利用多轨道多通道涨落场理论研究Kanamori-Hubbard模型中的竞争序

L. Torchia、[1] E. Linn´er[1] 和 M. Capone[1,2]

[1] *International School for Advanced Studies (SISSA) Via Bonomea 265 34136 Trieste Italy ,,,,*

[2] *CNR-IOM Via Bonomea 265 Istituto Officina dei Materiali, Consiglio Nazionale delle Ricerche,, 34136 Trieste, Italy*（日期：2026年11月25日）

多通道涨落场（MCFF）方法以非微扰方式处理相互作用量子晶格模型中选定的集体涨落，但迄今仅应用于单带系统。在此，我们将 MCFF 理论扩展至多轨道系统，并考虑电荷和自旋不稳定性的轨道结构。我们将该方法应用于具有排斥性轨道内相互作用 U以及正、负洪德耦合 J的半填充双轨道 Kanamori–Hubbard模型，研究其中的竞争序及其相互作用。选择性地保留各个涨落通道并控制它们之间的相互作用，使我们能够区分各自的贡献，并确定竞争性不稳定性背后的机制。该模型在 $J = U$附近呈现电荷密度波与反铁磁涨落之间的简单竞争；而在 $J = 0$附近，反铁磁、轨道和自旋-轨道涨落之间的竞争则更为复杂，此时模型具有更高的 SU(4) 对称性。因此，所提出的多轨道扩展为研究轨道和自旋特性如何影响竞争性集体涨落，提供了一个计算成本低且高效的框架。

arXiv:2611.32983v1 [cond-mat.str-el] 24 Nov 2026

I. 引言

关联材料的一个显著特征，是涉及电荷、自旋、配对和轨道自由度的集体不稳定性之间存在竞争。它们之间的相互作用可能产生不同结果，大体而言，不同有序态可能相互抑制 [1–3], 、相互稳定，甚至促成额外的中间相 [4–7]。在多轨道系统中，电荷、自旋和超导有序参量不仅由其空间结构和自旋结构决定，也具有各自的轨道特征。要理解它们之间的相互作用，需要一种既能保留每种涨落的轨道成分，又允许竞争通道同时发生涨落的框架。为研究这些问题，人们提出并采用了多种分析和计算方法，涵盖泛函重整化群 [8] 、基于双粒子顶角的方法 [9] ，以及密度矩阵重整化群或张量网络等全数值方法 [10]。此外，平均场理论 [11] 、动力学平均场理论（DMFT） [12–14], 及其团簇 [15, 16] 和图解扩展 [17–22], ，已被证明有助于深入理解多轨道模型；$GW+$ DMFT [23–28] 也常用于研究真实多轨道系统。然而，这一问题仍然极其复杂，计算开销往往很大，因此亟需新的求解方法。

本文介绍了多轨道多通道涨落场方法（MCFF）的一种多轨道推广形式，并将其应用于最简单的多轨道体系之一 [3, 7]。MCFF 是一种近期提出的方法，为研究集体不稳定性之间的相互作用提供了一条高效且可控的途径。该方法源自为磁性不稳定性发展起来的涨落（局域）场（FF）理论 [29–31] 。与静态平均场方法相比，这一方法用由具有通过变分确定参数的理论描述的集体 FFs 系综平均，取代了固定的自洽场，因此，该方法能够纳入超越平均场的涨落效应，并计算其自由能剖面。MCFF 通过引入与若干不同主导集体模相关联的多个 FFs，扩展了变分构造 [3]。迄今为止，该方法已被应用于电荷与磁性不稳定性之间的相互作用 [3] 以及 s-波配对涨落 [7]。然而，这些研究集中于具有单轨道的哈伯德 [30, 31] 模型和具有最近邻相互作用的扩展哈伯德模型 [3, 7] ，并未考虑任何轨道自由度。作为补充，除 MCFF 理论之外，我们还强调，原始 FF 理论已沿其他重要方向得到发展，包括强关联 [30, 32, 33], 无序系统 [34] 以及非平衡体系 [35]。

我们将该方法扩展到多轨道框架，增加了可能解的复杂性。此外，我们扩展了具体实现，使其能够纳入数量空前的不同FF，从而揭示了该方法在静态平均场图像之外引入显著效应的潜力。我们注意到，这一方法以一种与动力学平均场理论在一定程度上互补的方式改进了静态平均场。这里纳入了序参量涨落的平均效应，而动力学平均场理论则精确捕捉局域动力学关联。

我们将这一方法应用于一个用于研究多轨道物理的最小而丰富的平台，即半填充的二维双轨道 Kanamori-Hubbard 模型 [36]„ 该模型具有局域轨道间和轨道内 U 以及 U'排斥，并包含洪德耦合 J。 J 耦合在区分并偏好不同局域构型方面发挥着关键作用，其中 $J > 0$ [37–40] 和$J < 0$ [41, 42] 分别促进高自旋和低自旋局域态，

在它们的界面处 $J = 0$，对于简并能带，该模型表现出一种 SU(4) 对称性，它源自底层的自旋 SU(2) 和轨道 SU(2) 对称性 [37]。由于 Mermin-Wagner-Hohenberg 定理禁止连续对称性破缺所导致的长程有序，该结论适用于一大类有限温度下的二维系统 [43–46], ，包括双轨道 Kanamori-Hubbard 模型，因此，不应将由这些连续对称性引起的强涨落占主导的区域视为真正的热力学相。不过，与文献 [7], 类似，我们仍将这类强涨落区域称为“相”。MCFF 构造同样可以应用于更一般的哈密顿量，包括轨道依赖跃迁、晶场劈裂和轨道间杂化，尽管这些扩展通常需要重新审视本文所采用的不稳定性的对称性驱动分类。这种灵活性为研究更现实的多轨道材料模型中的竞争性不稳定性开辟了道路。

在考虑电荷通道与自旋通道之间相互作用的同时，我们也解析了它们的轨道结构，并构建了一个随模型参数变化的有限温度相图，对比 J 为正、为零和为负的区域。具体而言，我们首先讨论分别考虑电荷通道和自旋通道时不同解之间的相互作用，随后再转向二者的联合竞争。在后一种情况下，我们考虑了前所未有的七个同时存在的 FF，并使用蒙特卡罗方法对其进行抽样 [47, 48]。引入多个相互竞争的 FF 后，会出现一个区域，在该区域内，平均场不稳定性均不稳定，这表明系统定性地偏离了平均场结果。在我们固定 FF 数量的具体实现中，该区域会随系统尺寸增大而缩小，但我们预计，增加 FF 数量可以抵消这一效应。选择涨落通道的灵活性使我们能够分别考察各个不稳定性及其相互作用。将联合竞争中的各项贡献解耦的能力，是一种强大的诊断工具，有助于理解模型数值精确解中存在的复杂相互作用。

本文组织如下：在第 II 节中，我们回顾模型并列出相关的序参量。在第 III 节中，我们展示所提出的 MCFF 理论的多轨道扩展，详细推导见补充材料；第 IV 节专门介绍将其应用于该模型所得的结果。最后，第 V 节给出总结性评论。

II. 模型与序参量 RS

为研究电荷、自旋和轨道不稳定性之间的竞争，我们考虑正方晶格上半填充的双轨道 Kanamori-Hubbard模型 [16, 36, 42, 49–57], ，其定义为：

$$\hat{H} = -t \sum_{\langle i,j\rangle,m,\sigma} \left(\hat{c}^{\dagger}_{im\sigma}\hat{c}_{jm\sigma} + \text{H.c.}\right) + \sum_{i} \hat{H}^{(i)}_{\text{int}}, \tag{1}$$

其中，局域Kanamori相互作用为 [36]:

$$\begin{aligned}\hat{H}^{(i)}_{\text{int}} = {} & U \sum_{m} \hat{n}_{im\uparrow}\hat{n}_{im\downarrow} + U' \sum_{m\neq m'} \hat{n}_{im\uparrow}\hat{n}_{im'\downarrow} \\ & + (U' - J) \sum_{m<m',\sigma} \hat{n}_{im\sigma}\hat{n}_{im'\sigma} \\ & - J \sum_{m\neq m'} \hat{c}^{\dagger}_{im\uparrow}\hat{c}_{im\downarrow}\hat{c}^{\dagger}_{im'\downarrow}\hat{c}_{im'\uparrow} \\ & + J \sum_{m\neq m'} \hat{c}^{\dagger}_{im\uparrow}\hat{c}^{\dagger}_{im\downarrow}\hat{c}_{im'\downarrow}\hat{c}_{im'\uparrow}.\end{aligned} \tag{2}$$

这里，$\hat{c}^{(\dagger)}_{im\sigma}$ 湮灭（产生）格点 i上轨道 $m \in \{1, 2\}$ 中自旋为 $\sigma \in \{\uparrow, \downarrow\}$的电子，而$\hat{n}_{im\sigma} \equiv \hat{c}^{\dagger}_{im\sigma}\hat{c}_{im\sigma}$ 是其数算符。这些轨道是简并的，最近邻格点之间具有相同的跃迁 t $\langle i,\ j\rangle$，且不存在轨道间跃迁。我们将 $t \equiv 1$ 设为能量单位。参数 U 和U' 分别描述轨道内和轨道间的密度相互作用，而洪德耦合 J 则出现在自旋翻转和对跃迁项中。我们采用旋转不变关系 $U' \equiv U - 2J$ [58]。

在本研究中，我们考虑排斥性的轨道内相互作用 $U > 0$，以及洪德耦合的排斥区域和吸引区域 J。对于真实材料，通常的物理区域是 $0 < J \lesssim U/3$，此时两个轨道间密度相互作用系数 $U' = U - 2J$ 和 $U' - J = U - 3J$ 均为正，对应于纯排斥相互作用 [37, 58]。然而， J 的负值（对应于反转洪特耦合）也可能出现在物理系统中，例如由 Jahn–Teller声子 [41] 引起。对于 $J > U/3$，平行自旋轨道间相互作用 $U' - J$ 变为吸引性，随后在$J > U/2$ 时，反平行自旋轨道间相互作用 U' 也变为吸引性。为了刻画这些相互竞争的电荷、自旋和轨道不稳定性，我们引入了大量粒子-空穴通道中的序参量，并在本研究中对其进行考察。

A. 序参量

本节将介绍本研究所讨论的各种有序态。原则上，从我们定义的双轨道系统中的 16 种不同的局域粒子-空穴算符出发，我们可以描述 MCFF 所能探测到的所有可能的粒子-空穴不稳定性；这些算符构成了局域粒子-空穴双线性项的完备基：

$$\hat{n}^{\varrho,\varsigma}_{j} \equiv \sum_{\{m\},\{\sigma\}} \hat{c}^{\dagger}_{jm\sigma}\, \tau^{\varrho}_{mm'}\sigma^{\varsigma}_{\sigma\sigma'}\, \hat{c}_{jm'\sigma'}. \tag{3}$$

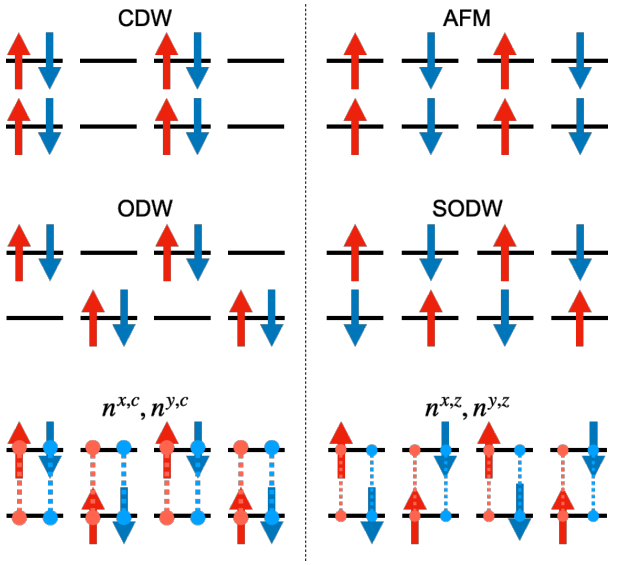


图 1. 本文讨论的双轨道 Kanamori-Hubbard 模型中的粒子-空穴不稳定性示意图。

这里，τ^{ϱ} 和 σ^{ς} 分别是轨道空间和自旋空间中的矩阵，其中 $\varrho \in \{0, x, y, z\}$ 和 $\varsigma \in \{c, x, y, z\}$ 涵盖了单位矩阵和三个泡利矩阵。对于第二个指标，我们使用符号 c 来强调单位矩阵对应于对两个自旋求和，即格点/轨道上的总占据数或电荷，而泡利矩阵则自然地描述电子自旋的三个分量。我们注意到，对于具有 $N_{\mathrm{orb}} > 2$ 个轨道的模型，也可以采用类似的构造，此时轨道泡利矩阵由单位矩阵和 SU(N_{orb}) 的生成元取代。例如，对于 $N_{\mathrm{orb}} = 3$，这些生成元就是八个盖尔曼矩阵。

对于公式（3）中的任意双线性量，我们都可以取不同的波矢$\mathbf{Q}$ 来指定空间图样 $e^{i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{r}}$，其中位置$\mathbf{r} = (j_x, j_y)$。在本文中，由于我们限于半填充情形，因此可以关注具有特征向量$\mathbf{Q} = \mathbf{M} \equiv (\pi, \pi)$的交错相。这是因为裸色散 $\epsilon_{\mathbf{k}} = -2(\cos k_x + \cos k_y)$ 满足 $\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{M}} = -\epsilon_{\mathbf{k}}$，从而导致费米面完美嵌套，其中$\mathbf{k}$ 是晶体动量。不过，我们仍然有几种可能的竞争模，下面将对此加以强调。

现在我们简要介绍相关的模。具体而言，我们使用更直观的名称对其中一些态进行分类，以简化讨论。在本节余下部分，我们省略格点下标 i 以及交错的 $(-1)^j$ 因子，使记号尽可能简洁。在所有自旋部分不是单位矩阵的情况下，为简单起见，我们只报告沿 z 轴方向的磁化强度。

与 τ^0-矩阵相关的两个轨道均匀模对应于棋盘格电荷密度波和奈尔反铁磁，它们定义如下：

$$\mathrm{CDW} : n^{0,c} \propto \sum_{m=\{1,2\}} [\hat{n}_{m\uparrow} + \hat{n}_{m\downarrow}], \tag{4}$$

$$\mathrm{AFM} : n^{0,z} \propto \sum_{m=\{1,2\}} [\hat{n}_{m\uparrow} - \hat{n}_{m\downarrow}]. \tag{5}$$

