arXiv:2611.32775v1 [cond-mat.str-el] 24 Nov 2026

时空点缺陷作为探测临界性的工具：Gross–Neveu–Heisenberg跃迁的应用

Jakob V¨ath, [1] LuisThe¨mer, [1] FrancescoParisenToldin, [2] 和FakherF. Assaad [1]

[1]*Institut für Theoretische Physik und Astrophysik and Würzburg-Dresden Cluster of Excellence ctd.qmat, Universität Würzburg, 97074 Würzburg, Germany*[2]*Institute for Theoretical Solid State Physics, RWTH Aachen University, Otto-Blumenthal-Str. 26, 52074 Aachen, Germany*

在临界性处，作用于欧几里得时空中单一点的局域场是无关的，并会诱导出一种随空间和时间调制、且以其标度维数两倍的速率衰减的效应。这使两点关联函数转化为一点测量：一个算符插入玻尔兹曼权重中，另一个则被测量。对于局域磁化强度而言，该关系在任意源强度下都是精确的。将这一方法应用于辅助场量子蒙特卡罗后，可以以前所未有的精度得到静态自旋磁化率和虚时间位移关联。我们将其应用于半填充 π-通量 Hubbard 模型中的狄拉克半金属到反铁磁莫特绝缘体跃迁。该晶格模型为 $N_f = 2$ Gross–Neveu–Heisenberg普适类提供了正则化。有限尺寸标度分析估计得到临界指数为 $\nu = 1.10(3)$和$\eta_\phi = 1.09(4)$，接近 $\eta_\phi \simeq 1$给出的场论预测。由于 $\eta_\phi > 1$，临界性处的等时结构因子不会随系统尺寸发散。因此，有序波矢处的等时结构因子由背景贡献主导，不能用于提取临界指数。与此一致，跃迁处的自旋动力学具有很强的非相干性，而量子费舍尔信息保持有界。

Gross–Neveu（GN）跃迁描述了通过对称性破缺，狄拉克费米子自发产生质量的过程。由于费米子在临界点仍保持无能隙状态，相较于纯玻色序参量理论，它们会从定性上改变临界行为 [1]。除了承载狄拉克费米子的石墨烯类单层材料外，这类跃迁如今也可能在 WSe_2 四层材料中通过实验实现 [2]。在重整化群理论中 [3], , 临界点由其相关算符的标度维数表征，而大量分析和数值研究工作已

已用于确定它们。对于 GN–伊辛普适性类，其中伊辛对称性发生破缺，不同方法的结果吻合良好 [4–9]。相比之下，对于 $N_f = 2$GN–海森堡（GNH）普适性类，玻色子反常维数仍存在持续的分歧：微扰计算和泛函重整化群计算得到 $\eta_\phi \simeq 1$ [10–12], , 而基于等时关联的费米子量子蒙特卡洛（QMC）研究则报告了明显更小的数值 [9, 13, 14]。

在本文中，我们通过引入一个与欧几里得时空中单个点处序参量耦合的源来探测临界点，从而解决这一分歧。传统的钉扎场沿虚时间方向的一条线作用，因此所定义的问题属于边界临界性的范畴 [15, 16]。相比之下，点缺陷是无关的，不会改变体相普适性。在辅助场量子蒙特卡洛中 [17–19], , 它将两点关联函数的计算转化为局域算符期望值的计算，并可直接获得静态磁化率。我们对玻色子反常维数的估计与场论结果一致，其数值为 $\eta_\phi > 1$，这解释了为何此前基于等时关联的 QMC 研究 [9, 13, 14]所

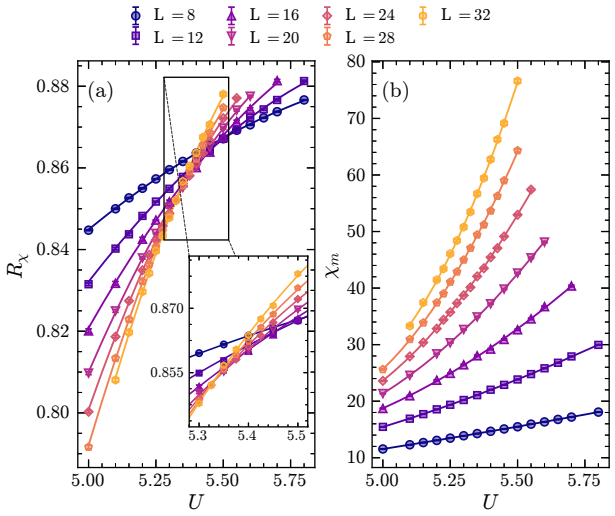

图1. $N_f = 2$ GNH相变的有限尺寸标度分析。(a) 重整化群不变磁化率比 R_χ 和(b) 交错自旋磁化率 χ_m 随 U/t变化的关系，适用于 $L = 8$–32。实线为数据的多项式拟合。

系统性地低估它。

考虑一个作用量 $S(\phi)$，并在空间和时间中加入一个局域源项：

$$S_h(\phi) = S(\phi) - h \int d^d\boldsymbol{x}\, d\tau\, \delta(\boldsymbol{x})\delta(\tau)\phi(\boldsymbol{x},\tau). \quad (1)$$

在不动点处，$S(\phi)$具有尺度不变性。在重整化群变换下，耦合变换为 $h \to b^{-\Delta_\phi} h$，其中 Δ_ϕ 是场 ϕ的标度维数，$b > 1$ 是该变换的尺度因子。由于幺正性要求 $\Delta_\phi > 0$，点缺陷是无关的。这类缺陷与此前在哈密顿量层面定义的钉扎场方法有很大不同，

