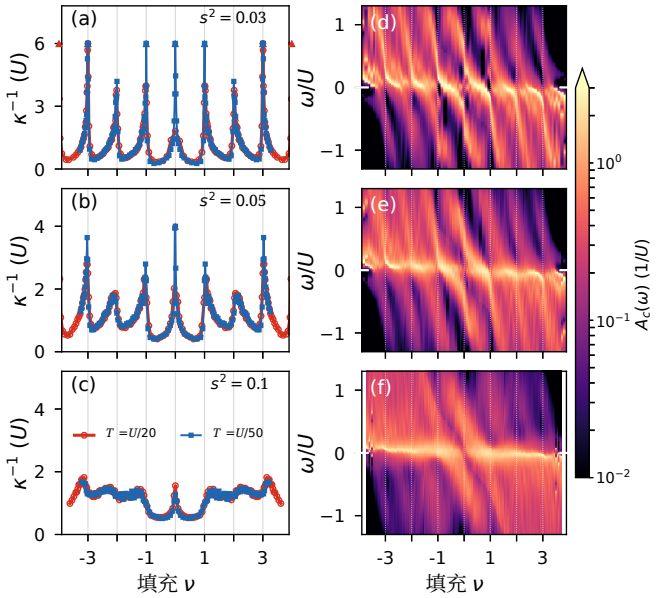


图 2. $s^2 = 0.03$、0.05 0.10 $\kappa^{-1} = \mu/n_c$ 和时平带（$N_f = 8$）内的级联。(a–c) $T = U/20$（红色）和 $U/50$（蓝色）处的逆压缩率 d d。(d–f) 对数色标下，$T = U/20$ 处每种味的局域谱函数 $A_c(\omega)$ 随填充的变化。$\nu > 0$ 由粒子-空穴对称性得出。

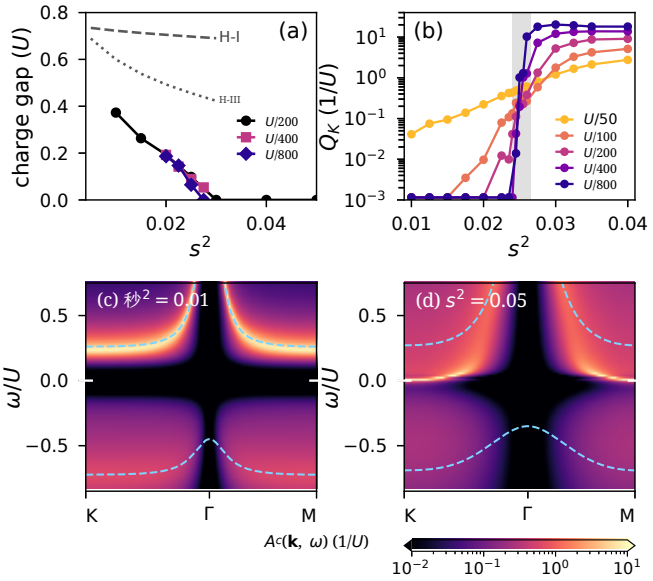


图 3. $\nu = -2$ ($N_f = 8$)处的莫特转变。(a) 电荷能隙，即 $n_c(\mu)$ 平台的宽度，随 s^2的变化。虚线和点线分别表示 Hubbard-I 和 Hubbard-III。(b) 平台中心处布里渊区角点 $Q_K = -\beta G_c(K, \beta/2)/\pi$的费米能级处权重，不作延拓。低于$10^{-3}$ 的值绘于坐标轴底部，阴影带标示转变。(c,d) $T = U/400$ 处$s^2 = 0.01$ 和 0.05 时的 $A_c(\boldsymbol{k}, \omega)$，后者低于 T_K。虚线表示式 (4) 中的 Hubbard-I 能带。

物理电子 $c_{\boldsymbol{k}}$ 与处于能级 ϵ_F 的辅助费米子 F 以振幅 $\sqrt{S_{\boldsymbol{k}}}\,\Phi$耦合。在 s^2的线性阶，我们直接使用 $\Sigma_{\rm at}(z)$来生成浴 $\Delta_f(z)$，其谱密度为 $\rho_\Delta(\omega) = s^2|\omega + \mu|$。由此浴，我们通过$F$的自能 Σ_F 得到对 Σ_f 的修正，

$$\Sigma_f(z) = \Sigma_\infty + \frac{\Phi^2}{z - \epsilon_F - \Sigma_F(z)}, \tag{5}$$

在这一阶近似下，其形式为

$$\begin{aligned} \Sigma_F(z) &= (N_f + 1)\Delta_f(z), \\ \Gamma_F(\omega) &\equiv -\operatorname{Im}\Sigma_F(\omega + i0^+) = (N_f + 1)\,\pi s^2|\omega + \mu|, \end{aligned} \tag{6}$$

其中，Δ_f 的静态部分吸收到化学势中，Γ_F 是 F的散射率，所得结果与 Hubbard 第三近似 [62, 86]一致。偏离非零整数填充时，在其空穴侧，费米能级位于 F能带中，且散射率$\Gamma_F(0) = (N_f + 1)\pi s^2|\mu|$ 很大，因为 $|\mu| \simeq |\nu|U$。该散射率可解释为 F 与 SU(N_f) 磁矩 $S^{\alpha\beta}$ [65]之间近藤交换的玻恩近似，

$$H_K = \frac{J_K}{N_M}\sum_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'}\phi_{\boldsymbol{k}}\phi_{\boldsymbol{k}'}F^\dagger_{\boldsymbol{k}\alpha}S^{\alpha\beta}F_{\boldsymbol{k}'\beta}, \qquad J_K = \frac{U\Phi^2}{E_+E_-} \sim U, \tag{7}$$

与 $E_\pm$ 添加和移除一个电子的能量以及 $\phi_{\boldsymbol{k}} \propto 1 - S_{\boldsymbol{k}}$一个形状因子（附录C 4）。

有效无量纲耦合为 $g = N_f J_K \rho_F(0) = N_f U \rho_\Delta(0)/(E_+E_-)$，其中 $\rho_F = \rho_\Delta/\Phi^2$是 F的态密度，量级为 s^2。因此，上述 $O(s^2)$ 展开是 g中的主导阶；然而，g 会随重整化而增长，$dg/d\ln D = -g^2$，并在近藤温度 $T_K \simeq De^{-1/g}$处达到强耦合，此时截断 $D \approx 0.08U$ 是 F 能带的宽度（附录 E1）。当 T达到 T_K时，微扰理论失效，因此我们转而进行完整的动力学平均场理论计算。

级联。—现在我们转向动力学平均场理论的结果。首先，我们扫描 ν，并展示逆压缩率和局域谱函数 $A_c(\omega)$，见图 2。在 $s^2 = 0.03$ 处，逆压缩率在每个整数填充处达到峰值，随后在其空穴侧大致按$1/\sqrt{\delta\nu}$ 随距离$\delta\nu$ 衰减，仿照了从魔角双层石墨烯中相同的行为推断出的“狄拉克复现” [13]。不过在这里，巡游电子和局域磁矩都来自ˆ轨道 f。在谱函数中，一个平坦的哈伯德能带位于两个整数填充之间的费米能级处，并在每个整数填充处重置 [14]。随着 s^2 增大，κ^{-1} 的峰值逐渐远离整数填充处，而近藤共振在每个填充处都保持钉扎在费米能级上，这表明形成了重费米液体 [，见图2(c,f)]。这表明，可由 s^2 调控非零整数填充处的绝缘体-金属转变。

莫特转变。——我们在 ν =处说明该相变

-2。电荷能隙在相变附近闭合，我们将该相变定位于 $s_c^2 \simeq 0.025$ [图3(a,b)]，，且Hubbard-I与Hubbard-III近似在相变之前失效。布里渊区角点处费米能级上的谱权重 $Q_K = -\beta G_c(K,\beta/2)/\pi$在冷却至 s_c^2以下时下降，并在其以上增大 [图3(b)]。在 s_c^2 以下，电子谱具有清晰的能隙。在其以上，磁矩被Kondo屏蔽，且一条重能带穿过费米能级[图3(c,d)]。能隙随 F 的能带上移并触及费米能级而闭合，并在此处屏蔽局域磁矩，因此该金属在 T_K 以下为重费米液体（附录D 2）。在 $\nu = -1$ 和 -3 处，类似的相变分别位于 $s_c^2 \simeq 0.033$ 和0.027（附录D）。

重费米液体与坏金属。——超出 s_c^2 后，磁矩在每一填充 [图4(a)]处均被屏蔽。在较低的近藤温度 T_K 以下，该态始终为重费米液体（重费米液体），并具有满足Luttinger定理的大费米面 [图4(c,f)]。我们不借助延拓来确定费米面，而是将其取为费米能级处权重最大的等值线，该权重为电子或 F的 $Q_\beta(\boldsymbol{k}) = -\beta G(\boldsymbol{k},\beta/2)/\pi$。在$T_K$ 以上，局域磁矩未被完全屏蔽，且不存在费米面，因为初生的重能带位于费米能级之上 [图4(b)]。降温时从坏金属到重费米液体的交叉，可由辅助粒子理论在统一框架中加以刻画，其中取 c、 F 和 F'[图1(b)]，，式(5)中的 Σ_F 变为

$$\Sigma_F(z) \simeq \frac{B^2}{z - \epsilon_{F'} + i\Gamma_{F'}} + \Sigma_{\mathrm{inc}}(z). \tag{8}$$

电子与 F杂化， F则通过 $B(F_i^\dagger F_i' + \mathrm{H.c.})$与自旋子$F'$杂化，这是Kondo屏蔽相 [87]的标准平均场描述。我们将这些参数拟合到DMFT自能。 Σ_{inc} 主要是 F的Hubbard-III散射率，拟合将自旋子能级置于费米能级以下， $\epsilon_{F'} < 0$。在 $T \ll T_K$处， $\Gamma_{F'} \to 0$ 和 Σ_{inc} 在费米能级处消失，由此出现重能带，其主要由 c 和F'组合而成，并在大费米面上穿过费米能级。在 T_K 以上，自旋子 F' 获得散射率$\Gamma_{F'} \propto T$，由此决定电子线性于T的散射率， $-\mathrm{Im}\ \Sigma_f(0) \simeq (\Phi^2/B^2)\Gamma_{F'} \approx 3.5\text{–}3.7\, k_B T$，位于 $s^2 = 0.05$。 F 在费米能级处也快速衰变。坏金属具有费米能级以上的重能带，其宽度与温度呈线性关系，半高处约为 $3\, k_B T$。魔角双层石墨烯中观测到的线性于T的电阻率 [88–90] 是否会在坏金属中T_K 以上出现，仍有待观察。

赝能隙金属。—在 $\nu = -2 - x$ 反洪特耦合会从根本上改变物理性质。在魔角双层石墨烯中，它有利于谷间自旋单态 [79]，，我们用一种简单的形式对其进行建模，

$$H_A^d = -J_A^d \sum_{i,o=\pm} \Pi_{io}^\dagger \Pi_{io},$$
$$\Pi_o^\dagger = \tfrac{1}{\sqrt{2}}\left(\hat{f}_{oK\uparrow}^\dagger \hat{f}_{oK'\downarrow}^\dagger - \hat{f}_{oK\downarrow}^\dagger \hat{f}_{oK'\uparrow}^\dagger\right), \tag{9}$$

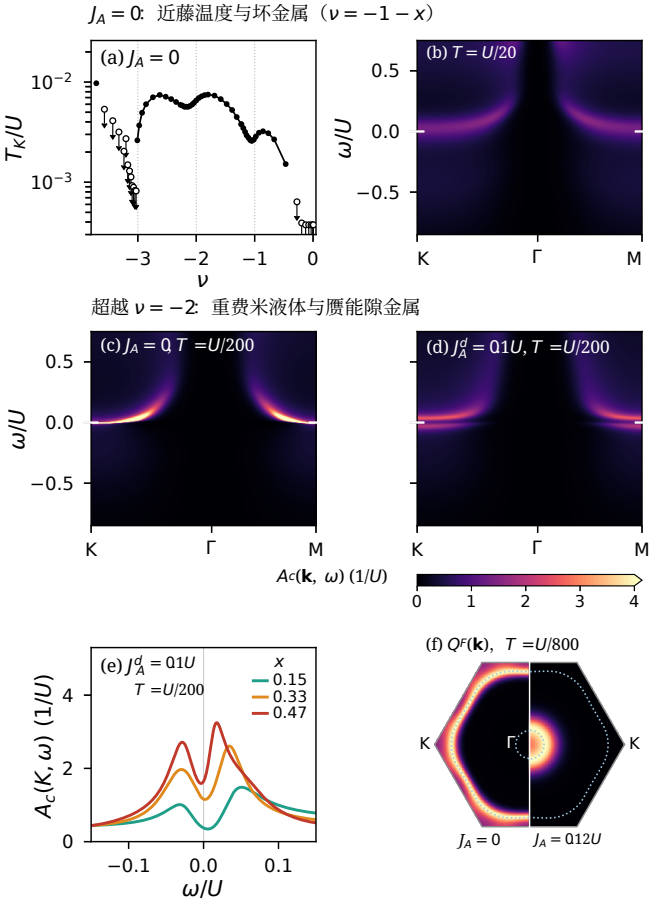


图 4. 掺杂金属（$N_f = 8$, $s^2 = 0.05$）。(a) 不含反洪德耦合时，近藤温度随填充范围的变化。实心符号表示自旋磁化率达到饱和，带箭头的空心符号表示 T_K 的上限。(b) 坏金属：在不含反洪德耦合时，$T = U/20 \simeq 13\, T_K$ 下 $x \simeq 0.2$ 超过 $\nu = -1$ 后的 $A_c(\boldsymbol{k},\omega)$。(d) 下方的色标供 (b–d) 共用，并在超过 $4/U$ 后饱和。(c,d) 在 $T = U/200$ 时， $\nu = -2$ 以上的 $A_c(\boldsymbol{k},\omega)$：不含反洪德耦合的重费米液体（$x = 0.34$, $T \simeq 0.8\, T_K$ $J_A^d = 0.1U$），以及采用式 (9) 的赝能隙金属（$x = 0.33$）。(e) 布里渊区角点处的赝能隙， $A_c(K,\omega)$，对于 $x = 0.15$，在 $T = U/200$ 时具有 $J_A^d = 0.1U$，0.33 0.47 和 。(b–e) 面板使用最大熵方法进行解析延拓。(f) 未经解析延拓的 $U/800$ 处费米面。图中显示了在不含 $\nu = -2$、且 $x \simeq 0.2$ 超过 $\nu = -2$ 时，费米能级处 F 的权重 $Q_F(\boldsymbol{k}) = -\beta G_F(\boldsymbol{k},\beta/2)/\pi$；左图不含式 (F1) 的 $J_A = 0.12U$，右图含有该项；各自均按最大值归一化。点线表示分别包围 x 和 $6 + x$ 个空穴的等高线。

其中 $o = \pm$ 是角动量为 $L_z = \pm 1$的轨道，因此该项有利于形成 $L_z = \pm 2$的轨道内谷间自旋单态。我们采用矩阵形式的 CT-HYB 求解杂质问题 [91] （附录F）。当耦合超过 T_K 的数倍时，磁矩形成局域单态，破坏近藤屏蔽，并在费米能级处的重能带中打开大小为 $\sim J_A^d$ 的赝能隙 [图4（d、e）]。方程（ J_A F1）中的另一项，它

有利于形成轨道间单态，会产生非常相似的赝能隙物理特性，因此我们在下文的拟合以及图 4（f）中采用该项。为了描述从坏金属到赝能隙金属的交叉，我们引入第二对辅助费米子 ψ 和 ψ'，以及 F 和 F' [图 1（b）]。费米子 ψ' 是束缚成局域单态乘积态的自旋子，而方程（8）中的自旋子 F' 与ψ通过 Φ_s（$F_i'^{\dagger}\psi_i + \text{H.c.}$）杂化，从而打开赝能隙，$\Delta_{\text{PG}} \sim \Phi_s$。自能 F 变为

$$\Sigma_F(z) = \frac{B^2}{z - \epsilon_{F'} - \dfrac{\Phi_s^2}{z - \epsilon_\psi + i\Gamma_\psi}} + \Sigma_{\text{inc}}(z), \qquad (10)$$

其与 DMFT 自能的拟合误差仅为百分之几。赝能隙在温度 T^* 以下打开，该温度见图 1(c)，量级为 J_A^d。在 T^* 与低得多的相干温度 $T_{\text{coh}} \sim U/800$之间， ψ 能带恰好位于费米能级下方，因此同样不存在费米面。低于 T_{coh} 时，该能带的顶端在 Γ处升至费米能级以上，主要由 ψ 携带的准粒子形成一个约含 x 个空穴的小费米面，见图 [4(f)], ，这对应于文献 [79]中的第二种费米液体（sFL）相。我们将 ψ 识别为自旋极化子，即与另一谷的自旋束缚在一起的电子。在 DMFT 中允许谷间相干（IVC）序后，它仅在 T^*以下才形成，因此对称性破缺并非赝能隙形成的必要条件。

摘要。——仅包含相干轨道上 Hubbard U 的模型，便能捕捉魔角双层石墨烯的许多关键特征。该模型无需远端能带或狄拉克复现，就能再现级联和逆压缩率的锯齿结构。相反，模型呈现出一种重费米子图像：巡游电子和局域磁矩ˆ来自同一轨道 f，它们之间的近藤耦合由相干轨道的重叠 s^2 控制，而该重叠取决于贝里曲率的集中程度。在非零整数填充下，莫特绝缘体通过近藤屏蔽转变为金属。在$\nu = -2 - x$ ，正常态在高温下是坏金属，降至 T^*以下则交叉转变为赝能隙金属；我们预期赝能隙金属是超导体 [7, 79]的正常态。只有在低于 $T_{\text{coh}} \sim U/800$时，它才会成为具有小费米面的费米液体；对于 $U \approx 30$ meV，这一温度约为0.43 K，似乎低于超导体的临界温度。因此，在 T_c，没有费米面的金属会转变为超导态，而相干准粒子仅在更低温度下才形成。这种情形超出了传统超导图像的范畴，值得进一步研究。更广泛地说，我们建立了一个研究拓扑能带中莫特物理的框架，并预期该框架也适用于其他体系，例如扭转 WSe_2 [92–96], ；在这些体系中，动能不可忽略，并与量子几何共同推动莫特转变。

致谢。——我使用 Claude Opus 5.5，通过 TRIQS 库 [85]实现了动力学平均场理论计算。关于在相干轨道上应用单格点动力学平均场理论，以及在辅助粒子框架下对其进行解释的构想，均出自我本人。本研究得到美国国家科学基金会资助，项目编号 DMR-2237031。

[1] C. Brouder、G. Panati、M. Calandra、C. Mourougane 和 N. Marzari，《绝缘体中瓦尼尔函数的指数局域化》，《物理评论快报》98，046402（2007年）。[2] R. Bistritzer 和 A. H. MacDonald，《扭转双层石墨烯中的莫尔能带》，Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A. 108，12233（2011年）。[3] H. C. Po、L. Zou、A. Vishwanath 和 T. Senthil，《扭转双层石墨烯中莫特绝缘行为和超导性的起源》，Physical Review X 8，031089（2018）。[4] Z. Song、Z. Wang、W. Shi、G. Li、C. Fang 和 B. A. Bernevig，《扭转双层石墨烯中的所有魔角均具有拓扑性》，《物理评论快报》123，036401（2019年）。[5] G. Tarnopolsky、A. J. Kruchkov 和 A. Vishwanath，《扭转双层石墨烯中魔角的起源》，《物理评论快报》122，106405（2019年）。[6] Y. Cao、V. Fatemi、A. Demir、S. Fang、S. L. Tomarken、J. Y. Luo、J. D. Sanchez-Yamagishi、K. Watanabe、T. Taniguchi、E. Kaxiras、R. C. Ashoori 和 P. Jarillo-Herrero，《魔角石墨烯超晶格半填充时的关联绝缘体行为》，《自然》556，80（2018年）。[7] Y. Cao、V. Fatemi、S. Fang、K. Watanabe、T. Taniguchi、E. Kaxiras 和 P. Jarillo-Herrero，《魔角石墨烯超晶格中的非常规超导性》，《自然》556，43（2018年）。[8] M. Yankowitz、S. Chen、H. Polshyn、Y. Zhang、K. Watanabe、T. Taniguchi、D. Graf、A. F. Young 和 C. R. Dean，《调控扭转双层石墨烯中的超导性》，《科学》363，1059（2019年）。[9] X. Lu、P. Stepanov、W. Yang 等，《魔角双层石墨烯中的超导体、轨道磁体和关联态》，《自然》574，653（2019年）。[10] Y. Cao、D. Rodan-Legrain、J. M. Park、N. F. Q. Yuan、K. Watanabe、T. Taniguchi、R. M. Fernandes、L. Fu 和 P. Jarillo-Herrero，《超导魔角石墨烯中的向列性与竞争序》，《科学》372，264 2021( )。[11] Y. Saito、F. Ge、L. Rademaker、K. Watanabe、T. Taniguchi、D. A. Abanin 和 A. F. Young，《扭转双层石墨烯中的同位旋波梅兰丘克效应》，《自然》592，220（2021年）。[12] A. Rozen、J. M. Park、U. Zondiner、Y. Cao、D. Rodan-Legrain、T. Taniguchi、K. Watanabe、Y. Oreg、A. Stern、E. Berg、P. Jarillo-Herrero 和 S. Ilani，《魔角石墨烯中波梅兰丘克效应的熵证据》，《自然》592，214（2021年）。[13] U. Zondiner、A. Rozen、D. Rodan-Legrain、Y. Cao、R. Queiroz、T. Taniguchi、K. Watanabe、Y. Oreg、F. von Oppen、A. Stern、E. Berg、P. Jarillo-Herrero 和 S. Ilani，《魔角石墨烯中的相变级联与狄拉克态复苏》，《自然》582，203（2020年）。

[14]D. Wong、K. P. Nuckolls、M. Oh、B. Lian、Y. Xie、S. Jeon、K. Watanabe、T. Taniguchi、B. A. Bernevig 和 A. Yazdani, 《魔角扭转双层石墨烯中的电子跃迁级联》, 《自然》582, 198（2020年）。[15] M. Oh、K. P. Nuckolls、D. Wong、R. L. Lee、X. Liu、K. Watanabe、T. Taniguchi 和 A. Yazdani, 《扭转双层石墨烯中非常规超导性的证据》, 《自然》600, 240（2021年）。[16] J. M. Park、S. Sun、K. Watanabe、T. Taniguchi 和 P. Jarillo-Herrero, 《莫尔石墨烯中节点型超导能隙的实验依据》, 《科学》391, 79（2026年）。[17] H. Kim、G. Rai、L. Crippa、D. Călugăru、H. Hu、Y. Choi、L. Kong、E. Baum、Y. Zhang、L. Holleis、K. Watanabe、T. Taniguchi、A. F. Young、B. A. Bernevig、R. Valentí、G. Sangiovanni、T. Wehling 和 S. Nadj-Perge, 《解析莫尔超导体中的谷间隙与多体共振》, 《自然》650, 592（2026年）。[18] J. Wang、J. Cano、A. J. Millis、Z. Liu 和 B. Yang, 《平带中几何与相互作用的精确朗道能级描述》, 《物理评论快报》127, 246403（2021年）。[19] F. K. Popov 和 A. Milekhin, 《扭转双层石墨烯的隐蔽波函数：作为朗道能级的平带》, Physical Review B 103, 155150（2021年）。[20] P. J. Ledwith、A. Vishwanath 和 E. Khalaf, 《手性扭转多层石墨烯中具有任意陈数的一族理想陈平带》, 《物理评论快报》128, 176404（2022年）。[21] E. Tang、J.-W. Mei 和 X.-G. Wen, 《高温分数量子霍尔态》, 《物理评论快报》106, 236802 2011( )。[22] K. Sun、Z. Gu、H. Katsura 和 S. Das Sarma, 《具有非平庸拓扑的近乎平坦能带》, 《物理评论快报》106, 236803（2011年）。[23] T. Neupert、L. Santos、C. Chamon 和 C. Mudry, 《零磁场下的分数量子霍尔态》, 《物理评论快报》106, 236804（2011年）。[24] D. N. Sheng、Z.-C. Gu、K. Sun 和 L. S heng, 《不存在朗道能级时的分数量子霍尔效应》, Nature Communications 2, 389（2011年）。[25] N. Regnault 和 B. A. Bernevig, 《分数陈绝缘体》, Physical Review X 1, 021014（2011年）。[26] S. A. Parameswaran、R. Roy 和 S. L. Sondhi, 《拓扑平带中的分数量子霍尔物理》, 《物理学报告》14, 816（2013年）。[27] J. Cai、E. Anderson、C. Wang 等, 《扭转 $MoTe_2$, 《自然》622, 63（2023年）。[28] Y. Zeng、Z. Xia、K. Kang 等, 《莫尔 MoTe 中分数陈绝缘体的热力学证据$_2$, 《自然》622, 69（2023年）。[29] H. Park、J. Cai、E. Anderson 等, 《分数化量子化反常霍尔效应的观测》, 《自然》622, 74 2023( )。[30] F. Xu、Z. Sun、T. Jia 等, 《扭转双层 $MoTe_2$, Physical Review X 13, 031037（2023年）。[31] Z. Lu、T. Han、Y. Yao 等, 《多层石墨烯中的分数量子反常霍尔效应》, 《自然》626, 759（2024年）。[32] J. Kang 和 O. Vafek, 《部分填充扭转双层石墨烯窄能带的强耦合相》, 《物理评论快报》122

’ 246401 (2019年).