相反，与 τ^z- 矩阵相关的通道对应于具有轨道极化的相。我们将轨道密度波（ODW）和自旋轨道密度波（SODW）分别定义为其自旋分量均匀和交错的情形：

$$\mathrm{ODW} : n^{z,c} \propto \sum_{\sigma=\{\uparrow,\downarrow\}} [\hat{n}_{1\sigma} - \hat{n}_{2\sigma}], \tag{6}$$

$$\mathrm{SODW} : n^{z,z} \propto \hat{n}_{1\uparrow} - \hat{n}_{1\downarrow} - \hat{n}_{2\uparrow} + \hat{n}_{2\downarrow}. \tag{7}$$

其余与轨道矩阵 τ^x 或 τ^y 相关的不稳定性，源于不同轨道之间的杂化，并与激子序有关。由于这些相在我们的分析中作用较小，因此我们不再为它们引入一套额外的专门名称。因此，其余彼此独立的序参量为：

$$n^{x,c} \propto \hat{c}^{\dagger}_{1\uparrow}\hat{c}_{2\uparrow} + \hat{c}^{\dagger}_{2\uparrow}\hat{c}_{1\uparrow} + \hat{c}^{\dagger}_{1\downarrow}\hat{c}_{2\downarrow} + \hat{c}^{\dagger}_{2\downarrow}\hat{c}_{1\downarrow}, \tag{8}$$

$$n^{y,c} \propto \hat{c}^{\dagger}_{1\uparrow}\hat{c}_{2\uparrow} - \hat{c}^{\dagger}_{2\uparrow}\hat{c}_{1\uparrow} + \hat{c}^{\dagger}_{1\downarrow}\hat{c}_{2\downarrow} - \hat{c}^{\dagger}_{2\downarrow}\hat{c}_{1\downarrow}, \tag{9}$$

$$n^{x,z} \propto \hat{c}^{\dagger}_{1\uparrow}\hat{c}_{2\uparrow} + \hat{c}^{\dagger}_{2\uparrow}\hat{c}_{1\uparrow} - \hat{c}^{\dagger}_{1\downarrow}\hat{c}_{2\downarrow} - \hat{c}^{\dagger}_{2\downarrow}\hat{c}_{1\downarrow}, \tag{10}$$

$$n^{y,z} \propto \hat{c}^{\dagger}_{1\uparrow}\hat{c}_{2\uparrow} - \hat{c}^{\dagger}_{2\uparrow}\hat{c}_{1\uparrow} - \hat{c}^{\dagger}_{1\downarrow}\hat{c}_{2\downarrow} + \hat{c}^{\dagger}_{2\downarrow}\hat{c}_{1\downarrow}. \tag{11}$$

在本文中，ODW 和 SODW 模分别与轨道杂化模 $n^{x,c}$ 和 $n^{x,z}$ 简并。我们的计算通过它们组合后的径向振幅，同时考虑每个简并对的两个分量。不过，为了简化符号，我们用具有轨道极化的代表态 ODW 和 SODW 来指代这些不稳定性。

B. 作用量形式

我们使用路径积分作用量形式引入 MCFF 理论。所考虑的双轨道 Kanamori-Hubbard模型的作用量为：

$$\mathcal{S} = -\frac{1}{\beta N_s} \sum_{k,m,\sigma} c^{*}_{km\sigma}\, \mathcal{G}^{-1}_{k}\, c_{km\sigma} + \mathcal{S}_{\mathrm{int}}, \tag{12}$$

其中，$N_s = L^2$ 表示 $L \times L$ 晶格上的格点数，$\beta = 1/k_B T$表示逆温度。Grassmann 变量 $c^{(*)}_{km\sigma}$ 描述电子的湮灭（产生），下标 $k = (\nu, \mathbf{k})$由费米子 Matsubara 频率 ν 和晶体动量$\mathbf{k}$组合而成。两个轨道的裸逆传播子 $\mathcal{G}^{-1}_{k} = i\nu + \mu - \epsilon_{\mathbf{k}}$ 相同，并取决于色散关系 $\epsilon_{\mathbf{k}}$和化学势 μ。最后，局域相互作用

该作用量可由哈密顿量轻松得到：

$$\begin{aligned}\mathcal{S}_{\rm int} =& U\sum_{m}\rho_{q,m,\uparrow}\rho_{-q,m,\downarrow}+U'\sum_{m\neq m'}\rho_{q,m,\uparrow}\rho_{-q,m',\downarrow}\\ &+(U'-J)\sum_{m<m',\sigma}\rho_{q,m,\sigma}\rho_{-q,m',\sigma}\\ &-J\sum_{m\neq m',k}c^{*}_{k+q,m,\uparrow}c_{k,m,\downarrow}c^{*}_{k'-q,m',\downarrow}c_{k',m',\uparrow}\\ &+J\sum_{m\neq m',k}c^{*}_{k+q,m,\uparrow}c^{*}_{k'-q,m,\downarrow}c_{m',k,\downarrow}c_{m',k',\uparrow}, \quad (13)\end{aligned}$$

平移密度为 $\rho_{q,\ \sigma,\ m}=n_{q,\ \sigma,\ m}-\langle n_{q,\ \sigma,\ m}\rangle\delta_{q,\ 0}$，其中 $n_{q,\ \sigma,\ m}=\sum_k c^{*}_{k+q,\ \sigma,\ m}c_{k,\ \sigma,\ m}$。这里，下标$q=(\omega,$ $\mathbf{q})$由玻色子 Matsubara 频率 ω和晶体动量$\mathbf{q}$组合而成。

III. 多轨道多通道涨落场理论

我们将最近发展起来、用于描述单轨道扩展哈伯德模型中相互竞争的集体不稳定性的 MCFF 理论 [3, 7], , 从其单轨道起源推广到多轨道构造。因此，我们旨在对粒子-空穴通道中的轨道分辨集体不稳定性及其相互作用进行一般性描述。秉承此前单轨道 FF 理论表述 [3, 7, 29–32], 的思想，我们引入多轨道 FF 作用量：

$$\begin{aligned}\mathcal{S}^{*}=&-\frac{1}{\beta N_s}\sum_{k,m,\sigma}c^{*}_{km\sigma}\,\mathcal{G}^{-1}_{k}\,c_{km\sigma}\\ &+\sum_{\alpha,\mathbf{Q}}\left[\phi^{\alpha}_{\mathbf{Q}}\,\rho^{\alpha}_{-\mathbf{Q}}-\frac{1}{2}\frac{\beta N_s}{J^{\alpha}_{\mathbf{Q}}}\,\phi^{\alpha}_{\mathbf{Q}}\phi^{\alpha}_{-\mathbf{Q}}\right], \quad (14)\end{aligned}$$

将其限制在一组保留的 FF $\phi^{\alpha}_{\mathbf{Q}}$上。每个 FF $\phi^{\alpha}_{\mathbf{Q}}$ 都与一个静态复合变量 $\rho^{\alpha}_{\mathbf{Q}}=n^{\alpha}_{\mathbf{Q}}-\langle n^{\alpha}_{\mathbf{Q}}\rangle\delta_{\mathbf{Q},\ 0}$相耦合，该变量对应于所保留的 α 通道。仅考虑粒子-空穴通道时，复合变量表示为 $n^{\varrho,\ \varsigma}{}_{\mathbf{Q}}$ ，其中 Q 表示相应的格拉斯曼双线性项，而 $\alpha=(\varrho,\ \varsigma)$则标记其自旋和轨道结构。对于每个 FF $\phi^{\alpha}_{\mathbf{Q}}$，我们通过佩尔斯–费曼–博戈留博夫变分方案 [59–61]计算刚度参数 $J^{\alpha}_{\mathbf{Q}}$。该方案基于最小化相对于原作用量的变分自由能泛函，正如在单轨道 FF 方法 [3, 7, 30], 中所进行的那样；在无需任何费尔兹解耦的情况下确定刚度参数 [62–64] （SM 第 S1 和 S2 节）。此外，我们对通道基的选择使所得的二次相互作用泛函呈对角形式。

对于每个FF构型，都可以显式地积掉费米子，从而得到关于FF自由度的有效作用量：

$$\mathcal{S}_{\phi}=-\mathrm{Tr}\ln\left[\mathcal{G}^{-1}-\sum_{\alpha,\mathbf{Q}}\phi^{\alpha}_{\mathbf{Q}}\Lambda^{\alpha}_{-\mathbf{Q}}\right]-\frac{1}{2}\sum_{\alpha,\mathbf{Q}}\frac{\beta N_s}{J^{\alpha}_{\mathbf{Q}}}\,\phi^{\alpha}_{\mathbf{Q}}\phi^{\alpha}_{-\mathbf{Q}}, \quad (15)$$

由 n^{α} 的定义可得矩阵 $\Lambda^{\alpha}\equiv\tau^{\varrho}\sigma^{\varsigma}$。该作用量定义了一个非二次型有效自由能，对选定的 FF 进行积分后，便能捕捉超越高斯近似的热涨落。按照我们的符号约定，实 FF 积分仅在 $J^{\alpha}_{\mathbf{Q}}<0$ 时收敛，因此只保留此类通道。通过保留不同的 FF 模，可以得到不同层次的近似；当纳入所有有序矢量 $\mathbf{Q}$ 和频率模 ω 时，则可恢复精确描述 [3]。

对除一个 FF 之外的所有 FF 进行积分，可以定义剩余单个 FF 的自由能剖面：

$$\mathcal{F}_{\alpha}(\phi^{\alpha})=-\frac{1}{\beta}\ln\int\prod_{\alpha'\neq\alpha}d\phi^{\alpha'}\,e^{-\mathcal{S}_{\phi}}. \quad (16)$$

遵循文献 [3, 7], , $\mathcal{F}_{\alpha}$ 的全局最小值位于 FF 的非零值处，意味着该通道自发形成有限幅度；而次级最小值则表明，由于与积分后的 FF 相互作用而产生了亚稳态。对于少数保留模，可以在足够稠密的网格上使用梯形法则对公式 16 进行数值积分。在第 IV D 节中，我们给出了双轨道模型中电荷–自旋竞争的联合结果，该模型同时涉及七个 FF。对于这一前所未有数量的 FF，我们改用马尔可夫链蒙特卡罗进行数值积分 [47, 48]。具体的自由能和积分测度见补充材料第 S3 和 S4 节。

A. 刚度参数

利用 Peierls–Feynman–Bogoliubov变分原理，我们得到决定 MCFF作用量 $\mathcal{S}^{*}$ 的刚度参数（SM 表 S1）：

$$\begin{aligned}&J^{0,c}=\tfrac{1}{4}(U+2U'-J), && J^{0,s}=-\tfrac{1}{4}(U+J),\\ &J^{x,c}=\tfrac{1}{4}(-U'+3J), && J^{x,s}=-\tfrac{1}{4}(U'+J),\\ &J^{y,c}=\tfrac{1}{4}(-U'+J), && J^{y,s}=\tfrac{1}{4}(-U'+J),\\ &J^{z,c}=\tfrac{1}{4}(U-2U'+J), && J^{z,s}=\tfrac{1}{4}(-U+J), \quad (17)\end{aligned}$$

根据自旋SU(2)对称性，所有自旋分量 $s\in\{x,y,z\}$ 均为简并。对于 $U'=U-2J$，不同相的数值汇总于表 I。

比较不同刚度参数的数值，有助于确定与不同相之间竞争相关的特征能标，并绘制一幅初步相图。我们可以先作两个简单的观察，暂且不考虑

表 I. 对于 $U' \equiv U - 2J$，公式（3）的指标、相名与刚度参数之间的对应关系。自旋扇区条目指的是共线分量 $\varsigma = z$。FF 仅对 $J^{\varrho,\varsigma} < 0$ 保留，单通道起始为 $J^{\varrho,\varsigma} < -U_c/4$（补充材料第 S3 节）。

$(\varrho,\ \varsigma)$	相	刚度	数值
Charge sector			
$(0,\ c)$	CDW	$J^{0,c}$	$+4(3U-5J)$
$(z,\ c)$	ODW	$J^{z,c}$	$+4(-U+5J)$
$(x,\ c)$	$n^{x,c}$	$J^{x,c}$	$+4(-U+5J)$
$(y,\ c)$	$n^{y,c}$	$J^{y,c}$	$+4(-U+3J)$
Spin sector			
$(0,\ z)$	AFM	$J^{0,z}$	$-\frac{1}{4}(U+J)$
$(z,\ z)$	SODW	$J^{z,z}$	$+4(-U+J)$
$(x,\ z)$	$n^{x,z}$	$J^{x,z}$	$+4(-U+J)$
$(y,\ z)$	$n^{y,z}$	$J^{y,z}$	$+4(-U+3J)$

稍后再作更详细的说明。(i) 对于旋转不变的取值 $U' \equiv U - 2J$: $J^{x,c} = J^{z,c}$ and $J^{x,s} = J^{z,s}$，它反映了由 τ^y 生成的轨道旋转。对于一般的 U' 值，两个双重态会分裂，满足 $J^{x,c} - J^{z,c} = J^{z,s} - J^{x,s} = (U' - U + 2J)/4$。(ii) 在 $J = 0$ 时，除电荷密度波不稳定性外，所有通道的刚度都相同，为 $J^{\varrho,\varsigma} = -U/4$，其中 $(\varrho,\varsigma) \neq (0,c)$，反映了它们的简并性。这是因为，对于 $J = 0$，模型哈密顿量 $\hat{H}_{\rm int} = \frac{U}{2}\hat{N}(\hat{N}-1)$ 在格点占据数为 N 时具有 SU(4) 对称性。因此，$J = 0$ 处增强的对称性为各竞争通道提供了一个组织基点。这一点类似于吸引型扩展哈伯德模型中出现的赝自旋对称线 [7]，，不过这里简并的通道是反铁磁、轨道密度波、自旋轨道密度波和轨道杂化模，而不是电荷密度波和 s 波超导。