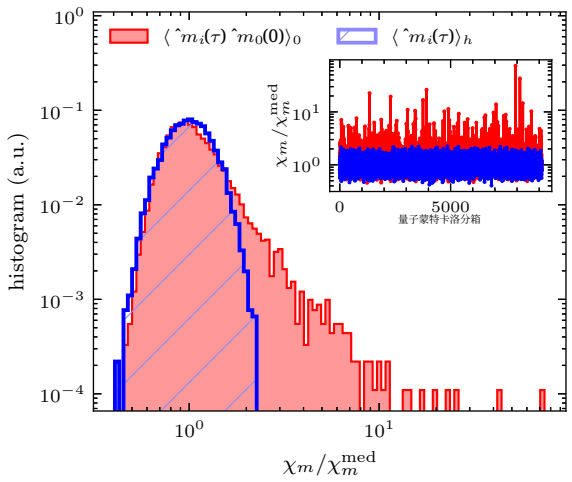

图 2. 交错自旋磁化率 χ_m，公式 (5)，在 $\boldsymbol{Q}=(\pi,\ \pi)$、$U=5.25\simeq U_c$、$L=\beta=24$ 处的结果，分别由一点关联函数 $\langle\hat{m}_i(\tau)\rangle_h$（蓝色，$h=1$）和两点关联函数 $\langle\hat{m}_i(\tau)\,\hat{m}_0(0)\rangle_0$（红色）计算得到，二者由公式 (4) 联系。每个量子蒙特卡洛分箱是 20 次扫描的平均值。两组数据均除以各自的中位数 $\chi_m^{\rm med}$，以消去公式 (4) 中的前因子 $C(U,\ L)$。主图：量子蒙特卡洛分箱的直方图，两种估计量的分箱数量相同。两点估计量存在远高于中位数的罕见事件；一点估计量则没有。插图：相同分箱的 $\chi_m/\chi_m^{\rm med}$ 随分箱编号的变化。两点估计量出现远离中位数的尖峰。

后者对应于欧几里得时空中的延展线缺陷，并有可能产生新颖的边界临界指数 [16]。

存在时空点缺陷时，位置 $\boldsymbol{x}$、虚时间 τ 处场 ϕ 的期望值为

$$\begin{aligned}\langle\phi(\boldsymbol{x},\tau)\rangle_h &= \frac{\langle\phi(\boldsymbol{x},\tau)e^{h\phi(\mathbf{0},0)}\rangle_0}{\langle e^{h\phi(\mathbf{0},0)}\rangle_0}\\ &= h\,\langle\phi(\boldsymbol{x},\tau)\phi(\mathbf{0},0)\rangle_0+\mathcal{O}(h^3),\end{aligned}\tag{2}$$

其中我们假设 $\langle\phi\rangle_0=0$。由于缺陷是不相关的，有效耦合在长距离下趋于零，因此即使在有限 h 下，该剖面仍与二点函数成正比，只是振幅发生了重整化。对于局域磁化强度，这种正比关系实际上在任意 h 下都严格成立，见下文公式 (4)。因此，缺陷将二点函数转化为一点测量，这对于费米子量子蒙特卡洛而言有两个优势：首先，完整的时空剖面可由每个时间切片上的等时格林函数得到，因此不需要非等时格林函数。其次，二点估计量涉及格林函数的乘积，因此在费米子行列式趋于零的构型附近会受到厚尾分布的影响 [20–22]。

我们将这一思想应用于 π-通量方格子上的 Hubbard 模型，

$$\begin{aligned}\hat{H} = &-t\sum_{\langle\boldsymbol{ij}\rangle,\sigma}\left(e^{iA_{\boldsymbol{ij}}}\hat{c}^\dagger_{\boldsymbol{i}\sigma}\hat{c}_{\boldsymbol{j}\sigma}+\text{H.c.}\right)\\ &+U\sum_{\boldsymbol{i}}\left(\hat{n}_{\boldsymbol{i}\uparrow}-\tfrac{1}{2}\right)\left(\hat{n}_{\boldsymbol{i}\downarrow}-\tfrac{1}{2}\right).\end{aligned}\tag{3}$$

此处，$\hat{c}^\dagger_{\boldsymbol{i}\sigma}$ 在以晶格格点 $\boldsymbol{i}$为中心的瓦尼尔态中产生一个自旋 σ的 z 分量费米子，$\hat{n}_{\boldsymbol{i}\sigma}=\hat{c}^\dagger_{\boldsymbol{i}\sigma}\hat{c}_{\boldsymbol{i}\sigma}$，其中 $\sigma=\uparrow,\ \downarrow$，且相位满足 $\sum_\square A_{\boldsymbol{ij}}=\pi$。弱耦合相是狄拉克半金属；当超出 U_c/t 后，系统变为反铁磁莫特绝缘体 [13–15]。该连续相变属于 Gross–Neveu–Heisenberg普适类，其中包含 $N_f=2$ 个味的四分量狄拉克费米子 [1, 13, 14]。在半填充时，该模型不存在负号问题 [23]。存在缺陷时这一点仍然成立：在部分粒子-空穴变换 $\hat{c}_{\boldsymbol{i}\downarrow}\to(-1)^{\boldsymbol{i}}\hat{c}^\dagger_{\boldsymbol{i}\downarrow}$ 下，源 $h\hat{m}_{\mathbf{0}}(0)$映射为 $h(\hat{n}_{\mathbf{0}}(0)-1)$，它与两个自旋组分的耦合完全相同，因此玻尔兹曼权重仍是复共轭行列式的乘积。

数值方法。——我们使用 ALF 实现的有限温辅助场量子蒙特卡罗算法，在具有周期性边界条件的 $L\times L$ 晶格上进行计算，取 $L=8,\ 12,\ \ldots\ldots,\ 32$，并设定 $t=1$。我们采用对称Trotter分解，取 $\Delta\tau=0.1$，在密度通道进行Hubbard–Stratonovich解耦，并取 $\beta=L$，这与动力学临界指数为 $z=1$相一致。由于该算法基于欧几里得路径积分，点缺陷通过在时间切片 $\tau=0$ 插入算符 $e^{h\hat{m}_{\mathbf{0}}}$ 来实现，其中包含 $\hat{m}_{\boldsymbol{i}}=\hat{n}_{\boldsymbol{i}\uparrow}-\hat{n}_{\boldsymbol{i}\downarrow}$。因此，耦合 h是无量纲的，且与 $\Delta\tau$无关；我们取 $h=1$。

