arXiv:2611.32974v1 [cond-mat.str-el] 24 Nov 2026

杂质熵的局域热力学重构

Hang Su[1, 2, *]

[1]物理系，法赫德国王石油与矿业大学（*KFUPM*），宰赫兰，沙特阿拉伯 [2]量子中心，*KFUPM*，宰赫兰，沙特阿拉伯

（2026年11月25日）

在空间延展的相互作用量子浴中，解析与局域杂质相关的热力学熵仍然是一项数值挑战。我们提出了一种局域麦克斯韦方法，可从世界线量子蒙特卡罗（QMC）模拟中的局域可观测量重构杂质熵。该方法沿杂质耦合对温度响应进行积分，从而避免分别估计广延熵。对于具有非负世界线展开和有界局域耦合的系统，我们建立了与浴大小无关的杂质顶点数所有阶乘矩的界。对于偶数顶点数，当耦合趋近于零时，麦克斯韦估计量方差仍保持有界。横场伊辛基准测试重现了精确的自由费米子结果，而相互作用的 XXZ 链相较于传统的广延热力学积分，在统计效率上实现了最高数百倍的提升。在三通道XXZ杂质结中，我们揭示了冷却过程中的熵恢复，以及有限温度熵差对耦合的非单调依赖。这些结果表明，局域热力学重构是研究相互作用量子浴中杂质熵的一种高效方法。

引言—— 热力学熵为探究支配量子多体系统低温行为的自由度提供了一种灵敏的手段 [1]。在量子杂质系统中，杂质熵 $S_{\mathrm{imp}} = S_{\mathrm{full}} - S_{\mathrm{bath}}$ 刻画了与局域杂质 [2–4]相关的额外热力学熵。它揭示了杂质屏蔽和边界交叉行为，包括多通道近藤系统中的分数残余熵 [5–7] 以及马约拉纳零模的熵特征 [8]。这些熵特征在介观量子器件和人工构造的量子杂质系统中尤其受到关注；在这些系统中，量子点和电荷近藤电路提供了可调平台，可用于探测强关联态以及潜在的非阿贝尔态 [9–13]。

尽管具有重要的物理意义，但对于具有空间延展相互作用浴的系统，准确计算杂质熵仍然颇具挑战。数值重整化群 [1, 14] 能够高效地捕捉杂质热力学，但不太容易应用于相互作用浴；张量网络方法 [15–17] 则可以显式处理此类系统，尽管有限温度计算在计算上可能颇为繁重 [18]。量子蒙特卡罗（QMC）方法 [19–22] 为研究量子多体系统的有限温度性质提供了互补途径，但热力学熵通常并不是可直接采样的观测量 [23]。现有方法通过基于能量的热力学积分（TI）重构熵，包括针对杂质的特定 QMC 实现 [24, 25], ，以及基于配分函数的方法，例如扩展系综 [26], 、重加权方案 [27]和用于边界熵的配分函数比 [28]，或温度增量计算 [29]。然而，对于杂质系统，直接将分别估计的完整系统熵和浴熵相减，需要分辨一个 $\mathcal{O}(1)$ 两个广延 $\mathcal{O}(L)$量之间的差异。由此，这些估计中的统计涨落可能会掩盖小得多的杂质信号。

另一种方法是利用热力学麦克斯韦关系，将熵对可调参数的响应与其共轭观测量的温度依赖性联系起来 [30]。这种方法已促成介观量子点中的熵测量 [10, 11]，并启发了利用多通道近藤器件探测分数熵 [6, 8] 以及拓扑相熵特征 [31]的相关方案。近年来，基于麦克斯韦关系的熵重构 [32, 33] 也已在量子气体中通过局域配对关联 [34], 以及在相互作用哈伯德模型中通过参数空间中的热力学积分 [35]得到数值验证。对于具有显式相互作用浴的杂质系统，这提示可以通过改变具有有界空间支撑的耦合来重构熵。一个核心问题是，随着浴大小增加，由此得到的量子蒙特卡罗估计量能否在避免广延量相减的同时，保持受控的统计涨落。

在本文中，我们发展了一种局域麦克斯韦方法，用于根据世界线量子蒙特卡罗中的局部耦合响应重构杂质熵 [19–22, 36–38]。该重构利用局域杂质顶点计数及其生成-

推广至对角耦合项，从而避免对独立估算的广延熵进行相减。对于具有有界局域耦合的非负世界线展开，我们证明了杂质顶点数的阶乘矩具有与浴大小无关的界。对于偶数顶点数的麦克斯韦估计量，还可得到一个额外的方差界。我们在临界横场伊辛模型（横场伊辛模型）中，将重构结果与精确结果进行验证，并证明相较于相互作用 XXZ 自旋链中的广延热力学积分，该方法具有更高的统计效率。将该方法应用于一个三通道

XXZ 杂质结点后，该方法揭示了冷却过程中熵的恢复现象；有限温度响应的自由能弦分析进一步支持了这一发现。

局域麦克斯韦重构与统计局域性。我们从哈密顿量 $\mathcal{H}(\lambda) = \mathcal{H}_0 + \lambda V_D$ 出发，其中V_D 是一个局域杂质耦合算符，其算符范数的上界与浴大小无关。在不存在符号问题的世界线量子蒙特卡罗展开中，我们首先考虑局域杂质交换通过带有因子 λ 的顶点进入的情形。配分函数的形式为 [20]

$$\mathcal{Z}(\beta,\lambda) = \sum_{\mathscr{C}} W(\mathscr{C},\lambda,\beta) = \sum_{\mathscr{C}} \lambda^{N_D(\mathscr{C})} \bar{W}(\mathscr{C},\beta), \quad (1)$$

其中，$\mathscr{C}$ 表示一个世界线构型，β 表示逆温度（其中 $k_B = 1$），N_D 统计局域交换顶点，剩余的与 λ无关的权重$\bar{W}(\mathscr{C}, \beta)$为非负数。因子 λ^{N_D} 给出 $\lambda\partial_\lambda \ln \mathcal{Z} = \langle N_D\rangle$。结合热力学关系$\partial_\lambda \ln \mathcal{Z} = -\beta\langle V_D\rangle$ [22]，我们得到 $\lambda\langle V_D\rangle = -\langle N_D\rangle/\beta$。因此，可直接根据杂质顶点数求得局域交换能。

通过引入麦克斯韦关系 $\partial_\lambda S = -\partial_T\langle V_D\rangle$ [32, 33]，我们得到

$$\lambda\frac{\partial S}{\partial\lambda} = \langle N_D\rangle - \beta\frac{\partial\langle N_D\rangle}{\partial\beta}. \quad (2)$$

因此，我们通过对这一局域响应积分来重构杂质熵，

$$S_{\rm imp}(\beta,\lambda) = S_{\rm imp}(\beta,0) + \int_0^\lambda \frac{\mathrm{d}\lambda'}{\lambda'}\left[\langle N_D\rangle_{\lambda'} - \beta\frac{\partial\langle N_D\rangle_{\lambda'}}{\partial\beta}\right], \quad (3)$$

其中，下标 λ' 表示在杂质耦合为 λ' 时计算的期望值。对于一个解耦的自旋-1/2杂质，$S_{\rm imp}(\beta, 0) = \ln 2$，这反映了其自旋的二重简并。由于参考浴与 λ 无关，即 $\partial_\lambda S_{\rm imp} = \partial_\lambda S$，局域交换能的热响应决定了杂质熵的变化，其中也包括周围浴的响应。这样便无需对两个广延熵估计作差。

我们考察 N_D 的平衡涨落如何依赖于浴大小。对于式（1）中的展开，第k阶阶乘矩为 $\langle(N_D)_k\rangle = \lambda^k\partial_\lambda^k\mathcal{Z}/\mathcal{Z}$，其中对于整数$k \geq 1$，$(N_D)_k = N_D(N_D-1)\cdots(N_D-k+1)$。在算符表示中，相同的导数涉及 k 个 V_D 的虚时间插入。这些插入受 V_D 的算子范数限制，因此 $|\partial_\lambda^k\mathcal{Z}| \leq \beta^k\mathcal{Z}\|V_D\|^k$ [39–41], ，如补充材料中所证明。对于非负的世界线权重且 $\lambda \geq 0$，我们得到$0 \leq \langle(N_D)_k\rangle \leq (\beta\lambda\|V_D\|)^k$。利用 $N_D^2 = (N_D)_2 + N_D$，前两个阶乘矩给出

$$\mathrm{Var}(N_D) \leq b + b^2, \qquad b = \beta\lambda\|V_D\|, \quad (4)$$

对于会翻转杂质自旋、且没有其他作用于杂质的自旋翻转项的杂质交换顶点，世界线周期性要求 N_D 为偶数。由于 $N_D^2 \leq 2(N_D)_2$,我们得到更强的界限

$$\mathrm{Var}\left(\frac{N_D}{\lambda}\right) \leq 2\beta^2\|V_D\|^2, \qquad \lambda > 0. \quad (5)$$

在固定β 和 λ时，这两个界都与浴大小无关，而后者在 $\lambda \to 0^+$时仍保持一致。该证明既不要求存在谱隙，也不要求关联长度有限，因此对临界浴同样有效。这些界涉及局域可观测量的平衡涨落，而不是重构熵的统计不确定性。温度微分可能放大统计噪声，而耦合积分会引入误差传播和离散化效应。

式（3）中的重构假设 λ 仅通过交换顶点进入。耦合通常也可能出现在对角构型权重中，而这些权重的贡献并未被 N_D捕捉。我们定义局域估计量 $Q_\lambda(\mathscr{C}) = \partial_\lambda \ln W(\mathscr{C}, \lambda, \beta)$，利用局域顶点数和对角相互作用的虚时间积分，即可根据每个采样构型直接计算该估计量。其期望值满足 $\langle Q_\lambda\rangle = \partial_\lambda \ln \mathcal{Z}$。一般的 Local-Maxwell 关系变为

$$\frac{\partial S_{\rm imp}}{\partial\lambda} = \langle Q_\lambda\rangle - \beta\frac{\partial\langle Q_\lambda\rangle}{\partial\beta}. \quad (6)$$