B. 关于竞争序的一般考量

在本小节中，我们讨论一些基本关系，这些关系将不同 FF 的数学性质及其相互作用联系起来。对于有序矢量为 $\mathbf{Q} = \mathbf{M}$的静态 FF，我们可以在八分量旋量 $(c_{\mathbf{k}},\ c_{\mathbf{k}+\mathbf{M}})$ 的基底下，将描述有效 FF 作用量 $\mathcal{S}_\phi$ (15) 中内部费米子贡献的二次哈密顿量 $H_{\mathbf{k}} \equiv \epsilon_{\mathbf{k}} + \sum_{\alpha,\ \mathbf{Q}} \phi^\alpha_{\mathbf{Q}} \Lambda^\alpha_{-\mathbf{Q}}$ 写为

$$H_{\mathbf{k}} = \begin{pmatrix} \epsilon_{\mathbf{k}}\mathbb{I}_4 & \Phi \\ \Phi & -\epsilon_{\mathbf{k}}\mathbb{I}_4 \end{pmatrix},\ \text{with}\ \ \Phi = \sum_\alpha \phi^\alpha\, \Gamma^\alpha. \qquad (18)$$

这里是 $\Gamma^\alpha = \tau^\varrho \otimes \sigma^\varsigma$。由于动能项与包含 FF 的项反对易，哈密顿量 $H_{\mathbf{k}}$ 的本征值为 $\pm\sqrt{\epsilon_{\mathbf{k}}^2 + \lambda^2}$，其中 λ 是 Φ的本征值。因此，λ 对费米子起到谱隙的作用。每个 Γ^α 的平方都等于单位矩阵，因此每个单个FF都会给出 $\lambda^2 = (\phi^\alpha)^2$。因此，所有通道共享相同的起始 $J^\alpha = -U_c/4$，而在鞍点层次上，表 I 中的刚度层级单独决定哪个通道占据优势。

考虑两个竞争 FF 时，我们可以根据它们矩阵的代数性质得出非常一般的结论。若 Γ^1 与 Γ^2 反对易，$\Phi^2 = (\phi_1^2 + \phi_2^2)\mathbb{I}_4$，则这些 FF 在本征值中以平方和形式相加：$\lambda^2 = \phi_1^2 + \phi_2^2$。由此可知，费米子贡献仅取决于它们的合成半径，而二次刚度项决定其取向。此外，当刚度项相等时，两个通道之间的旋转是平坦的，不产生自由能代价。电荷扇区（$\varsigma = c$）中的例子包括（$\phi^{x,c}, \phi^{y,c}, \phi^{z,c}$）；共线自旋扇区（$\varsigma = z$）中的例子包括（$\phi^{x,z}, \phi^{y,z}, \phi^{z,z}$），在 $J = 0$ 时，这些例子允许在轨道矢量长度固定的情况下连续旋转。只要完整能谱对一组刚度相等的 FF 的依赖仅通过它们的合成半径体现，就可以对其角变量积分，同时在 FF 测度中保留径向雅可比因子。我们分别在电荷扇区和自旋扇区的计算中，对双重态（$\phi^{x,c}, \phi^{z,c}$）和（$\phi^{x,z}, \phi^{z,z}$）采用这一约化，测度为 $2\pi R\mathrm{d}R$（补充材料 S4 节）。

若 Γ^1 与 Γ^2 对易且迹正交，则FF按 $|\phi_1| \pm |\phi_2|$ 相加，其中一个FF可随竞争振幅增大而闭合，从而可能出现分离的极小值与亚稳性。一个例子是相互竞争的电荷密度波与反铁磁，在单轨道多分量费米子双线性场 [3] 中具有类似结构。因此，矩阵代数决定了竞争费米子双线性场如何在能谱中组合，但要确定其竞争产生一级还是二级相变，则需要完整的自由能。尽管如此，它仍能特别清晰地区分轨道均匀通道与轨道非均匀通道。例如，电荷扇区通道（$\phi^{x,c}, \phi^{y,c}, \phi^{z,c}$）彼此反对易，但它们都与电荷密度波模 $\phi^{0,c}$对易。同样，共线自旋扇区通道也具有完全相同的区分。

IV. 双轨道哈伯德模型中的通道层级与竞争涨落

本节将转而分析具有周期性边界条件的双轨道 Kanamori-Hubbard模型 $L \times L$ 晶格，其中 $L \in \{4, 8, 16, 32\}$。我们将温度设为 $\beta = 10/t$，以便与先前的研究进行比较，并强调 MCFF 方法适用于更高和更低的温度。在我们的广义多轨道MCFF理论框架中，我们考察上述动量为$\mathbf{Q} = \mathbf{M}$ 的主要电荷、自旋和轨道涨落场。我们首先在鞍点层次确定不同集体不稳定性之间的层级关系；这相当于在积掉费米子后，使所有涨落场的联合自由能最小化，但不对任何辅助涨落场进行积分，也就是说，不考虑不同模之间明确的竞争

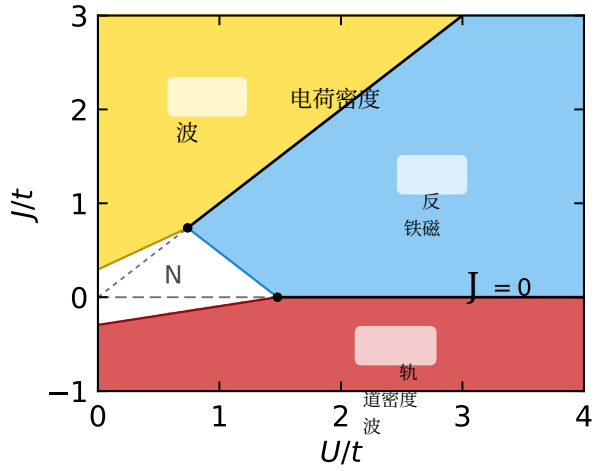


图2. $U' \equiv U - 2J$ 在$\beta = 10/t$下，使用 U_c（∞）得到的解析鞍点层级。彩色区域表示轨道密度波（红色）、反铁磁（蓝色）和电荷密度波（黄色）；白色表示常态。轨道密度波模式 n^z, ^{c} 与轨道-杂化模式 n^x, ^{c}简并。彩色线表示起始阈值；黑线表示相等的刚度参数，在有序区域内为实线，在其他区域则为虚线或点线。圆点标记（U_c，0）和（$U_c/2$，$U_c/2$）。

。随后，我们考察对竞争费米子双线性场进行积分后，它们在简并线附近的行为如何变化；在这些区域，它们之间的相互作用发挥着重要作用。

A. 单通道不稳定性及其起始阈值层级

由于色散关系完全相同且彼此嵌套，单个归一化 FF 会在所考虑的所有通道中产生相同的费米子谱。此外，单通道 FF 的自由能$\mathcal{F}_\alpha(\phi^\alpha)$使我们能够解析地确定其相边界，该边界由 J^α 的临界值给出；在该临界值处，$\mathcal{F}_\alpha(\phi^\alpha)$在 $\phi^\alpha = 0$处的曲率发生变号。我们观察到变号发生在 $J^\alpha = -U_c(L)/4$ （补充材料第 S3 节），其中

$$U_c(L) = \left[\frac{1}{N_s}\sum_{\mathbf{k}\in \mathrm{BZ}} \frac{\tanh(\beta\epsilon_{\mathbf{k}}/2)}{2\epsilon_{\mathbf{k}}}\right]^{-1}, \tag{19}$$

有序矢量 $\mathbf{Q} = \mathbf{M}$满足该条件。该方程是线性化 (19) Hartree–Fock 反铁磁能隙条件 [65], 在我们通道归一化下的有限晶格形式（补充材料第 S3 节）。对于 $\beta = 10/t$, 它给出U_c（32）$\simeq 1.4743$ 以及 $U_c(\infty) \simeq 1.4775$；在当前概述中，我们始终采用后者作为参考值。

我们考虑 $U > 0$ 的主要粒子–空穴通道，其对应的刚度参数 $J^\alpha_{\mathbf{Q}}$ 列于表 I。在单通道鞍点处理下，只需找出每个参数取值下刚度参数最负的通道，即可绘制相图。因此，

当 $J < 0$ 时，ODW 占优；而当 $0 < J < U$ 和 $J > U$ 时，轨道均匀 AFM 和 CDW 分别占优。对于这些通道中的每一个，我们都可以定义一个（单通道）起始条件

$$\begin{aligned} U - 5J &> U_c, \quad J < 0, \\ U + J &> U_c, \quad 0 < J < U, \\ 5J - 3U &> U_c, \quad J > U. \end{aligned} \tag{20}$$

这些起始条件和刚度交叉为我们在图2中报告的相图提供了简单的解析刻画，其中包括 ODW（红色）、AFM（蓝色）和 CDW（黄色）相。该图反映了各种耦合所驱动的自然倾向：排斥性的U 促进 AFM 和 ODW 不稳定性，但抑制 CDW；而正的 J 有利于 AFM 和 CDW，相比之下，负的 J 则会驱动 ODW，因为使两个轨道的占据数失衡具有能量优势。

跨越两条等刚度线时，主导通道会发生变化：一条是 $J = 0$处、对应 $U > U_c$ 的 ODW–反铁磁边界，另一条是 $J = U$ 处、对应$U > U_c/2$ 的反铁磁–CDW 边界，如图2中的黑色实线所示。在 $J = 0$处，我们强调该模型具有精确的 SU(4) 对称性（见第 III A 节），因此所有十五个无迹粒子–空穴通道都简并，刚度为 $-U/4$。在相变线 $J = U$处，反铁磁和 CDW 的刚度参数在 $-U/2$处相等，因此二者在 $U = J = U_c/2$处具有相同的起始点。在这两条相变线上，对于 $U > U_c$，在 $J = 0$ 处以及对于 $U > U_c/2$，在 $J = U$ 处，鞍点层次均存在简并的有限振幅极小值。请注意，在 $J = 0$ 处反铁磁相边界的鞍点值 U_c，与相应半填充单轨道哈伯德模型的 MCFF 理论估算值（$\beta = 10/t$ [3]处）完全一致。

这些总体趋势与文献 [52] 中的观察结果一致，该文将多轨道动力学平均场理论应用于贝特晶格上双轨道模型的低温区。具体而言，他们观察到 J 驱动了 $J > 0$下的反铁磁和电荷密度波相，以及$J < 0$下的轨道密度波。然而，除了这些观察结果之外，他们还捕捉到了配对不稳定性和关联驱动相，例如常规莫特绝缘体和配对莫特绝缘体，而这些现象在我们的方法中尚未得到考虑。尽管如此，这些被忽略的相仅在足够大的 $|J|$下出现，而我们的工作将主要致力于较小的 J 区间；多轨道动力学平均场理论预言，在该区间内，反铁磁和轨道密度波涨落占主导地位 [52]。

接下来，我们聚焦于 $J = 0$ 附近的区域，在这里轨道自由度起着核心作用。我们指出，$J = U$ 附近的反铁磁–电荷密度波竞争，其实已在半填充扩展Hubbard模型中的类似情形下得到研究 [3]。由于这两种有序态在轨道上均匀分布，我们不认为额外的轨道自由度会从定性上显著改变它们之间的竞争。在接下来的章节中，我们将超越鞍点极限，考察不同模之间的竞争。

B. 电荷扇区中的竞争

我们首先分析电荷扇区中的竞争模，即自旋部分包含单位矩阵的模（$\varsigma = c$）。在图3中，我们绘制了 U–J 相图中的主要电荷通道：电荷密度波（黄色）、轨道密度波（红色）和 $n^{y,\,c}$（橙色）通道，并用虚线标出相应的单通道起始阈值。我们观察到，电荷密度波的稳定区域与轨道通道（轨道密度波和 $n^{y,\,c}$）的稳定区域彼此分离。因此，我们不讨论电荷密度波与任何其他相之间的竞争，而是聚焦于 $J = 0$ 附近轨道通道之间的竞争。在该区域，$J < 0$ 时以及 $n^{y,\,c}$

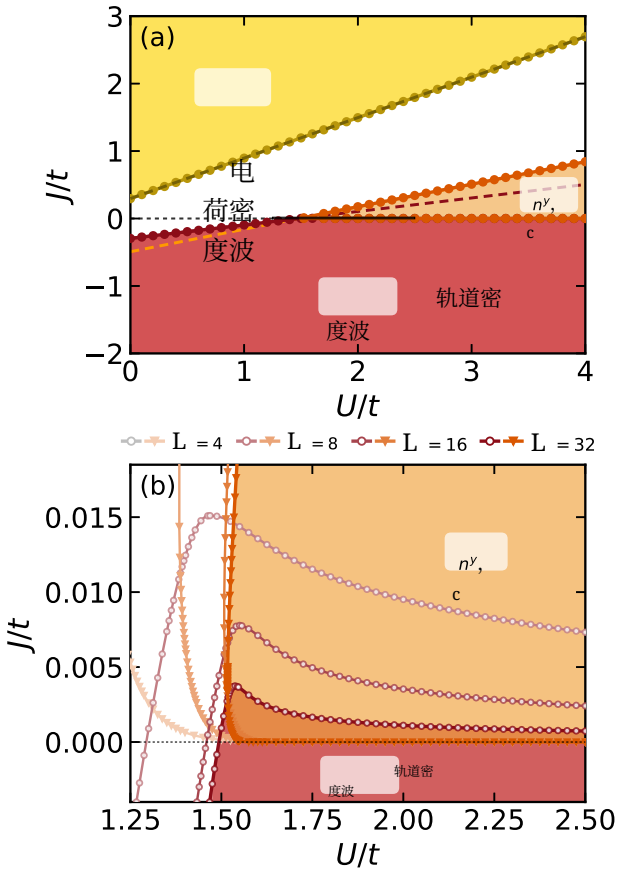


图 3. $\beta = 10/t$处的电荷扇区竞争图。颜色表示 CDW（黄色）、ODW（红色）和 $n^{y,c}$（橙色）相稳定的区域，即计入 FF 积分后的自由能达到绝对最小值的区域。ODW 标签表示简并对 ($n^{x,c}, n^{z,c}$)，并通过径向振幅 $R_c = [(\phi^{x,c})^2 + (\phi^{z,c})^2]^{1/2}$ 进行处理。(a) $L = 32$；虚线标示单通道起始点。(b) $J = 0$附近的放大图，显示不同尺寸 $L = \{4, 8, 16, 32\}$对应的相同边界；点表示计算点。在重叠区域（深橙色）中，ODW 和 $n^{y,c}$ 的自由能均具有非零全局极小值，表明轨道 SU(2) 共存相的出现。