数值结果。——由于 $\hat{m}_{\boldsymbol{i}}^3=\hat{m}_{\boldsymbol{i}}$，且由于关于 $\hat{m}$ 为奇数的期望值（例如 $\langle\hat{m}_{\mathbf{0}}^{2n+1}\rangle_0$ 和$\langle\hat{m}_{\boldsymbol{i}}(\tau)\,\hat{m}_{\mathbf{0}}^2(0)\rangle_0$）因时间反演对称性而消失，因此一点函数与零场两点函数之间的关系可以精确确定：

$$\langle\hat{m}_{\boldsymbol{i}}(\tau)\rangle_h=C(U,L)\langle\hat{m}_{\boldsymbol{i}}(\tau)\hat{m}_{\mathbf{0}}(0)\rangle_0,\tag{4}$$

其中 $C(U,\ L)=\sinh 1+\frac{h}{h-1}(\cosh)\langle\hat{m}_{\mathbf{0}}^2\rangle_0$。$C(U,\ L)$ 与 $\boldsymbol{i}$ 和 τ 无关，因此不会影响关联函数的轮廓，但它通过 $\langle\hat{m}_{\mathbf{0}}^2\rangle_0=\frac{1}{2}-2\langle(\hat{n}_{\mathbf{0}\uparrow}-\frac{1}{2})(\hat{n}_{\mathbf{0}\downarrow}-\frac{1}{2})\rangle_0$ 取决于 U 和 L。

根据缺陷诱导的轮廓，我们计算

$$\chi(\boldsymbol{q},0)=\int_0^\beta d\tau\sum_{\boldsymbol{i}}e^{i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{i}}\langle\hat{m}_{\boldsymbol{i}}(\tau)\rangle_h,\tag{5}$$

根据公式 (4)，该量与波矢为 $\boldsymbol{q}$处的静态自旋磁化率成正比，但仅通过一点测量获得。在辅助场量子蒙特卡罗中，图 2 展示了一点估计量优于传统两点估计量：该

一点估计量不会受到厚尾分布的影响。

在临界点， $C(U,\ L)$标度为有限值，并对标度修正产生贡献。临界性附近， $\langle \hat{m}_{\mathbf{0}}^2\rangle_0$ 的奇异部分标度为 $\partial f_s/\partial U \sim L^{1/\nu-d-z}$，其中 f_s 是自由能密度的奇异部分， ν 是关联长度指数， $d=2$ 是空间维数，而对于洛伦兹不变不动点， $z=1$ 。由于 $d+z-1/\nu=\Delta_\epsilon>0$ 是能量算符的标度维数，分母将对标度修正产生贡献。在我们的情形中，$\nu\approx 1$，因此 $\Delta_\epsilon\approx 2$ ，预期标度修正较弱。

为确定相变位置，我们采用重整化群不变量比值

$$R_\chi = 1-\frac{\chi(\boldsymbol{Q}+\Delta\boldsymbol{q},0)}{\chi(\boldsymbol{Q},0)},\qquad \boldsymbol{Q}=(\pi,\pi),\qquad |\Delta\boldsymbol{q}|=2\pi/L. \tag{6}$$

给定 $\beta=L$，有限尺寸标度给出

$$\chi_m(U,L)=L^{2-\eta_\phi}\left[f_\chi(x)+L^{-\omega}g_\chi(x)\right],\qquad R_\chi(U,L)=f_R(x)+L^{-\omega}g_R(x), \tag{7}$$

其中 $x=(U-U_c)L^{1/\nu}$ ， ω 为领先标度修正指数。为揭示交错自旋磁化率对 $U,\ L$ 的依赖关系，我们定义 $\chi_m(U,\ L)\ =\chi(\boldsymbol{Q},\ 0)$。公式（7）中的两个量均绘于图1中。

我们参照文献 [13]，通过有限尺寸标度分析提取临界参数。在临界点附近，我们可以将公式（7）右端按标度变量 x的幂次展开:

$$R_\chi(U,L)=R^*+\sum_{n=1}^{n_{\max}}a_n\,(U-U_c)^nL^{n/\nu}+L^{-\omega}\sum_{m=0}^{m_{\max}}\tilde{a}_m\,(U-U_c)^mL^{m/\nu}, \tag{8}$$

$$\chi_m(U,L)=L^{2-\eta_\phi}\sum_{n=0}^{n_{\max}}b_n\,(U-U_c)^nL^{n/\nu}. \tag{9}$$

暂时忽略标度修正，我们将量子蒙特卡洛数据拟合到方程 (8) 和 (9)，令 $\tilde{a}_m=0$，并使用满足 $|x|\le 4$的数据点。为监测标度修正的重要性，我们针对$L\ge L_{\min}$重复进行拟合。拟合结果见补充材料中的表 I。对于两个观测量，将 $n_{\max}$ 从$n_{\max}=2$ 增加到 $n_{\max}=3$ 仅使 χ^2/自由度略微减少（DOF 表示自由度），这表明二次近似能够充分刻画标度函数 f_χ 和 f_R。如方程 (9) 所预期， χ_m 中的标度修正似乎可以忽略：拟合显示出良好的 χ^2/自由度，并且随着 $L_{\min}$的增加，拟合参数保持稳定。相反， R_χ 的拟合显示出较大的 χ^2/自由度，且随着 $L_{\min}$的增加仍然如此，表明标度修正在数值上具有重要影响。