[33] N. Bultinck、E. Khalaf、S. Liu、S. Chatterjee、A. Vish- wanath 和 M. P. Zaletel, 《偶数整数填充下魔角石墨烯的基态与隐对称性》, Physical Review X 10, 031034（2020年）。[34] B. Lian、Z.-D. Song、N. Regnault、D. K. Efetov、A. Yaz- dani 和 B. A. Bernevig, 《扭转双层石墨烯 IV：精确绝缘体基态与相图》, Physical Review B 103, 205414（2021年）。[35] Y. H. Kwan、G. Wagner、T. Soejima、M. P. Zaletel、S. H. Simon、S. A. Parameswaran 和 N. Bultinck, 《扭转双层石墨烯所有非零整数填充下的 Kekulé 螺旋序》, Physical Review X 11, 041063（2021年）。[36] G. Wagner、Y. H. Kwan、N. Bultinck、S. H. Simon 和 S. A. Parameswaran, 《扭转双层石墨烯正常态的全局相图》, 《物理评论快报》128, 156401（2022年）。[37] J. P. Hong、T. Soejima 和 M. P. Zaletel, 《利用扫描隧道显微术探测魔角石墨烯中的对称性破缺》, 《物理评论快报》129, 147001 2022( )。[38] T. Wang、D. E. Parker、T. Soejima、J. Hauschild、S. Anand、N. Bultinck 和 M. P. Zaletel, 《填充 $\nu = -3$下魔角石墨烯的基态序：一项全规模密度矩阵重整化群研究》, Physical Review B 108, 235128（2023年）。[39] C. Repellin、Z. Dong、Y.-H. Zhang 和 T. Senthil, 《莫尔超晶格窄能带中的铁磁性》, 《物理评论快报》124, 187601（2020年）。[40] H. C. Po、L. Zou、T. Senthil 和 A. Vishwanath, 《忠实的紧束缚模型与魔角双层石墨烯的脆弱拓扑》, Physical Review B 99, 195455（2019年）。[41] J. Ahn、S. Park 和 B.-J. Yang, 《空间—时间反演对称二维系统中 Nielsen-Ninomiya 定理的失效与脆弱拓扑：在魔角扭转双层石墨烯中的应用》, Physical Review X 9, 021013（2019年）。[42] Z.-D. Song 和 B. A. Bernevig, 《作为拓扑重费米子问题的魔角扭转双层石墨烯》, 《物理评论快报》129, 047601（2022年）。[43] H. Shi 和 X. Dai, 《扭转双层石墨烯系统的重费米子表示》, Physical Review B 106, 245129 2022( )。[44] D. Călugăru、M. Borovkov、L. L. H. Lau、P. Coleman、Z.-D. Song 和 B. A. Bernevig, 《作为拓扑重费米子的扭转双层石墨烯：II. 模型参数的解析近似》, 低温物理 49, 640（2023年）。[45] Y.-Z. Chou 和 S. Das Sarma, 《魔角扭转双层石墨烯中的近藤晶格模型》, 《物理评论快报》131, 026501（2023年）。[46] H. Hu、B. A. Bernevig 和 A. M. Tsvelik, 《魔角扭转双层石墨烯的近藤晶格模型：洪德定则、局域磁矩涨落与低能有效理论》, 《物理评论快报》131, 026502（2023年）。[47] H. Hu、G. Rai、L. Crippa、J. Herzog-Arbeitman、D. Călugăru、T. Wehling、G. Sangiovanni、R. Valentí、A. M. Tsvelik 和 B. A. Bernevig, 《掺杂应变扭转双层石墨烯中的对称近藤晶格态》, 《物理评论快报》131, 166501（2023年）。[48] G.-D. Zhou、Y.-J. Wang、N.-H. Tong 和 Z.-D. Song, 《扭转双层石墨烯中的近藤相》, Physical Review B 109, 045419（2024年）。[49] L. L. H. Lau 和 P. Coleman, 《扭转双层石墨烯的拓扑混合价模型》, Physical Review X 15,

021028（2025年）。[50] A. Datta、M. J. Calderón、A. Camjayi 和 E. Bascones, 《扭转双层石墨烯中无对称性破缺的重准粒子与级联》, Nature Communications 14, 5036 2023( )。[51] G. Rai、L. Crippa、D. Călugăru、H. Hu、F. Paoletti、L. de' Medici、A. Georges、B. A. Bernevig、R. Valentí、G. Sangiovanni 和 T. Wehling, 《魔角扭转双层石墨烯中的动力学关联与序》, Physical Review X 14, 031045（2024年）。[52] S. Youn、B. Goh、G.-D. Zhou、Z.-D. Song 和 S.-S. B. Lee, 《扭转双层石墨烯中的洪德特性：关联能隙与配对》, arXiv:2412.03108（2024年）。[53] D. Călugăru、H. Hu、L. Crippa、G. Rai、N. Reg- nault、T. O. Wehling、R. Valentí、G. Sangiovanni 和 B. A. Bernevig, 《利用迭代微扰理论获得莫尔石墨烯重费米子的谱函数》, arXiv:2509.18256（2025年）。[54] P. J. Ledwith、J. Dong、A. Vishwanath 和 E. Khalaf, 《扭转双层石墨烯陈能带中的非局域磁矩与莫特半金属》, Physical Review X 15, 021087 2025( )。[55] P. J. Ledwith、A. Vishwanath 和 E. Khalaf, 《集中拓扑产生的奇异载流子：作为扭转双层石墨烯缺失谱权重起源的狄拉克三体子》, arXiv:2505.08779（2025年）。[56] S. Shan、C. Huang、P. Ledwith 和 Z. Y. Meng, 《扭转双层石墨烯中的三体子激发：量子蒙特卡罗研究》, arXiv:2607.27745（2026年）。[57] J.-Y. Zhao、B. Zhou 和 Y.-H. Zhang, 《扭转双层石墨烯中的混合价莫特绝缘体与复合激发》, Physical Review B 112, 235144（2025年）。[58] J.-Y. Zhao、B. Zhou 和 Y.-H. Zhang, 《扭转双层石墨烯中的拓扑莫特局域化与赝能隙金属》, Physical Review B 112, 085107（2025年）。[59] B. Zhou、T. Wang 和 Y.-H. Zhang, 《一维哈伯德模型中的量子莫特半金属》, arXiv:2607.19465（2026年）。[60] H. Hu、Z.-D. Song 和 B. A. Bernevig, 《扭转双层石墨烯的投影可解拓扑重费米子模型》, arXiv:2502.14039（2025年）。[61] Y. Vituri 和 E. Berg, 《拓扑重费米子模型的受控圈图展开》, arXiv:2604.14278（2026年）。[62] N. Wei、F. von Oppen 和 L. I. Glazman, 《拓扑重费米子的寿命与谱函数》, arXiv:2604.14369（2026年）。[63] H. Hu、Y. Shao、L. Crippa、D. Călugăru、G. Sangio- vanni、T. Wehling、L. I. Glazman 和 B. A. Bernevig, 《整数填充下扭转双层石墨烯的寿命：解析结果》, arXiv:2604.14303（2026年）。[64] P. A. Nosov、E. Khalaf 和 P. J. Ledwith, 《集中运动学下关联电子的受控展开》, arXiv:2605.20171（2026年）。[65] Y.-H. Zhang, 《扭转双层石墨烯莫特转变附近涌现的重费米子与超导性》, arXiv:2608.12319（2026年）。[66] A. M. Perelomov, 《相干态系统的完备性》, 理论与数学物理 6, 156（1971年）。[67] H. Bacry、A. Grossmann 和 J. Zak, 《证明 kq 表示中的晶格态完备性》, Physical Review B 12, 1118（1975年）。[68] N. Okuma, 《分数量子陈物理的双正交基方法》, arXiv:2503.19726（2025年）。[69]N. Okuma, 《平带拓扑能带中相互作用哈密顿量的局域基底表述：用于分数量子物理的相干态与类相干态》, arXiv:2602.13698（2026年）。[70] A. Georges、G. Kotliar、W. Krauth 和 M. J. Rozenberg, 《强关联费米子系统的动力学平均场理论与无限维极限》, 《现代物理学评论》68，13（1996年）。[71] Y. Choi、H. Kim、Y. Peng、A. Thomson、C. Lewandowski、R. Polski、Y. Zhang、H. S. Arora、K. Watanabe、T. Taniguchi、J. Alicea 和 S. Nadj-Perge, 《魔角扭转双层石墨烯中的关联驱动的拓扑相》, 《自然》589，536（2021年）。[72] J. Xiao、A. Inbar、J. Birkbeck、N. Gershon、Y. Zamir、Y. Vituri、T. Taniguchi、K. Watanabe、E. Berg 和 S. Ilani, 《相互作用重塑的魔角石墨烯平带成像》, 《自然》653，68（2026年）。[73] S. L. Tomarken、Y. Cao、A. Demir、K. Watanabe、T. Taniguchi、P. Jarillo-Herrero 和 R. C. Ashoori, 《魔角石墨烯超晶格的电子压缩率》, 《物理评论快报》123, 046601（2019年）。[74] A. T. Pierce、Y. Xie、J. M. Park、E. Khalaf、S. H. Lee、Y. Cao、D. E. Parker、P. R. Forrester、S. Chen、K. Watanabe、T. Taniguchi、A. Vishwanath、P. Jarillo-Herrero 和 A. Yacoby, 《魔角扭转双层石墨烯中关联陈绝缘体的非常规序列》, 《自然·物理》17，1210（2021年）。[75] J. Yu、B. A. Foutty、Z. Han、M. E. Barber、Y. Schattner、K. Watanabe、T. Taniguchi、P. Phillips、Z.-X. Shen、S. A. Kivelson 和 B. E. Feldman, 《魔角扭转双层石墨烯中的关联霍夫施塔特谱与味相图》, 《自然·物理》18，825（2022年）。[76] Q. Hu、S. Liang、X. Li、H. Shi、X. Dai 和 Y. Xu, 《魔角扭转双层石墨烯中级联现象与关联陈绝缘体之间的联系》, Nature Communications 16，9516（2025年）。[77] Z. Zhang、S. Wu、D. Călugăru、H. Hu、T. Taniguchi、K. Watanabe、B. A. Bernevig 和 E. Y. Andrei, 《魔角石墨烯中的熵平台、组合简并、局域磁矩与重费米子质量重整化》, Nature Communications 17，9785（2026年）。[78] Y.-H. Zhang 和 S. Sachdev, 《利用辅助量子比特从赝能隙金属到费米液体》, 《物理评论研究》2，023172（2020年）。[79] J.-Y. Zhao 和 Y.-H. Zhang, 《扭转双层石墨烯中源于小费米面的共振价键超导体》, Nature Communications 10.1038/s41467-026-76586-1（2026年）, arXiv:2510.26801。[80] H. Oh、H. Yang 和 Y.-H. Zhang, 《自旋一莫特绝缘体的掺杂：在双层镍酸盐中的可能应用》, arXiv:2509.02673（2025年）。[81] J.-Y. Zhao 和 Y.-H. Zhang, 《双重近藤模型中双层镍酸盐的赝能隙与非费米液体临界性》, arXiv:2603.25742（2026年）。[82] P. Werner、A. Comanac、L. de' Medici、M. Troyer 和 A. J. Millis, 《量子杂质模型的连续时间求解器》, 《物理评论快报》97, 076405（2006年）。[83] E. Gull、A. J. Millis、A. I. Lichtenstein、A. N. Rubtsov、M. Troyer 和 P. Werner, 《量子杂质模型的连续时间蒙特卡罗方法》, 《现代物理学评论》83，349（2011年）。[84] N. Kavokine、H. Lu、T. Ayral、M. Ferrero、N. Wentzell,

以及 O. Parcollet，《CTSEG：基于 TRIQS 的片段图量子杂质求解器》，J. Open Source Softw. 10，7425（2025年）。[85] O. Parcollet、M. Ferrero、T. Ayral、H. Hafermann、I. Krivenko、L. Messio 和 P. Seth，《TRIQS：用于研究相互作用量子系统的工具箱》，Comput. Phys. Commun. 196，398（2015年）。[86] J. Hubbard，《窄能带中的电子关联。III. 改进的解》，Proc. R. Soc. London A 281，401（1964年）。[87] P. Coleman，《多体物理导论》（剑桥大学出版社，剑桥，2015年）。[88] H. Polshyn、M. Yankowitz、S. Chen、Y. Zhang、K. Watanabe、T. Taniguchi、C. R. Dean 和 A. F. Young，《扭转双层石墨烯中巨大的温度线性电阻率》，《自然·物理》15，1011（2019年）。[89] Y. Cao、D. Chowdhury、D. Rodan-Legrain、O. Rubies-Bigorda、K. Watanabe、T. Taniguchi、T. Senthil 和 P. Jarillo-Herrero，《具有近普朗克耗散的魔角石墨烯奇异金属》，《物理评论快报》124，076801（2020年）。[90] A. Jaoui、I. Das、G. Di Battista、J. Díez-Mérida、X. Lu、K. Watanabe、T. Taniguchi、H. Ishizuka、L. Levitov 和 D. K. Efetov，《魔角扭转双层石墨烯中的量子临界行为》，《自然·物理》18，633（2022年）。[91] P. Seth、I. Krivenko、M. Ferrero 和 O. Parcollet，《TRIQS/CTHYB：用于量子杂质问题的连续时间量子蒙特卡罗杂化展开求解器》，Comput. Phys. Commun. 200，274（2016年）。[92]F. Wu、T. Lovorn、E. Tutuc、I. Martin 和 A. H. MacDonald，《转角过渡金属二硫化物同质双层中的拓扑绝缘体》，《物理评论快报》122，086402（2019年）。[93] L. Wang 等，《转角双层过渡金属二硫化物中的关联电子相》，Nat. Mater. 19，861（2020年）。[94] A. Ghiotto 等，《转角过渡金属二硫化物中的量子临界性》，《自然》597，345（2021年）。[95] Y. Xia 等，《转角双层 WSe_2，《自然》637，833（2025年）。[96] Y. Guo 等，《5.0° 转角双层 WSe_2，《自然》637，839（2025年）。[97] P. J. Ledwith、G. Tarnopolsky、E. Khalaf 和 A. Vishwanath，《魔角扭转双层石墨烯中的分数陈绝缘体》，《物理评论研究》2，023237（2020年）。[98] Y. Aharonov 和 A. Casher，《二维磁场中自旋1/2带电粒子的基态》，Phys. Rev. A 19，2461（1979年）。[99] K. Haule、C.-H. Yee 和 K. Kim，《全势方法框架下的动力学平均场理论：$CeIrIn_5$, $CeCoIn_5$, 和 $CeRhIn_5$, 的电子结构》，Phys. Rev. B 81，195107（2010年）。[100] H. Mori，《时间关联函数的连分式表示》，Prog. Theor. Phys. 34，399（1965年）。[101] J. R. Schrieffer 和 P. A. Wolff，《Anderson 与近藤哈密顿量之间的关系》，Phys. Rev. 149，491 1966( )。[102] M. Jarrell 和 J. E. Gubernatis，《贝叶斯推断与虚时量子蒙特卡罗数据的解析延拓》，Phys. Rep. 269，133（1996年）。

附录 A：陈能带的相干轨道

本附录定义了相干轨道，并介绍了两种实现方式：魔角双层石墨烯的平带，以及调制磁场中的最低朗道能级。

1. 投影轨道及其权重分布

投影轨道。—每种 N_f 味都具有一个陈数为 $C=\pm1$ 的平带，其布洛赫态为 $|\psi_{\boldsymbol{k}}\rangle$。我们在每个格点 $\boldsymbol{R}_i$上放置相同的局域轨道 $|\tau_i\rangle$。它在 N_M 原胞上的布洛赫和 $|\tau_{\boldsymbol{k}}\rangle = N_M^{-1/2}\sum_i e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}_i}|\tau_i\rangle$ 仅与动量相同的布洛赫态重叠，形状因子为 $\mu_f(\boldsymbol{k}) = \langle\tau_{\boldsymbol{k}}|\psi_{\boldsymbol{k}}\rangle$。权重$w_f(\boldsymbol{k}) = |\mu_f(\boldsymbol{k})|^2$的布里渊区平均值为 W_f。将 τ_i投影到能带上并归一化，得到相干轨道

$$\hat{f}_i = \frac{1}{\sqrt{N_M}}\sum_{\boldsymbol{k}} e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}_i}\,\frac{\mu_f(\boldsymbol{k})}{\sqrt{W_f}}\,c_{\boldsymbol{k}}, \qquad S_{\boldsymbol{k}} = \frac{w_f(\boldsymbol{k})}{W_f}, \tag{A1}$$

其中 $c_{\boldsymbol{k}}$在 $|\psi_{\boldsymbol{k}}\rangle$中湮灭一个电子。该轨道是归一化的，$\langle S_{\boldsymbol{k}}\rangle_{\boldsymbol{k}} = 1$。它与其他格点上的轨道重叠，$\{\hat{f}_{i\alpha},\ \hat{f}^\dagger_{j\beta}\} = \delta_{\alpha\beta}S_{ij}$其中 $S_{ij} = N_M^{-1}\sum_{\boldsymbol{k}} e^{i\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{R}_i-\boldsymbol{R}_j)}S_{\boldsymbol{k}}$。

重叠由拓扑所强制。——在具有 $|C|=1$ 的能带中，任意局域轨道的形状因子在某一动量处消失 $\boldsymbol{k}_0$，其相位在该处绕行一周 [66, 67]。否则 $\mu_f/|\mu_f|$ 将成为光滑的周期规范，并给出指数局域的瓦尼尔函数，而陈能带并不容许 [1]。因此，相干轨道恰好多出一个态而过完备。它们的重叠 $\eta_S^2 = \sum_{j\neq i}|S_{ij}|^2 = \langle S_{\boldsymbol{k}}^2\rangle_{\boldsymbol{k}} - 1$ 始终为正，但若贝里曲率集中，则可使其任意小。

轨道权重的分布。——动力学平均场理论只能通过轨道权重的分布来感知能带，

$$P(S) = \frac{1}{N_M}\sum_{\boldsymbol{k}}\delta(S - S_{\boldsymbol{k}}), \tag{A2}$$

其中 $\int\mathrm{d}S\,P(S) = \int\mathrm{d}S\,S\,P(S) = 1$和 $\int\mathrm{d}S(S-1)^2P(S) = \eta_S^2$。在 $\boldsymbol{k}_0 = 0$附近，权重为 $w_f(\boldsymbol{k}) \simeq k^2/(k^2+k_*^2)$。于是 $s^2 = \pi k_*^2/\Omega_{\mathrm{BZ}}$ 就是满足 $w_f < 1/2$的区域占整个布里渊区的比例。这种洛伦兹形式给出

$$P(S) = \frac{W_f\,s^2}{(1-W_fS)^2}, \qquad 0\le S\le S_{\max} = \frac{1}{W_f(1+s^2)}, \qquad W_f = 1 - s^2\ln\Big(1+\frac{1}{s^2}\Big). \tag{A3}$$

在 s^2 的主导阶下，它在 $0<S<1$上为 $P(S) = s^2/(1-S)^2$。因此，混合态携带均匀权重$P(S)(1-S)^2 = s^2$。重叠为 $\eta_S^2 \simeq s^2$。在动力学平均场理论中，我们在单位间距的三角晶格上采用这种纹理的晶格版本，

$$\begin{aligned} w_f(\boldsymbol{k}) &= \frac{1}{2}\Big(1 - \frac{m_{\boldsymbol{k}}}{\sqrt{m_{\boldsymbol{k}}^2 + 4|g_{\boldsymbol{k}}|^2/k_*^2}}\Big), \\ g_{\boldsymbol{k}} = \frac{2}{3}\sum_{j=0}^{2} e^{-i\theta_j}\sin(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{\delta}_j), &\qquad m_{\boldsymbol{k}} = 1 - \frac{4}{3k_*^2}\sum_{j=0}^{2}\big[1-\cos(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{\delta}_j)\big], \end{aligned} \tag{A4}$$

具有 $\boldsymbol{\delta}_j = (\text{余弦}\ \theta_j,\ \text{正弦}\,\theta_j)$ 以及 $\theta_j = 2\pi j/3$。它在 $k^2/(k^2+k_*^2)$ 附近 $\boldsymbol{k}=0$ 退化为，并且接近连续体形式[图 5(a,b)]。

2. 扭转双层石墨烯

味。—在魔角双层石墨烯中，每种自旋和谷对应的平带都可以旋转为陈数为±1 [5, 18, 97]的两个扇区，因此得到 $N_f = 8$ 种味。$C_2\mathcal{T}$ 将同一谷的两个陈扇区联系起来，而时间反演则联系两个谷。两者都使轨道权重保持不变（至多相差 $\boldsymbol{k}\to-\boldsymbol{k}$），因此八种味共享相同的 $P(S)$。

来自连续模型的相干轨道。—拓扑重费米子模型的 f 轨道投影ˆ到平带上后，可作为 f。不过，仅平带本身就已足够 [58]。在每个谷中，我们将第一魔角处的两条平坦 Bistritzer–MacDonald 能带旋转为陈能带，即投影子晶格算符的本征矢量

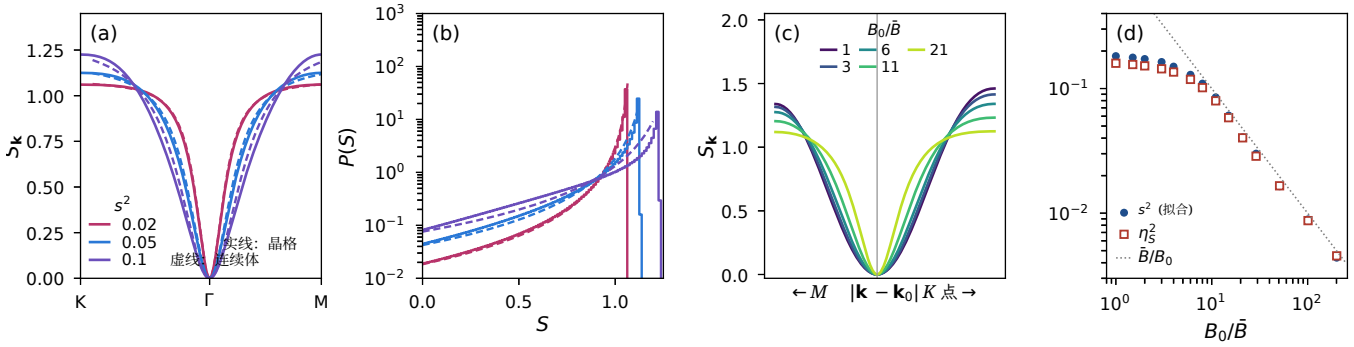


图 5. 相干轨道的权重。(a) $S_{\boldsymbol{k}}$ 沿着 K–Γ–M，对于公式（A4）的晶格纹理（实线）和具有相同 s^2 的连续洛伦兹型函数 $w_f = k^2/(k^2+k_*^2)$（虚线）。(b) 它们的分布 $P(S)$，即晶格纹理和公式（A3）的直方图。(c) 调制磁场中最低朗道能级的 $S_{\boldsymbol{k}}$，公式（A8），从其零点 $\boldsymbol{k}_0$ 朝向 M 和 K，对应图例中给出的格点处磁场增强量 $B_0/\bar{B}$。 $B_0 = \bar{B}$ 为均匀场，公式（A6）。(d) 对其零点附近的 $S_{\boldsymbol{k}}$ 进行洛伦兹拟合得到的 s^2，以及 η_S^2，随 $B_0/\bar{B}$的变化。点线表示 $\bar{B}/B_0$。