对于 $J > 0$，正如刚度参数（表 I）所表明的那样，它们相差 $J/2$，并在 $J = 0$ 处交换有序矢量。我们强调，与传统的电荷密度波不同，这些交错相并不涉及总电荷（密度）的调制。

在 $J = 0$ 处，ODW 以及 n^{y}、^{c} 通道分别对应实部和虚部轨道序，具有简并的刚度参数，且其矩阵反对易。这使得 ODW 与 n^{y}、^{c} 通道之间可以发生旋转，而自由能不发生变化（第 III B 节），因此涨落权重可以在二者之间分配。与此一致的是，图3(b) 显示了一个狭窄的共存区域，其中两个通道在各自对应的自由能中都呈现非零极小值。随着晶格尺寸 L 增大，该区域变得更加狭窄。在鞍点层次上，优势轨道通道在 $J = 0$ 处从 ODW 切换至 n^{y}、^{c}，且不存在能垒，这是因为费米子贡献仅取决于总轨道振幅（第 III B 节）。模之间的相互作用使两个相之间的切换变得平滑，并伴随着共存相的涌现；这一过程发生在正 J 的狭窄范围内，此时二重简并的 ODW 具有更大的权重。随着 L 增大，该共存窗口逐渐变窄；预计在热力学极限下，它将在 $J = 0^{+}$ 处变得无限窄，这与吸引型扩展哈伯德模型的 SU(2) 赝自旋对称线 [7] 类似。因而，遵循参考文献 [7]，我们可以将 ODW 与 n^{y}、^{c} 之间的相变解释为两个不同的二阶相边界。从 ODW 相出发，该相在 $J < 0$ 处由分量 (n^{x}、^{c}、n^{z}、^{c}) 表征；随后系统在 $J = 0$ 处经历二级相变，进入由对称性驱动的 (n^{x}、^{c}、n^{y}、^{c}、n^{z}、^{c}) 共存相，其中涌现的轨道 SU(2) 对称性将三个轨道分量联系起来。之后，在 $J > 0$ 处发生二级相变，进入 n^{y}、^{c} 相。

C. 自旋扇区中的竞争

我们现在考察共线自旋扇区（$\varsigma = z$）内各解之间的竞争。在图4中，我们绘制了 U–J 相图中的主导共线自旋通道：AFM（浅蓝色）、SODW（深蓝色）和$n^{y,\,z}$（绿色），并用虚线标出相应的单通道起始阈值。如上所述，简并的 FF $\phi^{z,\,z}$ 和 $\phi^{x,\,z}$ 通过它们的合成径向振幅来处理，其中 SODW 表示它们对应的不稳定性。我们观察到，正的 J 有利于轨道均匀 AFM（一种高自旋态），而负的 J 则促进 $n^{y,\,z}$（一种低自旋态）。这与两个相的刚度参数差异一致 $J^{y,\,z} - J^{0,\,z} = J$。如图4(b)所示，SODW 自由能仅在 $J = 0$附近的狭窄区域内形成非零全局最小值。然而，在所研究的所有系统尺寸下，AFM 相和 SODW 相始终彼此分离

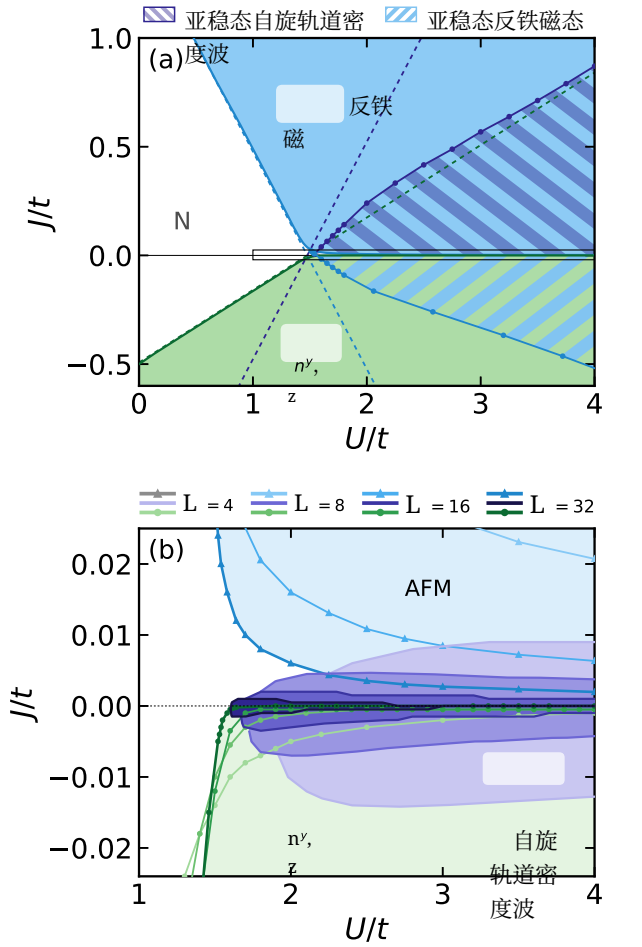


图 4. $\beta = 10/t$ 处的共线自旋扇区相图（未包含横向自旋涨落场）。颜色表示反铁磁（浅蓝色）和 n^{yz}（绿色）相稳定的区域，条纹区域表示亚稳态构型。SODW 标签表示由 R_s 分类的简并对（$n^{x,z}$，$n^{z,z}$），第 III 节 B）。(a) $L = 32$；虚线表示单通道起始点。(b) $J = 0$附近的放大图，显示不同尺寸 $L = \{4, 8, 16, 32\}$ 对应的相同边界，颜色越深表示 L 越大；点表示计算点。SODW 区域（蓝色）位于反铁磁起始点以下，并与 $n^{y,z}$ 相部分重叠。随着 L 增大，该区域逐渐变窄，在 $L = 32$处达到 J-扫描间距 5×10^{-4}。

在正J 一侧，AFM 的起始位置始终位于 SODW 区域上边界之外；而在负J 一侧，我们发现 SODW 相与 $n^{y,z}$ 相之间存在一个非常狭窄的重叠区域。这表明存在由对称性驱动的（$n^{x,z}$，$n^{y,z}$，$n^{z,z}$）共存区域，这是由轨道 SU(2) 对称性导致的，与图3(b)中观察到的轨道通道重叠类似。随着 L 增大，SODW 区域和共存区域都会缩窄，因为 AFM 与 $n^{y,z}$ 的边界从两侧向 $J = 0$ 靠近。

亚稳区域揭示了与电荷扇区中的竞争态进一步不同之处。在负-{v1}一侧，反铁磁自由能的一个次级最小值仍然存在，而在正 J 时，一个次级自旋轨道密度波极小值则延伸至反铁磁区域。这些具有次级最小值的区域由图 4(a) 中的次级颜色条纹标示。根据第 III 节 B 的论述，这种行为可以得到解释：自旋轨道矩阵彼此反对易，而反铁磁矩阵则与两个自旋轨道密度波矩阵均对易。由此产生的和差能隙允许自由能极小值各不相同且相互竞争，从而使亚稳态得以形成。尽管反铁磁矩阵也与关联于 $n^{y,z}$ 的矩阵对易，但在正 J 时，该通道中的构型在穿过 $J = 0$ 线时，可以在振幅固定的情况下旋转至更具吸引力的自旋轨道密度波扇区，从而降低其自由能。这会阻止在保留的自旋扇区内形成一个独立的亚稳态 $n^{y,z}$ 势阱。

图 5 通过不同通道在 $U = 3$ 以及 J 的选定取值处的自由能剖面展示了这一行为。实际上，我们绘制了 $\beta[\mathcal{F}_\alpha(\phi) - \mathcal{F}_\alpha(0)]/L^2$，以更清晰地突出各条曲线之间的差异。在反铁磁（第一个面板）的稳定区域内，其自由能在 $\phi^{0,z} \neq 0$ 处具有全局最小值。在 $n^{y,z}$ 相所对应区域内的 $J \leq 0$ 的较大范围内，该最小值仍作为次级最小值存在，表明存在亚稳态反铁磁序。在单轨道扩展 Hubbard 模型中，相互排斥的电荷密度波和反铁磁涨落之间的竞争也表现出类似行为 [3]。自旋轨道密度波和 $n^{y,z}$ 通道的自由能剖面（第二和第三个面板）则呈现出不同的行为。在一定范围的 $J > 0$ 内，自旋轨道密度波自由能剖面在非零 FF 处形成局部最小值，而 $n^{y,z}$ 自由能在 $n^{y,z}$ 相中具有非零的全局最小值。在对称点 $J = 0$ 附近，这些剖面变得平缓，与反铁磁剖面形成对比。在 $J = 0$ 处，三个自旋轨道 FF 具有相等的刚度参数，且其矩阵反对易，因此可以在保持总振幅不变的情况下旋转，而不改变自由能。这种旋转自由度解释了它们在对称点附近近乎平坦的自由能剖面。这种平坦性并不意味着自旋轨道振幅消失：例如，一个长度固定且非零、取向均匀分布的三分量向量，其每个笛卡尔分量都服从均匀分布。因此，这些自由能剖面反映了取向和振幅两者的涨落（补充材料 S4 节），并且与 $J = 0$ 处内在的轨道 SU(2) 对称性有关。

我们得出结论，虚部自旋轨道 $n^{y,z}$ 相与轨道均匀 AFM 之间的相变涉及两个不同的过程。若不考虑 AFM 通道，自旋轨道相变在 $J = 0$处与其电荷轨道对应相变相似：系统从$J > 0$处的 SODW 出发，经历二级相变，进入由对称性驱动的（$n^{x,z}$，$n^{y,z}$，$n^{z,z}$）相，该相与 $J = 0$处涌现的轨道 SU(2) 对称性相关。随后，系统在 $J < 0$处经历二级相变，进入 $n^{y,z}$。考虑与 AFM 振幅的相互作用后，相变的性质发生改变。在 n^{y}处占主导的

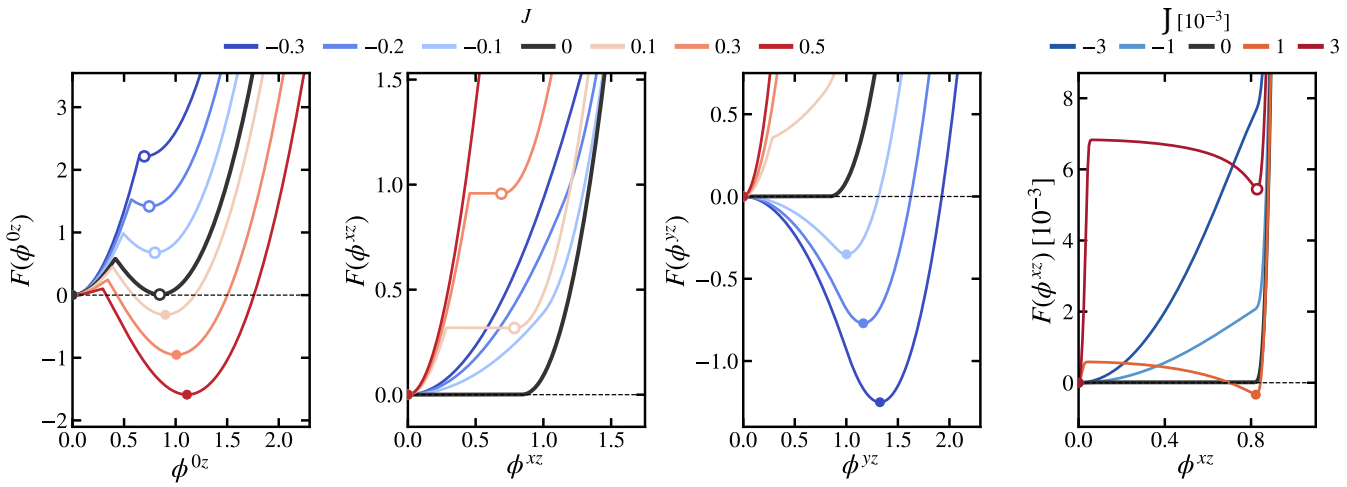


图 5。 $U = 3$、 $L = 32$和 $\beta = 10/t$在磁性扇区中的自由能。为更清晰地突出结果，我们绘制$\beta[\mathcal{F}_\alpha(\phi) - \mathcal{F}_\alpha(0)]/L^2$。前三个面板分别对应 ϕ^{0}、^{z}(反铁磁)、 ϕ^{x}、^{z}(自旋轨道密度波)和 ϕ^{y}、^{z} [； ϕ^{z}、^{z}曲线与 ϕ^{x}、^{z}]相同。在第四个面板中，我们展示 ϕ^{x}、^{z}在 $J = 0$附近、针对 $J = \{-0.003, -0.001, 0, 0.001, 0.003\}$的情形，以揭示浅极小值和近乎平坦的轮廓。根据图例， J的不同取值以不同颜色表示；实心圆和空心圆分别标记全局极小值和次级极小值。每条轮廓都对另外两个剩余的共线自旋自由能泛函进行积分消去。次级投影极小值不一定是完整自旋自由能泛函空间中的稳定点，其相对于零点的高度也不是逃逸势垒。

轨道均匀 AFM 涨落经历一级相变，进入由自旋轨道通道（$n^{x,\ z}$， $n^{y,\ z}$， $n^{z,\ z}$）主导的区域，并伴有由 J选出的亚稳态构型。因此， $J = 0$ 处的中间 SU(2) 对称相通过依次发生的二级相变和一级相变与 $J > 0$ 处的 AFM 相连，途中经过 SODW 相；同时，该相通过二级相变与 $J < 0$ 处的 $n^{y,\ z}$ 相连。 $J > 0$ 处的亚稳态 SOD W 构型和 $J < 0$ 处的 AFM 构型可能伴随这些相变，反映了 AFM 与自旋轨道序之间互斥的竞争关系。

D. 全面竞争：纳入所有通道

如上所述，鞍点层级表明，在 $J = 0$ 和 $J = U$ 相边界附近，电荷扇区与自旋扇区预计会产生强烈的相互作用。特别是 $J = 0$附近的区域，由于涌现的 SU(4) 对称性而存在大量鞍点极小值，因此需要一种将所有这些通道间的竞争纳入考量的理论处理。与鞍点分析一样，此区域中的主导通道可直接根据 $J = 0$ 两侧各自最负的刚度参数确定（表 I）。