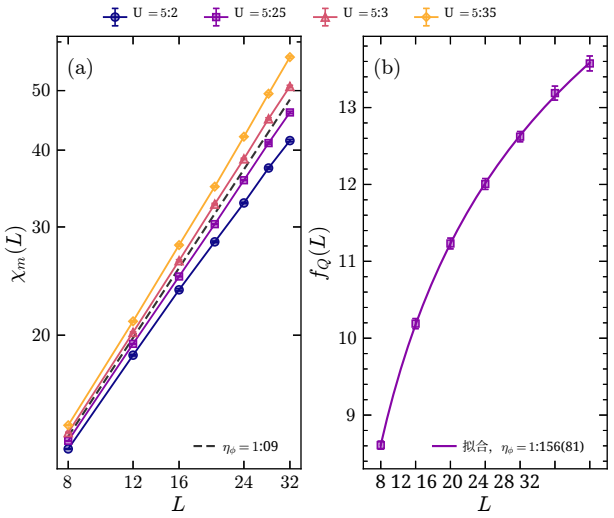

图3。（a）交错自旋磁化率 χ_m 随 L 的变化，参数为 $U=5.2$、5.25、5.3 和 5.35（双对数坐标）。虚线对应于 $\chi_m\propto L^{2-\eta_\phi}$，其中 $\eta_\phi=1.09$。（b）自旋量子费舍尔信息 f_Q L U =随 at . 的变 5.25 $\simeq U_c$ 化。不确定性通过对随机解析延拓进行自助法重采样确定。数据拟合为 $A+BL^{1-\eta_\phi}$，得到 $\eta_\phi=1.156(81)$，与公式（10）中的估计值一致。

为将其纳入考虑，我们在方程 (8) 中加入修正项 $\propto L^{-\omega}$ ，并令 ω为自由参数，重新进行了分析。为了更好地约束临界参数，我们将 R_χ 和 χ_m联合拟合到方程 (8) 和方程 (9)。 $n_{\max}=2$ 和 $m_{\max}=1$的拟合显示出良好的 χ^2/自由度，并且随着最小晶格尺寸的增加，拟合参数保持稳定。此外， U_c 和 η_ϕ 的拟合值与 χ_m的单独拟合结果一致。通过检查拟合结果，我们得到以下保守估计

$$U_c=5.26(3),\qquad \nu=1.10(3),\qquad \eta_\phi=1.09(4). \tag{10}$$

这些数值及其不确定度的选取，与表 I 中对 χ_m 的联合拟合以及自由度为 $\chi^2/\le 1.5$ 和 $\omega\le 2$ 的拟合完全一致。后一项判据是一个上限，因为存在标度修正 $\propto L^{-(2-\eta_\phi)}$。相应的数据塌缩和独立的交叉分析见补充材料中的图 6 和图 5。

图 3(a) 展示了四种临近临界点的耦合常数下， χ_m 随 L 变化的双对数图。对于 $U=5.2$ 和 5.35，曲线分别向下和向上弯曲，从而夹住 U_c。在 $U=5.25$ 处，接近 U_c，数据遵循幂律，与 $\eta_\phi=1.09$ 一致（参见式 (10)）。

这一结果也解释了此前等时分析中发现的较小的 η_ϕ 值。在临界性处，等时结构因子的奇异部分按 $S(\boldsymbol{Q})$ $\sim L^{1-\eta_\phi}$ 标度，因此随着系统尺寸增大而减小，适用于

$\eta_\phi > 1$，因此 $S(\boldsymbol{Q})$ 由其非普适背景主导。因此，基于等时结构因子的早期结果对 U_c 的估计值高于本研究给出的结果 [13, 14]。

自旋动力学与量子费舍尔信息。— 除静态磁化率外，式（4）还可通过一点测量得到自旋关联的完整虚时间依赖关系，$\langle \hat{m}_i(\tau)\, \hat{m}_0(0)\rangle_0$。我们使用 ALF 中实现的随机解析延拓 [25–27] ，将这些数据延拓至实频率，同时考虑虚时间数据的完整协方差矩阵。图 4 展示了 $U = 5.25 \simeq U_c$ 处以及反铁磁相深处 $U = 8$的动态自旋结构因子 $S(\boldsymbol{q},\omega) = \chi''(\boldsymbol{q},\omega)/[\pi(1-e^{-\beta\omega})]$。在临界性处， $\boldsymbol{Q}$ 处的谱权重在低频率下呈现宽广的连续谱， $S(\boldsymbol{Q},\omega) \propto_\omega^{-(2-\eta_\phi)}$。相比之下，在 $U = 8$处，自旋波理论适用，因此我们预期在有序波矢 $\boldsymbol{Q}$处存在一个零频磁振子极点。

非相干的临界动力学会直接影响纠缠。交错磁化强度的量子费舍尔信息密度，

$$f_Q = \frac{4}{\pi N}\int_0^\infty d\omega\, \tanh\left(\frac{\beta\omega}{2}\right)\chi''(\boldsymbol{Q},\omega), \qquad (11)$$

可用于见证多体纠缠：由于局域算符 $\hat{m}_i$ 的本征值为 $0, \pm 1$，$f_Q > 4C(U,L)k$ 意味着至少存在 $(k+1)$ 体纠缠 [28]。量子费舍尔信息的上限是方差的四倍，即 $f_Q \le 4S(\boldsymbol{Q})$，且在 $T = 0$ 时取等号。对于 $\eta_\phi > 1$， $S(\boldsymbol{Q})$ 的奇异部分随系统尺寸增大而减小，因此在相变点处 f_Q 仍有界，这一点也由图 3(b) 所证实。在近藤崩塌相变处也发现了有界的量子费舍尔信息 [29]；这两种情况下，临界自旋动力学都是非相干的，等时关联不会发散 [30]。

总结与结论。— 我们证明，在欧几里得时空中的单个点处耦合到序参量的源，在临界性处是无关微扰。与扩展缺陷不同，例如由哈密顿量钉扎场 [16]，产生的虚时间线缺陷，这种源不会引入独立的缺陷指数；它所诱导的单点测量剖面由体相两点关联函数决定：一个算符插入进入玻尔兹曼权重，另一个则被测量。对于磁化强度，该关系在任意 h 下都是精确的（参见式 (4)），因此即使远离临界性，也能探测自旋关联；对于其他算符，则必须加以检验

视具体情况而定。在辅助场量子蒙特卡罗中，这种方法为处理源自费米子行列式零点的重尾分布提供了实用方案 [20, 21], ，使大规模模拟能够保持良好的稳定性，这是因为观测到的方差是有限的。更广泛地说，点缺陷为获取时空关联和静态磁化率提供了高效途径，例如用于