算符 σ_z。它们具有 $C = \pm 1$，且分别极化于相反的子晶格。对于 $C = +1$ 能带，轨道 τ 是位于一个 AA 位点上的一对窄高斯波包，每层各一个，位于该能带所属的子晶格上。其权重为$w_f(\boldsymbol{k}) = \sum_l |\langle \tau_l \boldsymbol{k} | \psi_{\boldsymbol{k}} \rangle|^2$，其中 $|\tau_l \boldsymbol{k}\rangle$ 是层 l中该波包的布洛赫和。该权重在 Γ处消失，此处形状因子的相位 μ_f 发生绕转。这里 s^2 表示 w_f 低于其最大值一半的区域占整个布里渊区的比例。图1(a) 展示了由此得到的 $S_{\boldsymbol{k}}$，其 $P(S)$ 与具有相同 s^2的洛伦兹函数相近。

3. 调制磁场中的最低朗道能级

本文所讨论的物理应源于任意平带陈能带的相干轨道上的哈伯德相互作用，而不仅限于魔角双层石墨烯。此处， s^2 连续调节，同时能带始终保持完全平坦。考虑一个处于周期场 $B(\boldsymbol{r})\hat{z}$中的电子，其 $g = 2$ 为 $\boldsymbol{R}_i$，该周期场在由格点 $\boldsymbol{R}_i$构成的三角晶格的每个晶胞中包含一个磁通量子。其泡利哈密顿量为

$$H = \frac{[\boldsymbol{\sigma}\cdot(\boldsymbol{p}+e\boldsymbol{A})]^2}{2m} = \frac{(\boldsymbol{p}+e\boldsymbol{A})^2}{2m} + \frac{e\hbar}{2m}B(\boldsymbol{r})\,\sigma_z. \tag{A5}$$

对于一个自旋分量，塞曼能会抵消回旋运动的零点能。于是，零能态形成一个具有 $C = 1$ 的完全平坦能带，其中任意 $B(\boldsymbol{r})$均具有同一符号 [98]。对于均匀场，它就是最低朗道能级。

均匀场。—对于 $B = \bar{B}$，晶胞面积为 $2\pi\ell^2$，其中 $\ell = (\hbar/e\bar{B})^{1/2}$。将位于 $\boldsymbol{R}_i$处的狄拉克δ函数投影到该能级上，可得到对称规范下的相干态 [66, 67] $\varphi_i(\boldsymbol{r}) \propto \exp[-|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{R}_i|^2/4\ell^2 + i(\boldsymbol{R}_i\times\boldsymbol{r})_z/2\ell^2]$。这些态的重叠为 $S_{ij} = \epsilon_{\boldsymbol{R}_i-\boldsymbol{R}_j}\, e^{-|\boldsymbol{R}_i-\boldsymbol{R}_j|^2/4\ell^2}$，其中 $\epsilon_{\boldsymbol{R}} = (-1)^{mn}$ 是磁平移$\boldsymbol{R} = m\boldsymbol{a}_1 + n\boldsymbol{a}_2$的符号。因此

$$S_{\boldsymbol{k}}^{(0)} = \sum_{\boldsymbol{R}} \epsilon_{\boldsymbol{R}}\, e^{-R^2/4\ell^2}\cos(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}). \tag{A6}$$

它仅在 $\boldsymbol{k}_0 = (\boldsymbol{b}_1+\boldsymbol{b}_2)/2$ 这一规范下为零。重叠为 $\eta_S^2 = \sum_{\boldsymbol{R}\neq 0} e^{-R^2/2\ell^2}$。该数值以及 s^2，由 $\boldsymbol{k}_0$附近的洛伦兹拟合得到，是图5(d)中最左侧的点。

¯调制磁场。—现在令场在每晶胞磁通量固定时发生变化， $B(\boldsymbol{r}) = B + \delta B(\boldsymbol{r})$，其中 $\delta B = (\Delta B/3)\sum_j \cos(\boldsymbol{G}_j\cdot\boldsymbol{r})$¯取遍三个最短的倒格矢。场在位于 $B_0 = B + \Delta B$ 的格点处达到峰值。按照 Aharonov 和 Casher [98],，我们写作 $\boldsymbol{A} = (\hbar/e)\,\hat{z}\times\nabla\varphi$，其中 $\nabla^2\varphi = eB/\hbar$。于是，零模为 $\psi = f(z)\, e^{-\varphi}$，其中 f关于 $z = x+iy$解析。 φ 的均匀部分 $|\boldsymbol{r}|^2/4\ell^2$给出最低朗道能级。其周期部分 $\delta\varphi$ 则将每个零模都乘以同一个正函数，

$$\psi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}) = \psi_{\boldsymbol{k}}^{(0)}(\boldsymbol{r})\, e^{-\delta\varphi(\boldsymbol{r})}, \qquad \nabla^2\delta\varphi = \frac{e\,\delta B}{\hbar}, \tag{A7}$$

与 $\psi_{\boldsymbol{k}}^{(0)}$ 均匀场的布洛赫态。解析因子以及随之的零点和陈数保持不变。只有密度被重新加权，加权因子为 $e^{-2\delta\varphi}$，其峰值位于格点上。因为只有

零模发生变化， $\boldsymbol{R}_i$ 处的投影狄拉克δ函数具有权重

$$S_{\boldsymbol{k}} \propto \frac{S^{(0)}_{\boldsymbol{k}}}{N_{\boldsymbol{k}}}, \qquad N_{\boldsymbol{k}} = \int_{\text{cell}} \mathrm{d}^2 r \, |\psi^{(0)}_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r})|^2 e^{-2\delta\varphi(\boldsymbol{r})}. \tag{A8}$$

在磁场极大值附近，轨道是宽度为 $\sqrt{2}\ell_0$ 的高斯函数，其中 $\ell_0 = \ell(\bar{B}/B_0)^{1/2}$ 为局域磁长。因此 $k_* = \sqrt{2}\ell_0/\ell^2$ 且 $s^2 \simeq \bar{B}/B_0$。集中该场会使轨道收缩，并使其权重在零点附近变得更尖锐 [图 5(c)]。对于 $B_0 \gg \bar{B}$， s^2 与 η_S^2 均按 $\bar{B}/B_0$ [图 5(d)], 下降，而能带保持严格平坦。

量子几何。—该族的每条能带都是理想的，$\mathrm{tr}\ g = \Omega$。其积分度规 $\int \mathrm{tr}\, g \, \mathrm{d}^2k = 2\pi$ 因此被钉住，并不能度量重叠。发生变化的是贝里曲率的分布。对于洛伦兹纹理，零点周围半径 k 内的权重即其所包围的贝里通量， $w_f(k) = (2\pi)^{-1} |\int_{|\boldsymbol{q}|<k} \Omega \, \mathrm{d}^2 q|$。曲率的参与率则为 $\langle\Omega\rangle^2_{\boldsymbol{k}} / \langle\Omega^2\rangle_{\boldsymbol{k}} = 3s^2$，故 $\eta_S^2 \simeq \langle\Omega\rangle^2_{\boldsymbol{k}} / 3\langle\Omega^2\rangle_{\boldsymbol{k}}$。因此，当贝里曲率集中时，相干轨道的重叠很小。

附录 B：相干轨道上的动力学平均场理论

1. 杂质问题与自洽

杂质模型。——我们考虑相干轨道上的哈伯德模型，

$$H = -\mu \sum_{\boldsymbol{k}} c^\dagger_{\boldsymbol{k}} c_{\boldsymbol{k}} + \frac{U}{2} \sum_i \left(\hat{n}_{fi} - \frac{N_f}{2} \right)^2, \tag{B1}$$

其中 $\hat{n}_{fi} = \sum_\alpha \hat{f}^\dagger_{i\alpha} \hat{f}_{i\alpha}$。该能带完全平坦，因此电子自身没有动能。化学势与每格点能带填充 n_c 耦合，其中 $\nu = n_c - N_f/2$。能量以 U 为单位。动力学平均场理论 [70] 将完整模型替换为处于自洽浴中的单个相干轨道上的杂质模型。杂质位点的作用量为

$$\begin{aligned} \mathcal{S}_{\text{imp}} = & -\int_0^\beta \mathrm{d}\tau \, \mathrm{d}\tau' \, \bar{f}_\alpha(\tau) \, \mathcal{G}_0^{-1}(\tau - \tau') \, f_\alpha(\tau') \\ & + \frac{U}{2} \int_0^\beta \mathrm{d}\tau \left(n_f(\tau) - \frac{N_f}{2} \right)^2, \end{aligned} \tag{B2}$$

其中对味求和，且 $\mathcal{G}_0^{-1}(i\omega_n) = i\omega_n + \mu - \Delta_f(i\omega_n)$。杂化函数 $\Delta_f(\tau)$ 刻画了体系中其他格点的效应¯。杂质传播子 $G_{\text{imp}}(\tau) = -\langle f_\alpha(\tau) f_\alpha(0) \rangle$ 定义了杂质自能 $\Sigma_f = \mathcal{G}_0^{-1} - G^{-1}$ imp。动力学平均场理论近似表明，晶格自能来自该杂质位点：$\Sigma_f(z) \sum_i \hat{f}^\dagger_{i\alpha} \hat{f}_{i\alpha}$。由式 (A1)， $\sum_i \hat{f}^\dagger_{i\alpha} \hat{f}_{i\alpha} = \sum_{\boldsymbol{k}} S_{\boldsymbol{k}} \, c^\dagger_{\boldsymbol{k}\alpha} c_{\boldsymbol{k}\alpha}$，因此动力学平均场理论实际上给出了能带基底中具有动量依赖性的自能。在 $\zeta = z + \mu$ 下，能带电子与局域轨道具有传播子

$$\begin{aligned} G_c(\boldsymbol{k}, z) &= \frac{1}{\zeta - S_{\boldsymbol{k}} \Sigma_f(z)}, \\ G_f^{\text{loc}}(z) &= \frac{1}{N_M} \sum_{\boldsymbol{k}} S_{\boldsymbol{k}} \, G_c(\boldsymbol{k}, z) = \int \mathrm{d}S \, \frac{P(S) \, S}{\zeta - S\Sigma_f(z)}. \end{aligned} \tag{B3}$$

每个布洛赫态受到相互作用的影响与其轨道权重成正比，而零点处的态完全不受影响。杂质必须再现晶格中该轨道的局域传播子， $G_{\text{imp}} = G_f^{\text{loc}}$，由此得到自洽方程

$$\Delta_f(z) = \zeta - \Sigma_f(z) - \frac{1}{G_f^{\text{loc}}(z)}. \tag{B4}$$

方程（B2）–（B4）通过迭代求解：从孤立原子的自能开始，计算 G_f^{loc}和 Δ_f，针对新的 Σ_f求解杂质问题，将其与前一次结果混合，然后重复这一过程，直到 Δ_f在统计误差范围内不再变化；通常需要迭代 15–30 次。

与密度泛函理论的关系 +动力学平均场理论。—投影 $G_f^{\text{loc}} = \langle S_{\boldsymbol{k}} G_c \rangle_{\boldsymbol{k}}$ 以及将 Σ_f 嵌入为 $S_{\boldsymbol{k}}\Sigma_f$ 的做法，采用了密度泛函理论+动力学平均场理论中使用的形式，并使用投影局域轨道 [99]。在这种方法中，关联轨道几乎完全位于一个宽窗口内

的布洛赫能带范围内；它们的微小非正交性源于窗口截断和过完备基，并通过对投影算符进行正交化或重新归一化来消除或修正。此处的窗口是一条陈能带，其中不包含正交的局域轨道。因此，轨道仅在格点上归一化，$\langle S_{\boldsymbol{k}}\rangle_{\boldsymbol{k}} = 1$，而它们之间的重叠则由拓扑所决定。对于平带而言，这种重叠是浴 $\Delta_f(z)$的唯一来源，因为本文忽略了色散。

2. 浴从何而来

精确形式。—方程（B4）将 Δ_f 表示为两个几乎相互抵消的项之差。在方程（B3）的积分号内进行相减，即可看出浴由什么构成。将方程（B4）写为 $\Delta_f = [(\zeta - \Sigma_f)G_f^{\rm loc} - 1]/G_f^{\rm loc}$并利用 $\int \mathrm{d}S\, P(S) = 1$ 将分子移入该积分中，

$$(\zeta - \Sigma_f)G_f^{\rm loc} - 1 = \int \mathrm{d}S\, P(S)\, \frac{(\zeta - \Sigma_f)S - (\zeta - S\Sigma_f)}{\zeta - S\Sigma_f} = \zeta \int \mathrm{d}S\, P(S)\, \frac{S-1}{\zeta - S\Sigma_f}. \tag{B5}$$

由于还有 $\int \mathrm{d}S\, P(S)\, S = 1$，因此 $\int \mathrm{d}S\, P(S)\, (S-1) = 0$，从而从被积函数中减去 $(S-1)/(\zeta - \Sigma_f)$ 不会改变最后一个积分。令

$$\frac{S-1}{\zeta - S\Sigma_f} - \frac{S-1}{\zeta - \Sigma_f} = \frac{\Sigma_f\,(1-S)^2}{(\zeta - \Sigma_f)(\zeta - S\Sigma_f)} \tag{B6}$$

魏斯场变为

$$\Delta_f(z) = \frac{\zeta\,\Sigma_f}{(\zeta - \Sigma_f)\, G_f^{\rm loc}} \int \mathrm{d}S\, P(S)\, \frac{(1-S)^2}{\zeta - S\Sigma_f}. \tag{B7}$$

浴的构成。—方程（B7）是一个关于轨道权重的积分，其权重为 $P(S)(1-S)^2,$，它在平坦区域 $S \simeq 1$ 内为零，且积分结果为 $\eta_S^2 \simeq s^2$：轨道仅通过混合布洛赫态 $0 < S < 1$ 与晶格中的其他部分交换电子；而由正交归一轨道构成的晶格 $S_{\boldsymbol{k}} \equiv 1$则没有浴。在较大的$z$下， $G_f^{\rm loc} \to 1/\zeta$以及 $\Delta_f \to \Delta_\infty = \eta_S^2 \Sigma_\infty$下，哈特里常数为 $\Sigma_\infty = U(N_f - 1)$ $(\langle n_\alpha\rangle - \frac{1}{2})$。杂质能级为$\mu_{\rm imp} = \mu - \Delta_\infty$。

附录 C：关于 s^2 的展开：Hubbard-I、Hubbard-III 和近藤耦合

附录 B 中的浴为 s^2 阶，因此我们可以通过截断动力学平均场理论的自洽方程来建立微扰理论。在零阶时，我们得到 Hubbard-I近似；在 s^2 阶时，则得到 Hubbard-III近似。有趣的是，通过这里的解析推导，我们得到了辅助粒子框架，其中电子 $c_{\boldsymbol{k}}$ 与一对辅助费米子（F、F'）耦合。Hubbard-I 可以看作 c 与 F 之间的杂化，而 Hubbard-III 则为 F 费米子引入了散射率。不过，这两种近似都忽略了 F' 费米子，即局域磁矩的自旋子。在我们的表述中，我们发现动力学平均场理论的浴由 F 费米子主导， $\rho_\Delta(\omega) = \Phi^2 \rho_F(\omega)$ [式（C17）]，，并且 F 费米子与由 F' 表示的局域磁矩之间存在近藤耦合 $J_K \sim U$。Hubbard-III 可以通过对此近藤耦合应用费米黄金定则轻松推导得到。但近藤耦合是边缘相关的，并会在近藤温度 T_K 下流向强耦合。因此，我们预计微扰展开在 s^2 处会因近藤屏蔽而在更大的 s^2 下失效。本附录之外的完全自洽动力学平均场理论计算发现，在非零整数填充时，约于 $s^2 \simeq 0.025$–0.033 发生绝缘体-金属转变。要描述相应的重费米液体（HFL），我们需要在有效理论中同时保留（F、F'）。

方程（B7）的前因子为 $\zeta\Sigma_f + O(s^2)$，因为 $G_f^{\rm loc} = 1/(\zeta - \Sigma_f) + O(s^2)$。因此

$$\begin{aligned} \Delta_f(z) &= 0 + s^2 \Delta_f^{(1)}(z) + O(s^4), \\ \Delta_f^{(1)} &= \zeta\Sigma_f \int \mathrm{d}S\, \frac{P(S)(1-S)^2/s^2}{\zeta - S\Sigma_f}, \end{aligned} \tag{C1}$$

其中 $P(S)$ $(1-S)^2/s^2$ 不依赖于 s^2，就 $S_{\boldsymbol{k}}$ 的洛伦兹形式而言，在此阶，式（A3）。杂质自能随后可以按 s^2展开。

1. 零阶：Hubbard-I 与正交费米子

Hubbard-I。——在零阶，我们采用 $\Delta_f(z)=0$，于是每个格点都是一个孤立的SU（N_f）原子。设其容纳 n_f个电子，该整数由化学势通过 $U(n_f-N_f/2-\frac{1}{2})<\mu<U(n_f-N_f/2+\frac{1}{2})$ 确定，并令$q=n_f/N_f$。原子自能为

$$\begin{aligned}\Sigma_{\rm at}(z)&=\Sigma_\infty+\frac{\Phi^2}{z-\epsilon_F},\\ \Sigma_\infty&=U(N_f-1)(q-\tfrac{1}{2}),\qquad \Phi^2=U^2q(1-q),\end{aligned}\tag{C2}$$

具有 $\epsilon_F=qE_+-(1-q)E_-$。利用原子能量 $E_{\rm at}(n)=\frac{U}{2}(n-\frac{N_f}{2})^2-\mu n$，我们得到

$$\begin{aligned}E_+&=E_{\rm at}(n_f+1)-E_{\rm at}(n_f)=U\big(n_f-\tfrac{N_f}{2}+\tfrac{1}{2}\big)-\mu,\\ E_-&=E_{\rm at}(n_f-1)-E_{\rm at}(n_f)=U\big(\tfrac{N_f}{2}+\tfrac{1}{2}-n_f\big)+\mu,\end{aligned}\tag{C3}$$

也就是说，$E_\pm=U/2\pm[U(n_f-N_f/2)-\mu]$，其中 $E_++E_-=U$。在动力学平均场理论中，μ被杂质能级 $\mu_{\rm imp}=\mu-\Delta_\infty$取代。

$\hat{}$ $\Sigma_{\rm at}$的极点可视为物理电子 f与另一个费米子 F之间的杂化。这可以从原子哈密顿量 $H_{\rm at}=\frac{U}{2}(n-N_f/2)^2-\mu_{\rm imp}n$看出，它恰好给出 $[\hat{}f_\alpha,\ H_{\rm at}]=[U(N'_\alpha-\frac{N_f-1}{2})-\hat{}\hat{}\mu_{\rm imp}]f_\alpha$，其中 $N'_\alpha=\sum_{\beta\neq\alpha}n_\beta$。超出平均电荷的部分定义了一种新的费米子，即 $F_\alpha=(U/\Phi)\,\delta N'_\alpha\,f_\alpha$，其中 $\delta N'_\alpha=N'_\alpha-\langle N'_\alpha\rangle$是其他味的电荷相对于其平均值的偏差。$\Phi^2=U^2\langle\delta N'^2_\alpha\rangle$作为前因子对其进行归一化，$\langle\{F_\alpha,F_\alpha^\dagger\}\rangle=1$。于是，精确地有

$$[\hat f_\alpha,H_{\rm at}]=(\Sigma_\infty-\mu_{\rm imp})\hat f_\alpha+\Phi\,F_\alpha,\qquad [F_\alpha,H_{\rm at}]=\frac{U}{\Phi}\big[U\delta N'^2_\alpha+(\Sigma_\infty-\mu_{\rm imp})\,\delta N'_\alpha\big]\hat f_\alpha,\tag{C4}$$

满足 $\Sigma_\infty=U(\langle N'_\alpha\rangle-\frac{N_f-1}{2})$。第一个关系在$\hat{}$ f和 F上封闭；第二个关系仅在一个子空间内封闭。零阶时，原子含有 n_f 个电子，其格林函数仅涉及具有 n_f-1、n_f和 n_f+1 个电子的态。设

$$P_G=P_{n_f-1}+P_{n_f}+P_{n_f+1}\tag{C5}$$

将它们投影出来，其中 P_n 是投影到具有 n 个电子的态上的投影算符。在 P_G 内部，移除味α的算符作用于具有 n_f个或 n_f+1 个电子的态，在这些态中其他味的电荷分别为 $N'_\alpha=n_f-1$或 n_f。因此，变量 $N'_\alpha-(n_f-1)$ 为 0 或 1，其平均值为 $1-q$，因为 $\langle N'_\alpha\rangle=(N_f-1)q=n_f-q$。对于这样的变量$\delta N'^2_\alpha=q(1-q)+(2q-1)\,\delta N'_\alpha$，式 (C4) 中的括号变为 $Uq(1-q)+[U(2q-1)+\Sigma_\infty-\mu_{\rm imp}]\,\delta N'_\alpha$。当多重态中有 $\Phi^2=U^2q(1-q)$ 时，投影算子 $\hat{}$ $f^G_\alpha=P_G\hat{}f_\alpha P_G$ 和 $F^G_\alpha=P_GF_\alpha P_G$ 因此满足

$$[\hat f^G_\alpha,H_{\rm at}]=(\Sigma_\infty-\mu_{\rm imp})\hat f^G_\alpha+\Phi\,F^G_\alpha,\qquad [F^G_\alpha,H_{\rm at}]=\Phi\hat f^G_\alpha+\epsilon_FF^G_\alpha,\qquad \epsilon_F=\Sigma_\infty-\mu_{\rm imp}+U(2q-1),\tag{C6}$$

对于原子莫特绝缘体，$\hat{}$ f^G的传播子与未经过投影的$\hat{}$ f的传播子相同。在 P_G子空间之外，对于具有 $n_f\pm2$ 个电子的态，运动方程无法闭合，仅包含($\hat{}f^G$、F^G)的理论并不足够。

和 c 与 F的平均场理论。——方程（C6）的闭合方程组等价于辅助粒子理论 [57, 58, 65, 78] 在(c、F) 子空间内的平均场近似。平均场理论为（图6）

$$\begin{aligned}H_{\rm MF}&=-\mu\sum_{\boldsymbol{k}\alpha}c^\dagger_{\boldsymbol{k}\alpha}c_{\boldsymbol{k}\alpha}+\sum_{i\alpha}\Big[\Sigma_\infty\hat f^\dagger_{i\alpha}\hat f_{i\alpha}+\epsilon_FF^\dagger_{i\alpha}F_{i\alpha}+\Phi\big(\hat f^\dagger_{i\alpha}F_{i\alpha}+F^\dagger_{i\alpha}\hat f_{i\alpha}\big)\Big]\\&=\sum_{\boldsymbol{k}\alpha}\Big[(S_{\boldsymbol{k}}\Sigma_\infty-\mu)\,c^\dagger_{\boldsymbol{k}\alpha}c_{\boldsymbol{k}\alpha}+\epsilon_F\,F^\dagger_{\boldsymbol{k}\alpha}F_{\boldsymbol{k}\alpha}+\sqrt{S_{\boldsymbol{k}}}\,\Phi\big(e^{-i\theta_{\boldsymbol{k}}}c^\dagger_{\boldsymbol{k}\alpha}F_{\boldsymbol{k}\alpha}+e^{i\theta_{\boldsymbol{k}}}F^\dagger_{\boldsymbol{k}\alpha}c_{\boldsymbol{k}\alpha}\big)\Big],\end{aligned}\tag{C7}$$

其中，在这一阶有 $\mu_{\rm imp}=\mu$，且

$$\Sigma_\infty=U(N_f-1)\big(q-\tfrac{1}{2}\big),\qquad \epsilon_F=\Sigma_\infty-\mu+U(2q-1)=U(N_f+1)\big(q-\tfrac{1}{2}\big)-\mu,\tag{C8}$$

也就是说，$\epsilon_F=qE_+-(1-q)E_-$。在第二行中，$F_{\boldsymbol{k}\alpha}=N_M^{-1/2}\sum_i e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}_i}F_{i\alpha}$，而 $\theta_{\boldsymbol{k}}$是形状因子的相位，$\mu_f(\boldsymbol{k})=|\mu_f(\boldsymbol{k})|e^{i\theta_{\boldsymbol{k}}}$，它绕 $\boldsymbol{k}_0$ 缠绕 2π：杂化携带着陈能带的涡旋。