温度导数作用于完整的期望值，包括 Q_λ 中任何显式的 β 依赖性。对于仅含顶点的情形 $W(\mathscr{C}, \lambda, \beta) = \lambda^{N_D(\mathscr{C})}\bar{W}(\mathscr{C}, \beta)$，在 $Q_\lambda = N_D/\lambda$ 下可恢复公式（2）。

横场伊辛基准测试——我们首先将 Local-Maxwell 方法与具有边界杂质的可精确求解横场伊辛模型进行基准测试[42, 43]。其哈密顿量为

$$\mathcal{H}_{\rm TFIM} = -J\sum_{j=1}^{L-1}\sigma_j^z\sigma_{j+1}^z - \Gamma\sum_{j=1}^{L}\sigma_j^x - \lambda\sigma_0^z\sigma_1^z, \quad (7)$$

其中，位点 0 表示不含横场的杂质自旋，L 是浴自旋的数量。在此，我们设定 $\Gamma = J = 1$，使浴处于其量子临界点。利用自由费米子表示[44–46]，也可以精确计算杂质熵。

图 1 将 Local-Maxwell 的结果与精确的自由费米子解进行了比较 [47]。在弱耦合下$\lambda = 0.2$，$S_{\rm imp}$ 较大系统的熵随降温逐渐减小，在所研究的温度范围内未达到边界熵平台。相比之下，对于 $\lambda = 1.0$，较大系统趋近于普适的边界熵值 $\frac{1}{2}\ln 2$，这与临界伊辛模型中从自由边界到固定边界的重整化群流相关 [2, 48]。对于两种耦合，最小系统在低温下都呈现上翘，趋向 ln2。这是因为

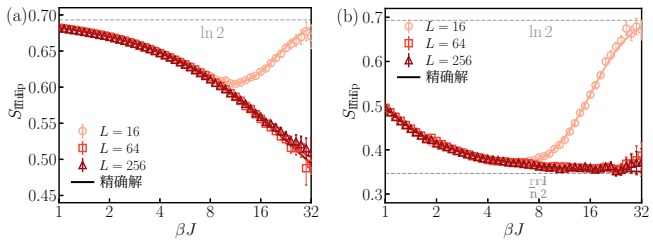

图 1：杂质熵 S_{imp} 作为 βJ 的函数，针对具有 (a) $\lambda = 0.2$ 和 (b) $\lambda = 1.0$的临界横场伊辛模型。实线显示不同浴长度 L [47]的精确自由费米子解。水平虚线标出 ln 2 和 $\frac{1}{2}\ln 2$。

有限系统具有二重基态简并，因为杂质自旋没有横向场。Local-Maxwell 的结果再现了这些不同的温度依赖性和有限尺寸效应，证实了熵重构在不同耦合和系统尺寸下的准确性。

相互作用 *XXZ* 自旋链。—— 我们接下来考察局域麦克斯韦方法在具有边界杂质 [3, 49]的自旋-1/2 XXZ 链中的统计效率。哈密顿量写为

$$\mathcal{H}_{\mathrm{XXZ}} = -\sum_{j=1}^{L-1}\left[J_x(S_j^x S_{j+1}^x + S_j^y S_{j+1}^y) + J_z S_j^z S_{j+1}^z\right] - C_x(S_0^x S_1^x + S_0^y S_1^y) - C_z S_0^z S_1^z, \tag{8}$$

其中 S_0 表示杂质自旋-1/2， L 是浴自旋的数目， C_x 和 C_z 分别为横向与纵向杂质耦合。我们选取 $J_x = -1.25$、$J_z = -1$，对应于具有 $\Delta = J_z/J_x = 0.8$ 的无能隙卢廷格液体浴，而杂质耦合设为 $C_x = 0.2$ （或 1.0 ）和 $C_z = 0$。

图 2(a) 和 (b) 比较了使用局域麦克斯韦方法和广延 TI 获得的杂质熵，其中完整系统和裸浴的熵分别根据其广延能量计算得到。两种方法的结果一致，但局域麦克斯韦方法的统计误差显著更小，尤其是在系统尺寸较大时。在弱耦合 $C_x = 0.2$ 下，杂质熵仍接近 ln 2，降温时仅小幅降低。相反，在较强耦合 $C_x = 1.0$ 下，杂质熵受到显著抑制，并且在 $\beta = 32$ 处表现出更强的有限尺寸依赖。

为量化统计效率，我们引入成本加权方差 $\mathcal{V} = \mathcal{C}\sigma_S^2$ [47]，其中 $\mathcal{C}$ 和 σ_S 分别表示总计算成本和杂质熵的标准误差。如图 2 (c) 和 (d) 所示，对所有尺寸进行幂律拟合 $\mathcal{V} = AL^p$ 表明，广延 TI 的尺寸依赖近似为二次，而 Local-Maxwell 方法则为 $p \simeq 1.0 \sim 1.3$ 。因此，相对统计效率

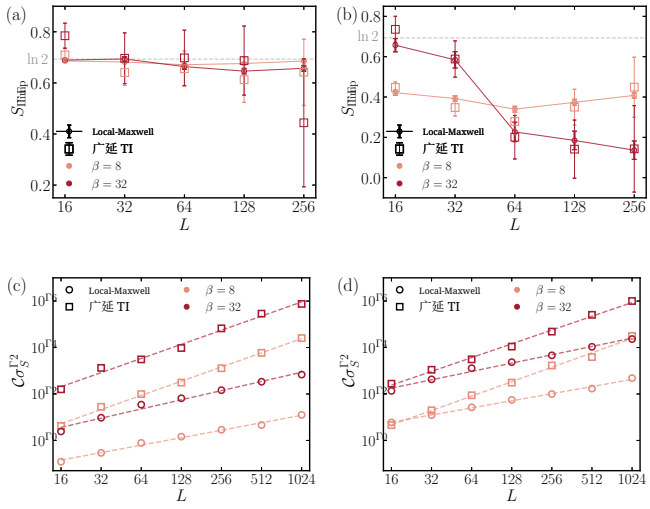

图 2：XXZ自旋链中的杂质熵和统计效率。(a、b) 杂质熵 S_{imp} 随浴长度 L 的变化，其中 (a) 为 $C_x = 0.2$ ，(b) 为 $C_x = 1.0$，比较了在$\beta = 8$ 和 32 处局域麦克斯韦方法与广延 TI 方法的结果。(c、d) 相应的成本加权方差 $\mathcal{V}$ ，其中 (c) 为 $C_x = 0.2$ ，(d) 为 $C_x = 1.0$。虚线表示在 $16 \le L \le 1024$ 上进行的幂律拟合。

会随着系统尺寸增大而提高，这与补充材料 [47] 中展示的直接比较结果一致。在杂质耦合较弱时，这种改进尤为显著，因为此时杂质贡献相较于广延的浴能量较小。这些结果表明，在相互作用量子系统中，从局域统计观测量重构杂质熵具有计算优势。

应用于多通道自旋链结点。—多通道量子杂质系统具有丰富的边界物理[50, 51], ，其中杂质熵可用来探测其低能行为。因此，我们考虑一个自旋为1/2 的杂质，对称耦合到三条 XXZ 链的末端 [6, 7]。其哈密顿量为

$$\mathcal{H} = J\sum_{\alpha=1}^{3}\sum_{j=1}^{L-1}\left(S_{\alpha,j}^x S_{\alpha,j+1}^x + S_{\alpha,j}^y S_{\alpha,j+1}^y + \Delta S_{\alpha,j}^z S_{\alpha,j+1}^z\right) + J_K\sum_{\alpha=1}^{3}\left(S_d^x S_{\alpha,1}^x + S_d^y S_{\alpha,1}^y + \Delta S_d^z S_{\alpha,1}^z\right), \tag{9}$$

这里， J 和 J_K 分别是链内耦合和杂质交换耦合，而 Δ 是 XXZ各向异性。我们令 $J = 1$ 和 $\Delta = 0.8$。每条链包含 L 个自旋，因此结点中共有 $N = 3L + 1$ 个自旋。我们定义$S_{\mathrm{imp}} = S_{\mathrm{junction}} - 3S_{\mathrm{chain}}$，精确的解耦极限参考值为 S_{imp}（$J_K = 0$） $= \ln 2$。

在 $\Delta = 0.8$处，每条链都是无能隙的卢廷格液体，其参数为 $K = \pi/[2(\pi - \arccos\Delta)] \simeq 0.629$。

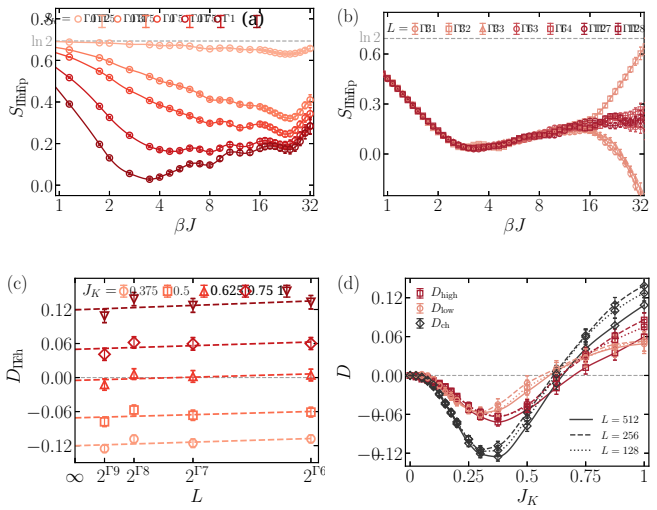

图3： $\Delta = 0.8$处三通道 XXZ 模型的杂质熵和热响应。(a) 杂质熵 $S_{\rm imp}$ 随 βJ 的变化，适用于 $L = 512$ 和不同的 J_K。虚线表示解耦杂质熵 ln2。(b) 相邻奇数和偶数链长下 $S_{\rm imp}$ 的温度依赖性。(c) 不同 J_K 下自由能弦对比度 $D_{\rm ch}$ 的系统尺寸依赖性。虚线表示 $1/L$ 中的线性拟合。(d) 总弦对比度 $D_{\rm ch} = D_{\rm low} + D_{\rm high}$ 中的低温和高温贡献 $D_{\rm low}$ 和 $D_{\rm high}$。