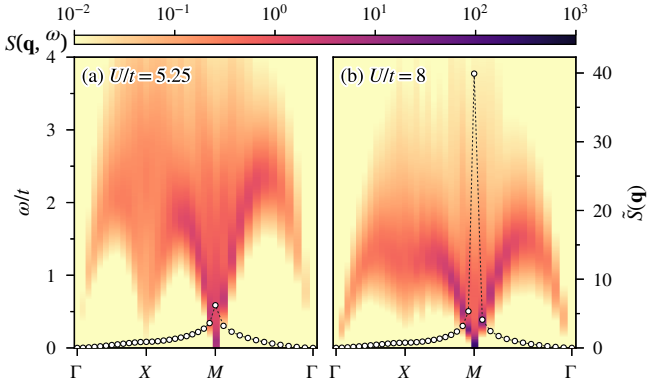

图 4. 沿路径 Γ–X–M–Γ 的动态自旋结构因子 $S(\boldsymbol{q},\omega)$，以及 $M = \boldsymbol{Q} = (\pi,\pi)$，对应于 $L = \beta = 24$ 在（a）临界性下的情况， $U = 5.25$；以及（b）深处于反铁磁相时的情况，$U = 8$。颜色标尺为对数刻度。白色虚点线（右侧坐标轴，两幅图共用）表示$\tilde{S}(\boldsymbol{q}) = S(\boldsymbol{q})/\langle m_0\rangle_h$，其中 $S(\boldsymbol{q}) = \int d\omega\, S(\boldsymbol{q},\omega)$ 是等时结构因子， $U = 5.25$ 时为 $\langle m_0\rangle_h = 0.6257(2)$，而 $U = 8$时为 0.6959(3)。谱通过随机解析延拓获得，使用了虚时间数据的完整协方差矩阵。

检验涌现的洛伦兹对称性，并为解析延拓提供虚时间数据，正如这里对临界自旋动力学的示例所示。特别是，所得的动态磁化率给出了量子费舍尔信息，从而为利用费米子量子蒙特卡洛计算量子临界点处的纠缠见证提供了一条途径。对于 GNH 相变， $\eta_\phi > 1$ 这意味着，由交错磁化强度的量子费舍尔信息所见证的纠缠深度在临界性处仍然是有限的。

我们将该方法应用于半填充 π-通量 Hubbard 模型的 GNH 相变，得到 ν =1.10(3) 和 $\eta_\phi = 1.09(4)$，与场论预言 [10–12] 接近。由于 $\eta_\phi > 1$，等时自旋关联的奇异部分会随系统尺寸增大而减小，因此基于这些关联的分析会受到非普适背景的主导，而时间积分磁化率则保留了一个不断增大的奇异部分。这凸显了当反常维数较大时，仅凭等时关联提取临界行为的困难。最后，该方法同样适用于 GN–Ising [4, 31]和 GN–XY [32] 普适类；如补充材料所述，这两种情况下点缺陷均不会引入负号问题。

我们感谢 Igor Herbut、Jo˜ao In´acio、Lukas Janssen、Fo-Hong Wang、Xiao Yan Xu 和 Indra Yudhistira 富有益处的讨论。我们衷心感谢 Gauss 超级计算中心协会（Gauss Centre for Supercomputing e.V.）通过提供在莱布尼茨超级计算中心（LRZ）的 GCS 超级计算机 SuperMUC-NG 上的计算时间（项目编号 pn73xu），以及由埃朗根国家高性能计算中心

（NHR@FAU）提供的科学支持和 HPC 资源，为本项目提供资助。该中心隶属于埃朗根-纽伦堡弗里德里希-亚历山大大学（FAU），资助来自 NHR 项目 b133ae。NHR 资金由联邦政府和巴伐利亚州政府提供。NHR@FAU 的硬件部分由德国研究基金会（DFG）资助，项目编号为 440719683。F.F.A.、J.V. 和 L.T. 感谢德国研究基金会（DFG）通过维尔茨堡-德累斯顿卓越集群 *ctd.qmat* ——量子物质的复杂性、拓扑与动力学（EXC 2147，项目编号 390858490）提供的资金支持。F.P.T. 获德国研究基金会（DFG）资助，项目编号为 586743423。

AI 的使用。— 我们使用了多个 Claude 模型（Anthropic，5.x 代），通过 Claude Team for Science 订阅访问，用于检查量子蒙特卡罗代码中的错误并交叉核对数据分析。所有这些工作均由作者指导；作者审阅并核实了 AI 生成的输出，并对论文内容承担全部责任。