为了解决这一问题，我们计算了 $J = 0$附近的 MCFF 相图，并在该区域保留全部七个活跃 FF：ODW、SODW 和反铁磁，以及其余轨道杂化的 $n^{x,\ c}$、 $n^{y,\ c}$、 $n^{x,\ z}$ 和 $n^{y,\ z}$模。此处未纳入电荷密度波模，因为它在该区域的刚度参数为正，并且自旋扇区被限制为共线自旋分量（$\varsigma = s$）。我们强调，在 MCFF 方法中，

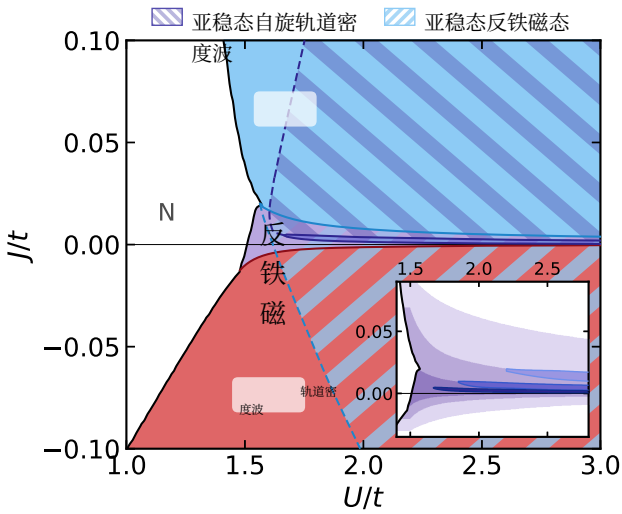


图 6 $\beta = 10$ $L = 32$七个 FF 联合电荷 – 自旋相图，适用于 。颜色表示根据自由能判据确定的稳定相：ODW（红色）、AFM（浅蓝色）和 SODW（深蓝色，在较小 $J > 0$处呈窄带）；N 表示常态（白色），与有序区域由黑色实线起始线分隔。在紫色区域，所有单独通道的自由能都在零处达到全局最小值，而总振幅模具有非零全局最小值。条纹区域表示亚稳态 SODW 和 AFM（次级边缘极小值），其边界由虚线标出。插图： $L = \{8, 16, 32\}$ 时的紫色区域和 SODW 带（深蓝色轮廓），颜色越深表示 L 越大；黑线为 $L = 32$ 起始线。

我们可以研究在 $J=0$ 处简并的全部七种模态之间的完整竞争，并分析它们之间的相互作用，而不是将涨落限制在各个独立扇区中。通过蒙特卡洛采样 [47, 48], ，对所有不同 FF 的积分进行计算，并根据采样得到的振幅分布重建每个通道的自由能。不同 FF 通道各自的自由能通过对其余 FF 积分得到；根据简并情况，其余 FF 可表示为双重态半径或单FF振幅。结果汇总于图 6 所示的相图中，其中我们用不同颜色标出各个自由能具有非零全局极小值的区域。

在图 6 中，我们展示了 $L=32$ 的 U–J 相图，并根据自由能分析标示出稳定有序态和亚稳有序态所在的区域。对于 $J<0$，ODW（红色）更为有利；而当 $J>0$ 足够大时，则选择 AFM（浅蓝色）。虽然这些结果反映了鞍点层级，但在中间区域，我们发现了两个源于显式纳入不同通道之间相互作用的显著结果。在紫色区域，所有单独通道的自由能都在零振幅处达到极小值，但总振幅自由能的全局最小值却位于有限振幅处。在该区域内，我们发现了一个小的子区域，其中自旋轨道密度波相（蓝色）稳定存在。我们还在图 6 中突出显示了两个发现亚稳态解的条纹区域，这与磁性通道中发现的情况相似：在稳定 AFM 边界以下存在一个次级 AFM 极小值，它横跨中间的紫色区域和狭窄的自旋轨道密度波带，并延伸进入 ODW 相；与此同时，一个亚稳态自旋轨道密度波仍存在于 AFM 主导区域内。这种相似性反映了费米子谱的共同结构。由于 ODW 矩阵和自旋轨道密度波矩阵均与 AFM 矩阵对易，它们会产生与和差能隙相关的分支。因此，混合相互竞争的振幅可能会部分闭合某个能隙，并分离它们的自由能极小值，从而使 AFM 的亚稳性得以渗透进入 ODW 相。

在图 6 的插图中，我们比较了 $L=\{8,16,32\}$ 对应的紫色区域和自旋轨道密度波边界，结果显示，随着系统尺寸的增加，紫色区域的两条分支和自旋轨道密度波区域都在变窄。我们可以推测，自旋轨道密度波相会逐渐收缩，并在其周围变得无限窄

$J=0^+$在热力学极限下，恰当地处理临界行为将至关重要。我们还注意到，纳入其他通道（例如与横向涨落和不同动量相关的通道）预计会改变我们的结果。横向涨落预计会增强自旋扇区不稳定性，但与不同动量结合后，可能会提高紫色区域的稳定性；在该区域中，各个通道均不稳定。

为了获得进一步的认识，并确定哪些通道在整个相图中承载最强的涨落，我们在图7中将其叠加到相图上——

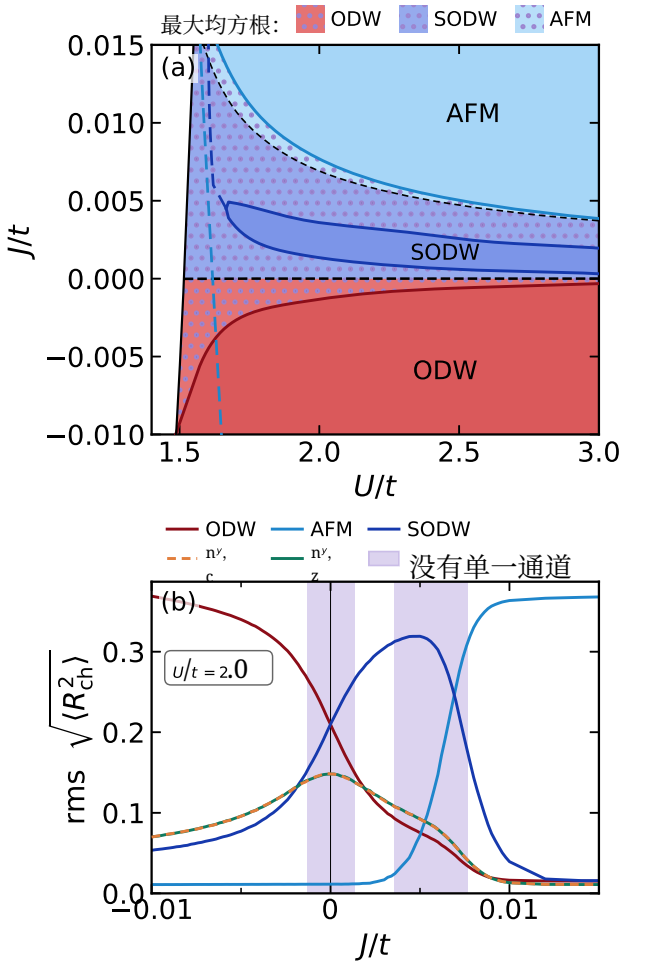


图 7. $L=32$ 和 $\beta=10$处、 $J=0$附近联合七个 FF 计算中的主导涨落通道。(a) 图 6 中相图的局部放大图，聚焦于 $J=0$ 周围的非平凡区域。实色表示具有非零全局自由能极小值的相，而点状区域对应于图 6 中的紫色区域，在该区域内所有单独通道的自由能均在零处取极小值。点状区域的颜色标识具有最大均方根振幅 $\sqrt{\langle R_{\rm ch}^2\rangle}$ 的通道。在 $J=0$处，黑色虚线表示轨道-电荷扇区与自旋轨道扇区之间均方根振幅相等的位置；在正J处，表示反铁磁与自旋轨道双重态之间均方根振幅相等的位置。彩色虚线表示图 6 中所示的亚稳边界。黑色实线表示数值起始边界；白色表示正常态区域。(b) $U=2$处均方根振幅随 J 的变化；阴影带对应于(a)中的点状区域。 $n^{y,c}$ 和 $n^{y,z}$ 曲线重合。

在 $J=0$ 附近，竞争通道在 $L=32$ 处的均方根（rms）振幅为。这些数据通过对联合七个 FF 分布进行蒙特卡洛抽样获得，即 $\sqrt{\langle R_{\rm ch}^2\rangle}$，其中 $R_{\rm ch}^2$ 是属于各个通道的 FF 的振幅平方之和。虽然均方根振幅最大的通道对 FF 均方振幅的贡献最强，但这并不意味着它在单个构型中占主导地位。

在图 7 的面板（a）中，我们将这些信息绘制为点状区域，其中点状区域的颜色表示均方根振幅最大的通道。这里，我们采用与绘制相图时相同的颜色图例。在这一标度下，反铁磁相与轨道密度波相之间的点状区域，即图 6 中的紫色区域，以及将二者分隔开的狭窄自旋轨道密度波带，都得到了清晰分辨。实线彩色边界遵循图 6 的自由能最小准则，而黑色虚线则标出相应通道的均方根振幅变得相等的位置。因此，后者表示的是涨落权重的交叉，而不是任何额外的有序化转变。与之前的分析一致，当 $J<0$ 时，轨道密度波涨落具有最大的均方根振幅；而在较小的正 J 下，自旋轨道密度波涨落占据主导。涨落的交叉似乎恰好发生在对称线 $J=0$ 处。随着 J 进一步增加，反铁磁涨落通过一次交叉超过自旋轨道密度波涨落；这一交叉的位置似乎略早于根据自由能最小准则定义的反铁磁相边界。该比较考虑了每个双重态两个分量的合成振幅，而反铁磁由单个 FF 表示。有趣的是，在联合计算中，$\{n^{y,c}, n^{y,z}\}$ 分量从未具有最大的均方根振幅，尽管它们在分别从电荷扇区和自旋扇区（第 IV B 和 IV C 节）获得的相图中各自对应的区域内受到偏好。

图7（b）展示了沿 $U=2$ 处的截线，随 J 变化的重新分布情况；阴影带标出了与面板（a）中两个虚线区域相交的部分。在 $J=0$ 处，涉及轨道涨落的六个保留分量具有相近的均方根振幅，反映了底层的 SU(4) 对称性，而反铁磁涨落（蓝色）则弱得多。这种不平衡是在受限的七个 FF 系综中得到的，其局限性将在后文讨论。离开 $J=0$ 后，涨落权重会根据 J 的符号转向轨道密度波或自旋轨道密度波区域。在 J 为正的一侧，随着接近反铁磁相，反铁磁涨落急剧增大，从而限制了自旋轨道密度波振幅的增长。总体而言，竞争的振幅不会在自由能极小值边界处发生剧烈变化，而是始终保持显著。这表明，某一通道的稳定并不会消除其他通道中的涨落。值得指出的是，在 $J=0$ 处，六个简并分量的均方振幅近乎相等，因为每个双重态的均方根振幅比单个分量大 $\sqrt{2}$ 倍。此外，我们观察到，次领先的（$n^{y,c}$、$n^{y,z}$）分量彼此简并，并在 $J=0$ 处达到最大的均方根值。请注意，仅凭均方根振幅，无法区分由不同通道主导的构型之间的竞争，以及多个通道同时具有显著振幅的构型。

我们强调，这里的结果取决于计算中所保留并纳入的 FF，并且忽略某些 FF 可能会限制该方法从鞍点起始点出发纳入相互作用效应的能力。因此，七个 FF 系综并未呈现完整的 SU(4) 对称性，预期在 $J=0$ 出现的 SU(4) 共存相被与轨道 SU(2) 对称性相关的六分量对称性驱动（$n^{x,c/z}$、$n^{y,c/z}$、$n^{z,c/z}$）共存相所取代。该相的出现依赖于“通路”的存在，即所有生成元矩阵对至少共享一个彼此对易的公共生成元矩阵。这些通路允许在 $J=0$ 处以零自由能代价重新分配涨落权重。由于在联合七个 FF 计算中，反铁磁生成元 $\tau^0\otimes\sigma^z$ 与涉及轨道涨落的六个保留生成元对易，因此它们的模之间禁止共存。然而，尽管纳入横向分量不会影响鞍点相图，但预计这些 FF 将通过允许 FF 模之间出现新的对易通路，重塑相互作用相图；而在共线系综中不存在这些通路。通过保留自旋扇区的所有 FF 模，我们预计反铁磁–自旋轨道密度波相边界将表现为二级相变；例如，共线反铁磁模 $n^{c,z}$ 与横向自旋轨道密度波模（$n^{x,x}$、$n^{y,x}$、$n^{x,y}$、$n^{y,y}$）反对易。此外，我们预计纳入这些 FF 将增强自旋扇区的 FF，并促成 SU(4) 共存相的出现；在该相中，全部十五个无迹粒子–空穴通道模在 $J=0$ 处简并。预计这将有利于 $J=0$ 附近的“紫色”区域，在该区域各个通道的振幅均为零。

最后，我们简要讨论 $J=U$ 处更为直观的电荷密度波–反铁磁相边界，该边界在粒子-空穴通道中仅涉及两个分量。由于它们对应的矩阵对易，它们沿着 $J=U$ 线发生一级相变，并由次级亚稳态构型连接起来。该边界的行为与半填充单轨道扩展 Hubbard 模型 [3] 中发现的电荷密度波–反铁磁相边界几乎完全相同。

V. 结论

我们发展了 MCFF 理论的多轨道扩展，为研究强关联电子模型及其相图中的竞争性不稳定性提供了一种计算成本低廉的框架。在单轨道表述 [3, 7],的基础上，我们的通用方法通过统一的变分构造处理电荷、自旋和轨道通道，并可轻松扩展以纳入超导通道。对费米子自由度进行积分后，问题便简化为对选定静态集体 FF 的积分，同时保留这些自由度相互耦合的非高斯热涨落，超越平均场鞍点。由于能够直接获取自由能剖面，因此可以在保留系综中识别竞争的全局与局部极小值，使该方法