横向杂质交换的标度维数为$d_\perp = 1/(2K) \simeq 0.795 < 1$，在弱耦合下是相关的。在弱耦合区内，边界微扰理论给出 $S_{\rm imp} - \ln 2 \sim -AJ_K^2 T^{2d_\perp - 2}$，其中 $A > 0$，这预言了冷却[47, 52, 53]过程中熵的耗减。在渐近极限 $J_K \gg J$下，杂质与三个链端点形成一个具有非简并基态的四自旋团簇。剩余的低能自由度构成三条缩短的 XXZ 链。在此极限下，在低温热力学区间 $S_{\rm imp} \simeq -\pi T/v$，其中 v 是自旋速度[47]。这两个极限倾向于产生相反的热响应。

我们使用 Local-Maxwell 方法计算中间区域 $0 < J_K \leq 1$ 的杂质熵。在高温下，结果与补充材料 [47] 中推导出的展开式$S_{\rm imp} = \ln 2 - 3(2 + \Delta^2)(\beta J_K)^2/32 + \mathcal{O}(\beta^3)$一致。图3(a)显示，在弱耦合下，熵会随冷却而耗减。在较大的 J_K 下，$S_{\rm imp}$ 达到最小值，并在进一步冷却时增加。我们进一步考察熵恢复是否源于有限尺寸奇偶效应。当 L 为偶数时，结中包含奇数个自旋-1/2 自由度，并呈现克 ramers 简并 [54]。相比之下，当 L 为奇数时，每条参考链中则分别受到克 ramers 简并的约束。图3(b)显示了显著的奇偶效应在较小系统的低温杂质熵中。对于 $L = 127$ 和 128 均观察到的恢复现象，排除了其完全由奇偶性引起的可能。

为避免对温度进行数值微分来表征熵恢复，我们引入自由能弦熵

$$S_{\rm ch}(T_1, T_2) = -\frac{F_{\rm imp}(T_2) - F_{\rm imp}(T_1)}{T_2 - T_1} = \frac{1}{T_2 - T_1}\int_{T_1}^{T_2} S_{\rm imp}(T)\,{\rm d}T, \tag{10}$$

其表示在 $[T_1, T_2]$ 上取温度平均的杂质熵。杂质自由能通过对 J_K [47] 上的局域共轭可观测量进行积分获得。我们将冷温与暖温弦对比定义为

$$D_{\rm ch}(J_K, L) = S_{\rm ch}(1/32, 1/16) - S_{\rm ch}(1/8, 1/4). \tag{11}$$

$D_{\rm ch}$ 的负值和正值分别表示冷却过程中的熵耗减和熵恢复。如图3(c)所示，$D_{\rm ch}$ 随 J_K 的增加而变号。对 $1/L$ 进行线性拟合表明，这种反转在热力学极限下仍然存在。

$D_{\rm ch}$ 对耦合的依赖性还可以通过比较相邻温度窗口进一步解析。令 $S_{\rm c}$、$S_{\rm m}$ 和 $S_{\rm w}$ 分别表示在 $[1/32, 1/16]$、$[1/16, 1/8]$ 和 $[1/8, 1/4]$ 上的弦熵。我们定义 $D_{\rm low} = S_{\rm c} - S_{\rm m}$ 和 $D_{\rm high} = S_{\rm m} - S_{\rm w}$，使得 $D_{\rm ch} = D_{\rm low} + D_{\rm high}$。如图3(d)所示，在弱耦合下，两种对比均为负值，但在较大的 J_K 下变为正值。较低温度下的对比往往首先变号，这表明熵恢复先在较低温度下发展，随后扩展至较高温度窗口。这一演化揭示了有限温度杂质熵响应随耦合而发生的反转。

边界自旋链模型中也有关于非单调杂质熵的报道，其中局域束缚模重组了低能激发谱 [55, 56]。不同于传统的局域杂质单态屏蔽，我们的三臂结点在强耦合极限下产生了一个由自旋三重态导出的非简并四自旋团簇基态 [47]。弱耦合极限和强耦合极限下相反的热响应表明，热力学上可访问的边界激发发生重组，可能是观测到的熵恢复现象的根源。局域麦克斯韦重构和自由能弦分析揭示了有限温度杂质熵响应随耦合变化而发生反转，这与边界交叉相一致。

结论与讨论。— 在这项工作中，我们提出了一种局域麦克斯韦方法，可从世界线量子蒙特卡罗中的局部耦合响应重构杂质熵。对于具有非负世界线展开且局域耦合算符有界的系统，我们建立了与浴大小无关的局域顶点数涨落界，

并且在满足自旋翻转宇称条件时，建立了相应麦克斯韦估计量的涨落界。横场伊辛模型基准验证了该重构方法与精确结果的一致性，而相互作用 XXZ 链则展示了相较于传统广延热力学积分更高的统计效率。在三通道 XXZ 结中，该方法揭示了杂质熵随冷却呈非单调变化，以及冷态与暖态熵差随耦合变化而发生反转。我们的框架为研究相互作用自旋链 [57, 58], 梯子系统 [59], 和更高维量子磁体 [60–62], 中的杂质与缺陷热力学，以及 Kondo 型系统 [7, 63–65] 提供了一条切实可行的途径，在这些系统中，局部耦合响应可以被高效采样。

致谢。— 作者感谢姚远和邹吉的支持，感谢张腾洲和 Tian- wei Ouyang 就量子蒙特卡罗实现及计算集群的使用进行的有益讨论，也感谢 Shen Haojie、洪图和戴泽南提供的有益讨论。

* suhang980715@gmail.com
[1] R. Bulla、T. A. Costi 和 T. Pruschke, 《现代物理评论》80, 395 (2008年)。 [2] I. Affleck 和 A. W. W. Ludwig, 《物理评论快报》67, 161 1991年 ( )。 [3] S. Eggert 和 I. Affleck, 《物理评论B》46, 10866 (1992)。 [4] D. Friedan 和 A. Konechny, 《物理评论快报》93, 030402 (2004年)。 [5] I. Affleck 和 A. W. W. Ludwig, 《物理评论B》48, 7297 (1993)。 [6] C. Han、Z. Iftikhar、Y. Kleeorin、A. Anthore、F. Pierre、Y. Meir、A. K. Mitchell 和 E. Sela, 《物理评论快报》128, 146803 (2022)。 [7] J. Gaines、G. Li 和 J. I. Väyrynen, 《物理评论快报》136, 036503 (2026年)。 [8] E. Sela、Y. Oreg、S. Plugge、N. Hartman、S. Lüscher 和 J. Folk, 《物理评论快报》123, 147702 (2019)。 [9] C. Nayak、S. H. Simon、A. Stern、M. Freedman 和 S. Das Sarma, 《现代物理评论》80, 1083 (2008年)。 [10] N. Hartman、C. Olsen、S. Lüscher、M. Samani、S. Fallahi、G. C. Gardner、M. Manfra 和 J. Folk, 《自然·物理》14, 1083 (2018)。 [11] T. Child、O. Sheekey、S. Lüscher、S. Fallahi、G. C. Gardner、M. Manfra、A. Mitchell、E. Sela、Y. Kleeorin、Y. Meir 和 J. Folk, 《物理评论快报》129, 227702 (2022)。 [12] D. B. Karki、E. Boulat、W. Pouse、D. Goldhaber-Gordon、A. K. Mitchell 和 C. Mora, 《物理评论快报》130, 146201 2023年( )。 [13] C. Piquard 、 A. Veillon 、 Y. Sato 、 F. Zanichelli 、 A. Aas- sime、A. Cavanna、U. Gennser、A. K. Mitchell、A. An- thore 和 F. Pierre, “临界近藤系统中的分数熵的实验证据”, (2026年), arXiv:2605.00669 [cond-mat.mes-hall]。 [14] K. G. Wilson, 《现代物理评论》47, 773 (1975)。 [15] S. R. White, 《物理评论快报》69, 2863 (1992)。 [16] S. R. White, 《物理评论B》48, 10345 (1993)。 [17] U. Schollwöck, 《物理学年鉴》326，96（2011年）。 [18] A. E. Feiguin 和 S. R. White, 《物理评论B》72, 220401 2005(R)（）。 [19] N. Prokof'Ev、B. Svistunov 和 I. Tupitsyn, 《实验与理论物理学杂志》87，310（1998年）。 [20] N. Kawashima 和 K. Harada, 《日本物理学会杂志》73，1379（2004年）。 [21] J. E. Gubernatis、N. Kawashima 和 P. Werner, 《量子蒙特卡罗方法：晶格模型算法》（剑桥，The address，2020年）。 [22] A. W. Sandvik, 载于《AIP会议论文集》第1297卷（美国物理联合会，2010年），第135–338页。 [23] Y. Kato 和 S. Onoda, 《物理评论快报》115，077202（2015年）。 [24] C. Huscroft、R. Gass 和 M. Jarrell, 《物理评论B》61，9300 2000（）。 [25] R. Žitko、J. Mravlje 和 K. Haule, 《物理评论快报》108，066602（2012年）。 [26] A. Lyubartsev、A. Martsinovski、S. Shevkunov 和 P. Vorontsov-Velyaminov, 《化学物理学杂志》96，1776（1992年）。 [27] Y.-M. Ding、J.-S. Sun、N. Ma、G. Pan、C. Cheng 和 Z. Yan, 《物理评论B》110，165152（2024年）。 [28] W. Tang、L. Chen、W. Li、X. C. Xie、H.-H. Tu 和 L. Wang, 《物理评论B》96，115136（2017年）。 [29] Z. Dai 和 X. Y. Xu, 《物理评论B》111，L081108（2025年）。 [30] N. R. Cooper 和 A. Stern, 《物理评论快报》102，176807（2009年）。 [31] S. Sankar、E. Sela 和 C. Han, 《物理评论快报》131，016601 2023（）。 [32] K. Huang, 《统计力学》（约翰·威立父子公司，2008年）。 [33] H. B. Callen，约翰·威立父子公司2（1960年）。 [34] R. S. Watson、C. Coleman 和 K. V. Kheruntsyan, 《物理评论快报》133，100403（2024年）。 [35] Y.-F. Song、Y. Deng 和 Y.-Y. He, 《物理评论B》114，115101 2026（）。 [36] N. Sadoune 和 L. Pollet, 《SciPost物理学代码库》，009（2022年）。 [37] T. Zhang 和 Z. Cai, 《物理评论快报》132，206503（2024年）。 [38] H. Su、T. Zhang、Y. Yao 和 A. Furusaki, 《物理评论快报》135，146502（2025年）。 [39] R. Bhatia, 《正定矩阵》（普林斯顿大学出版社，2009年）。 [40] R. Bhatia, 《矩阵分析》（施普林格科学与商业媒体，2013年）。 [41] R. Schatten, 《完全连续算子的范数理想》（施普林格出版社，2013年）。 [42] D. Karevski、R. Juhász、L. Turban 和 F. Iglói, 《物理评论B》60，4195（1999年）。 [43] T. J. G. Apollaro、G. Francica、D. Giuliano、G. Falcone、G. M. Palma 和 F. Plastina, 《物理评论B》96，155145（2017年）。 [44] S. Katsura, 《物理评论》127，1508（1962年）。 [45] P. Pfeuty, 《物理学年鉴》57，79（1970年）。 [46] J. Wu、L. Zhu 和 Q. Si, 《物理评论B》97，245127（2018年）。 [47] 参见补充材料。 [48] R. Chatterjee, 《核物理B》468，439（1996年）。 [49] A. Furusaki 和 T. Hikihara, 《物理评论B》58，5529（1998年）。 [50] P. Nozieres 和 A. Blandin, 《物理学杂志》41，193（1980年）。