[1] I. F. Herbut、V. Juriˇci´c 和 O. Vafek，《物理评论B》**80**，075432（2009）。[2] L. Ma、R. Chaturvedi、P. X. Nguyen、K. Watanabe、T. Taniguchi、K. F. Mak 和 J. Shan，《自然·材料》10.1038/s41563-025-02359-8（2025）。[3] J. Cardy，*Scaling and Renormalization in Statistical Physics* 1996（剑桥大学出版社，剑桥，）。[4] E. Huffman 和 S. Chandrasekharan，《物理评论D》**101**，074501（2020）。[5] B. Ihrig、L. N. Mihaila 和 M. M. Scherer，《物理评论B》**98**，125109（2018）。[6] J. A. Gracey，《物理学快报B》**297**，293（1992）。[7] B. Knorr，《物理评论B》**94**，245102（2016）。[8] R. S. Erramilli、L. V. Iliesiu、P. Kravchuk、A. Liu、D. Poland 和 D. Simmons-Duffin，《高能物理学杂志》**2023**，36（2023）。[9] F.-H. Wang、F. Sun、C. He 和 X. Y. Xu，《解析蜂窝哈伯德模型中的量子临界性》（2026年），arXiv:2602.03656。[10] N. Zerf、L. N. Mihaila、P. Marquard、I. F. Herbut 和 M. M. Scherer，《物理评论D》**96**，096010（2017）。[11] K. Ladovrechis、S. Ray、T. Meng 和 L. Janssen，《物理评论B》**107**，035151（2023）。[12] J. A. Gracey，《物理评论D》**97**，105009（2018）。[13] F. Parisen Toldin、M. Hohenadler、F. F. Assaad 和 I. F. Herbut，《物理评论B》**91**，165108（2015）。[14] Y. Otsuka、S. Yunoki 和 S. Sorella，《物理评论X》**6**，011029（2016）。[15] F. F. Assaad 和 I. F. Herbut，《物理评论X》**3**，031010（2013）。[16] F. Parisen Toldin、F. F. Assaad 和 S. Wessel，《物理评论B》**95**，014401（2017）。[17] R. Blankenbecler、D. J. Scalapino 和 R. L. Sugar，《物理评论D》**24**，2278（1981）。[18] S. White、D. Scalapino、R. Sugar、E. Loh、J. Gubernatis 和 R. Scalettar，《物理评论B》**40**，506（1989）。[19] S. Assaad 和 H. Evertz，《自旋、声子的世界线和行列式量子蒙特卡洛方法》以及电子，载于 *Computational Many-Particle Physics*，H. Fehske、R. Schneider 和 A. Weiße 编（施普林格·柏林·海德堡，柏林、海德堡，2008年），第277–356页。[20] H. Shi 和 S. Zhang，《物理评论E》**93**，033303（2016年）。[21] M. Ulybyshev 和 F. Assaad，《物理评论E》**106**，025318（2022年）。[22] Y. Liu、Z. Wang、T. Sato、W. Guo 和 F. F. Assaad，《物理评论B》**104**，035107（2021年）。[23] C. Wu 和 S.-C. Zhang，《物理评论B》**71**，155115（2005年）。[24] F. F. Assaad、M. Bercx、F. Goth、A. G¨otz、J. S. Hofmann、E. Huffman、Z. Liu、F. P. Toldin、J. S. E. Portela 和 J. Schwab，《SciPost物理代码库》，1（2025年）。[25] A. Sandvik，《物理评论B》**57**，10287（1998年）。[26] K. S. D. Beach，arXiv 电子预印本，cond-mat/0403055（2004年），arXiv:cond-mat/0403055 [cond-mat.str-el]。[27] H. Shao 和 A. W. Sandvik，《物理学报告》**1003**，1（2023年），量子蒙特卡罗数据随机解析延拓的进展。[28] P. Hauke、M. Heyl、L. Tagliacozzo 和 P. Zoller，《自然物理》**12**，778（2016年）。[29] F. Mazza、S. Biswas、X. Yan、A. Prokofiev、P. Steffens、Q. Si、F. F. Assaad 和 S. Paschen，《自然物理》**22**，1064 2026年( )。[30] 这一结论依赖于 $\eta_\phi > 1$。我们的数据支持这一点，但目前的误差条并不能排除 η_ϕ 在更大规模模拟中低于1的可能性。[31] Z. C. Wei、C. Wu、Y. Li、S. Zhang 和 T. Xiang，《物理评论快报》**116**，250601（2016年）。[32] Y. Otsuka、K. Seki、S. Sorella 和 S. Yunoki，《物理评论B》**98**，035126（2018年）。[33] E. F. Huffman 和 S. Chandrasekharan，《物理评论B》**89**，111101（2014年）。[34] Z.-X. Li、Y.-F. Jiang 和 H. Yao，《物理评论快报》**117**，267002 2016年( )。[35] W. Kennedy、J. C. In´acio 和 F. F. Assaad，arXiv:2611.16988（2026年），arXiv:2611.16988 [cond- mat.str-el]。[36] C. N. Yang 和 S. C. Zhang，《现代物理学快报B》**04**，759（1990年）。

补充材料

GN–伊辛普适性类

GN–伊辛普适性类的一个典型晶格模型是蜂窝晶格或 π-通量晶格上的无自旋 t-V 模型，

$$\hat{H} = -t\sum_{\langle \boldsymbol{i},\boldsymbol{j}\rangle}\left(\hat{c}_{\boldsymbol{i}}^{\dagger}\hat{c}_{\boldsymbol{j}} + \mathrm{H.c.}\right) + V\sum_{\langle \boldsymbol{i},\boldsymbol{j}\rangle}\left(\hat{n}_{\boldsymbol{i}} - \tfrac{1}{2}\right)\left(\hat{n}_{\boldsymbol{j}} - \tfrac{1}{2}\right). \tag{12}$$

该模型不存在负号问题 [33, 34]，其辅助场量子蒙特卡洛实现见文献 [24]。当 V 较大时，基态为电荷密度波，在两个子晶格之间存在密度不平衡。作为点缺陷，我们在 $\tau = 0$ $n_{\boldsymbol{i}} - \frac{1}{2}\ ^2 = \frac{1}{4}$ $e^{h(\hat{n}_{\mathbf{0}}-1/2} = h/2$ + 处插入 h 2 $(\hat{n}_{\mathbf{0}} - \frac{1}{2})$。由于 $(\hat{\ })$，有 $\cosh(\ )\sinh(h/2)(\hat{n}_{\mathbf{0}} - \frac{1}{2})$，而粒子-空穴对称性 $\langle\hat{\ }$ $n_{\boldsymbol{i}} - \frac{1}{2}\rangle_0 = 0$ h 对任意

$$\langle \hat{n}_{\boldsymbol{i}}(\tau) - \tfrac{1}{2}\rangle_h = 2\tanh\left(\frac{h}{2}\right)\left\langle\left(\hat{n}_{\boldsymbol{i}}(\tau) - \tfrac{1}{2}\right)\left(\hat{n}_{\mathbf{0}}(0) - \tfrac{1}{2}\right)\right\rangle_0. \tag{13}$$