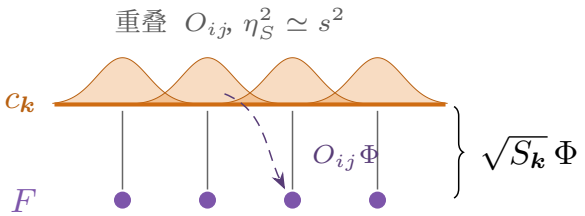


图6. c 和 F的平均场理论，式（C7），采用Hubbard-I近似。能带电子 $c_{\boldsymbol{k}}$ （叶瓣，即相互重叠的相干轨道）通过位点项 $\Phi\hat{f}_i^\dagger F_i$ （实线）与每个格点的正交费米子 F杂化。由于轨道并不正交， $\{\hat{f}_i,\ \hat{f}_j^\dagger\} = S_{ij}$，对易子 $[\hat{f}_i, H_{\rm MF}]$ 也会以振幅 $S_{ij}\Phi$ [式（C13）]（虚线）将$\hat{}$ f_i与其他格点的 F耦合起来。因此，其他格点的正交费米子 $\Phi\sum_{j\neq i} S_{ij}F_j$构成格点 i处杂质的浴。图中用 O_{ij} 表示重叠 S_{ij}。

由于 F在 $H_{\rm MF}$中不色散，涡旋可以移入其中， $F_{\boldsymbol{k}\alpha} \to e^{-i\theta_{\boldsymbol{k}}}F_{\boldsymbol{k}\alpha}$，这使 $\epsilon_F F_{\boldsymbol{k}\alpha}^\dagger F_{\boldsymbol{k}\alpha}$与能谱保持不变，并使耦合变为 $\sqrt{S_{\boldsymbol{k}}}\,\Phi$（$c_{\boldsymbol{k}\alpha}^\dagger F_{\boldsymbol{k}\alpha}$ + h.c.）；该变换仅在 $\boldsymbol{k}_0$处奇异，在那里 $S_{\boldsymbol{k}} = 0$ 且耦合消失。下文我们采用这一规范，$F_{\boldsymbol{k}\alpha} = e^{-i\theta_{\boldsymbol{k}}}N_M^{-1/2}\sum_i e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}_i}F_{i\alpha}$；涡旋随后重新出现在浴的相位 $e_{\boldsymbol{k}}$ 中，即式（C14）。将 F 积分掉后，能带电子获得Hubbard-I自能$\Sigma_c(\boldsymbol{k}) = S_{\boldsymbol{k}}\Sigma_{\rm at}(z)$。

正交费米子。——对于 $\chi_{+\alpha} = \hat{f}_\alpha P_{n_f+1}/\sqrt{1-q}$和$\overline{\chi_{-\alpha}} = \hat{f}_\alpha P_{n_f}/\sqrt{q}$，它们是从具有 n_f+1 个电子和 n_f 个电子的原子中移除相应味的Hubbard算符，并归一化为 $\langle\{\chi_{\pm\alpha}, \chi_{\pm\alpha}^\dagger\}\rangle = 1$，我们有

$$\hat{f}_\alpha^G = \sqrt{1-q}\,\chi_{+\alpha} + \sqrt{q}\,\chi_{-\alpha}, \qquad F_\alpha^G = \sqrt{q}\,\chi_{+\alpha} - \sqrt{1-q}\,\chi_{-\alpha}, \tag{C9}$$

F_α^G 因此不应被视为束缚态。它本质上是Hubbard算符的另一种线性组合，即与电子正交的那一个， $\langle\{F_\alpha, \hat{f}_\alpha^\dagger\}\rangle = 0$ 我们称之为正交费米子。这些算符仅在具有 n_f-1、 n_f 和 n_f+1 个电子的原子的子空间 P_G 中才有意义。

2. 一阶下的浴

我们只需将原子自能代入自洽方程公式（C1），并得到 s^2中主导阶的浴， $\Delta_f(z) = \zeta\Sigma_{\rm at}(z)\int {\rm d}S\, P(S)(1-S)^2/(\zeta - S\Sigma_{\rm at})$，其中 $\zeta = z+\mu$。此处频率 z以及实轴上的 ω均从费米能级量起： $\omega = 0$ 为费米能。平带没有动能，因此在公式（2）的 H中，无相互作用的能带电子具有能量 $\omega = -\mu$，即该能带的裸能级，而 $\zeta = z+\mu$ 是从该能级量起的能量。对于 $\nu < 0$，化学势为负，裸能级位于费米能级之上，处于 $-\mu \simeq 2.3U$，超出 $\nu = -2$。对于洛伦兹型轨道权重， $S_{\boldsymbol{k}} = w_f(\boldsymbol{k})/W_f$，其中 $w_f(\boldsymbol{k}) = k^2/(k^2+k_*^2)$以及 $k = |\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}_0|$，权重按 $P(S) = s^2/(1-S)^2$ 分布在 $0 < S < 1$ 上；在此阶 [公式（A3）], 从而$P(S)(1-S)^2 = s^2$，且该积分为初等积分：

$$\Delta_f(z) = s^2\zeta\Sigma_{\rm at}\int_0^1 \frac{{\rm d}S}{\zeta - S\Sigma_{\rm at}} = -s^2\zeta\,\ln\Big[1 - \frac{\Sigma_{\rm at}(z)}{\zeta}\Big], \qquad \rho_\Delta(\omega) = s^2\,|\omega+\mu|. \tag{C10}$$

谱密度来自被积函数的极点。在实轴上， $\zeta = \omega+\mu+i0^+$ 且 $\mathrm{Im}\,\Sigma_{\rm at} \le 0$，因此–$\mathrm{Im}(\zeta - S\Sigma_{\rm at})^{-1} = \pi\delta(S-S_\omega)/|\Sigma_{\rm at}(\omega)|$，其中 $S_\omega = (\omega+\mu)/\Sigma_{\rm at}(\omega)$ 是布洛赫态的权重，其 Hubbard-I 能量为 ω。对于任意 $P(S)$，于是，最后一个等式适用于 $P(S)(1-S)^2 = s^2$，

$$\rho_\Delta(\omega) = -\frac{1}{\pi}\,\mathrm{Im}\,\Delta_f(\omega) = \frac{(\omega+\mu)\,\Sigma_{\rm at}}{|\Sigma_{\rm at}|}\,P(S_\omega)(1-S_\omega)^2 = |\omega+\mu|\,P(S_\omega)(1-S_\omega)^2 = s^2|\omega+\mu| \tag{C11}$$

当 S_ω 超出范围 (0, 1) 时， $0 < S_\omega < 1$ 和 $\rho_\Delta = 0$。 $\omega+\mu$ 和 $\Sigma_{\rm at}$ 符号相同，且 $S_\omega > 0$。在非零整数填充下，费米能级位于 Hubbard-I 能带的能隙中。我们有 $S_0 = \mu/\Sigma_{\rm at}(0) > 1$，因此 $\rho_\Delta(0) = 0$。例如，在 $\nu = -2$ 平台的中心， $\mu = -2U$， $\Sigma_{\rm at}(0) = -U$ 且 $S_0 = 2$： F能带终止于 $\epsilon_F = -U/4$，而上能带始于 $E_+ = U/2$。在掺杂态中， ϵ_F 位于费米能级之上，且 F 能带穿过费米能级。例如，当 $\mu = -2.3U$时， $S_0 = 0.42$，且 $\rho_\Delta(0) = s^2|\mu|$。图 7 将 $O(s^2)$ 阶的浴与 $\nu = -2$ 下完整动力学平均场理论的浴进行了比较。

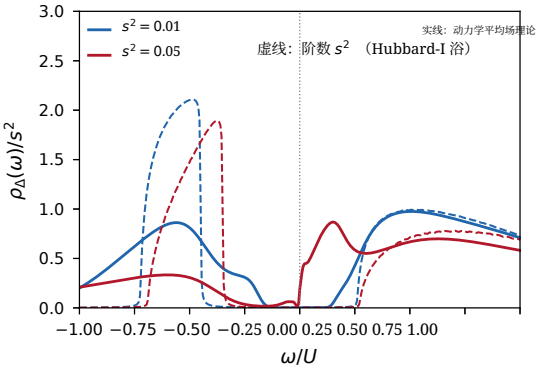


图 7. 浴 $\rho_\Delta(\omega)/s^2$ 处 $\nu = -2$ 和 $T = U/200$ 对于 $s^2 = 0.01$ 和 0.05，化学势与图 3(c,d) 中相同：动力学平均场理论（实线）以及 阶浴 s^2，方程（B7）采用 Hubbard-I 自能，并使用晶格的分布 $P(S)$ 计算（虚线）。闭式表达式，方程（C10），表示具有 $P(S)(1-S)^2 = s^2$ 的同一浴。

以 F表示浴费米子。—动力学平均场理论的杂质位点作用量也可写成安德森杂质模型。我们用自由费米子 $b_{l\alpha}$ 表示浴，它们处于能级 ϵ_l，并以振幅 V_l与轨道 f_i 耦合，因此 $H_{\rm imp} = H_{\rm at} + \sum_{l\alpha}[\epsilon_l b^\dagger_{l\alpha} b_{l\alpha} + V_l(\hat{} f^\dagger_\alpha b_{l\alpha} + b^\dagger_{l\alpha} \hat{} f_\alpha)]$。对应关系为 $\Delta_f(z) = \Delta_\infty + \sum_l V_l^2/(z-\epsilon_l)$，静态部分为附录 $\Delta_\infty = \eta_S^2 \Sigma_\infty$ 中的 B，并且

$$[\hat{f}_\alpha, H_{\rm imp}] = (\Sigma_\infty - \mu_{\rm imp})\hat{f}_\alpha + \Phi F_\alpha + \sum_l V_l b_{l\alpha}, \tag{C12}$$

因此，轨道 f_i 只能通过费米子 $\sum_l V_l b_{l\alpha}$ 感受到浴。下面我们尝试解释这些浴费米子的含义。考虑原始的完整模型，位于 $\boldsymbol{R}_0$ 的轨道 f_i 遵循相同的运动方程：由于 $\{\hat{} f_{0\alpha}, \hat{} f^\dagger_{j\beta}\} = \delta_{\alpha\beta} S_{0j}$，每个格点 j 的充电项都会给出与原子中相同的结果，即 [方程（C4）], $[\hat{} f_{0\alpha}, \ ^U_2(\hat{} n_{fj} - \ ^{N_f}_2)^2] = \hat{} S_{0j}(\Sigma_\infty f_{j\alpha} + \Phi F_{j\alpha})$，其中 $F_{j\alpha}$ 是格点 j的正交费米子，并且

$$[\hat{f}_{0\alpha}, H] = (\Sigma_\infty - \mu)\hat{f}_{0\alpha} + \Phi F_{0\alpha} + \Xi_{0\alpha}, \qquad \Xi_{0\alpha} = \sum_{j\neq 0} S_{0j}\big(\Sigma_\infty \hat{f}_{j\alpha} + \Phi F_{j\alpha}\big). \tag{C13}$$

比较方程（C12）和（C13），$\sum_l V_l b_{l\alpha}$ 表示 $\Xi_{0\alpha}$，但有一点区别。由于轨道彼此重叠， $\Xi_{0\alpha}$ 与其自身$\hat{} f_{0\alpha}$并不正交：它沿$\hat{} f_{0\alpha}$方向的分量为 $\langle\{\Xi_{0\alpha}, \hat{} f^\dagger_{0\alpha}\}\rangle = \Sigma_\infty \sum_{j\neq 0} |S_{0j}|^2 = \eta_S^2 \Sigma_\infty = \Delta_\infty$（ F_j不起作用，因为 $\langle \delta N'_{j\alpha}\rangle = 0$）。这一分量相当于该轨道的位点能：它是浴的静态部分，~ ^会使杂质能级从 μ 移至 $\mu_{\rm imp} = \mu - \Delta_\infty$。其余部分 $\Xi_{0\alpha} = \Xi_{0\alpha} - \Delta_\infty f_{0\alpha}$与该轨道正交，构成动力学浴$\sum_l V_l b_{l\alpha}$。因此，浴费米子由其他格点的正交费米子（振幅为 $S_{0j}\Phi$）以及 f_j 轨道（振幅为 $S_{0j}\Sigma_\infty$ ，在图6中以虚线表示）组成。

现在我们将 $\Xi_{0\alpha}$ 表示在动量空间中，

$$\Xi_{0\alpha} = \frac{1}{\sqrt{N_M}} \sum_{\boldsymbol{k}} e_{\boldsymbol{k}} \, (1 - S_{\boldsymbol{k}}) \big(\Phi F_{\boldsymbol{k}\alpha} + \Sigma_\infty \sqrt{S_{\boldsymbol{k}}} \, c_{\boldsymbol{k}\alpha}\big), \qquad e_{\boldsymbol{k}} = -e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}_0} e^{i\theta_{\boldsymbol{k}}}, \tag{C14}$$

因此只有动量为 $S_{\boldsymbol{k}} \neq 1$ 的状态有贡献。在掺杂态的费米能级附近，这些布洛赫态在 $\boldsymbol{k}_0$周围形成一个下哈伯德带的小口袋，几乎完全由 F 构成（如下所示），因此 $c_{\boldsymbol{k}}$ 项很小。将相位 $e_{\boldsymbol{k}}$ 吸收到 $F_{\boldsymbol{k}}$中后，浴费米子便是口袋中其他格点上的正交费米子，

$$\sum_l V_l b_{l\alpha} = \frac{\Phi}{\sqrt{N_M}} \sum_{\boldsymbol{k}} \phi_{\boldsymbol{k}} F_{\boldsymbol{k}\alpha}, \tag{C15}$$

其形状因子 $\phi_{\boldsymbol{k}}$ 如下所示。

我们关注 $\boldsymbol{k}_0$ 附近的区域，其中 $S_{\boldsymbol{k}} \ll 1$。若掺杂进入下哈伯德带，口袋几乎完全由 F 形成：在 $S_{\boldsymbol{k}}$ 的一阶近似下，其能量为 $E_{\boldsymbol{k}} = \epsilon_F + S_{\boldsymbol{k}}\Phi^2/(\epsilon_F + \mu)$，其在电子上的权重为 $S_{\boldsymbol{k}}$ 量级。式（C15）的形状因子是 $F_{\boldsymbol{k}}$ 在式（C14）中的系数，

$$\phi_{\boldsymbol{k}} = 1 - S_{\boldsymbol{k}} \simeq \frac{k_*^2}{k^2 + k_*^2}, \tag{C16}$$

其在 $\boldsymbol{k}_0 = 0$ 处为 1。因此，浴是按 $\phi_{\boldsymbol{k}}^2$ 计数的 F 态密度的 Φ^2 倍，

$$\rho_\Delta(\omega) = \Phi^2 \rho_F(\omega), \qquad \rho_F(\omega) = \frac{1}{N_M} \sum_{\boldsymbol{k}} \phi_{\boldsymbol{k}}^2 v_{\boldsymbol{k}}^2 \, \delta(\omega - E_{\boldsymbol{k}}), \tag{C17}$$

其中 $v_{\boldsymbol{k}}^2$ 的权重 F 在 $E_{\boldsymbol{k}}$处的能带态中，而在 $\boldsymbol{k}_0 = 0$附近趋近于 1。在口袋顶部，$\phi \to 1$，能带的态密度为 $P(S)\,|\mathrm{d}S/\mathrm{d}E| = s^2|\epsilon_F + \mu|/\Phi^2$ 其中 $P(S) \simeq s^2$，且 $\rho_\Delta(\epsilon_F) = s^2|\epsilon_F + \mu|$，与式 (C10) 相符。

3. 一阶 Hubbard-III

在浴 $\Delta_f(z)$（附录 C 2）中，杂质格点不再只是原子莫特绝缘体，因此我们必须求出 $\Sigma_f(z)$的修正。本小节将说明，自能保留了 F的极点，不过现在具有其自身的自能Σ_F，

$$\Sigma_f(z) = \Sigma_\infty + \frac{\Phi^2}{z - \epsilon_F - \Sigma_F(z)}, \qquad \Sigma_F(z) = (N_f + 1)\big[\Delta_f(z) - \Delta_\infty\big] + O(s^4), \tag{C18}$$

其中 ϵ_F 和 Σ_∞ 来自式 (C8)。第二个表达式等价于 Hubbard 第三近似 [86]。简而言之，杂质位点上的费米子 F 通过一个 Kondo形式的顶角 U 衰变为浴费米子，同时杂质原子的磁矩发生翻转，由此产生散射率

$$\Gamma_F(\omega) \equiv -\operatorname{Im}\Sigma_F(\omega + i0^+) = (N_f + 1)\,\pi\rho_\Delta(\omega) = (N_f + 1)\,\pi s^2|\omega + \mu|. \tag{C19}$$

推导。—我们使用式（C12）中的 Anderson模型， $H = H_{\mathrm{at}} + H_{\mathrm{bath}} + H_{\mathrm{hyb}}$，并写作 $\Delta(z) \equiv \Delta_f(z) - \Delta_\infty = \sum_l V_l^2/(z - \epsilon_l)$ 作为浴的动力学部分，这是电子能够衰变进入的唯一部分。推迟格林函数 $\langle\!\langle A;\ B^\dagger\rangle\!\rangle_z = -i\int_0^\infty \mathrm{d}t\, e^{izt}\langle\{A(t)\ \ B^\dagger\}\rangle$ 满足运动方程

$$z\,\langle\!\langle A; B^\dagger\rangle\!\rangle_z = \langle\{A, B^\dagger\}\rangle + \langle\!\langle [A, H]; B^\dagger\rangle\!\rangle_z = \langle\{A, B^\dagger\}\rangle + \langle\!\langle A; [H, B^\dagger]\rangle\!\rangle_z, \tag{C20}$$

其中，在第二种形式中，对易子作用于 $B^\dagger$；在定态中，这两种形式相等，对于每个算符 Y，$\hat{}\,\hat{}\langle[Y, H]\rangle = 0$。对于电子，$[f_\alpha, H] = (\Sigma_\infty - \mu_{\mathrm{imp}})\,f_\alpha + \Phi F_\alpha + \sum_l V_l b_{l\alpha}$，而浴项恰好给出 $\Delta(z)\,G_f$，因为 $(z - \epsilon_l)\langle\!\langle b_{l\alpha};\ \hat{}\ f_\alpha^\dagger\rangle\!\rangle = V_l G_f$。对于 F，对易子包含三个部分，$[F_\alpha, H] = \hat{}[F_\alpha, H_{\mathrm{at}}] + [F_\alpha, H_{\mathrm{bath}}] + [F_\alpha, H_{\mathrm{hyb}}]$: 原子在 P_G [式（C6）], 中给出 $\Phi f_\alpha + \epsilon_F F_\alpha$，浴项为零，因为 F_α不包含浴算符，而杂化产生一个新的算符，

$$[F_\alpha, H_{\mathrm{hyb}}] \equiv U X_\alpha, \qquad X_\alpha = \frac{1}{\Phi}\Big(\delta N'_\alpha[\hat{f}_\alpha, H_{\mathrm{hyb}}] + [N'_\alpha, H_{\mathrm{hyb}}]\,\hat{f}_\alpha\Big). \tag{C21}$$

因此

$$\big[z + \mu_{\mathrm{imp}} - \Sigma_\infty - \Delta(z)\big]G_f = 1 + \Phi\langle\!\langle F_\alpha; \hat{f}_\alpha^\dagger\rangle\!\rangle, \qquad (z - \epsilon_F)\langle\!\langle F_\alpha; \hat{f}_\alpha^\dagger\rangle\!\rangle = \Phi G_f + U\langle\!\langle X_\alpha; \hat{f}_\alpha^\dagger\rangle\!\rangle. \tag{C22}$$

浴费米子仅通过 X_α到达 F。定义 Σ_F为 $U\langle\!\langle X_\alpha;\ \hat{}\ f_\alpha^\dagger\rangle\!\rangle = \Sigma_F\langle\!\langle F_\alpha;\ \hat{}\ f_\alpha^\dagger\rangle\!\rangle$，由这两个方程可得到式 (C18) 的第一个方程。结合测得的 $\Phi^2 = U^2\langle\delta N_\alpha'^2\rangle$和 Σ_∞，该关系对所有阶数均成立，因为在 Mori 连分式 [100], 和 $\tilde{G}_F(z) = [z - \epsilon_F - \Sigma_F(z)]^{-1} = (\Sigma_f - \Sigma_\infty)/\Phi^2$中，$F$的局域传播子可由 CT-HYB 直接给出；在能带中，$c_{\boldsymbol{k}}$ 以振幅 $\sqrt{S_{\boldsymbol{k}}}\,\Phi$与 $F_{\boldsymbol{k}}$ 耦合，$G_F(\boldsymbol{k}, z) = \tilde{G}_F(z)(\zeta - S_{\boldsymbol{k}}\Sigma_\infty)G_c(\boldsymbol{k}, z)$在轨道权重为零处化简为 $\tilde{G}_F$。为求得 Σ_F，我们将式 (C20) 的第二种形式应用于 $\langle\!\langle X_\alpha;\ B^\dagger\rangle\!\rangle$，其中 $B = b_{l\alpha}$、$\hat{}\,f_\alpha$和 F_α利用 $[H, B^\dagger] = [B, H]^\dagger$及上述对易子。由于 X_α与$\hat{}\ f_\alpha$以及浴正交，$\langle\{X_\alpha, b_{l\alpha}^\dagger\}\rangle = \langle\{X_\alpha, \hat{}\,f_\alpha^\dagger\}\rangle = 0$，而 $\langle\{X_\alpha, F_\alpha^\dagger\}\rangle = O(V^2)$仅使 ϵ_F发生平移。因此

$$\begin{gathered}(z - \epsilon_l)\langle\!\langle X_\alpha; b_{l\alpha}^\dagger\rangle\!\rangle = V_l\langle\!\langle X_\alpha; \hat{f}_\alpha^\dagger\rangle\!\rangle, \qquad (z + \mu_{\mathrm{imp}} - \Sigma_\infty)\langle\!\langle X_\alpha; \hat{f}_\alpha^\dagger\rangle\!\rangle = \Phi\langle\!\langle X_\alpha; F_\alpha^\dagger\rangle\!\rangle + \sum_l V_l\langle\!\langle X_\alpha; b_{l\alpha}^\dagger\rangle\!\rangle, \\ (z - \epsilon_F)\langle\!\langle X_\alpha; F_\alpha^\dagger\rangle\!\rangle = \Phi\langle\!\langle X_\alpha; \hat{f}_\alpha^\dagger\rangle\!\rangle + U\langle\!\langle X_\alpha; X_\alpha^\dagger\rangle\!\rangle,\end{gathered} \tag{C23}$$

上述方程的镜像形式，以 $U\langle\!\langle X_\alpha;\ X_\alpha^\dagger\rangle\!\rangle$ 作为源。前两个给出 $g(z)\langle\!\langle X_\alpha;\ \hat{}\ f_\alpha^\dagger\rangle\!\rangle = \Phi\langle\!\langle X_\alpha;\ F_\alpha^\dagger\rangle\!\rangle$，其中 $g(z) = z + \mu_{\mathrm{imp}} - \Sigma_\infty - \Delta(z)$，而第三个则给出 $\langle\!\langle X_\alpha;\ F_\alpha^\dagger\rangle\!\rangle = \bar{G}_F\,U\langle\!\langle X_\alpha;\ X_\alpha^\dagger\rangle\!\rangle$，其中 $\bar{G}_F =$

$[z-\epsilon_F-\Phi^2/g(z)]^{-1}$。另一方面，关于 G_f 和 $\langle\langle F_\alpha;\ \hat{}f_\alpha^\dagger\rangle\rangle$ 的方程给出 $\langle\langle F_\alpha;\ \hat{}f_\alpha^\dagger\rangle\rangle = \Phi G_f/(z-\epsilon_F-\Sigma_F)$，其中 $G_f^{-1}=g-\Phi^2/(z-\epsilon_F-\Sigma_F)$。将二者代入定义 $\Sigma_F\langle\langle F_\alpha;\ \hat{}f_\alpha^\dagger\rangle\rangle = U\langle\langle X_\alpha;\ \hat{}f_\alpha^\dagger\rangle\rangle$ 得到

$$U^2\langle\langle X_\alpha; X_\alpha^\dagger\rangle\rangle = \frac{\Sigma_F}{1-\bar{G}_F\Sigma_F} = \Sigma_F+\Sigma_F\bar{G}_F\Sigma_F+\ldots, \qquad \bar{G}_F(z)=\Big[z-\epsilon_F-\frac{\Phi^2}{z+\mu_{\rm imp}-\Sigma_\infty-\Delta(z)}\Big]^{-1}, \tag{C24}$$

因此 $U^2\langle\langle X_\alpha;\ X_\alpha^\dagger\rangle\rangle$ 是 F的完整散射振幅，而 Σ_F是其不经由 F返回的部分。 X_α对 V为一阶，因此 Σ_F 为二阶，而返回项为四阶。在二阶下，我们也可从 X 费米子的运动中略去杂化，因为其一阶修正会使浴费米子数目改变一，平均为零。因此 $\Sigma_F = U^2\Pi + O(V^4)$，其中泡图 $\Pi(z) = \langle\langle X_\alpha;\ X_\alpha^\dagger\rangle\rangle_z^{(0)}$为该对在无杂化下的运动。