[51] I. Affleck 和 A. W. Ludwig，《核物理B》360，641（1991年）。[52] I. Affleck，“近藤效应的共形场论方法”（1995年），arXiv:cond-mat/9512099 [cond-mat]。[53] J. Cardy，“边界共形场论”（2008年），arXiv:hep-th/0411189 [hep-th]。[54] H. Tasaki，《量子多体系统的物理与数学》，第66卷（Springer，柏林，2020年）。[55] A. Zhakenov、P. Kattel 和 N. Andrei，“分裂希尔伯特空间中的热力学：海森堡链边缘的量子杂质”（2025 2508 19334），[ ] arXiv: 。cond-mat.str-el 。[56] A. Zhakenov、P. Kattel、A. Gleis 和 N. Andrei，“近藤自旋链的边界相与热力学：从过屏蔽近藤效应到边界束缚态”（2026年），arXiv:2608.12453 [。[57] S. Yamamoto 和 S. Miyashita，《物理评论B》48，9528（1993年）。[58] J. Becker、T. Köhler、A. C. Tiegel、S. R. Manmana、S. Wessel 和 A. Honecker，《物理评论B》96，060403(R)（2017年）。[59] J. Dai、P. Schlottmann 和 Y. Wang，《物理评论B》65，144411 2002（）。[60] K. H. Höglund 和 A. W. Sandvik，《物理评论B》70，024406 2004（）。[61] K. H. Höglund 和 A. W. Sandvik，《物理评论快报》99，027205 2007（）。[62] L.-W. Huang、J.-H. Peng 和 F.-J. Jiang，《中国物理学杂志》82，41（2023年）。[63] P. Kattel、A. Zhakenov 和 N. Andrei，《物理评论B》113，195155（2026年）。[64] N. Paris、N. Dupuis 和 C. Mora，《物理评论快报》136，066501 2026（）。[65] N. Paris、O. Bouverot-Dupuis 和 C. Mora，《物理评论快报》137，196503（2026年）。

补充材料

局域顶点数矩的界。— 我们建立了关于局域杂质顶点数 N_D 的所有阶乘矩的、与浴大小无关的界，由此可得一个方差界。考虑 $\mathcal{H}(\lambda) = \mathcal{H}_0 + \lambda V_D$，其中 $\|V_D\| \le v_D$，且 v_D 与浴大小无关。我们假设 $\lambda \ge 0$ 满足式 (1) 中的非负世界线展开，并保持其他所有哈密顿量参数不变。对于整数 $k \ge 1$，阶乘矩满足

$$\langle (N_D)_k \rangle = \frac{\lambda^k}{\mathcal{Z}} \frac{\partial^k \mathcal{Z}}{\partial \lambda^k}, \tag{12}$$

其中 $(N_D)_k = N_D(N_D-1)\cdots(N_D-k+1)$，且 $(N_D)_0 = 1$。我们注意到，非负构型权重保证 $\langle (N_D)_k \rangle \ge 0$。

由于 $\mathcal{H}$ 和 V_D 通常不对易，配分函数的第 k 阶导数可表示为杜哈梅尔展开 [39]为

$$\frac{\partial^k \mathcal{Z}}{\partial \lambda^k} = (-\beta)^k k! \int_{\Delta_k} \mathrm{d}^k s \times \mathrm{Tr}\left[\mathrm{e}^{-\beta t_0 \mathcal{H}} V_D \mathrm{e}^{-\beta t_1 \mathcal{H}} \cdots V_D \mathrm{e}^{-\beta t_k \mathcal{H}} \right], \tag{13}$$

其中 $\Delta_k = \{0 \le s_k \le \cdots \le s_1 \le 1\}$、$t_0 = 1 - s_1$、$t_j = s_j - s_{j+1}$ 对于 $1 \le j < k$ 成立，且 $t_k = s_k$。这些区间满足 $t_j \ge 0$ 和 $\sum_{j=0}^{k} t_j = 1$。对每个虚时间传播子应用指数为 $1/t_j$ 的广义 Schatten–Hölder 不等式 [40, 41], ，并对每个 V_D 使用算子范数，可得

$$\left| \mathrm{Tr}\left[\mathrm{e}^{-\beta t_0 \mathcal{H}} V_D \cdots V_D \mathrm{e}^{-\beta t_k \mathcal{H}} \right] \right| \le \|V_D\|^k \prod_{j=0}^{k} \left\| \mathrm{e}^{-\beta t_j \mathcal{H}} \right\|_{1/t_j} = \mathcal{Z} \|V_D\|^k. \tag{14}$$

对于 $t_j > 0$，Schatten 范数满足 $\|e^{-\beta t_j \mathcal{H}}\|_{1/t_j} = [\mathrm{Tr}(e^{-\beta t_j \mathcal{H}})^{1/t_j}]^{t_j} = \mathcal{Z}^{t_j}$。在 $t_j = 0$ 时，相应的算子范数为 $\|\mathbb{I}\|_\infty = 1 = \mathcal{Z}^0$。由于 t_j之和等于 1，传播子范数的乘积等于 $\mathcal{Z}$，即

$$\left| \frac{\partial^k \mathcal{Z}}{\partial \lambda^k} \right| \le \beta^k \mathcal{Z} \|V_D\|^k. \tag{15}$$

结合阶乘矩恒等式以及世界线权重的正性，我们得到

$$0 \le \langle (N_D)_k \rangle \le b^k, \qquad b = \beta \lambda v_D. \tag{16}$$

该界对每个整数 $k \ge 1$ 都成立，并且在固定 β 和 λ时与浴大小无关。它既不要求存在谱隙，也不要求关联长度有限。

统计学含义。—— 前两个阶乘矩界给出 $\langle N_D \rangle \le b$ 和 $\langle (N_D)_2 \rangle \le b^2$。利用$N_D^2 = (N_D)_2 + N_D$，我们得到

$$\mathrm{Var}(N_D) = \langle (N_D)_2 \rangle + \langle N_D \rangle - \langle N_D \rangle^2 \le b + b^2, \tag{17}$$

其中，$\mathrm{Var}(N_D)$ 表示方差 $\mathrm{Var}(N_D) = \langle N_D^2 \rangle - \langle N_D \rangle^2$。所有阶数的界还控制着更高阶的普通矩，而普通矩是阶乘矩的有限线性组合。

对于具有有界局域对角相互作用的非负世界线表示，相应的与浴大小无关的方差界可在固定 β 和 $\lambda > 0$ 下扩展到完整估计量 Q_λ，如补充材料 [47] 所示。

《杂质熵的局域热力学重构》的补充材料

局域估计量涨落界

本节将补充材料中推导的阶乘矩界扩展到包含对角相互作用的局域估计量。随后，我们将这些界应用于正文中研究的横场伊辛模型（TFIM）、XXZ自旋链和三通道 XXZ 杂质模型。

局域耦合的统一处理

我们考虑世界线基中可能同时包含非对角交换和对角相互作用的局域杂质耦合。为建立统一的方差界，我们引入两个独立的耦合参数：

$$\mathcal{H}(g,h) = \mathcal{H}_0 + gV_\perp + hV_z, \tag{S1}$$

其中，$V_\perp$ 产生交换顶点，而 V_z 在世界线基中是对角的。这两个算符均为局域且有界。假设世界线展开非负，其构型权重为

$$W(\mathscr{C}; g, h, \beta) = g^{N_D(\mathscr{C})} \mathrm{e}^{-\beta h A_D(\mathscr{C})} \bar{W}(\mathscr{C}, \beta), \tag{S2}$$

其中，$g \geq 0$ 和 $W(\mathscr{C}, \beta) \geq 0$ 独立于 g 和 h。对角可观测量定义为

$$A_D(\mathscr{C}) = \frac{1}{\beta} \int_0^\beta \mathrm{d}\tau \, V_z(\tau; \mathscr{C}), \tag{S3}$$

其中，$V_z(\tau; \mathscr{C})$ 表示沿采样世界线的对角矩阵元。由于 V_z 有界，$|A_D(\mathscr{C})| \leq v_z$，其中 $v_z = \|V_z\|$ 与浴大小无关。

沿着物理耦合路径 $g = \lambda$ 和 $h = h(\lambda)$，我们定义构型权重 $\widetilde{W}(\mathscr{C}; \lambda, \beta) = W(\mathscr{C}; \lambda, h(\lambda), \beta)$。于是，局域估计量为

$$Q_\lambda(\mathscr{C}) = \frac{\partial}{\partial \lambda} \ln \widetilde{W}(\mathscr{C}; \lambda, \beta) = \frac{N_D(\mathscr{C})}{\lambda} - \beta h'(\lambda) A_D(\mathscr{C}). \tag{S4}$$

其中 $h'(\lambda) = \mathrm{d}h/\mathrm{d}\lambda$ 和 $\lambda > 0$。其期望满足沿相同耦合路径的 $\langle Q_\lambda \rangle = \mathrm{d} \ln \mathcal{Z}/\mathrm{d}\lambda$.