与 Hubbard 模型类似，该缺陷因此可精确获得零场两点函数。马约拉纳正性 [31] 保证交错场（因而点缺陷）不会导致负号问题。

GN–XY 普适性类

文献 [32] 引入了 GN–XY 普适性类的一种实现：三角晶格上的有自旋费米子，具有吸引性 Hubbard 相互作用，

$$\hat{H} = \sum_{\langle \boldsymbol{i},\boldsymbol{j}\rangle,\sigma} t_{\boldsymbol{ij}}\left(\hat{c}_{\boldsymbol{i}\sigma}^{\dagger}\hat{c}_{\boldsymbol{j}\sigma} + \mathrm{H.c.}\right) - U\sum_{\boldsymbol{i}}\left(\hat{n}_{\boldsymbol{i}} - 1\right)^2, \tag{14}$$

其中 $t_{\boldsymbol{ij}} = \pm t$ 表示穿过朝上三角形的 π 通量，且 $U > 0$。在半填充时，对应于 $\mu = 0$ [35]，该通量会产生狄拉克半金属。由于三角晶格不是二分晶格，Hubbard 模型在二分晶格上的 $SO(4)$ 对称性 [36] 降低为 $U(1)\times SU(2)$，分别对应电荷守恒和自旋旋转。当 U 达到临界值时，该模型会从半金属转变为 s 波超导体，属于 GN–XY 普适性类 [32]。

作为一个点缺陷，我们在 $\tau = 0$ 处插入厄米局域配对算符 $h\hat{O}_{\mathbf{0}}$，其中 $\hat{O}_{\boldsymbol{i}} = \hat{\Delta}_{\boldsymbol{i}} + \hat{\Delta}_{\boldsymbol{i}}^{\dagger}$ 和 $\hat{\Delta}_{\boldsymbol{i}} = \hat{c}_{\boldsymbol{i}\downarrow}\hat{c}_{\boldsymbol{i}\uparrow}$。由于根据 $U(1)$ 对称性，$\hat{O}_{\boldsymbol{i}}^3 = \hat{O}_{\boldsymbol{i}}$ 以及会改变粒子数的期望值均为零，因此该关系是严格成立的，并且形式与式 (4) 相同：

$$\langle \hat{O}_{\boldsymbol{i}}(\tau)\rangle_h = \frac{\sinh h}{1 + (\cosh h - 1)\langle \hat{O}_{\mathbf{0}}^2\rangle_0}\langle \hat{O}_{\boldsymbol{i}}(\tau)\hat{O}_{\mathbf{0}}(0)\rangle_0. \tag{15}$$

有趣的是，我们未能利用文献 [34] 中的马约拉纳时间反演对称性和马约拉纳正性 [31]，证明负号问题不存在。这里我们采用另一种方法。由于 $\hat{O}_{\mathbf{0}}^2 = (\hat{n}_{\mathbf{0}} - 1)^2$ 是一个投影算符，$e^{h\hat{O}_{\mathbf{0}}} = e^{\alpha(\hat{n}_{\mathbf{0}}-1)^2} + \sinh(h)\hat{O}_{\mathbf{0}}$，其中 $\alpha = \ln(\cosh h) \geq 0$。对哈密顿量中的完全平方项进行离散 Hubbard–Stratonovich（HS）解耦后，玻尔兹曼

每个构型的权重 s 为 $\mathrm{Tr}\left[\hat{U}_s(\beta,\ 0)\ e^{h\hat{O}_{\mathbf{0}}}\right] = \mathrm{Tr}\left[\hat{U}_s(\beta,\ 0)\ e^{\alpha(\hat{n}_{\mathbf{0}}-1)^2}\right]$，其中 $\hat{U}_s(\beta,\ 0)$ 是 HS 构型 s 的虚时传播子。我们省略了 $\sinh(h)\hat{O}_{\mathbf{0}}$ 项，因为 $\hat{U}_s(\beta,\ 0)$ 守恒粒子数。现在可以对时空缺陷项进行额外的 HS 变换。由于对于 HS 场的每个构型，传播子在时间反演下不变且守恒粒子数，文献 [23] 保证不存在负号问题。对额外的场求和可恢复 $\mathrm{Tr}\left[\hat{U}_s(\beta,\ 0)\ e^{h\hat{O}_{\mathbf{0}}}\right]$，因此对于每个 s，它都是非负的。

实际上，我们执行部分粒子-空穴变换-

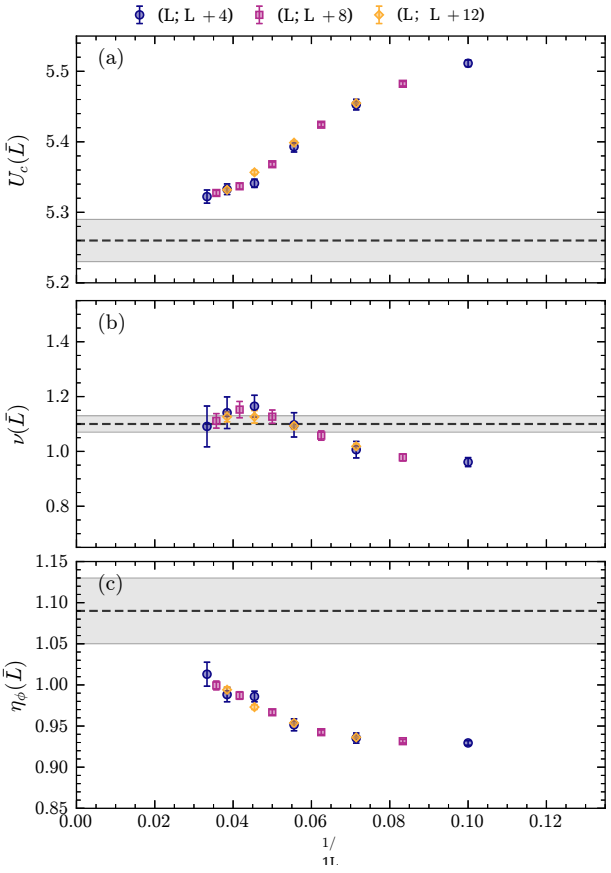

图 5. 交叉分析：(a) U_c、(b) ν和 (c) η_ϕ，由式 (16) 得出，对比尺寸为 $(L,\ L + L_{\mathrm{step}})$ 的样本对与 $1/\bar{L}$，其中 $\bar{L}$ 为该样本对的平均尺寸。虚线和阴影带：式 (10) 的估计值及一个标准差的不确定性。