具体写出时， X_α 是一个浴费米子乘以原子的一个算符，

$$X_\alpha = \frac{1}{\Phi}\sum_l V_l\Big[\delta N'_\alpha\, b_{l\alpha} - \sum_{\beta\neq\alpha}\hat{f}_\beta^\dagger\hat{f}_\alpha\, b_{l\beta} - \sum_{\beta\neq\alpha} b_{l\beta}^\dagger\hat{f}_\beta\hat{f}_\alpha\Big]. \tag{C25}$$

它包含三项，我们将舍去第三项：该项会使杂质位点离开子空间 P_G，转变为 $n_f\pm 2$ 个电子，并付出约为 U、超出 Hubbard 能带的能量代价。无迹磁矩 $S^{\alpha\beta}=\hat{}f_\beta^\dagger\hat{}f_\alpha - q\delta_{\alpha\beta}$ 和多重态中的 $\delta N'_\alpha = -S^{\alpha\alpha}$ 使前两项构成一个复合算符，

$$X_\alpha = -\frac{1}{\Phi}\sum_\beta S^{\alpha\beta}\sum_l V_l b_{l\beta} = -\frac{1}{\sqrt{N_M}}\sum_{\boldsymbol{k}\beta}\phi_{\boldsymbol{k}}\, S^{\alpha\beta}F_{\boldsymbol{k}\beta}, \tag{C26}$$

其中局域磁矩与式（C15）（图 8）中的一个浴费米子结合。没有杂化时，局域磁矩被冻结，浴费米子则是自由的，因此我们有

$$\Pi(z) = \frac{1}{\Phi^2}\sum_{l\beta}V_l^2\,\frac{(1-n_l)\langle S^{\alpha\beta}S^{\beta\alpha}\rangle + n_l\langle S^{\beta\alpha}S^{\alpha\beta}\rangle}{z-\epsilon_l}, \tag{C27}$$

其中 n_l 表示浴态的占据数，接着，

$$\Pi(z) = \frac{C}{\Phi^2}\Delta(z), \qquad C=\sum_\beta\langle S^{\alpha\beta}S^{\beta\alpha}\rangle = \langle(n_\alpha-q)^2\rangle + \sum_{\beta\neq\alpha}\langle n_\beta(1-n_\alpha)\rangle = q(1-q)(N_f+1). \tag{C28}$$

最终我们得到 $\Sigma_F(z) = U^2\Pi = (N_f+1)\,\Delta(z)$。

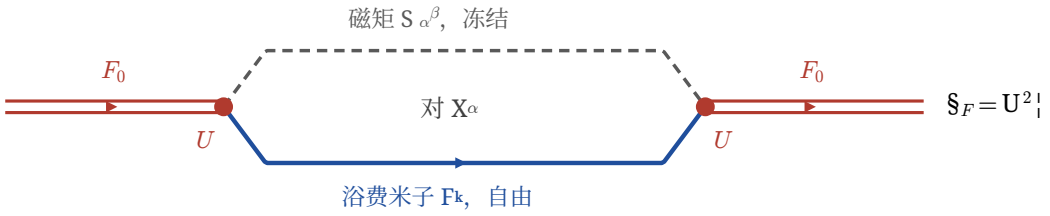


图 8. Hubbard-III 中 F 的自能。 F_0 （红色双线）从杂质位点出发，经由顶角 U （红点）$[F_\alpha, H_{\rm hyb}] = UX_\alpha$ 衰变为式（ X_α C26）中的一对：一个浴费米子（蓝色）和局域磁矩（虚线）。

结果。—图 9 展示了 Hubbard-I 和 Hubbard-III 中的谱函数。在非零整数填充时，费米能级位于 ϵ_F 与 E_+之间的能隙中，因此 $\Gamma_F(0)=0$：Hubbard-III 保留了能隙，但能隙略有缩小，并按与 $|\omega+\mu|$成比例的幅度展宽能带的色散部分。在两个整数之间， $\Gamma_F(0)$ 会发生跃变， [图 9(c)]。此处 $\Gamma_F(0) = (N_f+1)\pi\rho_\Delta(0)$，其中 $\rho_\Delta(0) = |\mu|P(S_0)(1-S_0)^2$, 式 (C11)，而 $S_0=\mu/\Sigma_{\rm at}(0)$ 是费米能级处布洛赫态的权重；图中采用的是晶格的 $P(S)$。式 (C19) 的简单表达式是其在 $P(S)(1-S)^2 = s^2$时的取值，该式适用于远离平坦区域 $S\simeq 1$的色散态 $0<S_0<1$。例如，从 $\nu=-2$ 到 -1，原子持有 $n_f=2$ 个电子，直到 $\mu=-3U/2$，此时其电荷态 2 和 3 简并，而在 $n_f=3$ 之上则不同。随着 $n_f=2$ ，添加的电子填满上Hubbard带的平坦底部，

$S_0 \simeq 1$，此时 $(1-S_0)^2$，浴也随之消失，因此 $\Gamma_F(0) \simeq 0$。随着 $n_f = 3$，费米能级位于新原子的 F 色散能带中，$0 < S_0 < 1$，而 $\Gamma_F(0)$ 在 $\boldsymbol{k}_0$附近趋近于简单表达式 $(N_f+1)\pi s^2|\mu|$；此时费米能级接近 $\boldsymbol{k}_0$，随着费米能级移向平坦区域，它会降至其下方。在一阶近似下，原子的电荷是由 μ决定的整数，因此变化呈跃变。在掺杂态中，电子以速率通过 F 发生散射

$$\Gamma_0 \equiv -\operatorname{Im}\Sigma_f(0) = \frac{\Phi^2\gamma_F}{\epsilon_F^{*2}+\gamma_F^2}, \tag{C29}$$

其中 $\gamma_F = \Gamma_F(0)$ 与 ϵ_F^* F 的能级，由 Σ_F 的实部所移动，并从费米能级起测量。它随掺杂而移动。在整数填充处，它位于费米能级之下，$\epsilon_F = -U/4$ 处于 $\nu = -2$ 平台的中心。当掺杂开始时，它在 $\mu = -9U/4$ 处穿过费米能级。在掺杂态中，费米能级位于 F 的能带中、其顶部之下，因此 $\epsilon_F^* > 0$ 随空穴数目增长，直至口袋的深度 $\Phi^2/|\mu| \simeq 0.08U$（$\epsilon_F = 0.05U$ 在$\mu = -2.3U$ 处，Hubbard-I 中）。当它在此尺度上缓慢衰变时，F 是费米能级处的尖锐共振，$\gamma_F \ll \epsilon_F^*$，然后 $\Gamma_0 \simeq \Phi^2\gamma_F/\epsilon_F^{*2}$。在相反极限下，$\gamma_F \gg \epsilon_F^*$，$F$是过阻尼的，$\Gamma_0 \simeq \Phi^2/\gamma_F$，并且 F 衰变得越快，电子散射越少。由于掺杂开始时 $\epsilon_F^* \to 0$，对任意 s^2，F 在小掺杂下均为过阻尼；在 $x \simeq 0.2$ 超出 $\nu = -2$ 时，尖锐的 F 要求 $\gamma_F = (N_f+1)\pi s^2|\mu| \ll \epsilon_F^* \simeq 0.05U$，即 Hubbard-I 中 $\mu = -2.3U$ 处 F 的能级，也就是 $s^2 \ll 10^{-3}$。

4. Kondo 解释

消除电荷涨落 $n_f \pm 1$ 通过 Schrieffer–Wolff 变换 [101] 可将杂质 Anderson 模型映射为 Kondo 模型，其中局域磁矩与浴费米子耦合，即与其他格点的正交费米子 $F_{\boldsymbol{k}}$ 通过形状因子 $\phi_{\boldsymbol{k}} = 1 - S_{\boldsymbol{k}}$（附录 C2）

$$H_K = \frac{J_K}{N_M}\sum_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'}\phi_{\boldsymbol{k}}\phi_{\boldsymbol{k}'}F^\dagger_{\boldsymbol{k}\alpha}\Big(S^{\alpha\beta} + \frac{\epsilon_F}{U}\delta_{\alpha\beta}\Big)F_{\boldsymbol{k}'\beta}, \qquad J_K = \frac{U\Phi^2}{E_+E_-}. \tag{C30}$$

这是正文中的方程（7），其中包含了势散射。交换相互作用的量级为 U。但有效耦合受到 F 费米子的态密度抑制：$\rho_F = \rho_\Delta/\Phi^2 = O(s^2)/U$ [方程（C17）]。无量纲耦合

$$g = N_f J_K \rho_F(0) = \frac{N_f U \rho_\Delta(0)}{E_+E_-} \tag{C31}$$

在非零整数填充处消失，此时 $\rho_\Delta(0) = 0$；在掺杂态中则为 $N_f U s^2|\mu|/(E_+E_-)$。在重整化群作用下，g按 $dg/d\ln D = -g^2$ 流动，由此得到近藤温度 $T_K \simeq De^{-1/g}$；其中 D 是费米能级附近 ρ_Δ 保持平坦的窗口，其宽度约为 F 能带的宽度。

推导。—对于 $V_l \ll E_\pm$，存在两个虚过程：一个电子以 E_+的代价从浴进入轨道，随后再次离开；或者以 E_-的代价离开进入浴，随后返回，其中根据方程（C3）在 $\mu_{\rm imp}$能级处。在多重态中，它们给出

$$H_K = J_0\sum_{ll'}V_lV_{l'}\,b^\dagger_{l'\alpha}\Big(S^{\alpha\beta} + \frac{\epsilon_F}{U}\,\delta_{\alpha\beta}\Big)b_{l\beta}, \qquad J_0 = \frac{1}{E_+} + \frac{1}{E_-} = \frac{U}{E_+E_-}. \tag{C32}$$

两个过程都会对交换相互作用作出贡献，而势散射 $J_0\epsilon_F/U$在 F的能级处于费米能级时消失。使用方程（C15）中的浴费米子，这就是方程（C30），其中 $J_K = J_0\Phi^2$。

作为近藤散射主导阶的 ***Hubbard-III***。—近藤耦合将浴费米子散射到与 F的衰变相同的对中，$[F_{\boldsymbol{k}\alpha}, H_K] = -(J_K\phi_{\boldsymbol{k}}/\sqrt{N_M})\,X_\alpha$，除去势散射 [方程（C26）]，其中用顶角$J_K\phi_{\boldsymbol{k}}/\sqrt{N_M}$ 替代 U。在二阶过程中，当磁矩被冻结时，其散射振幅包含与方程（Π C28）相同的泡图，

$$T^{(2)}_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'}(z) = \frac{\phi_{\boldsymbol{k}}\phi_{\boldsymbol{k}'}}{N_M}\,J_K^2\Big[\Pi(z) + \Big(\frac{\epsilon_F}{U}\Big)^2\frac{\Delta(z)}{\Phi^2}\Big], \tag{C33}$$

并且当 F 的能级位于费米能级时，其中 $J_K = U$ 和 $\epsilon_F = 0$，浴费米子的玻恩速率等于 F的 Hubbard-III 衰变率，$(N_f+1)\pi\rho_\Delta(0)$。各因子匹配如下。浴费米子的顶角 $J_K\phi_{\boldsymbol{k}}/\sqrt{N_M}$

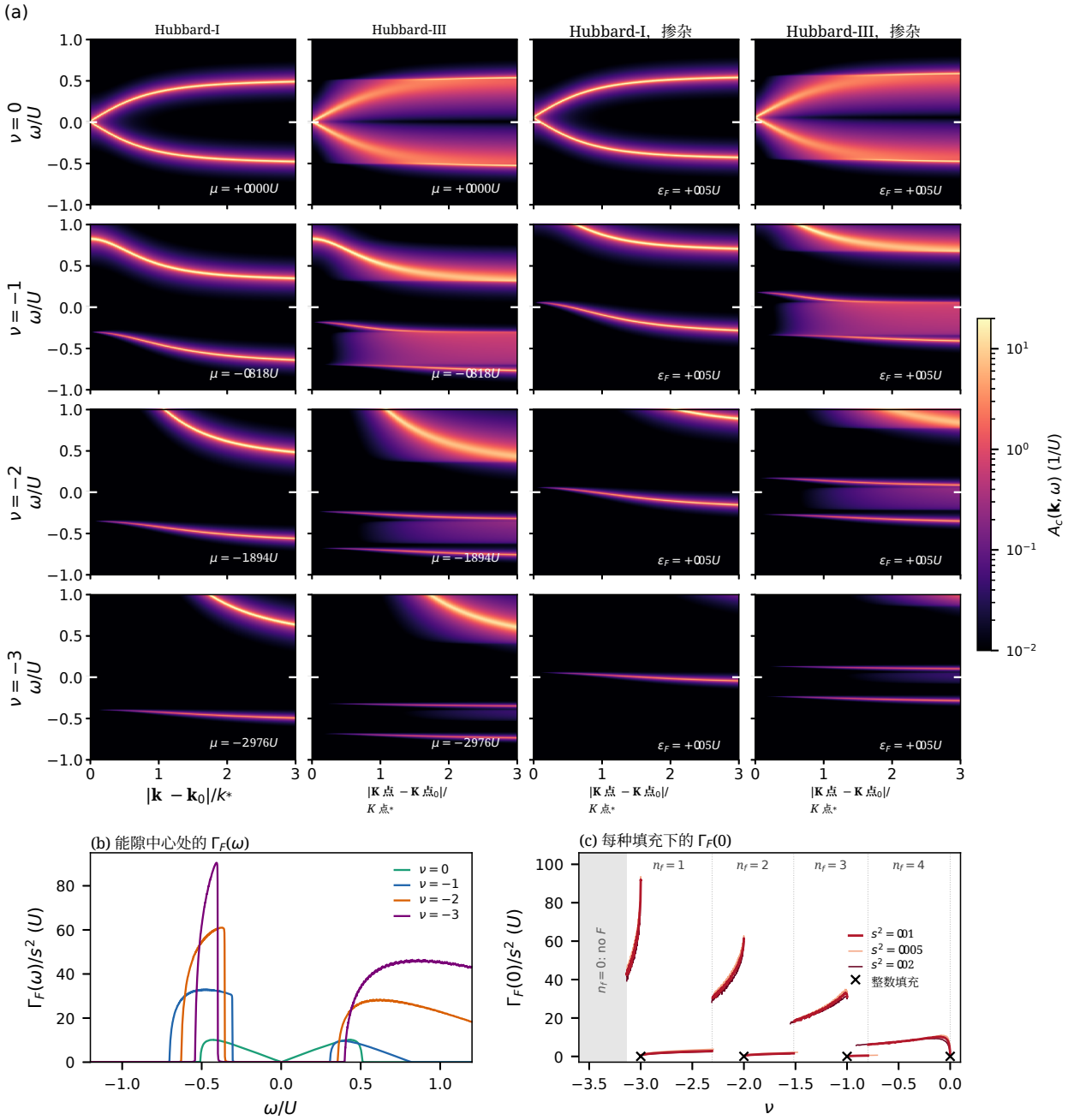


图 9. s^2的一阶近似下整数填充处的 Hubbard-I 和 Hubbard-III（$N_f = 8$，洛伦兹纹理，$T = 0$）。(a) $A_c(\boldsymbol{k},\ \omega)$ 沿 $|\boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}_0|/k_*$ 在 $s^2 = 0.01$ 处对应 $\nu = 0$、-1、-2 和 -3（各行）的结果。各列分别显示能隙中心处有 μ 时的 Hubbard-I 和 Hubbard-III，以及掺杂离开电中性的态，其能级位于费米能级上方 F $0.05U$ 处。颜色刻度为对数，边缘的刻度标出费米能级。谱是在实轴上以 $0.004U$ 的展宽计算得出，未进行解析延拓。Hubbard-III 中界定占据连续谱的尖锐线条是分裂极点。(b) 能隙中心处 F、$\Gamma_F(\omega)/s^2$ 的衰减率。(c) 对每个填充，由精确布里渊区积分得到的 $\Gamma_F(0)/s^2$，其中 $s^2 = 0.01$（粗线），0.005、0.02（细线）。原子的电荷 n_f 标注在每对分支上方。每个整数填充以下，费米能级位于 F 能带中；其上，费米能级则位于上能带的平坦底部。十字标记整数填充处的 $\Gamma_F(0) = 0$，阴影区域为 $n_f = 0$，其中不存在 F。

取代了顶角的费米子 U 的 F [方程（C21）], 并且二者都散射到同一个对 X_α 中，因此泡图 II 是共通的。每个格点都带有一个磁矩，对 N_M 格点的前向振幅求和，得到自能

浴费米子的,

$$\Sigma_F(\boldsymbol{k},z)=N_M T^{(2)}_{\boldsymbol{kk}}(z)=\phi^2_{\boldsymbol{k}}\Big(\frac{J_K}{U}\Big)^2\Big[\Sigma_F(z)+\epsilon_F^2\frac{\Delta(z)}{\Phi^2}\Big], \tag{C34}$$

其中 $\Sigma_F=U^2\Pi=(N_f+1)\Delta(z)$ 是 F 在杂质位点 [处的 Hubbard-III自能]。在 $J_K=U$ 和$\epsilon_F=0$ 处，其为 $\phi^2_{\boldsymbol{k}}\Sigma_F(z)$：在 $\boldsymbol{k}_0$附近，$\phi_{\boldsymbol{k}}=1-S_{\boldsymbol{k}}\simeq 1$ 且 $F_{\boldsymbol{k}}$ 具有局域传播子 $\tilde{G}_F$，浴费米子在杂质位点处具有 F 的自能。因此，Hubbard-III 中 F 的衰变与浴费米子受磁矩散射是同一过程。由于近藤效应是非微扰的，Hubbard-III 在较大的 g 下必然失效；尤其是，低于 T_K 时磁矩的屏蔽超出了关于 s^2的任何展开。因此，我们依赖完整的动力学平均场理论（DMFT）解；当 s^2 超过约 0.02 后，该解便与 Hubbard-III 定性不同。

附录 D：动力学平均场理论结果：级联与莫特转变

1. 级联

对于较小的 s^2，逆压缩率呈现出级联现象（图2）。在每个非零整数填充附近，电子掺杂侧与空穴掺杂侧的表现并不对称。在 $\nu=-2+x$，κ^{-1}从其峰值 $x=0$急剧下降。在 $\nu=-2-x$，它则逐渐降低，如 $\kappa^{-1}\simeq b/\sqrt{x}$所示。相应地，$\mu$ 在 $\mu_0-2b\sqrt{x}$ 之后遵循 $\nu=-1$，-2 而 -3在 $s^2=0.03$ 和 0.05 [图10（c）中对应于 $\nu=-2$]。在魔角双层石墨烯中，同样的行为被归因于狄拉克复现 [13],；其线性色散使态密度随能量线性变化，因此 $\delta\mu\propto=\sqrt{x}$ 以及 $\kappa^{-1}\propto 1/\sqrt{x}$。然而，我们的模型没有刚性能带。在坏金属区，掺杂空穴进入一个没有费米面的非相干连续谱，因此不存在狄拉克费米子。

混合价莫特绝缘体。—— κ^{-1} 随空穴掺杂而呈现的不对称性和缓慢下降，反而可由混合价莫特绝缘体 [57, 58] 的图像解释。在 $s^2=0$，每个轨道都具有整数电荷 n，相互作用能为 $E_n=\frac{U}{2}(n-\frac{N_f}{2})^2$。使一个轨道上的电子数从 n 变为 $n-1$ 的空穴，代价为 $\mu\equiv E_n-E_{n-1}$。在两个相邻的整数填充之间，每个空穴都起相同作用，因此 $\mu(\nu)$ 在该区间内是平坦的，而 κ^{-1} 为零。每当达到整数 ν时，n_f 跃增 1，μ 则跃增 U。在 $s^2>0$ 时，$\nu=-2$ 处的态是混合价莫特态。除双重占据态外，$n_f=2$，其中还有三重占据态 $n_f=3$，而单重占据态更少，$n_f=1$。下文中我们取 $s^2=0.03$。我们定义 $\delta n\equiv n_f-n_c$，即杂质位点电荷超出能带填充的部分。在这种 s^2 下，它几乎保持不变（ [，见图 10(b) 插图]）。

在 $\nu=-2$ 之外，一个空穴可以将三重占据态转变为双重占据态，$3\to 2$，代价为 $E_3-E_2=-\frac{3}{2}U$；也可以将双重占据态转变为单重占据态，$2\to 1$，代价为 $E_2-E_1=-\frac{5}{2}U$。将价态 1、2 和 3 的相互作用能写作 $\sum_n p_n E_n$，其中 $n_f=n_c+\delta n$，我们得到

$$\mu=-\frac{5}{2}U+U\frac{\mathrm{d}p_3}{\mathrm{d}\nu}-\frac{5}{2}U\frac{\mathrm{d}\,\delta n}{\mathrm{d}\nu}, \tag{D1}$$

其中最后一项在所考虑的掺杂范围内较小。因此，空穴的代价比$-\frac{5}{2}U$高出 U倍于移除三重占据态的空穴所占比例，即$\mathrm{d}p_3/\mathrm{d}\nu$。移除三重占据态的代价较低，因此最初的空穴会优先耗尽它们，耗尽速率取决于剩余三重占据态的密度 [图 10(d)],

$$\frac{\mathrm{d}p_3}{\mathrm{d}\nu}=c\,(p_3-p_3^\infty), \tag{D2}$$

其中 c 和 p_3^∞（即浴在偏离整数填充时维持的三重占据态密度）是对动力学平均场理论结果的拟合。该规律在所考虑的整个掺杂范围内都成立；在 $s^2=0.05$处，尽管 c几乎相同，但成立范围较小。因此，过量三重占据态呈指数衰变，$p_3-p_3^\infty=(p_3^0-p_3^\infty)e^{-cx}$，其中 p_3^0 是 $\nu=-2$ [图 10(e)]处的三重占据态密度。将这一衰变代入方程（D1），并将最后一项以及其中省略的价态0和4 一并用常数背景 κ_0^{-1}描述，我们得到

$$\begin{aligned}\mu&=\mu_0-\kappa_0^{-1}x-cU(p_3^0-p_3^\infty)\big(1-e^{-cx}\big),\\ \kappa^{-1}&=\kappa_0^{-1}+c^2U(p_3^0-p_3^\infty)\,e^{-cx},\end{aligned} \tag{D3}$$

其中振幅 $cU(p_3^0-p_3^\infty)$ 由三占据态密度决定，因此只有 μ_0 和 κ_0^{-1}是对 μ拟合的。拟合得到的背景 κ_0^{-1}在 κ^{-1} 的电子侧接近 $\nu=-2$。方程（D3）能很好地复现 μ，见 [图 10(c)]。因此，μ随着三占据态被移除而迅速下降，随后缓慢下降。 μ与$-\frac{5}{2}U$之间的面积为 U的密度的