对于可观测量 X 和 Y，可以将方差和协方差定义为

$$\mathrm{Var}(X) = \langle X^2 \rangle - \langle X \rangle^2, \qquad \mathrm{Cov}(X, Y) = \langle XY \rangle - \langle X \rangle \langle Y \rangle. \tag{S5}$$

为界定 N_D 的涨落，我们将 g 和 h 视为独立参数，并在固定 h 的条件下对配分函数关于 g 求导。用 $\langle \cdots \rangle_{g,\, h}$ 表示固定 g 和 h 时的热平均，补充材料中建立的全阶阶乘矩界给出

$$0 \leq \langle (N_D)_k \rangle_{g,h} \leq b_\perp^k, \qquad b_\perp = \beta g \|V_\perp\|. \tag{S6}$$

沿物理耦合路径计算该界，在此路径上 $g = \lambda$ 和 $b_\perp = \beta\lambda\|V_\perp\|$，前两个阶乘矩给出

$$\mathrm{Var}(N_D) \leq b_\perp + b_\perp^2. \tag{S7}$$

完整估计量的方差为

$$\mathrm{Var}(Q_\lambda) = \frac{\mathrm{Var}(N_D)}{\lambda^2} + \beta^2 [h'(\lambda)]^2 \, \mathrm{Var}(A_D) - \frac{2\beta h'(\lambda)}{\lambda} \, \mathrm{Cov}(N_D, A_D). \tag{S8}$$

利用 $\mathrm{Var}(A_D) \leq v_z^2$，并对协方差项应用柯西–施瓦茨不等式，我们得到

$$\mathrm{Var}(Q_\lambda) \leq \left[\frac{\sqrt{\mathrm{Var}(N_D)}}{\lambda} + \beta |h'(\lambda)| \sqrt{\mathrm{Var}(A_D)} \right]^2 \leq \left[\frac{\sqrt{b_\perp + b_\perp^2}}{\lambda} + \beta |h'(\lambda)| v_z \right]^2. \tag{S9}$$

对于固定的 β 和 $\lambda > 0$，且 $h'(\lambda)$ 与浴大小无关时，该界与浴大小无关，并计及横向贡献与对角贡献之间的关联。

涨落界在量子自旋模型中的应用

对于正文中研究的三个模型，可以对所得界限进行显式计算。对于横场伊辛模型，杂质耦合算符为

$$V_{\mathrm{TFIM}} = -\sigma_0^z \sigma_1^z, \qquad \|V_{\mathrm{TFIM}}\| = 1. \tag{S10}$$

在顶点计数表示中， $Q_\lambda = N_D/\lambda$。所得估计量方差的界限为

$$\mathrm{Var}(Q_\lambda) \le \frac{\beta}{\lambda} + \beta^2. \tag{S11}$$

对于 $C_z = 0$的 XXZ 基准模型，局域耦合算符为

$$V_{\mathrm{XXZ}} = -(S_0^x S_1^x + S_0^y S_1^y), \qquad \|V_{\mathrm{XXZ}}\| = \frac{1}{2}. \tag{S12}$$

由于 $Q_{C_x} = N_D/C_x$，估计量方差满足

$$\mathrm{Var}(Q_{C_x}) \le \frac{\beta}{2C_x} + \frac{\beta^2}{4}. \tag{S13}$$

对于三通道 XXZ 模型，物理耦合路径为 $g = J_K$ 以及 $h(J_K) = \Delta J_K$，其中 $h'(J_K) = \Delta$。横向和纵向耦合算符为

$$V_\perp = \sum_{\alpha=1}^{3} (S_d^x S_{\alpha,1}^x + S_d^y S_{\alpha,1}^y), \qquad V_z = \sum_{\alpha=1}^{3} S_d^z S_{\alpha,1}^z. \tag{S14}$$

这里， N_D 对横向交换顶点进行计数，而 $A_D(\mathscr{C}) = \beta^{-1} \int_0^\beta \mathrm{d}\tau\, V_z(\tau;\, \mathscr{C})$是纵向交换相互作用的虚时间平均。因此，局域估计量为

$$Q_{J_K}(\mathscr{C}) = \frac{N_D(\mathscr{C})}{J_K} - \beta\Delta A_D(\mathscr{C}). \tag{S15}$$

为计算算符范数，我们引入三个链端点的总自旋$\mathbf{T} = \sum_{\alpha=1}^{3} \mathbf{S}_{\alpha,\ 1}$ 得到

$$V_\perp = \frac{1}{2}(S_d^+ T^- + S_d^- T^+), \qquad V_z = S_d^z T^z. \tag{S16}$$

端点自旋希尔伯特空间分解为一个 $T = 3/2$ 扇区和两个 $T = 1/2$ 扇区。在固定的-T 扇区中， $V_\perp$ 的最大矩阵元为 $\frac{1}{2}\sqrt{T(T+1)} + \frac{1}{4}$，而 V_z的最大特征值绝对值为 $T/2$。因此，

$$\|V_\perp\|_{T=1/2} = \frac{1}{2}, \qquad \|V_\perp\|_{T=3/2} = 1, \tag{S17}$$

$$\|V_z\|_{T=1/2} = \frac{1}{4}, \qquad \|V_z\|_{T=3/2} = \frac{3}{4}. \tag{S18}$$

完整的算符范数　　因此分别为 $\|V_\perp\| = 1$ 和 $\|V_z\| = 3/4$。将这些值代入公式（S9），得到

$$\mathrm{Var}(Q_{J_K}) \le \left[\frac{\sqrt{\beta J_K + (\beta J_K)^2}}{J_K} + \frac{3}{4}\beta|\Delta| \right]^2. \tag{S19}$$

当杂质交换顶点仅以偶数个出现时， $N_D^2 \le 2(N_D)_2$ 得到

$$\left\langle \left(\frac{N_D}{g} \right)^2 \right\rangle \le 2\beta^2 \|V_\perp\|^2. \tag{S20}$$

使用 $|A_D| \le \|V_z\|$，我们得到

$$\mathrm{Var}(Q_g) \le \beta^2 \left(\sqrt{2}\|V_\perp\| + |h'(g)|\|V_z\| \right)^2. \tag{S21}$$

对于横场伊辛模型，偶数顶点数条件给出

$$\mathrm{Var}(Q_\lambda) \le 2\beta^2. \tag{S22}$$

对于 XXZ 基准模型，同样的条件给出

$$\mathrm{Var}(Q_{C_x}) \le \frac{\beta^2}{2}. \tag{S23}$$

将这些算符范数代入公式（S21），得到

$$\mathrm{Var}(Q_{J_K}) \le \beta^2 \left(\sqrt{2} + \frac{3|\Delta|}{4}\right)^2. \tag{S24}$$

该界与浴长度无关，并且在 $J_K \to 0^+$ 时保持一致。

横场伊辛模型

本节给出横场伊辛模型的有限尺寸自由费米子精确解，该解对应正文图 1 中的实线。我们还给出了更多 Local-Maxwell 量子蒙特卡洛结果，扩展了基准的温度范围和系统尺寸覆盖范围。

Exact free fermion solution

我们从横场伊辛模型哈密顿量出发

$$\mathcal{H}_{\mathrm{TFIM}} = \mathcal{H}^{(\mathrm{bath})}_{\mathrm{TFIM}} + \mathcal{H}^{(\mathrm{imp})}_{\mathrm{TFIM}}, \tag{S25}$$

其中

$$\mathcal{H}^{(\mathrm{bath})}_{\mathrm{TFIM}} = -J\sum_{j=1}^{L-1}\sigma_j^z\sigma_{j+1}^z - \Gamma\sum_{j=1}^{L}\sigma_j^x, \tag{S26}$$

$$\mathcal{H}^{(\mathrm{imp})}_{\mathrm{TFIM}} = -\lambda\sigma_0^z\sigma_1^z, \tag{S27}$$

其中， L 表示浴自旋的数量， σ_0 表示没有横向场的杂质自旋。这里取$J=\Gamma=1$ ，对应于浴的量子临界点。

通过约旦–维格纳变换，该模型可以映射为自由费米子。为方便起见，我们先对自旋轴进行统一旋转， $\sigma_j^z \to \sigma_j^x$和 $\sigma_j^x \to \sigma_j^z$。于是哈密顿量变为

$$\mathcal{H}_{\mathrm{TFIM}} = -\sum_{j=0}^{L-1} K_j\sigma_j^x\sigma_{j+1}^x - \sum_{j=0}^{L} h_j\sigma_j^z, \tag{S28}$$

其中，对于 $j \ge 1$， $K_0=\lambda$ 和 $h_0=0$、 $K_j=J$和 $h_j=\Gamma$。

引入马约拉纳算符

$$a_j = \left(\prod_{k=0}^{j-1}\sigma_k^z\right)\sigma_j^x, \quad b_j = \left(\prod_{k=0}^{j-1}\sigma_k^z\right)\sigma_j^y, \tag{S29}$$

它们满足 $\{a_i,a_j\}=\{b_i,b_j\}=2\delta_{ij}$和 $\{a_i,b_j\}=0$，由此可得二次哈密顿量

$$\mathcal{H}_{\mathrm{TFIM}} = \mathrm{i}\sum_{j=0}^{L-1} K_j b_j a_{j+1} + \mathrm{i}\sum_{j=0}^{L} h_j a_j b_j = \mathrm{i}\boldsymbol{a}^{\mathsf{T}}\boldsymbol{B}\boldsymbol{b}, \tag{S30}$$