非常适用于系统性的参数扫描和有限尺寸比较。

我们在半填充的二维双轨道Kanamori–Hubbard模型上测试了该方法 [16,36, 42, 49–57], 。在该模型中，Hubbard 相互作用和洪德耦合决定了多个相之间的竞争。该方法的准确性取决于所选模的数量和性质。原则上，MCFF 构造可以纳入所有可能的振幅和涨落。在本工作中，我们将研究范围限制在具有相容动量 $\mathbf{Q}$ =$\mathbf{M}$ 的粒子-空穴通道。这一选择是针对当前应用作出的，原因是裸色散关系存在完美嵌套 $\epsilon_{\mathbf{k}}$。

通过选择纳入所有具有 $\mathbf{Q} = \mathbf{M}$ 的电荷与自旋共线相，我们发现， $J = 0$ 附近与模型中的 SU(4) 对称性相关的区域，呈现出集体电荷、自旋和轨道涨落之间错综复杂的竞争。有趣的是，我们发现，纳入各种 FF 后会产生一个集体 FF 非零的区域，尽管由于强烈的相互作用，任何单独的 FF 都没有表现出有限振幅。该区域与鞍点解相比存在明显的定性差异，展示了该方法偏离平均场理论的能力。我们强调，这一强涨落区域会随系统尺寸增大而缩小；尽管我们无法对热力学极限得出确定结论，但我们预计，在描述 $J = 0$ 交叉处出现的临界效应时，涨落的重要性仍将持续。此外，可以预期，纳入部分被忽略的模也会改变并扩大这一区域。系统地、以受控方式研究这些效应，包括——以受控方式纳入这些效应，是未来研究中一个很有前景的方向。另一个引人入胜的方向，是将 FF 理论与非传统的平均场解相结合，例如条纹 [66, 67] 或更复杂的自旋图样 [68]。

这个非平凡的例子展示了 MCFF 方法的潜力：它能够以可控且高效的方式描述竞争的集体序。然而，动力学关联以及未纳入的通道和动量可能会影响相边界的定量结果。预计这些问题在竞争激烈的区域和强关联区域尤为重要。尽管如此，我们相信，MCFF 方法的灵活性以及其区分各种贡献的能力，使其成为强有力的诊断工具。因此，将这一框架应用于包含两个以上轨道的模型，纳入更多涨落通道，并考虑更一般的能带结构，将拓宽其应用范围。

致谢

作者感谢 MUR 通过 PRIN 2020（Prot. G93C22000430006）提供的经费支持，感谢欧盟通过欧盟下一代计划资助的国家复苏与韧性计划（PNRR）MUR（Prot. PE0000023-NQSTI）提供的支持，以及 FVG 通过补充运营计划（POC）2014-2020（Prot. G93C25000880002）提供的支持。高性能计算工作得以完成，得益于 CINECA HPC 通过 SISSA 2025 和 2026 年协议提供的资源。

[1] B. Fourcade 和 G. Spronken, 《应用于一维扩展哈伯德模型的实空间标度方法。I. 实空间重整化群方法》, 《物理评论B》**29**, 5089 (1984年)。[2] J. E. Hirsch, 《扩展哈伯德模型中的电荷密度波到自旋密度波相变》, 《物理评论快报》**53**, 2327 (1984年)。[3] E. Linn´er、A. I. Lichtenstein、S. Biermann 和 E. A. Stepanov, 《多通道涨落场方法在相互作用电子系统竞争性不稳定性研究中的应用》, 《物理评论B》**108**, 035143 (2023年)。[4] M. Nakamura, 《一维中的电荷密度波—自旋密度波相变机制》, 《日本物理学会杂志》**68**, 3123 (1999年)。[5] M. Nakamura, 《扩展哈伯德链中的三临界行为》, 《物理评论B》**61**, 16377 (2000年)。[6] A. W. Sandvik、L. Balents 和 D. K. Campbell, 《半填充一维扩展哈伯德模型的基态相》, 《物理评论快报》**92**, 236401 (2004年)。[7] E. Linn´er、C. Dutreix、S. Biermann 和 E. A. Stepanov, 《半填充扩展哈伯德模型中 s-波超导性与相分离的共存》, 《物理评论B》**108**, 205156 (2023年)。

[8] W. Metzner、M. Salmhofer、C. Honerkamp、V. Meden 和 K. Sch¨onhammer, 关联费米子系统的泛函重整化群方法, 《现代物理评论》**84**, 299（2012年）。[9] G. Rohringer、H. Hafermann、A. Toschi、A. A. Katanin、A. E. Antipov、M. I. Katsnelson、A. I. Lichtenstein、A. N. Rubtsov 和 K. Held, 超越动力学平均场理论研究非局域关联的图解路径, 《现代物理评论》**90**, 025003（2018年）。[10] U. Schollw¨ock, 密度矩阵重整化群, 《现代物理评论》**77**, 259（2005年）。[11] Q. Luo、D.-X. Yao、A. Moreo 和 E. Dagotto, 铁基砷化物双轨道哈伯德模型中的电荷条纹, 《物理评论B》**83**, 174513（2011年）。[12] W. Metzner 和 D. Vollhardt, 无限 $d = \infty$ **62**, 维中的324, 1989关联晶格费米子, 《物理评论快报》（）。[13] A. Georges、G. Kotliar、W. Krauth 和 M. J. Rozen-berg, 强关联费米子系统的动力学平均场理论及无限维极限, 《现代物理评论》**68**, 13（1996年）。[14] G. Kotliar、S. Y. Savrasov、K. Haule、V. S. Oudovenko、O. Parcollet 和 C. A. Marianetti, 电子结构计-

算与动力学平均场理论，《现代物理评论》78，865（2006年）。[15] Y. Nomura、S. Sakai 和 R. Arita，采用改进连续时间量子蒙特卡罗算法的多轨道团簇动力学平均场理论，《物理评论B》89，195146（2014年）。[16] T. Kita、T. Ohashi 和 S.-i. Suga，双轨道哈伯德模型中自旋和轨道性质的空间涨落，《物理评论B》79，245128（2009年）。[17] A. Galler、P. Thunstr¨om、P. Gunacker、J. M. Tomczak 和 K. Held，第一性原理动力学顶角近似，《物理评论B》95，115107（2017年）。[18] A. Galler、J. Kaufmann、P. Gunacker、M. Pickem、P. Thunstr¨om、J. M. Tomczak 和 K. Held，第一性原理动力学顶角近似，《日本物理学会杂志》87，041004 2018（）。[19] J. Kaufmann、C. Eckhardt、M. Pickem、M. Kitatani、A. Kauch 和 K. Held，自洽梯形动力学顶角近似，《物理评论B》103，035120（2021年）。[20] E. G. C. P. van Loon，多轨道系统的二阶对偶费米子，《凝聚态物理杂志》33，135601（2021年）。[21] E. A. Stepanov、Y. Nomura、A. I. Lichtenstein 和 S. Biermann，Hund交换耦合诱导关联电子材料中磁涨落的轨道各向同性，《物理评论快报》127，207205（2021年）。[22] M. Vandelli、J. Kaufmann、M. El-Nabulsi、V. Harkov、A. Lichtenstein 和 E. Stepanov，强电子关联材料的多能带D-TRILEX方法，《SciPost Phys.》13，036（2022年）。[23] S. Biermann、F. Aryasetiawan 和 A. Georges，强关联系统电子结构的第一性原理方法：结合 GW 近似与动力学平均场理论，《物理评论快报》90，086402（2003年）。[24] J. M. Tomczak、M. Casula、T. Miyake、F. Aryasetiawan 和 S. Biermann，GW与动力学平均场理论的结合：过渡金属氧化物中的动态屏蔽效应，EPL 100，67001（2012年）。[25] J. M. Tomczak、M. van Schilfgaarde 和 G. Kotliar，铁基砷化物和硫族化物中的多体效应：有效质量的非局域起源与动态起源，《物理评论快报》109，237010（2012年）。[26] C. Taranto、M. Kaltak、N. Parragh、G. Sangiovanni、G. Kresse、A. Toschi 和 K. Held，比较准粒子 GW+动力学平均场理论和LDA+动力学平均场理论：测试材料$SrVO_3$，，《物理评论B》88，165119（2013年）。[27] R. Sakuma、P. Werner 和 F. Aryasetiawan，$SrVO_3$ 在 GW+动力学平均场理论中的电子结构，《物理评论B》88，235110（2013年）。[28] J. M. Tomczak、M. Casula、T. Miyake 和 S. Biermann，$SrVO_3$中能带展宽与准粒子寿命的不对称性：结合 GW 与动力学平均场理论 GW +动力学平均场理论得到的屏蔽交换与局域关联之间的竞争，《物理评论B》90，165138（2014年）。[29] A. N. Rubtsov，用于描述小型经典关联晶格的涨落局域场方法研究，《物理评论E》97，052120（2018年）。[30] A. N. Rubtsov、E. A. Stepanov 和 A. I. Lichtenstein，涨落局域场方法捕获Hubbard plaquette中的集体磁涨落，《物理评论B》102，224423（2020年）。[31] Y. S. Lyakhova、E. A. Stepanov 和 A. N. Rubtsov，涨落局域场方法在具有强集体电子涨落的一维分子自由能研究中的应用，《物理评论B》**105**, 035118 (2022). [32] Y. S. Lyakhova 和 A. N. Rubtsov，涨落局域场方法：强耦合区晶格模型的描述，《超导与新型磁性期刊》**35**, 2169 2022( ). [33] Y. S. Lyakhova、S. D. Semenov、A. I. Lichtenstein 和 A. N. Rubtsov，涨落场级数：迈向高精度关联系统计算，《物理评论B》**110**, 245134 (2024). [34] D. Kuznetsova、G. V. Astretsov 和 A. N. Rubtsov，无序伊辛模型的涨落局域场方法，arXiv:2212.14733 (2022). [35] L. D. Silakov、Y. S. Lyakhova 和 A. N. Rubtsov，用于描述关联费米子动力学的时变涨落局域场方法，《物理评论B》**113**, 235121 2026( ). [36] J. Kanamori，过渡金属中的电子关联与铁磁性，理论物理进展**30**, 275 (1963). [37] A. Georges、L. de' Medici 和 J. Mravlje，洪德耦合引起的强关联，凝聚态物理年度评论**4**, 137 (2013). [38] L. de' Medici、J. Mravlje 和 A. Georges，洪德规则耦合在强关联材料中的双重影响，《物理评论快报》**107**, 256401 (2011). [39] A. Georges 和 G. Kotliar，通向强电子关联的洪德金属路径，今日物理**77**, 46 (2024). [40] M. Capone 和 L. Fanfarillo，洪德金属：关联与涌现序的相互作用，当代物理**67**, 93 (2026). [41] M. Capone、M. Fabrizio、C. Castellani 和 E. Tosatti，专题综述：扩展型 A_3C_{60} 富勒烯的非常规超导性质建模，《现代物理评论》**81**, 943 (2009). [42] M. Capone、M. Fabrizio、C. Castellani 和 E. Tosatti，多能带莫特绝缘体附近的强关联超导与赝能隙相，《物理评论快报》**93**, 047001 (2004). [43] P. C. Hohenberg，一维和二维中长程有序的存在性，《物理评论》**158**, 383 (1967). [44] N. D. Mermin 和 H. Wagner，一维或二维各向同性海森堡模型中铁磁性或反铁磁性的缺失，《物理评论快报》**17**, 1133 (1966). [45] M. B. Walker 和 T. W. Ruijgrok，金属相互作用电子多能带模型中一维和二维磁有序的缺失，《物理评论》**171**, 513 (1968). [46] D. Loss、F. L. Pedrocchi 和 A. J. Leggett，一维和二维中与巡游相互作用电子耦合的晶格自旋自发磁有序的缺失，《物理评论快报》**107**, 107201 (2011). [47] N. Metropolis 和 S. Ulam，蒙特卡罗方法，美国统计学会杂志**44**, 335 (1949). [48] N. Metropolis、A. W. Rosenbluth、M. N. Rosenbluth、A. H. Teller 和 E. Teller，利用快速计算机进行状态方程计算，化学物理杂志**21**, 1087 1953( ). [49] P. Werner 和 A. J. Millis，多轨道莫特系统中的高自旋到低自旋转变及轨道极化转变

，《物理评论快报》 **99** ，126405（2007）。

[50] R. Peters 和 T. Pruschke, 《双轨道Hubbard模型中的轨道序与磁序》, 《物理评论B》**81**, 035112（2010）。[51] R. Peters、N. Kawakami 和 T. Pruschke, 《双轨道Hubbard模型中的轨道序、金属-绝缘体相变与磁阻效应》, 《物理评论B》**83**, 125110（2011）。[52] K. Steiner、S. Hoshino、Y. Nomura 和 P. Werner, 《双能带Hubbard模型中的长程有序态与自旋/轨道冻结》, 《物理评论B》**94**, 075107（2016）。[53] E. A. Stepanov, 《强磁涨落通过消除金属-绝缘体相变中的轨道选择性》, 《物理评论快报》**129**, 096404（2022）。[54] E. A. Stepanov 和 S. Biermann, 《轨道选择性 n´eel 相变能否在强非局域电子关联下存续? 》, 《物理评论快报》**132**, 226501（2024）。[55] D. Florez-Ablan、C. Mejuto-Zaera 和 M. Capone, 《多能带簇动力学平均场理论中的浴参数化》, 《物理评论B》**112**, 085153（2025）。[56] L. Torchia 和 M. Capone, 《具有洪特交换的双轨道吸引性Hubbard模型中的超导体-绝缘体相变》, 《物理评论B》**112**, 235161（2025）。[57] R. D. Soares、L. Staszewski、C. Feng 和 A. Wietek, 《双轨道Hubbard-Kanamori模型中的激子条纹序》（2026）, arXiv:2609.36051 [cond-mat.str-el]。[58] C. Castellani、C. R. Natoli 和 J. Ranninger, 《绝缘相中 V_2O_3 的磁结构》, 《物理评论B》**18**, 4945（1978）。[59] R. Peierls, 《自由能的极小性质》, 《物理评论》**54**, 918（1938年）。[60] N. N. Bogolyubov, 《多体问题中的变分原理》, 苏联科学院通报**119**, 244（1958年）。[61] R. P. Feynman, *Statistical Mechanics: A Set of Lectures*（Benjamin/Cummings，马萨诸塞州雷丁，1972年）。[62] J. Jaeckel 和 C. Wetterich, 《消除平均场歧义的流方程》, Phys. Rev. D **68**, 025020（2003年）。[63] T. Baier、E. Bick 和 C. Wetterich, 《Hubbard模型中反铁磁序的温度依赖性》, 《物理评论B》**70**, 125111（2004年）。[64] J. Jaeckel, 《理解部分玻色化理论中的 Fierz 歧义》, arXiv:hep-ph/0205154（2002年）。[65] E. Langmann 和 J. Lenells, 《半填充各向异性三维Hubbard模型中平均场反铁磁序的普适性》, J. Stat. Phys. **192**, 10（2025年）。[66] H. J. Schulz, 《二维Hubbard模型中的非公度反铁磁性》, 《物理评论快报》**64**, 1445（1990年）。[67] R. Scholle、P. M. Bonetti、D. Vilardi 和 W. Metzner, 《二维Hubbard模型中磁序与电荷序的全面平均场分析》, 《物理评论B》**108**, 035139（2023年）。[68] M. Quinzi、A. Pintus、T. Chiarotti、M. Capone 和 N. Marzari, 《自旋纹理的谱特征与赝能隙的出现》, arXiv:2610.19269（2026年）。