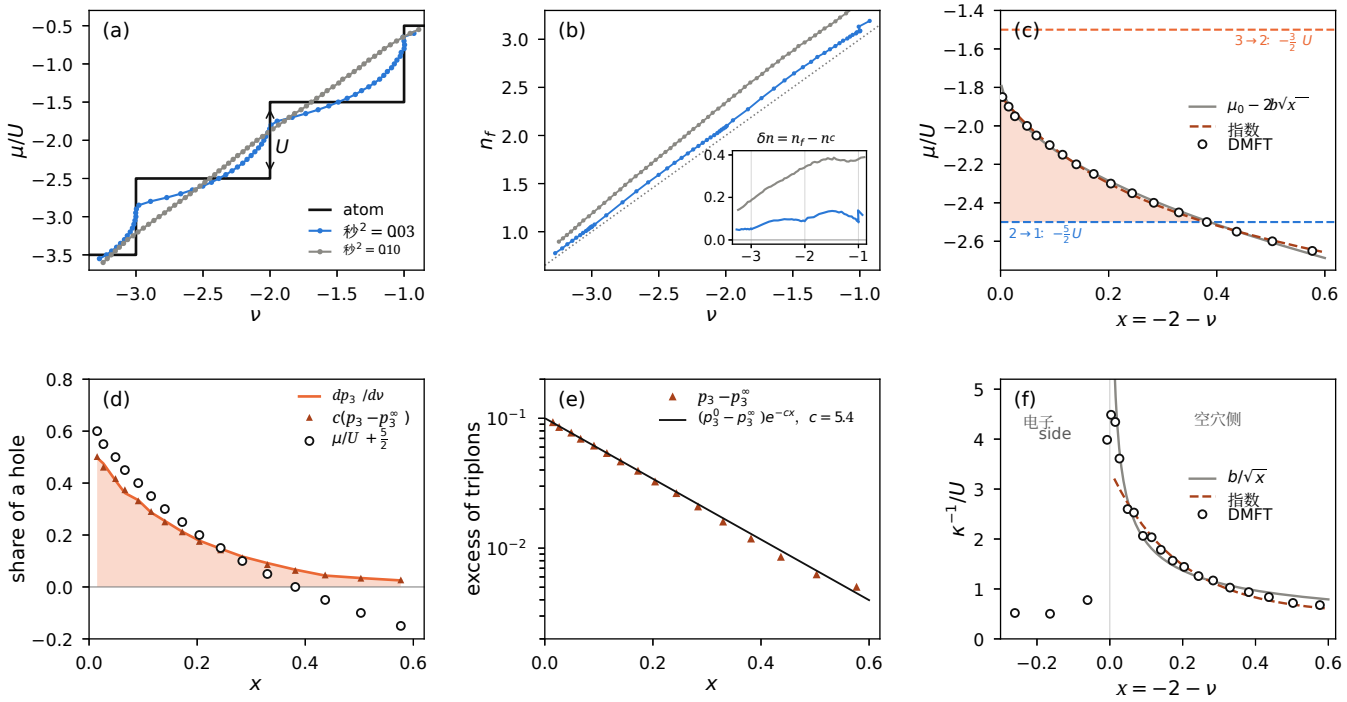


图 10. $\nu=-2$ 处 $T=U/50$之后的级联。(a) 化学势随填充的变化：原子阶梯，以及 $s^2=0.03$ 处的动力学平均场理论（该温度下为类莫特态）和 0.10 处的动力学平均场理论（金属态）。(b) 轨道电荷 n_f 随填充的变化。(c) μ 随 $s^2=0.03$ 处的空穴掺杂 x 变化（圆圈），以及拟合 $\mu_0-2b\sqrt{x}$（灰色）和方程 (D3)（红色虚线）。(d) 每个空穴移除一个三重占据态的比例，$\mathrm{d}p_3/\mathrm{d}\nu$，其中 $\mu/U+\frac{5}{2}$ [方程 (D1)]，以及 $c(p_3-p_3^\infty)$ [方程 (D2)]。(e) 过量三重占据态 $p_3-p_3^\infty$，以及 $(p_3^0-p_3^\infty)e^{-cx}$。(f) κ^{-1} 在 $\nu=-2$ 两侧的变化，以及 $b/\sqrt{x}$ 和方程 (D3)。

三占据态被移除。由此，μ 在整数掺杂处的跃变移至其空穴侧，从而形成了κ^{-1} [图 10(f)]中的不对称齿状特征。在这一掺杂范围内，指数形式与平方根形式几乎无法区分，见[图 10(c,f)]。因此，混合价图像无需狄拉克复现即可解释观测到的 κ^{-1}。

2. 整数填充处的莫特转变

在非零整数填充处，存在由 s^2 调控的莫特转变。我们在 $\nu=-2$ 处仅考虑 Hubbard$U$ 来展示这一转变。在固定温度下，n_c（μ）在 $n_c=2$ [处出现平台（图 11(a)）]。平台宽度给出了图 3(a) 中的电荷能隙。在绝缘侧，平台中心处的自旋磁矩是自由的。其未屏蔽分数 $T\chi_{\mathrm{spin}}/\langle S_z^2\rangle$ 接近于 1，且不依赖温度（图 11(b)） []。在金属侧，磁矩受到屏蔽，近藤温度（附录 E 1）在转变附近从零连续上升（图 11(c)） []。在 s^2 中，从绝缘体向上扫描、从金属向下扫描，在最低温度下直至 $T=U/800$ 都得到相同的解。因此，如果存在一级相变，其温度应低于此温度。我们将转变位置定在 $s_c^2\simeq 0.025$。在 $\nu=-1$ 和 -3 处也会发生类似的转变，分别对应 $s_c^2\simeq 0.033$ 和 0.027。我们将转变位置确定为两个低温下费米面权重曲线的交点（图 11(d–g)） []。

该能级 F 到达费米能级。——我们仅从动力学平均场理论的自能得到 F 费米子的谱函数。在式（5）的辅助粒子图像中，电子 $c_{\boldsymbol{k}}$ 以振幅 $F_{\boldsymbol{k}}$ 耦合到 $\sqrt{S_{\boldsymbol{k}}}\,\Phi$。因此，自能为 $\Sigma_f=\Sigma_\infty+\Phi^2\tilde{G}_F$，其中 $\tilde{G}_F=1/(z-\epsilon_F-\Sigma_F)$ 是 F 的局域传播子。消去 $c_{\boldsymbol{k}}$ 后，可得 F的晶格传播子，

$$G_F(\boldsymbol{k},z)=\frac{1}{z-\epsilon_F-\Sigma_F(z)-\dfrac{S_{\boldsymbol{k}}\Phi^2}{z+\mu-S_{\boldsymbol{k}}\Sigma_\infty}}=\tilde{G}_F(z)\,\frac{z+\mu-S_{\boldsymbol{k}}\Sigma_\infty}{z+\mu-S_{\boldsymbol{k}}\Sigma_f(z)},\tag{D4}$$

其中 $\tilde{G}_F=(\Sigma_f-\Sigma_\infty)/\Phi^2$。因此，谱函数 $A_F(\boldsymbol{k},\ \omega)=-\operatorname{Im}G_F(\boldsymbol{k},\ \omega)/\pi$只需将 $\Sigma_f(\omega)$ 延拓至实轴，正如 A_c 所做的那样。我们采用最大熵方法延拓 Σ_f [102], ，因此本文中的谱仅作定性分析。

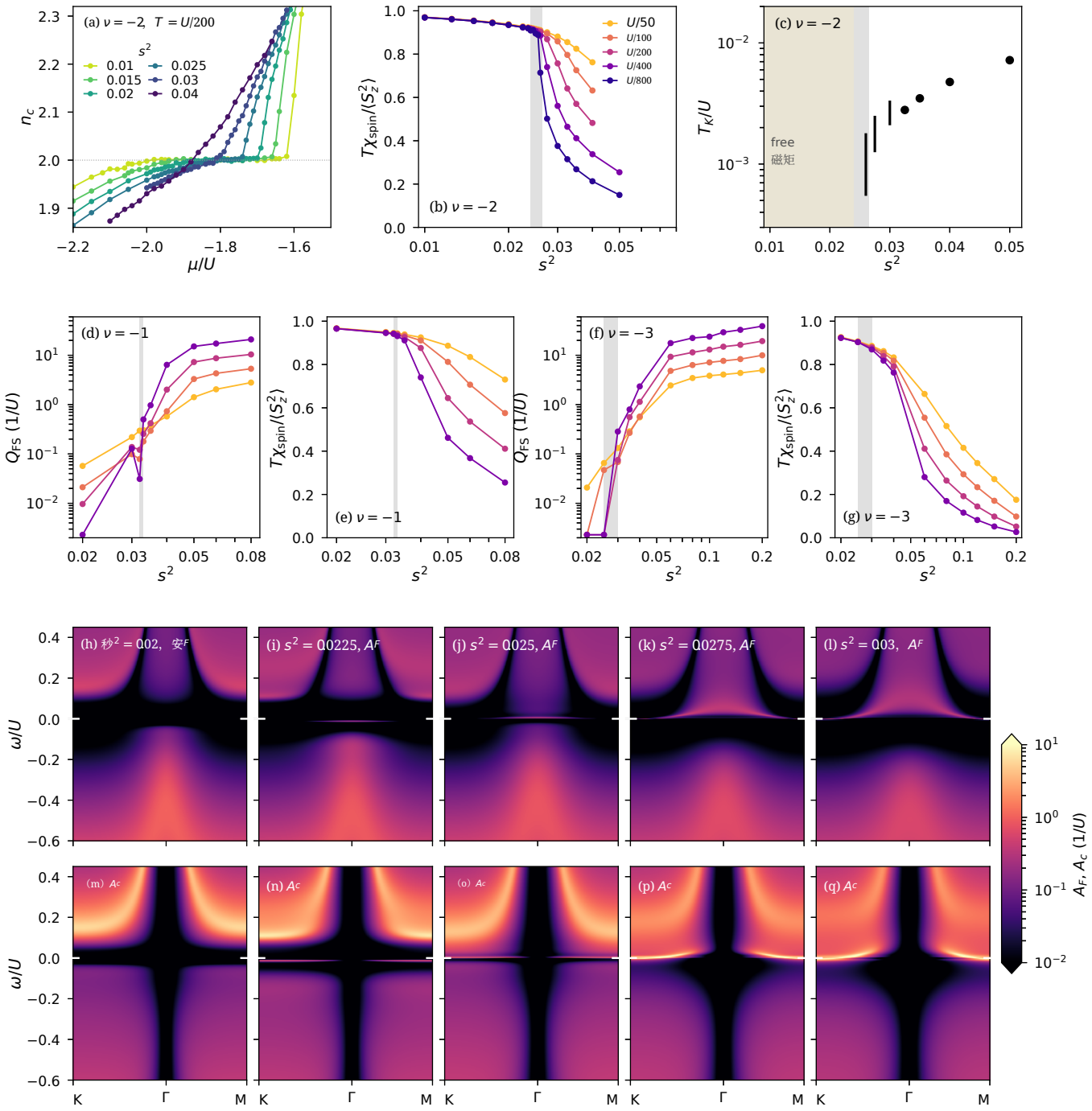


图 11. 整数填充下的莫特转变。(a) $\nu=-2$和 $T=U/200$时，能带填充随 μ的变化。平台 $n_c=2$的宽度即图 3(a) 中的电荷能隙。(b) 图例所示温度下，平台中心 $\mu=-1.80U$处的磁矩未屏蔽分数 $T\chi_{\rm spin}/\langle S_z^2\rangle$随 s^2的变化。(c) $\nu=-2$处的近藤温度。圆圈标出 $\tau=\langle S_z^2\rangle/\chi_{\rm spin}-T$已饱和的点（附录 E 1）。在转变附近（条形标记处），即使在最低温度下，τ仍在上升。在这种情况下，随着冷却，τ增大并趋近 T_K，而 $\tau+T=\langle S_z^2\rangle/\chi_{\rm spin}$则减小并趋近该值，因此该温度下的 T_K介于这两个数值之间。(d–g) 对于 (b) 中的温度，费米面上费米能级附近约 $2T$范围内的权重 $Q_{\rm FS}=\max_{\boldsymbol{k}}[-\beta G_c(\boldsymbol{k},\beta/2)/\pi]$，以及 $T\chi_{\rm spin}/\langle S_z^2\rangle$随 s^2的变化，分别对应 $\nu=-1$和 -3。(h–q) 对于跨越转变的五个 s^2，沿 K–Γ–M路径在 $\nu=-2$和 $T=U/800$处的 $A_F(\boldsymbol{k},\omega)$ [式 (D4)] 以及 $A_c(\boldsymbol{k},\omega)$；数据来自按图 3(c,d) 所示通过最大熵法解析延拓的自能。

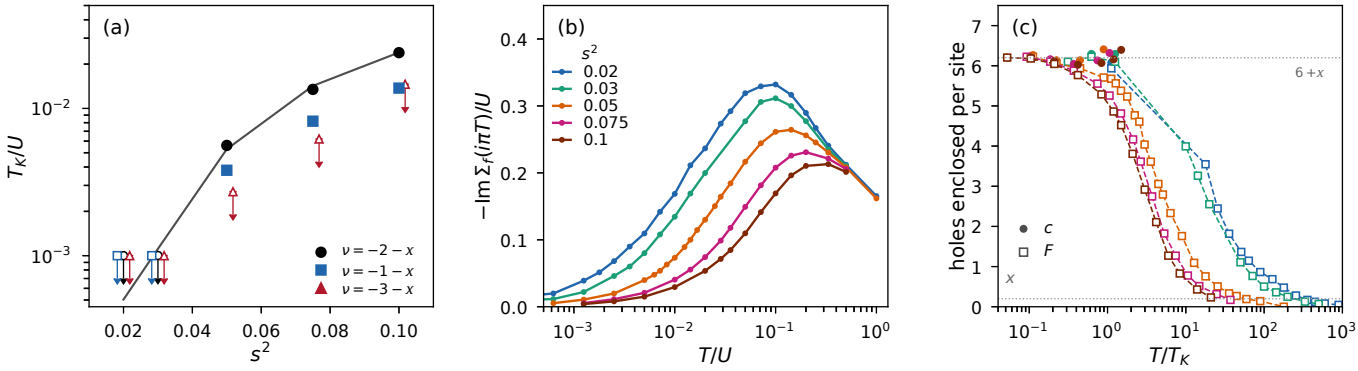


图 12. 掺杂莫特态（$N_f = 8$，超出 $\nu = -2$ 的空穴数为 $x \simeq 0.2$，范围从 $T = U$ 到 $U/3200$）。(a) 近藤温度随超出 $\nu = -2$ 的 s^2、-1 和 -3 的变化。对于带箭头的空心符号，最低温度下 τ 尚未饱和，且 T_K 低于所示数值。低于 $U/1000$ 的数值以 $U/1000$ 绘出。曲线表示 $\nu = -2 - x$ 在 $D = 0.079U$ 下的 $T_K = De^{-1/g}$。(b) 电子散射率 $-\mathrm{Im}\ \Sigma_f(i\pi T)$。(c) 在费米能级处，由电子（实心）权重和 F（空心）权重的最大值所围成的每格点空穴数。高于 T_K 时，F 的最大值位于费米能级以上的一条能带上，因此不是费米面。s^2 的颜色同 (b)。

˜在 Γ处，其中 $S_{\boldsymbol{k}} = 0$，电子解耦，且 $G_F = G_{F^\circ}$。在那里，占据带的顶部主要由 F主导。低温下的谱显示能隙如何闭合 [图 11(h–q)]。在绝缘体中，该能带的顶部位于费米能级以下，在 s_c^2 处与费米能级接触，并在更远处穿过费米能级。在金属中，磁矩受到屏蔽，电子在远离 Γ的位置处于费米能级附近的一条窄能带中。该能带形成重费米液体。

附录 E：动力学平均场理论结果：掺杂莫特态

我们向 $\nu = -2$ 中掺入 $x \simeq 0.2$ 个空穴，并追踪该态从 $T = U$ 降至 $U/3200$ 的变化，考察若干个 s^2 (图 12)。我们先直接介绍动力学平均场理论的结果，然后用辅助粒子理论对其进行拟合。

1. 近藤温度

我们定义 $T_K = \langle S_z^2\rangle/\chi_{\mathrm{spin}}(T \to 0)$，其中 $\langle S_z^2\rangle$和 χ_{spin}分别是等时关联函数$\langle n_\alpha n_\beta\rangle$和静态磁化率中味无迹部分。我们通过 $\tau(T) = \langle S_z^2\rangle/\chi_{\mathrm{spin}} - T$得到它。如果 $\chi_{\mathrm{spin}} = \langle S_z^2\rangle/(T + T_K)$呈居里–外斯形式，那么 $\tau = T_K$ 在任意温度下都成立。在掺杂金属中，τ 随冷却而减小，并在T_K处趋于平稳，此时 χ_{spin} 在费米液体中达到饱和。如果在最低温度下 τ 尚未饱和，那么它就是 T_K的上限。在 $\nu = -2$附近的莫特转变处，高温下磁矩近乎自由，τ 反而随冷却而升高，因此我们将 T_K [限定在图 11(c)所示的范围内]。

除此之外，$\nu = -2$ 近藤温度遵循附录 $T_K = De^{-1/g}$ 中的单圈定律 C4，其中 $g = N_f U\rho_\Delta(0)/(E_+E_-)$ 以及浴 $\rho_\Delta(0)$ 取值于 T_K。拟合得到的截断 D接近图 $\Phi^2/|\mu|$12(a) 中能带的宽度F [图 12(a)]。在 $\nu = -1$ 和 -3 的情况下，近藤温度更低。

2. 散射率与费米面

散射率。——电子散射率 $-\mathrm{Im}\ \Sigma_f(i\pi T)$ 随降温从 $T = U$开始增大，达到峰值后又下降[图 12(b)]。Hubbard-III 在 s^2 的一阶近似下，采用相同的杂质电荷，在约 $U/5$以上重现了这一现象，但在其以下则失效。电子散射率在峰值以下随温度线性下降。在 $s^2 = 0.05$时，$\Gamma_0 = -\mathrm{Im}\ \Sigma_f(i0^+) = (3.4–3.8)\,T$，对应的温度为 $T_K = U/178$的三至九倍。

费米面面积。—费米能级处的权重 $Q_\beta(S) = -\beta G(S, \beta/2)/\pi$无需进行解析延拓，可用作“费米面”的度量。我们分别计算电子 $G_c = 1/(z + \mu - S\Sigma_f)$ 和 F 的权重，采用式（D4）中的传播子，轨道权重为 S。在 S_{ring} 处的极大值表明可能存在费米面，其轮廓为 $S_{\boldsymbol{k}_F} = S_{\mathrm{ring}}$。其体积为 $A_{\mathrm{FS}} = N_f \int_0^{S_{\mathrm{ring}}} P(S)\,\mathrm{d}S$ 每格点空穴数。我们预计 A_{FS} 在小费米面情况下为 x」

面，而 $N_f - n_c$在常规费米液体情况下为 $A_{\rm FS} = 6 + x$。正如重费米液体所预期的那样，我们确实发现 T_K低于[图 12(c)]。高于 T_K 时不存在费米面。电子在费米能级处的权重在区域内部没有极大值。权重 F 的极大值位于其能带上，且高于费米能级；冷却时，该能带向下移动。在任何温度下都不存在清晰的小费米面。即使我们仍将权重 F 的极大值视为费米面，其面积也会随着冷却而持续增大 [图 12(c)], ，这进一步表明坏金属没有费米面。

3. 使用辅助粒子理论进行拟合

这里我们展示，辅助粒子框架中， $c_{\boldsymbol{k}}$ 与一对辅助费米子 F和 F'杂化，能够捕捉从 T_K 以上的坏金属态到 T_K以下的重费米液体态的演变。

平均场理论。—没有散射时，该理论是二次型的。对于每种味，

$$H_{\rm MF} = \sum_{\boldsymbol{k}} \Big[(S_{\boldsymbol{k}}\Sigma_\infty - \mu)\, c^\dagger_{\boldsymbol{k}} c_{\boldsymbol{k}} + \sqrt{S_{\boldsymbol{k}}}\,\Phi \left(c^\dagger_{\boldsymbol{k}} F_{\boldsymbol{k}} + \text{H.c.} \right) + \epsilon_F F^\dagger_{\boldsymbol{k}} F_{\boldsymbol{k}} + \epsilon_{F'} F'^\dagger_{\boldsymbol{k}} F'_{\boldsymbol{k}} + B \left(F^\dagger_{\boldsymbol{k}} F'_{\boldsymbol{k}} + \text{H.c.} \right) \Big], \tag{E1}$$

其中， $F_{\boldsymbol{k}}$ 和 $F'_{\boldsymbol{k}}$ 是局域辅助粒子的傅里叶分量。在基底($c_{\boldsymbol{k}}$， $F_{\boldsymbol{k}}$， $F'_{\boldsymbol{k}}$)中，布洛赫哈密顿量为

$$H_{\boldsymbol{k}} = \begin{pmatrix} S_{\boldsymbol{k}}\Sigma_\infty - \mu & \sqrt{S_{\boldsymbol{k}}}\,\Phi & 0 \\ \sqrt{S_{\boldsymbol{k}}}\,\Phi & \epsilon_F & B \\ 0 & B & \epsilon_{F'} \end{pmatrix} \tag{E2}$$

其能量以费米能级为参照。图14使用在 $U/400$ 处为 $s^2 = 0.05$拟合的参数构造能带，这些参数使 F 位于费米能级以上，而 F' 位于其下。不考虑耦合 [时，见图14(a)] ，电子以其Hartree能 $S_{\boldsymbol{k}}\Sigma_\infty - \mu$色散，而 F和 F' 则是平坦能级。耦合 Φ 将 c 与 F杂化，形成Hubbard-I的两条能带，而自旋子 F' 仍处于平坦能级，代表一个未屏蔽磁矩 [，见图14(b)]。耦合B 将 F 与 F' 杂化，形成三条能带 [，见图14(c)]。下部和上部能带几乎承载了 F 在 K处的全部权重。它们是Hubbard能带，经动力学平均场理论（DMFT）处理后， $\Sigma_{\rm inc}$ 会使其展宽。中间能带是重能带。在K 附近，它是组合态 $Bc - \sqrt{S_{\boldsymbol{k}}}\,\Phi F'$。趋近 Γ 时，它失去电子，变成 F与F'的反键能级，因此只有在布里渊区边界附近才是平坦且重的；在那里，它穿过费米能级并形成大费米面。

自能的连分式表示。—积分掉 F' ，再 F ，得到电子自能的连分式表示。散射通过自旋子的衰减率 $\Gamma_{F'}$ 以及 $\Sigma_{\rm inc}$ F的自能体现，因此，方程（5）和（8给出

$$\Sigma_f(z) = \Sigma_\infty + \cfrac{\Phi^2}{z - \epsilon_F - \Sigma_{\rm inc}(z) - \cfrac{B^2}{z - \epsilon_{F'} + i\Gamma_{F'}}}. \tag{E3}$$

没有 $\Gamma_{F'}$和 $\Sigma_{\rm inc}$时， $G_c(\boldsymbol{k}, z) = 1/(z + \mu - S_{\boldsymbol{k}}\Sigma_f(z))$的极点就是方程（E2）中的三条能带。阻尼使它们展宽。我们在每个温度下将方程（E3）拟合到DMFT自能，其中 Σ_∞ 和 Φ^2 根据方程（C4） [测得]，并拟合六个参数：能级 ϵ_F 和 $\epsilon_{F'}$、耦合 B^2、自旋子宽度 $\Gamma_{F'}$，以及 γ_∞ 的衰减率和截断Ω_c $\Sigma_{\rm inc}$ [方程（E4）]。拟合结果与DMFT吻合良好。从 U 到 $U/3200$ ，它对自能的两个部分都能准确再现，均方根偏差为0.7–8% [图13(a,b)]，，且其参数随温度平滑变化 [图13(c–f)]。自旋子 F'能级位于费米能级以下，对于 $\epsilon_{F'}$，约在 $-0.07U$和 $-0.25U$之间；其宽度与温度呈线性关系，在 $s^2 = 0.05$时为 $\Gamma_{F'} = (2.3 \pm 0.2)T$，由此电子的衰减率为（$\Phi^2/B^2$）$\Gamma_{F'} \simeq 3.7T$。在最低温度下， F在费米能级处的能级 $\epsilon^*_F = \epsilon_F + \text{Re}\ \Sigma_F(0)$等于$\epsilon^*_{F,L}$，即卢廷格体积对应的费米面所要求的值；其衰减率则消失 [图13(g)]。

非相干部分。——公式 $\Sigma_{\rm inc}$ （8）中的阻尼并非推导得出。我们将其设计为在高能下具有恒定的衰减率，如同 Hubbard-III 中一样；在低能下，衰减率与 $\omega^2 + \pi^2 T^2$ 成正比，从而使准粒子在 $T = 0$处不受阻尼。满足这一条件的最简单函数是带有洛伦兹凹陷的常数函数：

$$-\,\text{Im}\,\Sigma_{\rm inc}(\omega) = \gamma_\infty \Big[1 - \frac{\Omega_c^2}{\omega^2 + a^2} \Big], \qquad \Sigma_{\rm inc}(i\omega_n) = -i\gamma_\infty \Big[1 - \frac{\Omega_c^2}{a(\omega_n + a)} \Big], \qquad a = \sqrt{\Omega_c^2 + \pi^2 T^2}. \tag{E4}$$

在马茨巴拉轴上， $\Sigma_{\rm inc}$ 是纯虚数。在实轴上，因果性使其具有实部 $-\gamma_\infty \Omega_c^2 \omega/[a(\omega^2 + a^2)]$，该实部关于 ω为奇函数，并在费米能级处消失，因此 $\Sigma_{\rm inc}$ 不会在那里移动 F 的能级。拟合得到的 γ_∞ 与 Hubbard-III 散射率（$N_f + 1$）$|\text{Im}\ \Delta_f(i\omega_n)|$ 在 $\omega_n = U/2$处的值相当。 $\Sigma_{\rm inc}$在费米能级处的散射率 $\gamma_\infty \pi^2 T^2/(\Omega_c^2 + \pi^2 T^2)$随 T^2趋于零。因此，这个非相干部分本质上相当于 F的恒定散射率，并在Ω_c以下被截断。