其中 $\boldsymbol{a}=(a_0$、.....、$a_L)^{\mathsf{T}}$和 $\boldsymbol{b}=(b_0$、.....、$b_L)^{\mathsf{T}}$，而 $\boldsymbol{B}$的非零矩阵元为 $B_{jj}=h_j$和 $B_{j+1,\,j}=-K_j$。费米子激发能由 $\epsilon_n = 2s_n$给出，其中 s_n 是 $\boldsymbol{B}$的奇异值。由于 $h_0=0$，矩阵 $\boldsymbol{B}$ 存在一个精确的零奇异值 $\epsilon_0=0$。

为了明确得到有限尺寸谱，我们考察 $\boldsymbol{B}\boldsymbol{B}^{\mathsf{T}}$的非零本征值。移除其零行和零列后，得到 $L \times L$ 三对角矩阵

$$\boldsymbol{M}_L = \begin{pmatrix} \Gamma^2+\lambda^2 & -\Gamma J & & \\ -\Gamma J & \Gamma^2+J^2 & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & -\Gamma J \\ & & -\Gamma J & \Gamma^2+J^2 \end{pmatrix}. \tag{S31}$$

在临界点 $J=\Gamma=1$，本征值方程 $\boldsymbol{M}_L\boldsymbol{v}=\mu\boldsymbol{v}$ 给出体递推关系

$$-v_{j-1}+2v_j-v_{j+1}=\mu v_j, \tag{S32}$$

结合边界条件 $v_{L+1}=0$和 $v_0=(1-\lambda^2)v_1$。通过写成 $\mu=2-2\cos k$和 $v_j\propto\sin[(L+1-j)k]$，我们得到有限尺寸量子化条件

$$\sin[(L+1)k]=(1-\lambda^2)\sin(Lk). \tag{S33}$$

对于所考虑的耦合 s， L 解 $k_n\in(0,\pi)$决定了非零激发能 s

$$\epsilon_n(L,\lambda)=4\sin\frac{k_n}{2}, \qquad n=1,\dots,L. \tag{S34}$$

对于隔离的 浴，相应的量子化条件可通过令 $\lambda=0$得到，即

$$\widetilde{\epsilon}_n(L)=4\sin\frac{q_n}{2}, \qquad q_n=\frac{(2n-1)\pi}{2L+1}. \tag{S35}$$

因此，完整系统和孤立浴都具有精确的有限尺寸单粒子谱。对角化哈密顿量为

$$\mathcal{H}_{\mathrm{TFIM}}=\sum_{n=0}^{L}\epsilon_n\left(c_n^\dagger c_n-\frac{1}{2}\right), \tag{S36}$$

其中 $\epsilon_0=0$ 表示零能费米子模。相应的配分函数为

$$\mathcal{Z}_{\mathrm{full}}=2\prod_{n=1}^{L}2\cosh\left(\frac{\beta\epsilon_n}{2}\right). \tag{S37}$$

利用 $S=(1-\beta\partial_\beta)\ln\mathcal{Z}$，我们将单个费米子模的熵贡献定义为

$$s(\beta,\epsilon)=\ln\left[2\cosh\left(\frac{\beta\epsilon}{2}\right)\right]-\frac{\beta\epsilon}{2}\tanh\left(\frac{\beta\epsilon}{2}\right). \tag{S38}$$

因此，精确的杂质熵可通过从完整系统的熵中减去孤立浴的熵得到，

$$S_{\mathrm{imp}}^{\mathrm{exact}}(\beta,L,\lambda)=\ln 2+\sum_{n=1}^{L}\left[s(\beta,\epsilon_n(L,\lambda))-s(\beta,\widetilde{\epsilon}_n(L))\right]. \tag{S39}$$

方程（S39）给出了用于将正文中的 Local-Maxwell 量子蒙特卡洛结果作为基准的精确有限尺寸杂质熵。在 $\lambda=0$ 时，杂质完全解耦，对于任意温度都有 $S_{\mathrm{imp}}=\ln 2$。对于任意固定的有限 L，零能费米子模使完整系统具有二重基态简并，从而在 $\beta\to\infty$ 时得到 $S_{\mathrm{imp}}\to\ln 2$。这解释了小系统中观察到的低温上翘现象。

扩展的温度和系统尺寸结果

我们针对浴长度 $L=16$、32、64、128、256 开展了额外的高温 Local-Maxwell 量子蒙特卡洛模拟，将逆温度范围扩展至 $\beta=0.05$。图 S1 将 $\lambda=0.2$ 和 1。0 时重构得到的杂质熵与相应的精确有限尺寸解进行了比较。

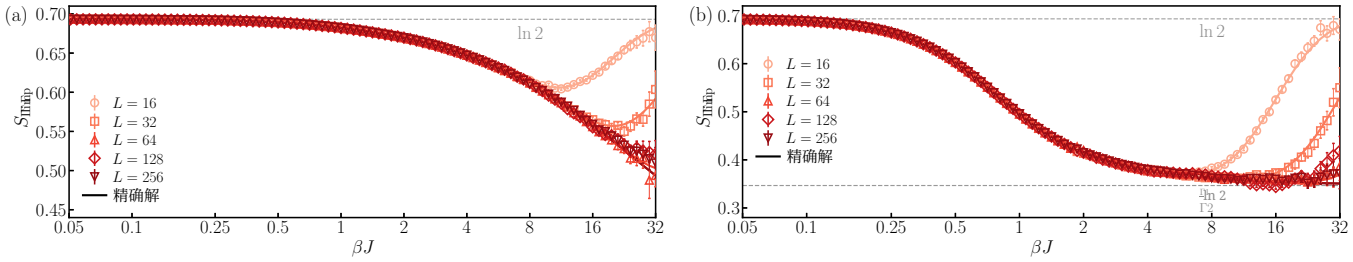

图 S1：横场伊辛模型的杂质熵 S_{imp} 随逆温度 β 变化的结果，其中 (a) $\lambda = 0.2$ 和 (b) $\lambda = 1.0$。水平虚线标出了 ln 2 和 $\frac{1}{2}\ln 2$。

XXZ模型

为量化局域麦克斯韦方法的统计效率，我们将成本加权方差定义为

$$\mathcal{V} = \mathcal{C}\sigma_S^2, \tag{S40}$$

其中，$\mathcal{C}$ 表示分配的 CPU核心时间总量，σ_S 表示杂质熵的统计标准误差。对于具有 $\sigma_S^2 \propto 1/\mathcal{C}$的蒙特卡罗估计，在给定计算成本下，较小的 $\mathcal{V}$ 表示更高的统计效率。我们根据分配的 CPU核心时间估计计算成本

$$\mathcal{C} = N_{\mathrm{core}} \sum_{k \in \mathcal{P}} t_k, \tag{S41}$$

其中，t_k 是第 k个任务中最慢 MPI进程的已用时间。所有模拟均使用了 $N_{\mathrm{core}} = 24$。

为刻画其 系统尺寸依赖性，我们将成本加权方差 $\mathcal{V}$ 拟合为关于 m

$$\mathcal{V} = AL^p \tag{S42}$$

$16 \le L \le 1024$的幂律函数。拟合指数汇总于表 S1 中，所有情况下的决定系数均接近 0.99。传统的广延 TI 方法呈现出近似二次增长，而 Local-Maxwell 方法则表现出弱得多、近似线性的尺寸依赖性。

表 S1：XXZ模型中成本加权方差 $\mathcal{V} = AL^p$ 关于 $16 \le L \le 1024$的幂律指数。

C_x	β	p_{LM}	p_{TI}
0.2	8	1.069	2.029
0.2	32	1.313	2.021
1.0	8	1.018	2.063
1.0	32	1.192	1.969

为直接比较 Local-Maxwell 方法与广延热力学积分（TI）的统计效率，我们将相对效率定义为

$$R_{\mathrm{eff}} = \frac{\mathcal{V}_{\mathrm{TI}}}{\mathcal{V}_{\mathrm{LM}}}, \tag{S43}$$

其中，$R_{\mathrm{eff}} > 1$ 表示 Local-Maxwell 方法具有统计优势。拟合得到的指数表明 $R_{\mathrm{eff}} \propto L^{\Delta p}$，对于所考察的所有情况均有 $\Delta p = p_{\mathrm{TI}} - p_{\mathrm{LM}} > 0$。如图 S2 所示，对于两种杂质耦合，相对效率均随系统尺寸增大而提高，这与局域麦克斯韦估计量更有利的标度关系一致。

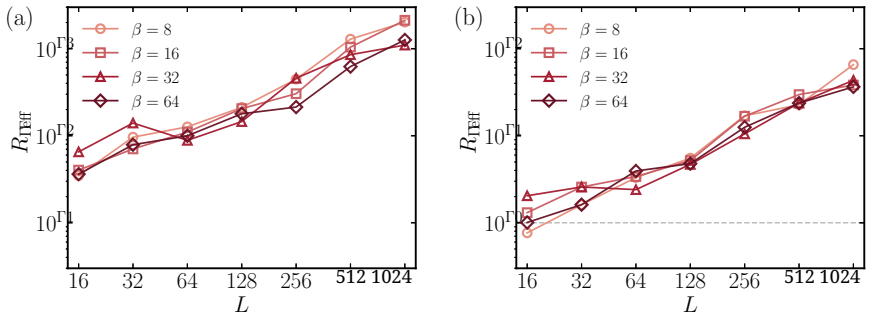

图 S2：对于 XXZ自旋链，两种方法的相对统计效率 R_{eff} 随系统大小 L 的变化，(a)$C_x = 0.2$ 和 (b) $C_x = 1.0$。水平虚线表示 $R_{\mathrm{eff}} = 1$。