表 I. 对 R_χ 和 χ_m 进行的有限尺寸标度拟合，拟合所用方程为（8）和（9）。水平线上方的行是未考虑标度修正的单独拟合；下方的行是对 R_χ 和 χ_m 进行的联合拟合，其中针对 R_χ纳入了标度修正。所有拟合均仅使用满足 $|x| = |U - U_c|L^{1/\nu} \leq 4$的数据； $L_{\min}$ 表示拟合所考虑的最小晶格尺寸。

	$L_{\min}$	U_c	ν	η_ϕ	ω	DOF	χ^2/ 自由度
R_χ $n_{\max}=2$	8	5.4354(13)	1.2350(88)	–	–	80	57.59
	12	5.3803(15)	1.194(14)	–	–	65	15.40
	16	5.3496(19)	1.171(18)	–	–	52	4.21
R_χ $n_{\max}=3$	8	5.4285(12)	1.1748(84)	–	–	79	55.06
	12	5.3813(15)	1.198(14)	–	–	64	15.41
	16	5.3496(19)	1.171(18)	–	–	51	4.29
χ_m $n_{\max}=2$	8	5.2644(28)	1.0532(33)	1.0954(27)	–	79	4.10
	12	5.2535(61)	1.0848(76)	1.1097(73)	–	64	1.44
	16	5.274(12)	1.112(14)	1.081(16)	–	51	1.24
χ_m $n_{\max}=3$	8	5.2698(31)	1.0473(35)	1.0906(30)	–	78	3.56
	12	5.2528(62)	1.0855(75)	1.1105(74)	–	63	1.45
	16	5.270(12)	1.111(13)	1.085(16)	–	50	1.14
$R_\chi + \chi_m$ $n_{\max}=2,\ m_{\max}=0$	8	5.2939(20)	1.0243(36)	1.0685(20)	0.758(29)	159	8.88
	12	5.2813(46)	1.0619(80)	1.0775(56)	1.27(11)	129	2.21
	16	5.2955(95)	1.106(15)	1.051(13)	2.6(26)	103	1.09
$R_\chi + \chi_m$ $n_{\max}=2,\ m_{\max}=1$	8	5.2609(28)	1.0601(35)	1.0984(27)	0.338(24)	158	4.20
	12	5.2541(62)	1.0924(79)	1.1086(73)	0.725(86)	128	1.37
	16	5.279(15)	1.120(15)	1.073(20)	1.6(22)	102	1.03

自旋向下费米子进行部分粒子-空穴变换，$\hat{c}_{i\downarrow} \to \hat{c}^\dagger_{i\downarrow}$。它将吸引相互作用映射为排斥相互作用，反转自旋向下跃迁的符号， $t_{ij} \to -t_{ij}$，并将$\hat{O}_i$ 映射为横向磁化$\hat{c}^\dagger_{i\uparrow}\hat{c}_{i\downarrow}$ +H.c. 因此，GN–XY 情形归结为排斥型 Hubbard 模型中具有自旋依赖跃迁的横向自旋缺陷，其处理方式与正文中完全相同。

交叉法

在尺寸为 L 和 rL的交点处，比值估计的斜率为 $1/\nu$，而磁化率比值的估计值为 η_ϕ。记作 $R_L = R_\chi(U, L)$和 $\chi_L = \chi_m(U, L)$，我们使用

$$\nu^{-1}(L) = \left.\frac{\ln[\partial_U R_{rL}/\partial_U R_L]}{\ln r}\right|_{U=U_c(L)}, \qquad \eta_\phi(L) = 2 - \left.\frac{\ln[\chi_{rL}/\chi_L]}{\ln r}\right|_{U=U_c(L)}. \tag{16}$$

图 5 展示了尺寸对 $(L,\ L + L_{\text{step}})$ 且 $L_{\text{step}} = 4$、8 和 12 时所得的有限尺寸估计；交叉不确定性通过对蒙特卡罗分箱进行自助法重采样获得。随着尺寸对的平均尺寸 L 增大，交叉点向更小的耦合常数漂移；对于最大的尺寸对，达到 $U \simeq 5.3$ ，而 η_ϕ 不断增大并超过 1。这两种趋势都指向公式（10）的估计值，其范围以阴影带表示。较大的未—

有限尺寸估计中的确定性 ν 之所以出现，是因为公式（16）不仅要求插值后的数值

R_χ 交叉点处的数值及其导数 $\partial_U R_\chi$。最后，图 6 展示了利用公式（10）中的估计值对重整化群不变磁化率比 R_χ 和交错磁化率 χ_m 进行的数据塌缩。对于所有尺寸，磁化率都实现了塌缩，而对于最小的尺寸，磁化率比值显示出明显的标度修正。

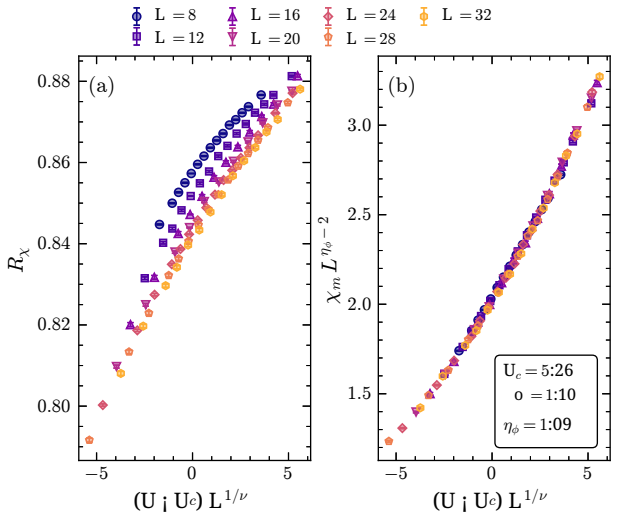

图 6。（a） R_χ 和（b） χ_m 利用公式（10）进行的数据塌缩：$U_c = 5.26$、 $\nu = 1.10$和 $\eta_\phi = 1.09$。