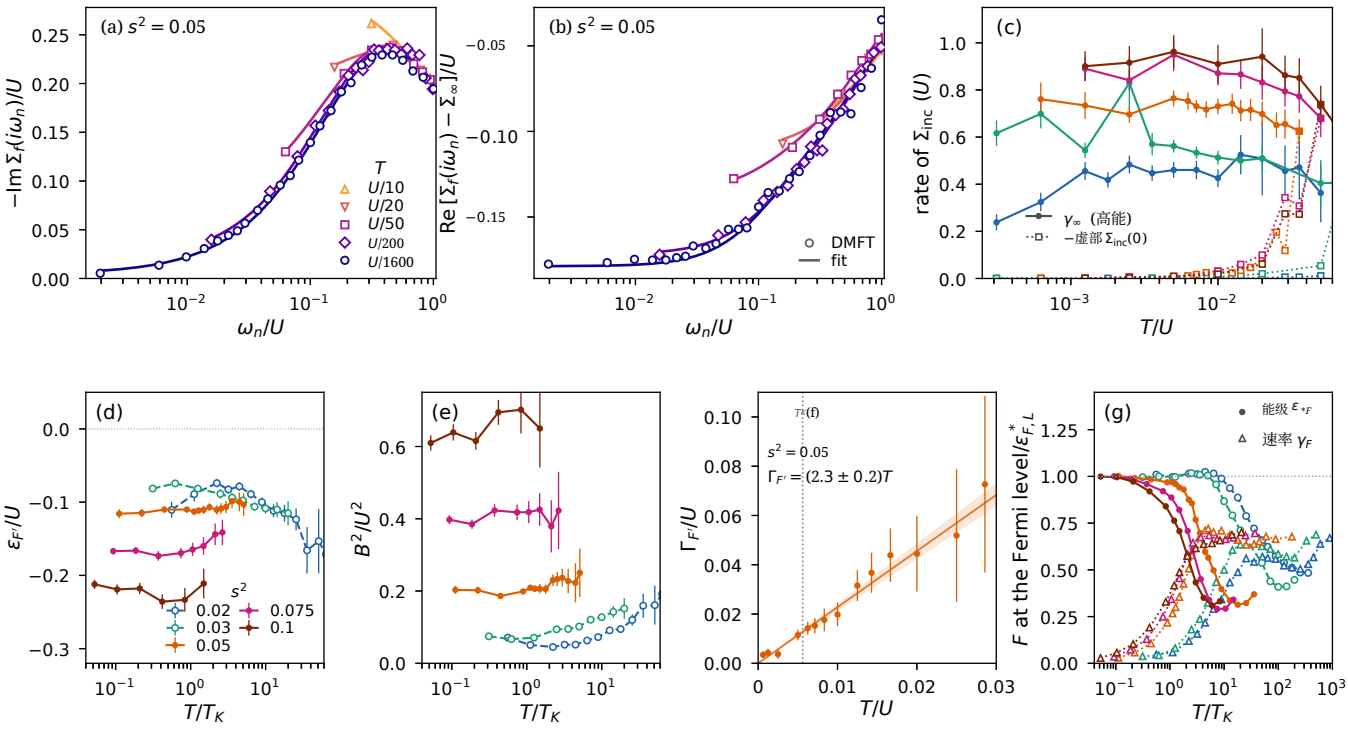


图 13. 方程（8）的拟合质量（$x \simeq 0.2$超出 $\nu = -2$, $N_f = 8$）。(a) $-\mathrm{Im}\ \Sigma_f(i\omega_n)$ 和 (b) $\mathrm{Re}[\Sigma_f(i\omega_n) - \Sigma_\infty]$ 在 $s^2 = 0.05$ 处对应图例中的温度。符号表示动力学平均场理论，曲线表示辅助场拟合。(c) Σ_{inc} 在高能处的衰减率，γ_∞（实心圆），以及在费米能级处的衰减率，$-\mathrm{Im}\ \Sigma_{\mathrm{inc}}(0) = \gamma_\infty \pi^2 T^2/(\Omega_c^2 + \pi^2 T^2)$（空心方块）；对应 (d) 图例中的 s^2。(d) 自旋子能级 $\epsilon_{F'}$和 (e) 其留数 B^2随 T/T_K的变化。对于 $s^2 = 0.02$和 0.03（空心符号、虚线），T_K为上限，T/T_K为下限。(f) 自旋子 F'的散射率 $\Gamma_{F'}$随温度的变化，取值为 $s^2 = 0.05$。点状竖线表示 T_K。(c–f) 中的误差棒为拟合雅可比矩阵给出的一个标准差。(g) 在第一个马茨巴拉频率处，F的能级 ϵ^*_F（圆形）和衰减率 γ_F（三角形），以 Luttinger 能级 $\epsilon^*_{F,\,L}$为单位。

4. 谱随温度的演化

我们展示了电子谱随温度的演化，$\nu = -2 - x$ 此处仅考虑哈伯德相互作用，$J_A = 0$，在 $s^2 = 0.05$，从 $U/20$（远高于 T_K）降至 $U/1600$（图15）。利用辅助粒子理论进行解析拟合，无需解析延拓，即可通过方程（E3）和（E4）得到实轴上的 $\Sigma_f(\omega)$。其谱与对同一 DMFT 自能进行最大熵延拓所得的结果一致。在 T_K 以上时，重能带位于费米能级之上，且较宽，宽度达数个 $k_B T$。随着冷却，它逐渐变窄并下移，在 T_K附近穿过费米能级；在T_K 以下，它成为大费米面上的重能带。在 $\nu = -1 - x$ 处，谱以相同方式演化（图16）。

有限温度下，重能带因能级排斥而位于费米能级之上。在布里渊区边界附近，电子处于 $S_{\boldsymbol{k}}\mathrm{Re}\ \Sigma_f(0) - \mu$，其中 $\mathrm{Re}\ \Sigma_f(0) = \Sigma_\infty - \Phi^2 \epsilon^*_F/(\epsilon^{*2}_F + \gamma^2_F)$，$\epsilon^*_F$ 和 γ_F 分别是费米能级处 F 的能级和衰减率。第一项 Hartree 能使电子处于费米能级之上。第二项是来自 F的排斥作用；F远高于费米能级，并将电子向下推。在 $T \ll T_K$处，F 在费米能级处不会衰变。自旋子使 Σ_F 出现一个极点，但该极点很尖锐，位于费米能级之下的 $\epsilon_{F'}$处。因此，F仅在 $\epsilon_{F'}$附近发生强烈散射，而在费米能级处，该极点只会使 F上移 $B^2/|\epsilon_{F'}|$。Σ_{inc} 在费米能级处也会消失。随后，来自 F 的排斥作用会将能带带到略低于费米能级的位置。升温时，F 在费米能级处发生衰变，其衰减率与其能级相当，这主要是因为 Σ_{inc} 的凹陷被填平。这使排斥作用减弱约一半，并将能带抬升至费米能级之上。在填充固定时，μ 随温度升高而下降，进一步抬升能带。辅助粒子理论在 [图 14(d)]中直观地展示了这一点。将参数固定在 $U/400$处的取值（随温度变化的参数除外）后，升温会使 K 处的能带升至费米能级之上。如果 Σ_{inc} 保持其 $T = 0$ 形式，能带则停留在费米能级处。因此，重能带位于费米能级之上，是因为 F的散射。

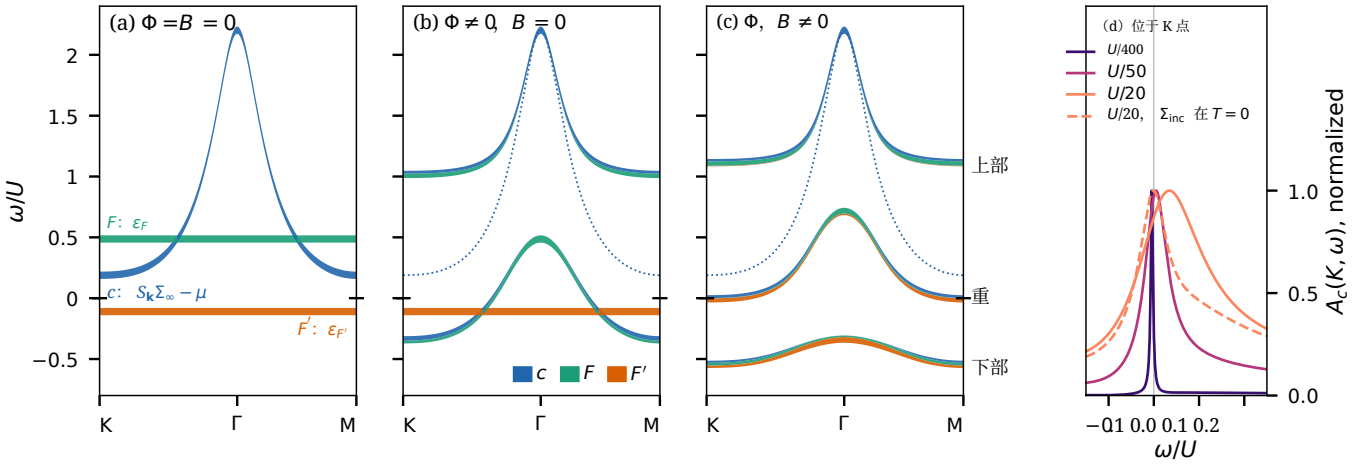


图 14. 辅助粒子理论的三条能带（$s^2 = 0.05$, $x \simeq 0.2$超出 $\nu = -2$, 公式（8）的参数在 $U/400$拟合）。（a–c）公式（E2）的能带，分别对应无耦合、仅有 Φ 以及同时有 Φ和 B的情况。每条能带均绘制为固定宽度的带状区域，并按 c（蓝色）、 F（绿色）和 F'（橙色）的权重划分。点线表示电子的 Hartree 能 $S_{\boldsymbol{k}}\Sigma_\infty - \mu$。（d）辅助粒子理论在 $U/400$、 $U/50$和 $U/20$下的 $A_c(K,\ \omega)$，并归一化至其最大值。除三个随温度变化的参数外，所有参数均固定为在 $U/400$拟合所得的值：自旋子宽度 $\Gamma_{F'} = 2.3T$、由填充决定的化学势 μ, 以及公式（E4）中 $\Sigma_{\rm inc}$的截断 $a = (\Omega_c^2 + \pi^2 T^2)^{1/2}$；其 γ_∞和 Ω_c保持固定。虚线表示采用 $a = \Omega_c$的 $U/20$，即 $\Sigma_{\rm inc}$处于其 $T = 0$形式时的情况。

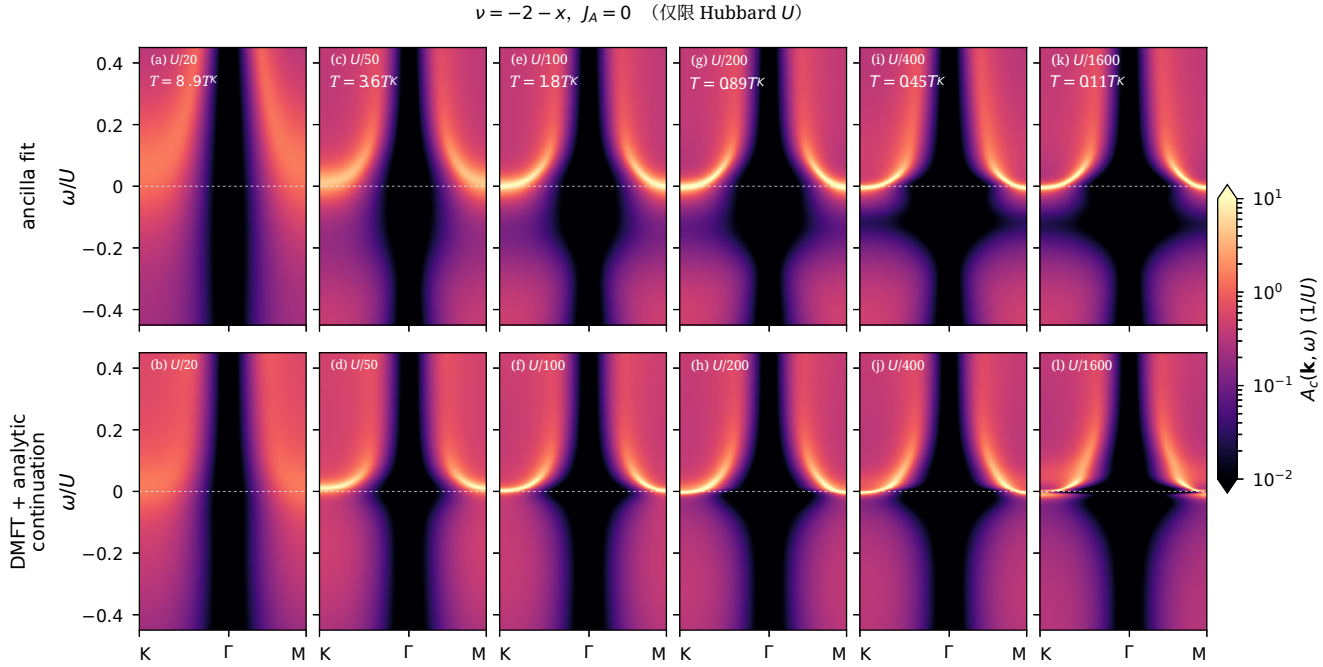


图 15. 仅在哈伯德相互作用下，谱从坏金属到重费米液体的演化（$J_A = 0$, $s^2 = 0.05$ $x \simeq 0.2$ $\nu = -2$ A_c $\boldsymbol{k}$ ω K Γ M ，之外）。图 (a、c、e、g、i、k) 显示各温度下由辅助场拟合沿 – – 得到的 (,)，位于实轴上且未经延拓。图 (b、d、f、h、j、l) 显示来自动力学平均场理论并经解析延拓的结果，即对同一自能所作的最大熵延拓。在 $U/1600$ 处，该延拓在费米能级处出现伪影。色标为对数标度，虚线表示费米能级。

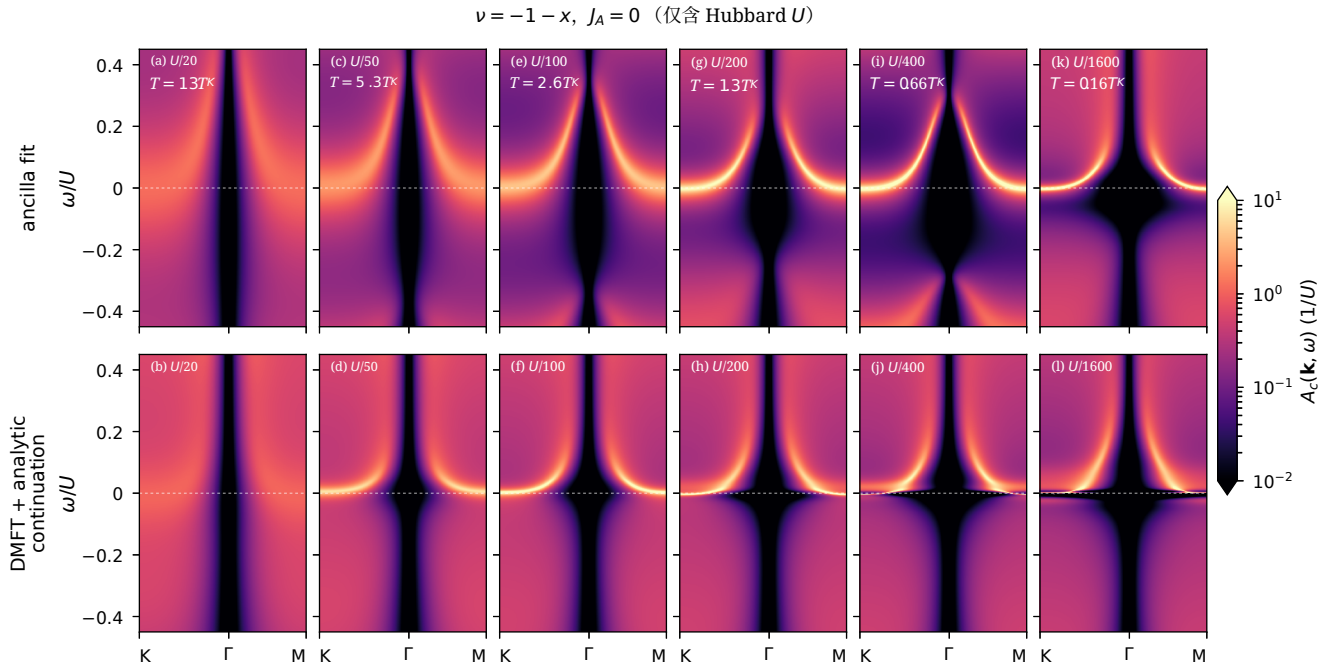


图 16。如图 15，在 $\nu=-1$ （$J_A=0$， $s^2=0.05$， $x\simeq 0.2$， $T_K=U/263$）之外，（a、c、e、g、i、k）中采用辅助场拟合，（b、d、f、h、j、l）中采用动力学平均场理论并进行解析延拓。在 $U/400$ 和 $U/1600$ 处，延拓在费米能级处出现了伪影。

附录 F：反洪德耦合与赝能隙金属

1. 反洪德耦合的两种形式

这八种味道为 $a=(o,\ v,\ s)$，轨道 $o=\pm$ 的角动量 $L_z=\pm1$ 相对于 AA 位点，谷 $v=K,\ K'$ 自旋 s。我们使用两种形式的反洪德耦合。第一种是式（9）中的 H_A^d

$$H_A^d=-J_A^d\sum_{i,o=\pm}\Pi_{io}^\dagger\Pi_{io},$$
$$\Pi_o^\dagger=\tfrac{1}{\sqrt{2}}\big(\hat f_{oK\uparrow}^\dagger\hat f_{oK'\downarrow}^\dagger-\hat f_{oK\downarrow}^\dagger\hat f_{oK'\uparrow}^\dagger\big).$$

它使两个轨道内谷间自旋单态的能量降低，耦合强度为 $L_z=\pm2$。第二种形式是参考文献 [79], 中的耦合。

$$H_A=-J_A\sum_i\Pi_i^\dagger\Pi_i,$$
$$\Pi^\dagger=\tfrac{1}{2}\big[f_{+K\uparrow}^\dagger f_{-K'\downarrow}^\dagger-f_{+K\downarrow}^\dagger f_{-K'\uparrow}^\dagger+f_{-K\uparrow}^\dagger f_{+K'\downarrow}^\dagger-f_{-K\downarrow}^\dagger f_{+K'\uparrow}^\dagger\big],\tag{F1}$$

它会降低一个轨道间谷间自旋单态的能量 $L_z=0$。在这两种形式中，每种味 a 在另一谷中都有一个配对伙伴$\bar a$，且八种味仍然等价。图 1(c) 和 4(d,e) 的填充扫描采用 H_A^d。附录 F3 和 F 4 以及图 4(f) 采用 H_A。在耦合强度相同时，两种形式产生的赝能隙大小相同。我们使用 TRIQS/cthyb 求解杂质问题 [85, 91]。

2. 赝能隙温度

我们定义 T^* 为该轨道在约 $2T$ 费米能级附近范围内的权重。该权重是局域的，且不按动量分辨。它来自该轨道的局域格林函数， $G_f(z)=\langle S_{\boldsymbol k}G_c(\boldsymbol k,z)\rangle_{\boldsymbol k}$，即式（3），该式对所有布洛赫态求和，每个态均带有其轨道权重 $S_{\boldsymbol k}$。它无需解析延拓，

$$Q_f(T)=-\frac{\beta}{\pi}G_f(\tau=\beta/2)=\int\mathrm{d}\omega\,\frac{A_f(\omega)}{2\pi T\cosh(\omega/2T)}.\tag{F2}$$

在金属中， Q_f 随降温而增大。一旦费米能级处打开能隙，它便下降。 T^* 是其最大值所对应的温度[图 18(a,b)]。

在 $\nu=-2$附近， $T^*\simeq 0.4J_A^d$ 是单重态形成的温度。随着掺杂，它大致呈指数下降，$T^*\propto e^{-x/0.36}$ 对于 $J_A^d=0.1U$，即图1(c)中的实线。在所研究的最大掺杂附近，接近 $x\simeq 0.7$， Q_f 没有极大值，并在降温时如费米液体般增长。 H_A 与 $J_A=0.1U$ 的耦合在 $x=0.2$给出 $T^*=U/42$ ，接近相同强度的 H_A^d 。在 T^* 以下，电子能带在费米能级处发生劈裂 [图4(e)]。在 $x\simeq 0.15$ 和$J_A^d=0.1U$ ， K 处的边缘位于 $-0.03U$ 和 $+0.06U$，能隙量级为 J_A^d。该能隙随掺杂变窄并被填充。在 $\nu=-2$ 附近，我们仅在空穴掺杂侧发现赝能隙。

绝缘体位于 $\nu=-2$。—反洪德耦合还会增强 $\nu=-2$处的绝缘体能隙，同时使 $\nu=-1$ 和 -3 处的莫特转变保持不变。在 $T=U/200$ 处，对于$J_A^d=0.1U$ ，绝缘体能隙可维持至 $s^2\simeq 0.075$ ，对于 H_A则可维持至超过 $s^2=0.05$ ，为无 J_A [的莫特绝缘体之 s_c^2 的两到三倍，见图 17]。

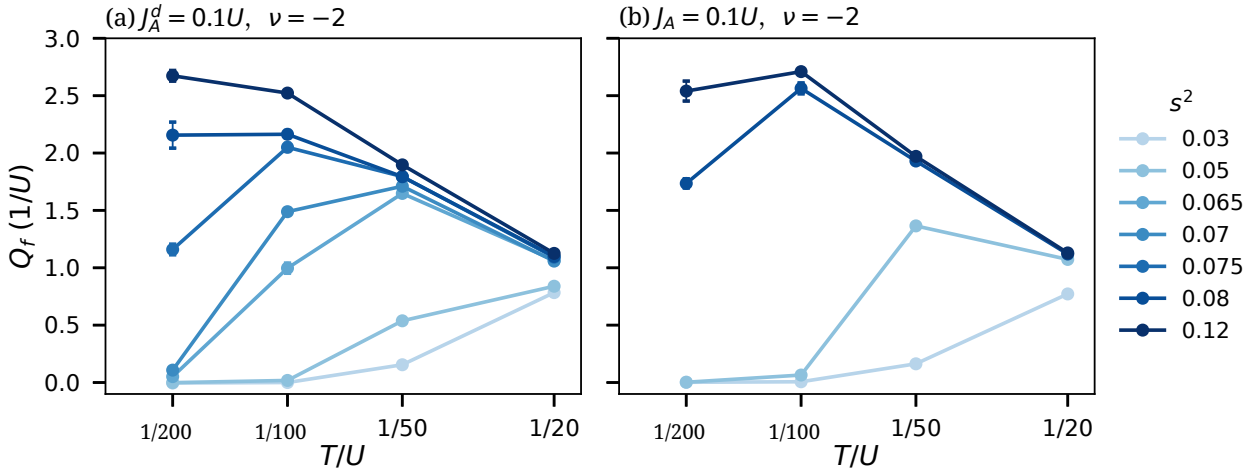


图 17. 自旋单态绝缘体，位于 $\nu=-2$。费米能级处轨道的权重 Q_f，对应方程（F2），随温度变化，固定于 $n_c=2$，图例中对应 s^2；（a）采用方程（9）中的 $J_A^d=0.1U$，以及（b）采用方程（F1）中的 $J_A=0.1U$。在绝缘体中， Q_f 会随冷却而消失；在金属中则保持较大。