三通道 XXZ 杂质模型

本节分析三通道 XXZ 杂质模型的弱耦合与强耦合极限，并通过基于自由能的一致性检查来验证熵恢复。哈密顿量为

$$\mathcal{H} = J \sum_{\alpha=1}^{3} \sum_{j=1}^{L-1} \left(S^x_{\alpha,j} S^x_{\alpha,j+1} + S^y_{\alpha,j} S^y_{\alpha,j+1} + \Delta S^z_{\alpha,j} S^z_{\alpha,j+1} \right) + J_K \sum_{\alpha=1}^{3} \left(S^x_d S^x_{\alpha,1} + S^y_d S^y_{\alpha,1} + \Delta S^z_d S^z_{\alpha,1} \right), \tag{S44}$$

其中我们设定 $J = 1$ 和 $\Delta = 0.8$，而 J_K 控制杂质-浴耦合。

高温展开

我们首先考虑高温极限 $\beta J \ll 1$。通过写成 $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + J_K V$（其中 $V = \partial_{J_K} \mathcal{H}$ 表示杂质交换算符），我们在 $\beta = 0$ 附近展开杂质配分函数比。在无限温度下，$\langle V \rangle_0 = 0$，二阶矩为

$$\langle V^2 \rangle_0 = \sum_{\alpha=1}^{3} \left\langle \left(S^x_d S^x_{\alpha,1} + S^y_d S^y_{\alpha,1} + \Delta S^z_d S^z_{\alpha,1} \right)^2 \right\rangle_0 = \frac{3}{16}(2 + \Delta^2), \tag{S45}$$

不同链之间的交叉项在无限温度迹下消失。累积量展开给出

$$\ln \frac{\mathcal{Z}_{\mathrm{junction}}}{\mathcal{Z}_{\mathrm{bath}}} = \ln 2 + \frac{\beta^2 J_K^2}{2} \langle V^2 \rangle_0 + \mathcal{O}(\beta^3). \tag{S46}$$

利用 $S = (1 - \beta\partial_\beta) \ln \mathcal{Z}$，我们得到

$$S_{\mathrm{imp}} = \ln 2 - \frac{3}{32}(2 + \Delta^2)(\beta J_K)^2 + \mathcal{O}(\beta^3). \tag{S47}$$

对于 $\Delta = 0.8$，首项系数为 $3(2 + \Delta^2)/32 = 0.2475$。因此，初始熵耗减关于 βJ_K 呈二次关系，其系数完全由局域杂质交换决定，与浴大小无关。

图 S3 将这一预测与 Local-Maxwell 对 $L = 512$ 以及不同杂质耦合下、跨越 $0.05 \lesssim \beta J \leq 1$ 的结果进行了比较。数值结果展现出预期的初始熵耗减；当将 $(\ln 2 - S_{\mathrm{imp}})/J_K^2$ 绘制为 $(\beta J)^2$，的函数时，还呈现出与公式 (S47) 一致的近似塌缩。虚线展示了在所显示温度范围内延拓的最低阶展开，以供比较；只有在高温区域才预期会达到定量一致。

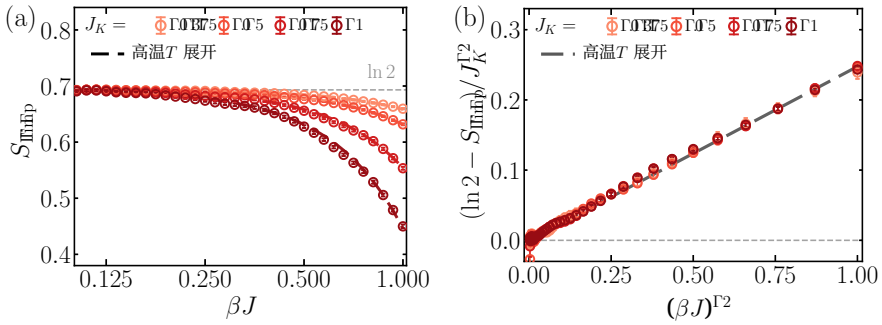

图 S3： $\Delta = 0.8$ 和 $L = 512$处三通道 XXZ 模型的高温杂质熵。(a) 杂质熵 $S_{\rm imp}$ 随 βJ的变化，取值分别为 $J_K = 0.375$，0。5，0。75 和 1。0。水平虚线表示 ln 2。(b) 重标度后的熵耗减 (ln $2 - S_{\rm imp})/J_K^2$ 随 $(\beta J)^2$的变化。虚线表示公式 (S47) 中高温展开的最低阶项。

弱耦合极限

当 $J_K \ll J$时，三条 XXZ 链可用相互独立的 Luttinger液体描述。对于零磁场下且 $-1 < \Delta < 1$的自旋-1/2 XXZ 链，Luttinger 参数为

$$K = \frac{\pi}{2(\pi - \arccos \Delta)}. \tag{S48}$$

这给出 $K \simeq 0.629$ 在 $\Delta = 0.8$处。横向边界自旋算符的标度维数为 $d_\perp = 1/2K \simeq 0.795$。因此，横向杂质交换在解耦固定点处是相关的，其中

$$\frac{\mathrm{d}g_\perp}{\mathrm{d}\ell} = (1 - d_\perp)g_\perp + \mathcal{O}(g_\perp g_z, g_\perp^3), \tag{S49}$$

其中， $g_\perp$ 和 g_z 是无量纲的横向耦合和纵向耦合。纵向交换的边界标度维数为一，在树级上是边缘的。

为了考察相应的熵响应，我们围绕 $J_K = 0$展开杂质自由能。记作$V = \partial_{J_K}\mathcal{H}$，一阶项为零，因为解耦系统满足 $\langle V\rangle_{J_K=0} = 0$。二阶累积量展开给出

$$F_{\rm imp}(T, J_K) = -T \ln 2 - \frac{J_K^2}{2}\chi_V(T) + \mathcal{O}(J_K^3), \tag{S50}$$

其中磁化率为

$$\chi_V(T) = \int_0^\beta \mathrm{d}\tau \, \langle V(\tau)V(0)\rangle_0. \tag{S51}$$

记作 $V = V_\perp + \Delta V_z$，由 $U(1)$ 对称性可知，横向-纵向混合关联为零，因此得到

$$\chi_V(T) = \chi_\perp(T) + \Delta^2\chi_z(T), \tag{S52}$$

其中， $\chi_\perp$ 和 χ_z 分别表示相应的积分关联函数。纵向贡献相对于横向奇异项是次领先的。杂质熵为

$$S_{\rm imp}(T, J_K) = \ln 2 + \frac{J_K^2}{2}\partial_T\chi_V(T) + \mathcal{O}(J_K^3). \tag{S53}$$

在解耦固定点，横向边界关联按如下方式衰减

$$\langle S^+_{\alpha,1}(\tau)S^-_{\alpha,1}(0)\rangle_0 \sim |\tau|^{-2d_\perp}. \tag{S54}$$

对于 $1/2 < d_\perp < 1$，其对积分磁化率的奇异贡献形式如下

$$\chi_\perp(T) = \chi_\perp(0) - BT^{2d_\perp - 1} + \cdots, \qquad B > 0. \tag{S55}$$

因此，奇异熵修正的主导项为

$$S_{\rm imp} - \ln 2 \sim -AJ_K^2 T^{2d_\perp - 2}, \qquad A > 0. \tag{S56}$$

对于 $\Delta = 0.8$，指数为 $2d_\perp - 2 \simeq -0.410$。负修正表明，随着冷却，杂质熵耗减会增强。这种微扰形式适用于交叉尺度以上的弱耦合区；在该交叉尺度处，重整化横向耦合变得很强。

强耦合极限

当 $J_K \gg J$ 时，杂质自旋与三个相邻的端点自旋构成一个四自旋团簇，其描述由下式给出

$$\mathcal{H}_{\rm cl} = J_K \sum_{\alpha=1}^{3} \left(S_d^x S_{\alpha,1}^x + S_d^y S_{\alpha,1}^y + \Delta S_d^z S_{\alpha,1}^z \right). \tag{S57}$$

通过引入 总端点自旋 $\mathbf{T} = \sum_{\alpha=1}^{3} \mathbf{S}_{\alpha,\,1}$，团簇哈密顿量变为 [见式（S1 6)]

$$\mathcal{H}_{\rm cl} = J_K \left[\frac{1}{2}(S_d^+ T^- + S_d^- T^+) + \Delta S_d^z T^z \right]. \tag{S58}$$

由于 $\mathcal{H}_{\rm cl}$ 与 $\mathbf{T}^2$ 及 $M = S_d^z + T^z$对易，其谱分解为 $T = 1/2$ 和 $T = 3/2$ 两个扇区。对于$\Delta = 0.8$，唯一的基态属于 $T = 3/2$, $M = 0$ 扇区，其能量及对应态为

$$E_0 = -J_K \left(1 + \frac{\Delta}{4} \right) = -1.2 J_K, \qquad |0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle - \left| -\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \right) \tag{S59}$$

其中各项分别表示 S_d^z 和 T^z。该态与各向同性团簇的 $S = 1$, $M = 0$ 态相同，并非总自旋单态。最低激发态属于 $T = 3/2$, $M = \pm 1$ 扇区，其能量为

$$E_{\pm 1} = -J_K \left(\frac{\Delta}{4} + \frac{\sqrt{\Delta^2 + 3}}{2} \right). \tag{S60}$$

因此，团簇 $\mathcal{H}$ 的激发能隙为

$$\delta_{\rm cl} = E_{\pm 1} - E_0 = J_K \left(1 - \frac{\sqrt{\Delta^2 + 3}}{2} \right) \simeq 0.04606 J_K. \tag{S61}$$

该团簇通过以下相互作用与其余链耦合

$$\mathcal{H}_{\rm link} = J \sum_{\alpha=1}^{3} \left(S_{\alpha,1}^x S_{\alpha,2}^x + S_{\alpha,1}^y S_{\alpha,2}^y + \Delta S_{\alpha,1}^z S_{\alpha,2}^z \right). \tag{S62}$$