补充材料

利用多轨道多通道涨落场理论研究 Kanamori-Hubbard 模型中的竞争序

L. Torchia[1], E. Linn´er[1], M. Capone[1,2]

[1]国际高等研究学院（SISSA），Via Bonomea 265，34136 的里雅斯特，意大利[2]CNR-IOM，材料制造研究所，国家研究委员会，Via Bonomea 265，34136 的里雅斯特，意大利

在本补充材料中，我们详细推导了正文所采用的两轨道 Kanamori–Hubbard 模型粒子-空穴通道中电荷和自旋涨落的多轨道多通道涨落场（MCFF）构造。首先，我们通过计算局域相互作用收缩，利用变分原理确定通道刚度参数。其次，我们介绍自由能构造，详细说明单通道起始，以及描述集体不稳定性相互作用的不同涨落场（FF）通道自由能剖面。最后，我们讨论相边界 $J = 0$ 和 $J = U$附近竞争背后的对称性关系。

S1. 变分构造

我们的多轨道 MCFF 构造基于相同的变分原理，与单轨道 FF 和 MCFF 构造中所采用的变分原理相同 [1–3]。为此，考虑正文中介绍的原始晶格作用量 $\mathcal{S} = \mathcal{S}_0 + \mathcal{S}_{\rm int}$，其形式为

$$\mathcal{S}_0 = -\frac{1}{\beta N_s}\sum_{k,m,\sigma} c^*_{km\sigma}\mathcal{G}_k^{-1}c_{km\sigma}, \quad \text{and} \quad \mathcal{S}_{\rm int} = \sum_j \int_0^\beta d\tau\, H_{\rm int}(j,\tau). \tag{S1}$$

此处， $k = (\mathbf{k}\ \nu)$表示组合准动量$\mathbf{k}$ 和费米子 Matsubara 频率 ν， N_s 为格点数，而 $H_{\rm int}$ 为局域Kanamori相互作用，相关定义均见正文。MCFF 理论旨在将原始晶格作用量映射为 MCFF作用量，使各种密度与一组保留的 FF 相耦合：

$$\mathcal{S}^* = \mathcal{S}_0 + \sum_{\alpha,\mathbf{Q}}\left[\phi^\alpha_{\mathbf{Q}}\rho^\alpha_{-\mathbf{Q}} - \frac{\beta N_s}{2J^\alpha_{\mathbf{Q}}}\phi^\alpha_{\mathbf{Q}}\phi^\alpha_{-\mathbf{Q}}\right]. \tag{S2}$$

我们考虑一组与粒子–空穴通道耦合的保留 FF，如 $\Gamma^\alpha = \tau^\varrho \otimes \sigma^\varsigma$所定义，其中$\alpha = (\varrho, \varsigma)$表示轨道 $\varrho \in \{0, x, y, z\}$ 和自旋 $\varsigma \in \{c, x, y, z\}$ 纹理。此外，我们使用平移密度$\rho^\alpha_{\mathbf{Q}}$，以确保原始晶格作用量与 MCFF作用量中的化学势 μ 相同。由于涉及 $\mathcal{S}^*$ 的实场积分只有在刚度参数满足 $J^\alpha_{\mathbf{Q}} < 0$时才收敛，因此这为保留的集体不稳定性定义了稳定性判据。

显式积分出 MCFF作用量中的 FF，得到一个有效的费米子作用量 n,

$$\mathcal{S}_c = \mathcal{S}_0 + \frac{1}{2}\sum_{\alpha,\mathbf{Q}}\frac{J^\alpha_{\mathbf{Q}}}{\beta N_s}\rho^\alpha_{\mathbf{Q}}\rho^\alpha_{-\mathbf{Q}}, \tag{S3}$$

它构成了利用 Peierls–Feynman–Bogoliubov变分原理 [4–6] 确定刚度参数的基础。该变分原理基于以下泛函：

$$f[J^\alpha_{\mathbf{Q}}] \equiv f_c[J^\alpha_{\mathbf{Q}}] + \frac{1}{\beta N_s}\langle \mathcal{S} - \mathcal{S}^*\rangle_{\mathcal{S}_c} = -\frac{\ln \mathcal{Z}_c}{\beta N_s} + \frac{1}{\beta N_s}\left\langle \mathcal{S}_{\rm int} - \frac{1}{2}\sum_{\alpha,\mathbf{Q}}\frac{J^\alpha_{\mathbf{Q}}}{\beta N_s}\rho^\alpha_{\mathbf{Q}}\rho^\alpha_{-\mathbf{Q}}\right\rangle_{\mathcal{S}_c}, \tag{S4}$$

每个格点给定。在计算式 (S4) 中的相互作用平均时，我们利用以下精确关系：

$$\langle O\rangle_{\mathcal{S}_c} = \left\langle \langle O\rangle_{\mathcal{S}_e}\right\rangle_{\mathcal{S}_\phi}, \quad \text{where} \quad \mathcal{S}_e = \mathcal{S}_0 + \sum_{\alpha,\mathbf{Q}}\phi^\alpha_{\mathbf{Q}}\rho^\alpha_{-\mathbf{Q}}. \tag{S5}$$

首先，对于固定的 FF，内平均描述的是非相互作用费米子，因此其局域四费米子收缩可由维克定理方便且精确地得到，具体推导见下一节。其次，外平均考虑 FF 的分布，该分布由有效 FF 作用量所导出的 FF 分布定义，其中费米子自由度已被显式积分掉。对于式 (S4) 中的集体密度乘积，我们沿用单轨道构造，在固定场的条件下仅保留非连通贡献：

$$\left\langle \rho^{\alpha}_{\mathbf{Q}} \rho^{\alpha}_{-\mathbf{Q}} \right\rangle_{\mathcal{S}_c} \simeq \left\langle \langle \rho^{\alpha}_{\mathbf{Q}} \rangle_{\mathcal{S}_e} \langle \rho^{\alpha}_{-\mathbf{Q}} \rangle_{\mathcal{S}_e} \right\rangle_{\mathcal{S}_\phi} . \tag{S6}$$

其依据是被省略的连通贡献在系统尺寸方面属于次要项。此近似仅涉及集体密度乘积，而在给定 FF 的情况下，局域维克收缩本身仍是精确的。

投影到保留模后，式 (S4) 中的两个相互作用贡献在 FF 通道振幅中均具有二次型。根据变分方案，可以得到刚度参数 $J^{\alpha} = 2C_{\alpha}$；局域相互作用平均的系数为 C_{α}，其乘以 $\langle n^{\alpha} \rangle^2_{\mathcal{S}_e}$。因此，刚度参数可由相互作用收缩确定，无需额外选择费尔兹解耦。需要强调的是，由于相互作用是局域的，刚度参数与准动量无关。在下一节中，我们将解析地求出不同刚度参数关于轨道内相互作用参数 U 和轨道间相互作用参数 U'（分别）以及洪德耦合 J 的函数形式。

S2. 金纳莫里收缩与刚度参数

为变分确定刚度参数，我们需要计算局域相互作用收缩，并如上一节所述，明确运用维克定理。为方便起见，我们将五个相互作用项分开处理：

$$\hat{H}_{\mathrm{int}} = U\hat{H}_1 + U'\hat{H}_2 + (U'-J)\hat{H}_3 + (-J)\hat{H}_4 + J\hat{H}_5. \tag{S7}$$

省略格点指标后，正规序相互作用项的形式为：

$$\begin{aligned}
\hat{H}_1 &= \sum_{m} \hat{c}^{\dagger}_{m\uparrow}\hat{c}^{\dagger}_{m\downarrow}\hat{c}_{m\downarrow}\hat{c}_{m\uparrow}, \\
\hat{H}_2 &= \sum_{m\neq m'} \hat{c}^{\dagger}_{m\uparrow}\hat{c}^{\dagger}_{m'\downarrow}\hat{c}_{m'\downarrow}\hat{c}_{m\uparrow}, \\
\hat{H}_3 &= \sum_{\sigma} \hat{c}^{\dagger}_{1\sigma}\hat{c}^{\dagger}_{2\sigma}\hat{c}_{2\sigma}\hat{c}_{1\sigma}, \\
\hat{H}_4 &= -\sum_{m\neq m'} \hat{c}^{\dagger}_{m\uparrow}\hat{c}^{\dagger}_{m'\downarrow}\hat{c}_{m\downarrow}\hat{c}_{m'\uparrow}, \\
\hat{H}_5 &= \sum_{m\neq m'} \hat{c}^{\dagger}_{m\uparrow}\hat{c}^{\dagger}_{m\downarrow}\hat{c}_{m'\downarrow}\hat{c}_{m'\uparrow}.
\end{aligned} \tag{S8}$$

ˆ 此处，正规序自旋翻转项中的负号 H_4 源于交换一个产生算符和一个湮灭算符，而式（S7）中的前因子仍为 $-J$。同样，对跃迁项 H_5 保留其前因子$+J$。

将讨论限定于粒子-空穴通道时，反常收缩为零，由维克定理可得以下精确恒等式：

$$\langle \hat{c}^{\dagger}_{\mu}\hat{c}^{\dagger}_{\nu}\hat{c}_{\rho}\hat{c}_{\lambda} \rangle_{\mathcal{S}_e} = G_{\mu\lambda}G_{\nu\rho} - G_{\mu\rho}G_{\nu\lambda}. \tag{S9}$$

这里，对于固定的 FF，我们引入 $G_{\mu\nu} = \langle \hat{c}^{\dagger}_{\mu}\hat{c}_{\nu} \rangle_{\mathcal{S}_e}$，其中 $\{\mu,\nu\}$ 表示组合的（m，σ）分量。下文中，为方便记号，$\langle \ldots \rangle$ 表示在固定 FF 下相对于 $\langle\cdot\rangle_{\mathcal{S}_e}$ 的期望值。此外，在计算局域相互作用收缩时，指出轨道分辨平均 $\langle n^b_{mm'} \rangle = \sum_{\sigma\sigma'} \sigma^b_{\sigma\sigma'} G_{m\sigma,\ m'\sigma'}$ 与电荷和自旋通道相关，这一点很有用：

$$\begin{aligned}
\langle n^b_{11} \rangle &= \tfrac{1}{2}\big(\langle n^{0,b} \rangle + \langle n^{z,b} \rangle\big), \quad & \langle n^b_{22} \rangle &= \tfrac{1}{2}\big(\langle n^{0,b} \rangle - \langle n^{z,b} \rangle\big), \\
\langle n^b_{12} \rangle &= \tfrac{1}{2}\big(\langle n^{x,b} \rangle + i\langle n^{y,b} \rangle\big), \quad & \langle n^b_{21} \rangle &= \tfrac{1}{2}\big(\langle n^{x,b} \rangle - i\langle n^{y,b} \rangle\big),
\end{aligned} \tag{S10}$$

采用未平移密度。

应用前面引入的恒等式后，我们可以计算相互作用项的平均值。对于轨道内相互作用，Hartree项和Fock项的收缩给出

$$\langle \hat{H}_1 \rangle_{\mathcal{S}_e} = \sum_m (G_{m\uparrow,m\uparrow}G_{m\downarrow,m\downarrow} - G_{m\uparrow,m\downarrow}G_{m\downarrow,m\uparrow}) = \frac{1}{4}\sum_m \left[\langle n^c_{mm}\rangle^2 - \sum_{s=x,y,z} \langle n^s_{mm}\rangle^2 \right]$$
$$= \frac{1}{8}\left[\langle n^{0,c}\rangle^2 + \langle n^{z,c}\rangle^2 - \sum_{s=x,y,z} \left(\langle n^{0,s}\rangle^2 + \langle n^{z,s}\rangle^2 \right) \right]. \tag{S11}$$

对两个轨道间密度项应用相同的替换可得：

$$\langle \hat{H}_2 \rangle_{\mathcal{S}_e} = \frac{1}{8}\Big[\langle n^{0,c}\rangle^2 - \langle n^{z,c}\rangle^2 - \langle n^{0,z}\rangle^2 + \langle n^{z,z}\rangle^2 - \sum_{s=x,y} \left(\langle n^{x,s}\rangle^2 + \langle n^{y,s}\rangle^2 \right) \Big], \tag{S12}$$

$$\langle \hat{H}_3 \rangle_{\mathcal{S}_e} = \frac{1}{8}\Big[\langle n^{0,c}\rangle^2 - \langle n^{z,c}\rangle^2 + \langle n^{0,z}\rangle^2 - \langle n^{z,z}\rangle^2 - \langle n^{x,c}\rangle^2 - \langle n^{y,c}\rangle^2 - \langle n^{x,z}\rangle^2 - \langle n^{y,z}\rangle^2 \Big]. \tag{S13}$$

剩余的自旋翻转项和对跃迁项呈现为：

$$\langle \hat{H}_4 \rangle_{\mathcal{S}_e} = \frac{1}{8}\Big[\sum_{s=x,y} \left(\langle n^{0,s}\rangle^2 - \langle n^{z,s}\rangle^2 \right) - \langle n^{x,c}\rangle^2 - \langle n^{y,c}\rangle^2 + \langle n^{x,z}\rangle^2 + \langle n^{y,z}\rangle^2 \Big], \tag{S14}$$

$$\langle \hat{H}_5 \rangle_{\mathcal{S}_e} = \frac{1}{8}\Big[\langle n^{x,c}\rangle^2 - \langle n^{y,c}\rangle^2 - \sum_{s=x,y,z} \left(\langle n^{x,s}\rangle^2 - \langle n^{y,s}\rangle^2 \right) \Big]. \tag{S15}$$