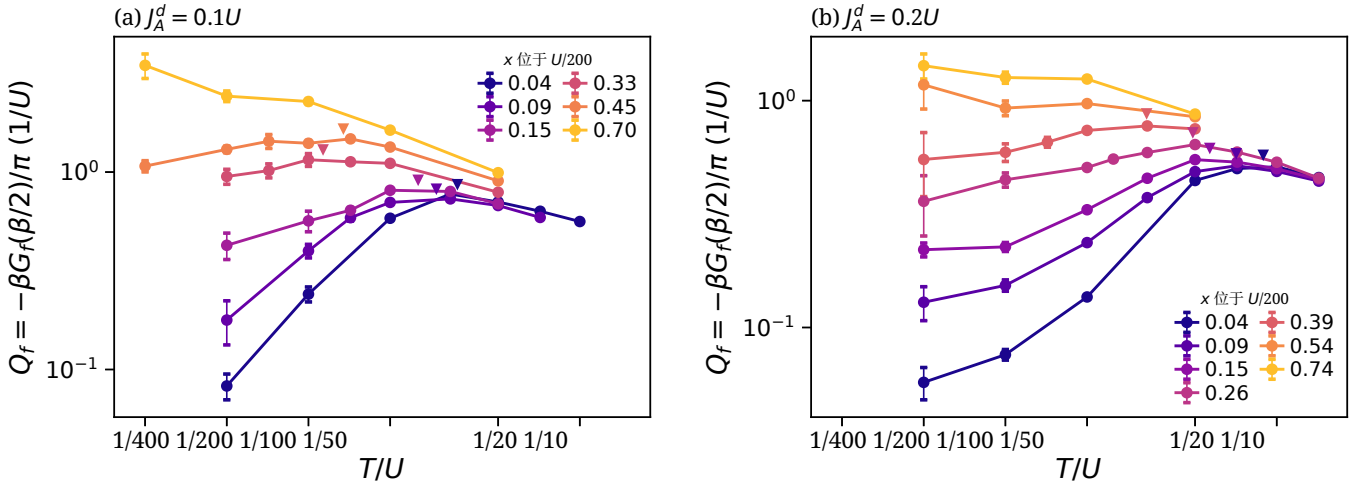


图 18. 赝能隙温度。（a、b）费米能级附近约 $2T$范围内轨道的权重 Q_f，对应方程（F2），随温度变化，固定 μ；对应 $J_A^d=0.1U$和 $0.2U$。图例给出 $U/200$处的掺杂量。三角形标记 T^*，即 Q_f的最大值。

3. $x = 0.2$ 处的赝能隙金属及其解析拟合

交叉。—在 $T = U/200$ 处，耦合 $J_A \leq 0.02U$ 几乎不改变 $J_A = 0$ 的重费米液体。在 $J_A = 0.02U$ 与 $0.04U$ 之间，即 T_K的四到七倍，磁矩形成局域单态，从而破坏近藤屏蔽。对于 $J_A \geq 0.08U$，电子散射率随降温而增大，电子和 F 均不具有费米面 [图 19(a–c)]。随着降温，该阈值下降。在 $U/400$ 处，重费米液体需要 $J_A < 0.01U$，而耦合 $J_A > 0.01U$ 已打开赝能隙。

具有 ψ 的辅助粒子链。——方程（8）的单极点形式在赝能隙金属中失效。单重态使自旋子 F'形成能隙，因此赝能隙是重费米液体的自旋子能隙。为了描述这一现象，我们再加入一对辅助费米子(ψ, ψ')，耦合为 $\Phi_s(F'^{\dagger}\psi + \text{H.c.})$。无阻尼时，哈密顿量为

$$H_{\boldsymbol{k}} = \begin{pmatrix} S_{\boldsymbol{k}}\Sigma_\infty - \mu & \sqrt{S_{\boldsymbol{k}}}\,\Phi & 0 & 0 \\ \sqrt{S_{\boldsymbol{k}}}\,\Phi & \epsilon_F & B & 0 \\ 0 & B & \epsilon_{F'} & \Phi_s \\ 0 & 0 & \Phi_s & \epsilon_\psi \end{pmatrix} \tag{F3}$$

基底中 s $(c_{\boldsymbol{k}}, F_{\boldsymbol{k}}, F'_{\boldsymbol{k}}, \psi_{\boldsymbol{k}})$。依次消去 ψ、F' 和 F，可得到电荷的自能 n,

$$\Sigma_f(z) = \Sigma_\infty + \cfrac{\Phi^2}{z - \epsilon_F - \Sigma_{\rm inc}(z) - \cfrac{B^2}{z - \epsilon_{F'} - \cfrac{\Phi_s^2}{z - \epsilon_\psi + i\Gamma_\psi}}}, \tag{F4}$$

即将方程（10）代入方程（5）所得结果。ψ 的散射率 Γ_ψ 表示其与 ψ' 的耦合。与附录 E 3 中一样，测量了 Σ_∞ 和 Φ^2。拟合了八个参数：能级 ϵ_F、$\Sigma_{\rm inc}$ [的散射率 γ_∞ 和截断 Ω_c（方程（E4）），耦合 B^2、自旋子能级 $\epsilon_{F'}$、耦合 Φ_s、能级 ϵ_ψ 和散射率 Γ_ψ。这条链在 $U/200$ 到 $U/800$ [的范围内，将自能拟合到几个百分点的精度（图 19(c,d)）。反洪德耦合决定了与 ψ、$\Phi_s \simeq 0.6J_A$ 的耦合，并使留数 B^2 减半。图 20(d–f) 展示了这些参数随温度的变化。

该态位于 Γ。——在 Γ，其中 $S_{\boldsymbol{k}} = 0$，电子发生解耦，而能带顶端是 F–F'–ψ中最靠近费米能级的态。F 远高于费米能级，而 F' 远低于费米能级，因此该态主要是 ψ [图 20(a,b)]。其能量是 ψ 受下方 F' 的排斥作用而上移后的能级，

$$E^* \simeq \epsilon_\psi + \frac{\Phi_s^2}{|\epsilon_{F'}| + B^2/\epsilon_F}, \tag{F5}$$

其宽度由 Γ_ψ决定。在费米能级附近 $\Sigma_f \simeq \Sigma_\infty + w/(z - E^* + iW)$，其中 w/Φ^2 是该态中 F的权重，而 W是其宽度。在马茨巴拉轴上 实部$[\Sigma_f - \Sigma_\infty](i\pi T) \simeq -wE^*/[E^{*2} + (\pi T + W)^2]$。当该态位于费米能级以下时，它为正；当该态位于费米能级以上时，则变得很大且为负。这一符号变化导致图 实部 Σ_f 在 $U/400$ 和 $U/800$ 之间发生定性变化，见图 19(d)。

温度演化。—在 T^* 以上，单重态尚未形成，系统处于 $J_A = 0$ 所述的坏金属态。在 T^* 以下，单重态使重能带打开能隙并破坏近藤屏蔽；只有在 $U/200$ 附近、远低于 T^* 时，拟合才需要在费米能级附近引入一个能级 ψ，而这对于 $J_A = 0.1U$ 来说是 $U/42$。在较高温度下，拟合不需要 ψ，因此图 20 展示了从 $U/200$ 向下的参数。起初，ψ 很宽。其宽度为 T 的数倍，超过了它与费米能级之间的距离 [图 20(c)]。于是，掺杂空穴处于一个非相干能级中，没有费米面，且电子散射率随冷却而增大。这就是 $T_{\rm coh}$ 与 T^* 之间的赝能隙金属。冷却时，Γ_ψ 急剧下降，大致按 $T^{2.6}$ 变化，从 $U/200$ 时约为 $3T$，降至 $U/400$ 时的 T，以及 $U/800$ [时的 $0.3T$ 图 20(f)]。与此同时，Φ_s 保持在接近 $0.6J_A$ [的水平图 20(e)]。在 $U/400$ 时，拟合将尖锐态置于费米能级正下方，因此 Γ 处的能带顶仍被占据 [图 20(a)]。能带顶在 $U/400$ 与 $U/800$ 之间穿过费米能级[图 20(b,c)]，并在 $T_{\rm coh}$ 以下形成一个小费米面，由此产生 sFL 相。

4. 自旋极化子与小费米面

在 $T_{\rm coh}$ 之下，小费米面上的准粒子主要由 ψ承载。在 $\boldsymbol{k}_0$处，$S_{\boldsymbol{k}} = 0$，电子在其中没有权重，而 F 的权重也很小。这里我们要探究 ψ 代表哪种物理算符。一般而言，它是一个也包含非局域部分的复合算符。我们将讨论范围限定在格点算符，并寻找在该态中占比最大的那个算符。

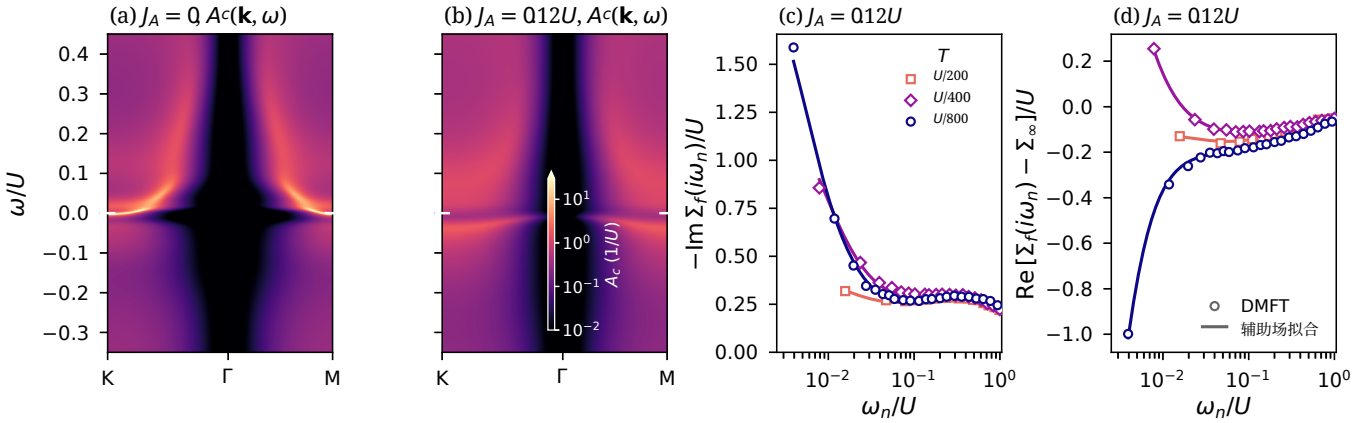


图 19. 含有式（F1）中的反洪德耦合的赝能隙金属（$s^2 = 0.05$，$x = 0.2$）。（a、b）$A_c(\boldsymbol{k}, \omega)$ 在 $T = U/200$ 下、不含该耦合时，以及在 $J_A = 0.12U$ 下（最大熵，对数色标）。（c）$-\mathrm{Im}\,\Sigma_f(i\omega_n)$ 和（d）$\mathrm{Re}[\Sigma_f(i\omega_n) - \Sigma_\infty]$ 在 $J_A = 0.12U$ 下对应图例所列温度的结果。符号表示动力学平均场理论，曲线表示式（10）中的辅助场拟合。

精确对角化。——蒙特卡罗求解器无法测量复合算符的关联函数。因此，我们在 $T = 0$处对同一个杂质进行对角化，其中收敛浴由每种味的少数几个能级表示。ˆ在 $\boldsymbol{k}_0$处，$f_{\boldsymbol{k}_0} = 0$，晶格态是 Σ_f的极点，即 G_f的零点。局域算符 A 在此类极点中的占比，是其 f不可约传播子 $\tilde{G}_{AA} = G_{AA} - G_{Af}G_f^{-1}G_{fA}$的留数除以（$A_\perp|A_\perp$），其中$A_\perp = A -$（$A|f$）$f$，内积为（$A|B$）$= \langle\{A, B^\dagger\}\rangle$。最接近费米能级的极点位于 $-0.019U$，而F 在其中的占比仅为0。04。少数几个浴能级无法跟随能带顶穿过费米能级，因此该极点仍位于其下方。

自旋极化子。——对于 $a=(+K\uparrow)$ 和 $\bar{a} = (-K'\downarrow)$ 中，电子与反洪德项的对易子 is

$$[f_a, H_A] = -\frac{J_A}{4}\big(\hat{O}_a + P_a\big), \qquad \hat{O}_a = n_{-K'\downarrow}f_{+K\uparrow} - S^-_{-K'}f_{+K\downarrow}. \tag{F6}$$

这里，ˆ $O_a = [(\frac{1}{2}n_{-K'} - \boldsymbol{S}_{-K'}\cdot\boldsymbol{\sigma})f_{+K}]_\uparrow$将电子从另一谷中自旋与伴轨道相同的单重态移除。项 P_a 将一对电子从另一个单重态通道转移过来。具有 f_a量子数的所有局域 Hubbard 算符的最佳组合，在最接近费米能级的极点中所占比例为 0.36。这一比例几乎全部来自一个算符。加上单重态双占据态 $S = \Pi^\dagger|0\rangle$、三重占据态 $t_b = (2/\sqrt{3})f_b^\dagger S$和其他双占据态 $d_{bc} = f_b^\dagger f_c^\dagger|0\rangle$ [57]，可得

$$\psi_a \simeq \sum_{b\neq a,\bar{a}} |d_{b\bar{a}}\rangle\langle t_b| + \gamma\,|\bar{a}\rangle\langle S|, \tag{F7}$$

与 $\gamma = -0.29$ 相比，裸电子 f_a 投影到相同跃迁上的占比为 $\gamma = -\sqrt{3}/2$ 。其占比为 0.33，而 F 的占比为 0.04。这两项都会移除电子 a，使其脱离与另一谷中伴轨道 $\bar{a}$ 形成的单重态。相较于裸电子，ψ 对从三重占据态移除电子的权重高出三倍。在这两项中，被移除的电子都会破坏一个单重态，并使其伴轨道 $\bar{a}$ 的自旋变为未成对自旋。因此，该准粒子是一个与另一谷的未成对自旋束缚在一起的电子，正如掺杂反铁磁体中的自旋极化子是与其扰动的自旋束缚在一起的载流子。反洪特项所生成的算符 O_a 形式相同，即电子乘以伴轨道的自旋。

$U/800$ 处的准粒子。——降温时，Σ_f 在费米能级附近的极点向上移动，并在 $U/400$ 与 $U/800$ 之间穿过费米能级，由此确定相干温度 $T_{\mathrm{coh}} \sim U/800$。在 $U/400$ 处，$\boldsymbol{k}_0$ 处的能带顶仍略低于费米能级，而 F 的权重 $Q_\beta(S)$ 在那里达到峰值。在 $U/800$ 和 $x = 0.23$ 处，它呈现一个环，环内包含 0.27 ± 0.05 个空穴，形成一个约有 x 个空穴的小费米面 [图4(f)]。拟合得到的辅助粒子理论将 $\boldsymbol{k}_0$ 处的态置于 $+0.0024U$，略高于费米能级，其占比为 ψ 的 0.89。因此，小费米面的准粒子是 ψ 费米子。

附录 G：谷间相干

上述赝能隙金属不破坏任何对称性，尽管它违反微扰 Luttinger定理。赝能隙和小费米面也可能源于对称性破缺，例如谷间相干序。这里我们允许

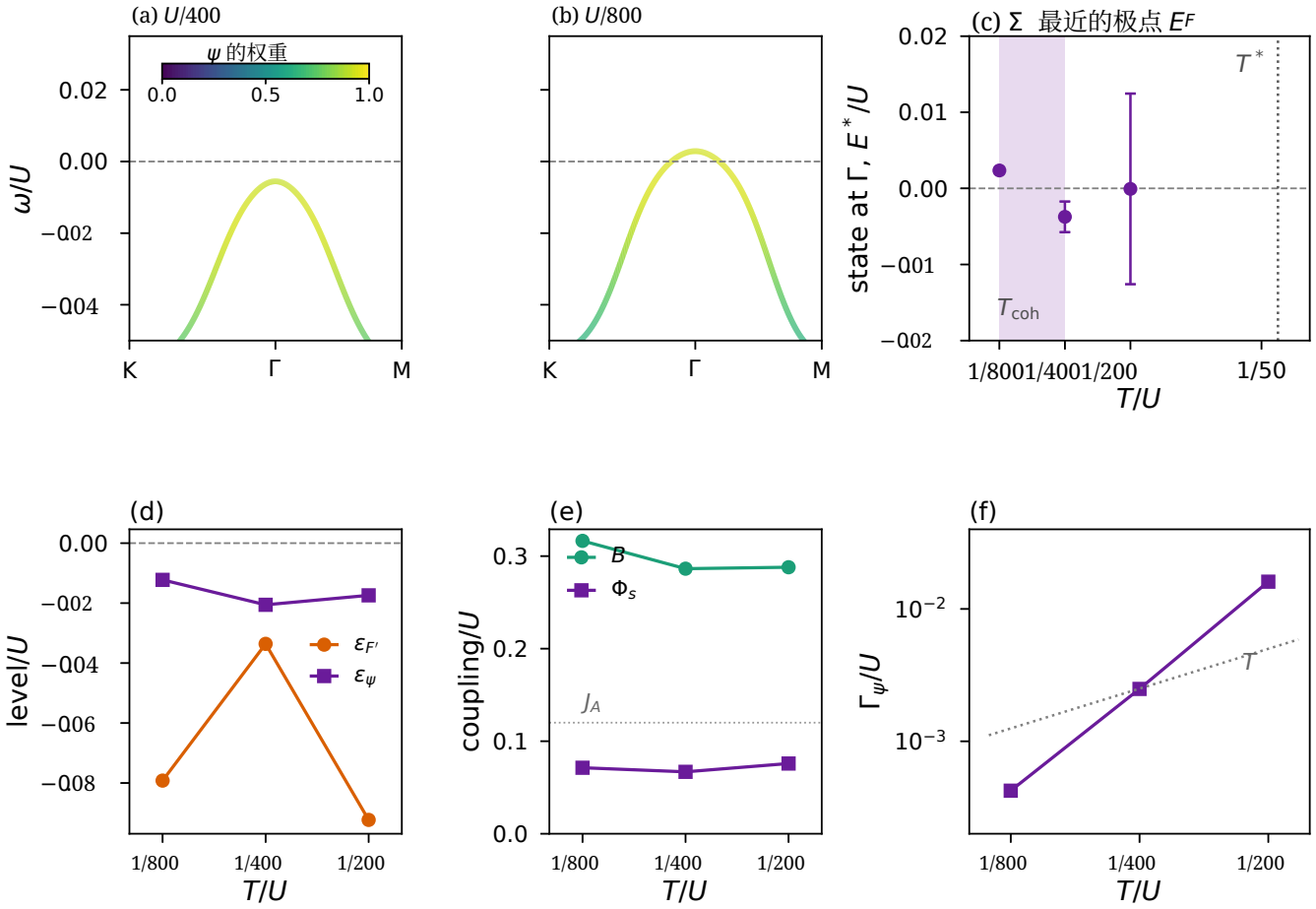


图 20. 辅助粒子理论中的赝能隙金属（$J_A = 0.12U$， $s^2 = 0.05$， $x \simeq 0.2$）。(a,b) 式（F3）在 $U/400$ 和 $U/800$处的能带，按 ψ的权重着色。(c) Γ 处态的能量随温度的变化，条形表示其宽度。(d–f) ψ 的拟合能级、耦合和宽度随温度的变化。虚线标示费米能级。

在动力学平均场理论中出现谷间相干序，并追踪其起始。我们表明，谷间相干序在 T^* 以下出现，因此并非赝能隙形成的必要条件。相反，它是在对称赝能隙相中涌现的。

式（9）的耦合 H_A^d 与每个轨道的四种味所经历的 Sp(4)旋转对易。该旋转将自旋单态谷间相干 $\sigma_0\tau_x s_0$ 映射为自旋-谷锁定序 $\sigma_0\tau_z s_z$，其中 σ、 τ 和 s 分别表示轨道、谷和自旋。因此，我们通过后一种在味空间中为对角形式的序来允许谷间相干。图 21 展示了在 $x \simeq 0.15$处冷却时该序如何出现。 Q_f 在 T^*处达到峰值，此时赝能隙开启，随后下降。对于 $J_A^d = 0.1U$，谷间相干序在 $U/300$ 和 $U/200$ 之间出现；对于 $0.2U$，则在 $U/200$ 和 $U/100$ 之间出现，其温度比 T^*低五到十倍。在 $x \simeq 0.47$和 $J_A^d = 0.1U$处，该序在 $U/100$和 $U/75$之间出现，接近 $T^* = U/74$。

我们通过在每个化学势和温度下进行两次计算来确定起始点。一次从极化态开始，随后在无场条件下释放。另一次从弱场 $0.03T$ 下的对称态开始，并逐步降温。两次计算都达到相同的非零值时，序参量是稳定的。当释放后的序参量消失，且场只诱发微弱响应时，序参量便会衰变。由于相变附近的迭代收敛缓慢，我们将起始点限定在序参量稳定时的最高温度与下一个序参量衰变的温度之间。

对于 J_A^d的两种强度，在每种掺杂下，谷间相干都会在低于 T^* 时出现。对于 $x \lesssim 0.2$，其起始温度至少比T^*低五倍。只有在 $x \simeq 0.4$–0.5附近，这两个尺度才会彼此接近，此处赝能隙最弱。因此，赝能隙的形成并不需要序参量，而序参量是在赝能隙金属中发展起来的。 $\nu = -2$ 处的单态绝缘体在温度降至 $U/400$以下时仍不存在谷间相干不稳定性。

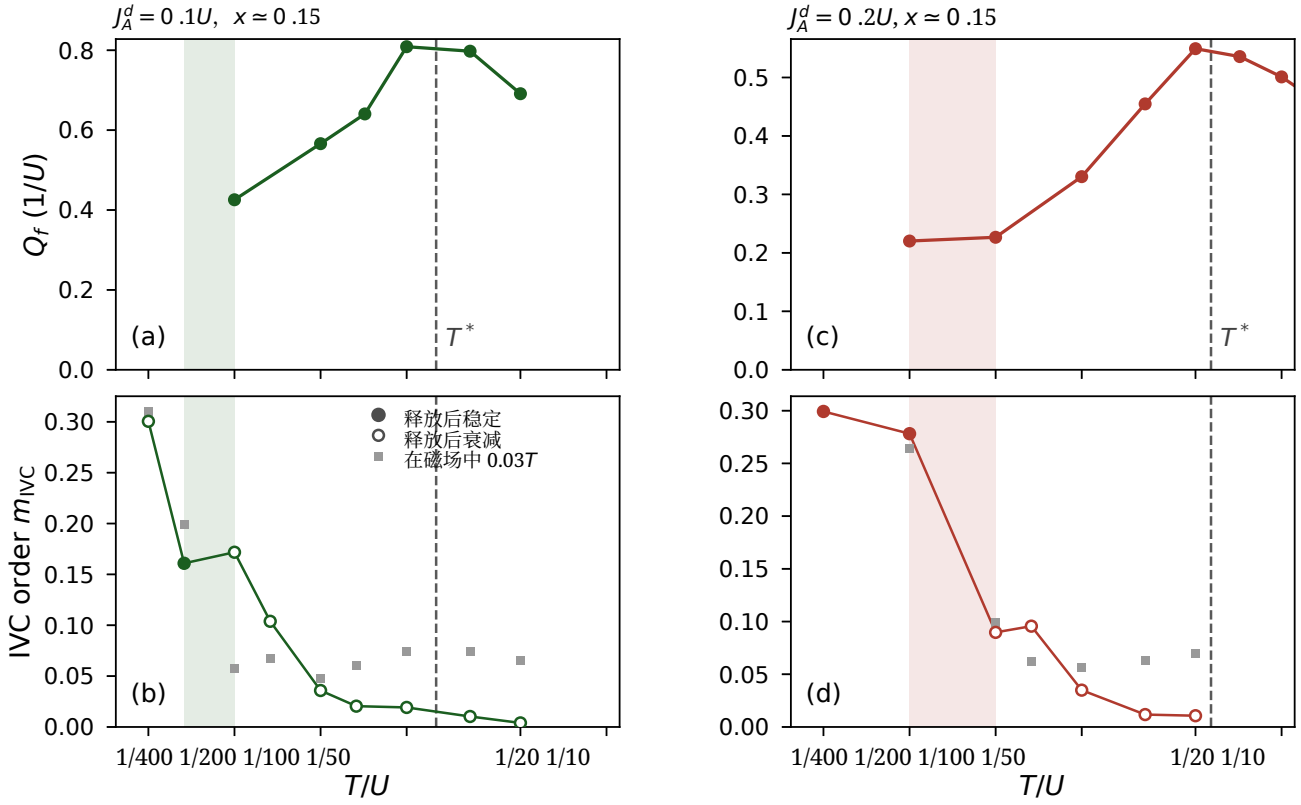


图 21. 赝能隙在谷间相干建立之前开启（$x \simeq 0.15$， $s^2 = 0.05$）。（a、c）对称态在费米能级处的轨道权重， Q_f，式（F2）中的权重，随温度的变化，取值为 $J_A^d = 0.1U$和 $0.2U$。虚线标出 T^*，即 Q_f的最大值。（b、d）谷间相干序 $m_{\mathrm{IVC}} = \sum_a (\tau_z s_z)_{aa} n_a$，Sp(4) 对称性将其映射为 H_A^d 自旋单态谷间相干。圆圈表示施加一次脉冲并在无磁场下释放后的序参量。实心圆表示序参量稳定，空心圆表示序参量在迭代过程中仍在减小。灰色方块表示从对称态开始冷却时，对 $0.03T$磁场的响应。阴影带标示序参量的起始范围。