对于 $J \ll \delta_{\rm cl}$，我们使用 $\mathcal{P} = |0\rangle\langle 0|$ 和 $\mathcal{Q} = 1 - \mathcal{P}$投影到团簇基态。由于 $\langle 0|\mathbf{S}_{\alpha,1}|0\rangle = 0$，一阶贡献为零。二阶 Schrieffer-Wolff贡献为

$$\mathcal{H}_{\rm eff}^{(2)} = -\mathcal{P}\mathcal{H}_{\rm link}\mathcal{Q} \frac{1}{\mathcal{Q}\mathcal{H}_{\rm cl}\mathcal{Q} - E_0} \mathcal{Q}\mathcal{H}_{\rm link}\mathcal{P}. \tag{S63}$$

除相差一个加性常数外，剩余链端点之间的诱导相互作用形式为

$$\mathcal{H}_{\rm inter}^{\rm eff} = \sum_{\alpha<\beta} \left[J_{xy}^{\rm eff} \left(S_{\alpha,2}^x S_{\beta,2}^x + S_{\alpha,2}^y S_{\beta,2}^y \right) + J_z^{\rm eff} S_{\alpha,2}^z S_{\beta,2}^z \right]. \tag{S64}$$

对于 $\alpha \neq \beta$，有效耦合由虚拟簇激发决定，

$$J_{xy}^{\mathrm{eff}} = -2J^2 \sum_{n\neq 0} \frac{\langle 0|S^x_{\alpha,1}|n\rangle\langle n|S^x_{\beta,1}|0\rangle}{E_n - E_0}, \tag{S65}$$

$$J_{z}^{\mathrm{eff}} = -2J^2\Delta^2 \sum_{n\neq 0} \frac{\langle 0|S^z_{\alpha,1}|n\rangle\langle n|S^z_{\beta,1}|0\rangle}{E_n - E_0}. \tag{S66}$$

在 $\Delta = 0.8$ 处，这些表达式给出

$$J_{xy}^{\mathrm{eff}} = -\frac{325}{42}\frac{J^2}{J_K}, \qquad J_{z}^{\mathrm{eff}} = \frac{4}{15}\frac{J^2}{J_K}. \tag{S67}$$

在解耦开放链固定点，横向链间交换的标度维数为 $1/K > 1$，而纵向交换的维数为 2。因此，对于 $\Delta = 0.8$，这两种微扰都是无关的。 consequently，渐近强耦合固定点由三条长度为 $L-1$、彼此有效解耦的 XXZ 链组成。

利用低温 临界XXZ链的体熵密度 $s_{\mathrm{bulk}}(T) = \pi T/(3v)$，我们得到 n

$$S_{\mathrm{imp}}(T) \simeq 3\left[S_{\mathrm{chain}}(L-1,T) - S_{\mathrm{chain}}(L,T)\right] \simeq -\frac{\pi T}{v}, \tag{S68}$$

其中， $v = \pi J\sqrt{1-\Delta^2}/(2 \arccos \Delta)$ 是自旋速度。当 $v/L \ll T \ll \min(J, \delta_{\mathrm{cl}})$ 时，只要 $J \ll \delta_{\mathrm{cl}}$，该渐近表达式便适用。

因此，过剩熵为负，并且在冷却过程中其绝对值减小。由于我们的模拟涵盖 $J_K \leq J$，这一强耦合分析可作为渐近参考。

自由能弦重构

正文中的自由能弦分析基于由局域观测量重构的杂质自由能，从而避免了数值温度微分。对于 $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + J_K V$，局域共轭可观测量为

$$\langle V\rangle = -\frac{\langle N_D\rangle}{\beta J_K} + \Delta\langle A_D\rangle, \tag{S69}$$

其中 A_D 是对三条链上的纵向杂质交换进行虚时间平均后求和所得。杂质自由能由下式得到

$$F_{\mathrm{imp}}(T, J_K) = -T\ln 2 + \int_0^{J_K} \mathrm{d}j\, \langle V\rangle_{T,j}. \tag{S70}$$

耦合积分采用与 Local-Maxwell 重构相同的求积方法。弦熵由自由能差得到

$$S_{\mathrm{ch}}(T_1, T_2) = -\frac{F_{\mathrm{imp}}(T_2, J_K) - F_{\mathrm{imp}}(T_1, J_K)}{T_2 - T_1}. \tag{S71}$$

对于 $J = 1$，记 $F_b = F_{\mathrm{imp}}(1/b,\ J_K)$，并得到低温、中温和高温弦熵如下

$$S_{\mathrm{c}} = 32(F_{32} - F_{16}), \tag{S72}$$

$$S_{\mathrm{m}} = 16(F_{16} - F_{8}), \tag{S73}$$

$$S_{\mathrm{w}} = 8(F_{8} - F_{4}). \tag{S74}$$

相邻窗口对比为 $D_{\mathrm{low}} = S_{\mathrm{c}} - S_{\mathrm{m}}$ 和 $D_{\mathrm{high}} = S_{\mathrm{m}} - S_{\mathrm{w}}$，满足 $D_{\mathrm{ch}} = D_{\mathrm{low}} + D_{\mathrm{high}} = S_{\mathrm{c}} - S_{\mathrm{w}}$。这些量直接由自由能差构造，无需进行数值温度微分。

作为另一项一致性检查，图 S4(a) 展示了不同系统尺寸（包括相邻的奇数和偶数链长）下的弦对比度。图 S4(b) 将 D_{ch} 与 Local-Maxwell 对比度 $D_{\mathrm{LM}} = S^{\mathrm{cold}}{}_{\mathrm{imp}} - S^{\mathrm{warm}}{}_{\mathrm{imp}}$ 在 $L = 512$ 处进行了比较。尽管这两种对比度采用了不同的温度平均方式，但二者都随着 J_K 的增加呈现符号反转，从而支持有限温度熵恢复。

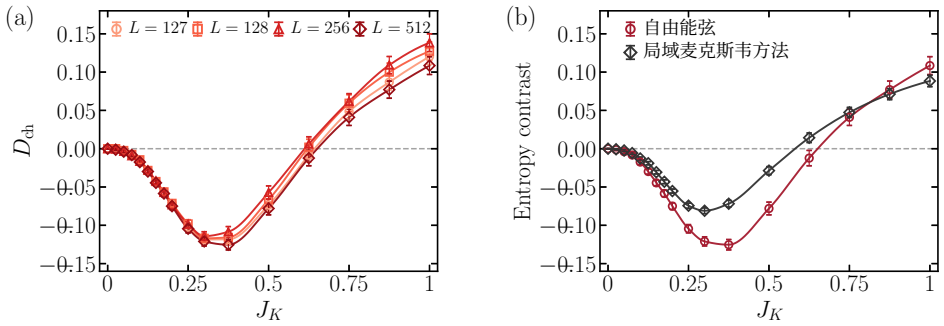

图 S4：三通道 XXZ 杂质模型的额外一致性检查。(a) 对于 $L = 127$，128、256、512， D_{ch}自由能弦对比度。(b) 使用各自的温度平均，比较 D_{ch} 与 $L = 512$的局部麦克斯韦熵对比度 D_{LM}。

世界线量子蒙特卡罗的细节

我们为 TFIM 提供了精确对角化（ED）基准，并总结了世界线量子蒙特卡罗计算中所采用的数值重构流程。

局域麦克斯韦量子蒙特卡罗方法的基准

我们将局域麦克斯韦方法与含有 $L = 8$ 个浴自旋的临界横场伊辛模型的独立精确对角化结果进行基准比较。如图 S5 所示，对于$\lambda = 0.2$ 和 1.0，重构得到的杂质熵在统计不确定性范围内与精确结果一致。

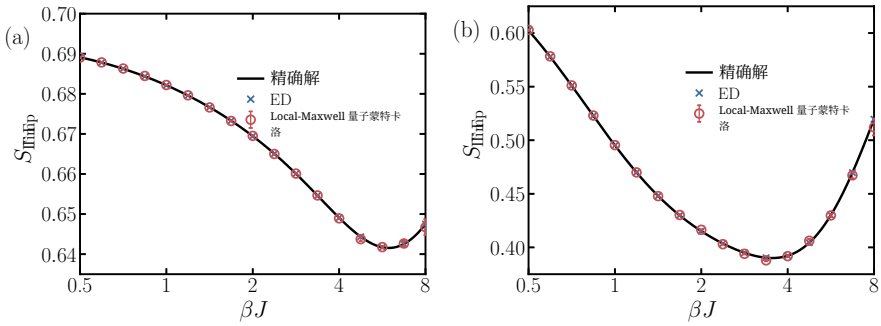

图 S5：含有 $L = 8$ 个浴自旋的临界横场伊辛模型中，局域麦克斯韦方法的杂质熵 S_{imp} 基准比较。(a) 和 (b) 分别对应 $\lambda = 0.2$ 和 1.0。

杂质熵的数值重构

我们采用世界线量子蒙特卡罗对麦克斯韦关系中涉及的局域可观测量进行采样。对于 $\mathcal{H}(g) = \mathcal{H}_0 + gV$，杂质熵可重构为

$$S_{\mathrm{imp}}(\beta, g) = \ln 2 + \int_0^g \mathrm{d}g' \, (1 - \beta\partial_\beta) Q_{g'}(\beta), \tag{S75}$$

其中 $Q_g = \partial_g \ln \mathcal{Z} = -\beta\langle V\rangle$，温度导数是在耦合保持不变的条件下取的。初始熵 ln2 对应于解耦的自旋-1/2 杂质。

对于横场伊辛模型和三通道 XXZ 模型，我们采用对数间隔的 β 网格，在 $\ln\beta$ 中均匀取点，并分别使用最高三阶和五阶的局部多项式拟合来计算温度导数。

对于 XXZ 链，温度导数则通过对三个相邻点 $\beta e^{-0.1}$、 β 和 $\beta e^{0.1}$ 在 $\ln\beta$ 中进行二次插值来计算。此外，对于三通道 XXZ 模型，先进行耦合积分，再进行数值温度微分。

统计不确定性根据独立的蒙特卡洛测量进行估算，并通过数值温度微分和耦合积分进行传播。对于自由能弦分析，不确定性则由相应的自由能估计传播而来。