因此，尽管没有保留配对通道，我们仍观察到电荷和自旋通道中的对跃迁贡献。$\hat{}$ 为汇总每个耦合的贡献，我们将 $U' - J$ 的 H_3前因子分为其 U'和 J部分，并将后者与自旋翻转项和对跃迁贡献结合起来。由公式 (S11)–(S15) 可得：

$$\begin{aligned}
U:&\ \frac{U}{8}\Big[\langle n^{0,c}\rangle^2 + \langle n^{z,c}\rangle^2 - \sum_{s=x,y,z} \left(\langle n^{0,s}\rangle^2 + \langle n^{z,s}\rangle^2 \right) \Big], \\
U':&\ \frac{U'}{8}\Big[2\langle n^{0,c}\rangle^2 - 2\langle n^{z,c}\rangle^2 - \langle n^{x,c}\rangle^2 - \langle n^{y,c}\rangle^2 - \sum_{s=x,y,z} \left(\langle n^{x,s}\rangle^2 + \langle n^{y,s}\rangle^2 \right) \Big], \\
J:&\ \frac{J}{8}\Big[-\langle n^{0,c}\rangle^2 + \langle n^{z,c}\rangle^2 + 3\langle n^{x,c}\rangle^2 + \langle n^{y,c}\rangle^2 + \sum_{s=x,y,z} \left(-\langle n^{0,s}\rangle^2 - \langle n^{x,s}\rangle^2 + \langle n^{y,s}\rangle^2 + \langle n^{z,s}\rangle^2 \right) \Big].
\end{aligned} \tag{S16}$$

它们的和为 $\langle \hat{H}_{\rm int}\rangle_{\mathcal{S}_e}$。在这种形式下，三个自旋分量均以相同的系数出现，这体现了完整相互作用中的自旋各向同性，尽管所选取的部分哈密顿量项打破了这一对称性。按照第 S1 节所述，将每个平方通道平均值的系数的两倍与其刚度参数对应，可得：

$$\langle \hat{H}_{\rm int}\rangle_{\mathcal{S}_e} = \frac{1}{2}\sum_{\varrho=\{0,x,y,z\}} \left[J^{\varrho,c}\langle n^{\varrho,c}\rangle^2 + J^{\varrho,s} \sum_{s=\{x,y,z\}} \langle n^{\varrho,s}\rangle^2 \right], \tag{S17}$$

其中，$J^{\varrho,\,s}$ 参数与自旋方向 $s \in \{x,y,z\}$无关。例如，我们得到，轨道均匀的电荷和自旋通道分别为 $J^{0,\,c} = (U + 2U' - J)/4$ 和 $J^{0,\,s} = -(U + J)/4$。所有得到的刚度参数均列于表 S1 中。需要强调的是，对角形式并不会使不稳定性通道解耦；这些通道仍通过费米子行列式相互耦合。

聚焦于正文中采用的旋转不变关系 $U' \equiv U - 2J$，等式 $J^{x,\,c} = J^{z,\,c}$和 $J^{x,\,s} = J^{z,\,s}$ 体现了由 τ^y 生成的轨道旋转。此外，在 $J = 0$ 处，全部十五个无迹通道的刚度均为 $-U/4$，而 $J^{0,\,c} = 3U/4$。这就是在 $J = 0$ 处出现的 SU(4)对称相互作用 $\hat{}\,\hat{}\,\hat{}H_{\rm int} = UN(N-1)/2$ 的通道表示。

S3. 自由能与单通道起始

在 MCFF 理论中，可以基于正文给出的 FF 自由度的有效作用量，构造自由能：

$$\mathcal{S}_\phi = -\mathrm{Tr}\ln\left[\mathcal{G}^{-1} - \sum_{\alpha,\mathbf{Q}} \phi^\alpha_{\mathbf{Q}} \Lambda^\alpha_{-\mathbf{Q}} \right] - \frac{1}{2}\sum_{\alpha,\mathbf{Q}} \frac{\beta N_s}{J^\alpha_{\mathbf{Q}}}\, \phi^\alpha_{\mathbf{Q}} \phi^\alpha_{-\mathbf{Q}}. \tag{S18}$$

表 S1. 局域 Kanamori 缩并得到的粒子–空穴刚度参数。自旋标记 $s \in \{x, y, z\}$ 表示其方向，正文中的计算仅保留 $s = z$。最后一列采用旋转不变关系 $U' \equiv U - 2J$。

扇区	通道 $J^{a,\,b}$		$J^{a,b}$ 对于 $U' = U - 2J$
电荷	$n^{0,\,c}$	$(U + 2U' - J)/4$	$(3U - 5J)/4$
	$n^{x,c}$	$(-U' + 3J)/4$	$(-U + 5J)/4$
	$n^{y,c}$	$(-U' + J)/4$	$(-U + 3J)/4$
	$n^{z,c}$	$(U - 2U' + J)/4$	$(-U + 5J)/4$
Spin	$n^{0,s}$	$-(U + J)/4$	$-(U + J)/4$
	$n^{x,s}$	$-(U' + J)/4$	$(-U + J)/4$
	$n^{y,s}$	$(-U' + J)/4$	$(-U + 3J)/4$
	$n^{z,s}$	$(-U + J)/4$	$(-U + J)/4$

因此，自由能中的费米子自由度由内部非相互作用哈密顿量 $H_{\mathbf{k}}$ 描述，该哈密顿量出现在 $-\mathrm{Tr}\ln\left[\ldots\right]$ 项中。考虑半填充时由裸色散 $\epsilon_{\mathbf{k}}$ 描述的简并能带分量，如正文所示，它们通过固定的一般 FF 构型耦合，该构型的有序矢量为 $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$。哈密顿量 $H_{\mathbf{k}}$ 因而具有以下形式，用以描述其内部行为：

$$H_{\mathbf{k}} = \begin{pmatrix} \epsilon_{\mathbf{k}}\mathbb{I}_4 & \Phi \\ \Phi & -\epsilon_{\mathbf{k}}\mathbb{I}_4 \end{pmatrix}, \quad \text{with} \quad \Phi = \sum_\alpha \phi^\alpha \Gamma^\alpha. \tag{S19}$$

若 λ_i、$i = \{1, \ldots, 4\}$ 是 Φ 的本征值，则费米子能量由如下能谱描述：$\pm E_{\mathbf{k}i}$，其中$E_{\mathbf{k}i} = \sqrt{\epsilon_{\mathbf{k}}^2 + \lambda_i^2}$。由此可得自由能（忽略与 FF 无关的常数）：

$$\beta\mathcal{F}(\{\phi\}) = -\sum_{\mathbf{k}\in\mathrm{RBZ}} \sum_{i=1}^{4} \ln\left[2 + 2\cosh\left(\beta\sqrt{\epsilon_{\mathbf{k}}^2 + \lambda_i^2}\right)\right] - \frac{\beta N_s}{2}\sum_\alpha \frac{(\phi^\alpha)^2}{J^\alpha}, \tag{S20}$$

该式适用于单个 FF，不涉及与其他 FF 的相互作用。此处，约化布里渊区（RBZ）包含每对 $(\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{Q})$ 中的一个动量，并且每个对数项已包含两个能级 $\pm E_{\mathbf{k}i}$。对于所保留的负刚度参数，最后一项始终为正。

与内部哈密顿量相关的能谱可以直接用我们计算中采用的 FF 表示。定义轨道矢量

$$\boldsymbol{\phi}_c = (\phi^{x,c}, \phi^{y,c}, \phi^{z,c}), \quad \text{and} \quad \boldsymbol{\phi}_z = (\phi^{x,z}, \phi^{y,z}, \phi^{z,z}), \tag{S21}$$

我们得到，在电荷扇区中，FF 本征值为 $\phi^{0,c} \pm |\boldsymbol{\phi}_c|$，且各自二重简并；在共线自旋扇区中，本征值为 $\pm\phi^{0,z} \pm |\boldsymbol{\phi}_z|$。对于正文中定义的联合七场系综，其中 $\phi^{0,c}$ 缺失，自旋仍为分块对角，四个本征值为：

$$\lambda_i \in \left\{\phi^{0,z} \pm |\boldsymbol{\phi}_c + \boldsymbol{\phi}_z|, -\phi^{0,z} \pm |\boldsymbol{\phi}_c - \boldsymbol{\phi}_z|\right\}. \tag{S22}$$

因此，　　两个轨道矢量的相对取向仅通过联合自由能体现。

对于单个FF，情况要简单得多。由于 $(\Gamma^\alpha)^2 = \mathbb{I}_4$ 意味着 $\lambda_i^2 = \phi^2$ 在每个通道中成立，我们可以对所有单个FF模一视同仁。将式（S20）在零点附近展开可得

$$\beta[\mathcal{F}(\phi) - \mathcal{F}(0)] = \beta N_s\left[\frac{1}{2|J^\alpha|} - 2\chi_0(L)\right]\phi^2 + O(\phi^4), \quad \text{with} \quad \chi_0(L) = \frac{1}{N_s}\sum_{\mathbf{k}\in\mathrm{BZ}} \frac{\tanh(\beta\epsilon_{\mathbf{k}}/2)}{2\epsilon_{\mathbf{k}}}. \tag{S23}$$

因此，所有考虑的单通道不稳定性都发生在

$$J^\alpha < -\frac{U_c(L)}{4}, \quad \text{with} \quad U_c(L) = \chi_0(L)^{-1}. \tag{S24}$$

这给出了正文中使用的参考起始线。它采用共同的色散关系和生成元归一化。自然，考虑竞争费米子双线性场之间相互作用后，起始线不必与相边界重合，下一节将对此进行讨论。

S4. FF及其测度的积分

在 MCFF 理论中，通过计算不同 FF 的自由能来考虑 FF 之间的相互影响，其中其余 FF 通过数值积分消去。进行此积分时，每个 FF 积分的权重为 $\exp[-\beta\mathcal{F}(\{\phi\})]$，并且保留的笛卡尔自由费米子采用平坦测度。此外，在分别针对电荷扇区和自旋扇区进行的计算中，具有相同刚度参数的双重态可表示为：

$$R_c = \sqrt{(\phi^{x,c})^2 + (\phi^{z,c})^2}, \quad \text{and} \quad R_s = \sqrt{(\phi^{x,z})^2 + (\phi^{z,z})^2}. \tag{S25}$$

由于它们的角度不进入相应的自由能，标准角积分给出

$$d\mu_c = 2\pi R_c \, dR_c \, d\phi^{y,c}, \quad \text{and} \quad d\mu_s = d\phi^{0,z} \, 2\pi R_s \, dR_s \, d\phi^{y,z}. \tag{S26}$$

我们强调，正文相图中的轨道密度波（ODW）和自旋轨道密度波（SODW）标签分别指这些 R_c 和 R_s。

在本工作所进行的积分中，电荷密度波（CDW）在电荷扇区图中被单独处理，其稳定区域与轨道依赖的自由费米子的稳定区域相分离。同样，在 $J = 0$附近进行的联合计算中，我们保留 ϕ_c的三个分量、 ϕ_z的三个分量以及 $\phi^{0,z}$，并采用它们的笛卡尔积测度，因为该处的CDW刚度参数为正。此外，在联合系综中，两个轨道角不能作为常数因子独立积分，因为它们的相对取向会影响式(S22)。

我们现在说明一个受到其余FF作用的FF的自由能构造。考虑一个FFx，其自由能通过对其余FF积分得到：

$$\beta\mathcal{F}_x(x) = -\ln \int d\mu_{\neq x} \, e^{-\beta\mathcal{F}(x,\phi_{\neq x})}. \tag{S27}$$

对于径向坐标，该积分包含角变量，但不包含 x自身的径向雅可比。电荷和自旋积分分别通过直接数值求积计算，而联合的七场积分则通过蒙特卡洛抽样进行采样。这两种方法得到相同的自由能：对于径向分布， $\beta\mathcal{F}_x(x) = -\ln [P_x(x)/\mathcal{J}_x(x)]$ （相差一个常数），其中双重态对应 $\mathcal{J}_x \propto x$ ， D 笛卡尔自由费米子的总振幅对应 $\mathcal{J}_x \propto x^{D-1}$ 。按照 MCFF 稳定性判据 [2, 3], ，$\mathcal{F}_x$ 的非零全局最小值表明通道振幅已形成，而非零的次级（局部）最小值则表明该通道中存在亚稳态构型。需要强调的是，自旋扇区图中展示的单分量自由能剖面仅保留一个笛卡尔分量，并对其他三个 FF 积分，因此其形状不一定与双重态剖面相同。

这些投影自由能同时考虑了振幅涨落和取向涨落。例如，长度固定、取向均匀分布的三分量矢量，其每个笛卡尔分量都服从均匀分布。因此，即使矢量振幅有限，单分量剖面仍可能是平坦的。更一般地，每个通道的自由能在零处达到极小，并不意味着联合分布集中在零场附近。这就是正文还考察总振幅 $R_{\text{tot}} = (\sum_\alpha (\phi^\alpha)^2)^{1/2}$ 的自由能剖面的原因。尽管各通道的自由能都没有选出任何一个通道，正文仍用紫色区域标示这一非零极小值。

---

[1] A. N. Rubtsov、E. A. Stepanov 和 A. I. Lichtenstein。涨落局域场方法捕捉到的 Hubbard plaquette 中的集体磁涨落。 *Phys. Rev. B*，102:224423，2020年。[2] E. Linn´er、A. I. Lichtenstein、S. Biermann 和 E. A. Stepanov。用于研究相互作用电子系统中竞争性不稳定性的多通道涨落场方法。 *Phys. Rev. B*，108:035143，2023年。[3] E. Linn´er、C. Dutreix、S. Biermann 和 E. A. Stepanov。半填充扩展Hubbard模型中 s-波超导性与相分离在吸引相互作用下的共存。 *Phys. Rev. B*，108:205156，2023年。[4] R. Peierls。关于自由能的极小性质。 *Phys. Rev.*，54:918，1938年。[5] N. N. Bogolyubov。多体问题中的变分原理。 *Dokl. Akad. Nauk SSSR*，119:244，1958年。[6] R. P. Feynman。 *Statistical Mechanics: A Set of Lectures*。Benjamin/Cummings，马萨诸塞州雷丁，1972年。