



## 强关联电子体系的量子蒙特卡罗计算

许霄琰

### Quantum Monte Carlo study of strongly correlated electrons

Xu Xiao-Yan

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 71, 127101 (2022) DOI: 10.7498/aps.71.20220079

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220079>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

---

## 您可能感兴趣的其他文章

### Articles you may be interested in

自旋-1/2量子罗盘链的量子相与相变

Quantum phases and transitions of spin-1/2 quantum compass chain

物理学报. 2022, 71(3): 030302 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20211433>

一维扩展量子罗盘模型的拓扑序和量子相变

Topological orders and quantum phase transitions in a one-dimensional extended quantum compass model

物理学报. 2018, 67(19): 190301 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20180855>

Jaynes-Cummings晶格模型和Rabi晶格模型的量子相变

The quantum phase transition in the Jaynes-Cummings lattice model and the Rabi lattice model

物理学报. 2021, 70(10): 100201 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20202066>

含有Dzyaloshinskii-Moriya相互作用的自旋1键交替海森伯模型的量子相变和拓扑序标度

Quantum phase transition and topological order scaling in spin-1 bond-alternating Heisenberg model with Dzyaloshinskii-Moriya interaction

物理学报. 2020, 69(9): 090302 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20191773>

光腔中两组分玻色-爱因斯坦凝聚体的受激辐射特性和量子相变

Stimulated radiation characteristics and quantum phase transition for two-component Bose-Einstein condensate in optical cavity

物理学报. 2018, 67(18): 183701 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20180971>

各向异性ruby晶格中费米子体系的Mott相变

Mott transition of fermions in anisotropic ruby lattice

物理学报. 2021, 70(23): 230305 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20210963>

专题: 低维材料的新奇物性

## 强关联电子体系的量子蒙特卡罗计算\*

许霄琰<sup>†</sup>

(上海交通大学物理与天文学院, 上海 200240)

(2022 年 1 月 11 日收到; 2022 年 2 月 12 日收到修改稿)

理解强关联电子体系是一个长期的重要目标, 该体系的魅力不仅在于其背后蕴藏着深刻的物理, 还在于其中涌现出的丰富物质态在量子调控、量子计算等领域具有巨大的潜在应用价值. 同时, 理论上非微扰地理解强关联电子体系是极其困难的, 一直充满挑战. 量子蒙特卡罗计算是一类非微扰计算的标准方法, 有助于对强关联电子体系提供非微扰的理解, 因而广泛运用于凝聚态和高能物理领域. 然而, 量子蒙特卡罗计算通常会受到负符号问题的困扰. 本文将具体介绍一些无负符号关联电子模型的设计思路, 并讨论我们近期提出的符号边界理论. 通过设计无负符号或者具有代数符号行为的强关联电子模型, 可以帮助人们研究很多重要的量子多体问题, 包括巡游磁性量子临界行为、非常规超导和磁性序的竞争, 以及莫尔 (moiré) 量子物质中的关联物相与相变等.

**关键词:** 符号问题, 量子相变, 非费米液体, 莫尔量子物质

**PACS:** 71.27.+a, 71.10.Fd, 71.10.Hf, 02.70.Ss

**DOI:** 10.7498/aps.71.20220079

## 1 引言

强关联电子体系的研究可以追溯到 80 多年前一些部分填充的过渡金属氧化物绝缘体的发现<sup>[1]</sup>. 众所周知, 晶格中的电子运动受到周期性晶格势场的作用, 在近自由电子近似的框架下, 电子能级形成以波矢标记的能带, 同时由于泡利不相容原理, 电子依能量从低往高填充能带, 占据费米面以下的电子态. 这种近自由电子能带理论的图像帮助人们对固体材料进行金属、绝缘体和半导体的划分. 进一步, 朗道的费米液体唯象理论建立了相互作用下的费米液体与无相互作用费米子体系的对应关系, 并论证了费米面附近的准粒子在低温下的稳定性, 后来的微扰重整化群的计算<sup>[2-5]</sup>, 也进一步论证了费米面在短程库仑排斥相互作用下的稳定性. 朗道的费米液体理论给出了关于金属很多性质的预言, 比如电阻与温度的二次方关系, 比热与温度的线性

关系等. 结合能带理论和费米液体理论, 通常认为低温下金属是较为稳定的, 注意这里暂不讨论超导不稳定性. 因此, 当实验上发现一些能带部分填充的过渡金属氧化物不是金属反而是绝缘体时, 能带理论和费米液体理论都遇到了困难. 超越能带理论和费米液体理论实验现象的发现, 使得早期人们就意识到了电子间强关联相互作用可能导致的不可微扰性. 从电子间库仑相互作用出发, 可导出一些图像简洁、物理极为丰富的强关联电子有效模型, 例如哈伯德模型和  $t$ - $J$  模型. 这些模型普遍被认为可以用来描述过渡金属氧化物中电子关联驱动的金属-绝缘体转变, 以及掺杂的莫特绝缘体等<sup>[6-8]</sup>.

20 世纪 80 年代末以来, 随着铜基高温超导材料的发现<sup>[9]</sup>, 对于强关联电子模型的研究逐渐深入, 人们希望通过对这些强关联电子模型的研究揭示铜基高温超导材料中丰富的物理性质<sup>[6-8]</sup>. 铜基高温超导材料具有非常丰富的相图<sup>[10]</sup>, 在欠掺杂区存在所谓的赝能隙, 并且存在多种序的交织竞争,

\* 国家重点研发计划 (批准号: 2021YFA1401400)、上海浦江人才计划 (批准号: 21PJ1407200) 和阳阳发展基金资助的课题.

<sup>†</sup> 通信作者. E-mail: xiaoyanxu@sjtu.edu.cn

电荷涨落、反铁磁涨落和库珀对涨落等交织在一起<sup>[11]</sup>, 让问题变得复杂. 而在最佳掺杂超导相以上, 有所谓的奇异金属行为, 在奇异金属中, 电阻与温度的关系偏离费米液体理论所预言的二次方关系, 表现出非费米液体行为. 除了过渡金属氧化物, 在铁基超导、重费米子和过渡金属合金等材料磁序或电荷序相变的边缘, 人们也观测到了比较普遍的费米液体不稳定性, 并发现了奇异金属行为<sup>[12]</sup>. 近年来, 人们对莫尔 (moiré) 超晶格材料中可能存在的强关联电子行为也产生了极大的研究兴趣<sup>[13–18]</sup>. 强关联电子中不仅蕴藏着丰富的物理特性, 其中涌现出的新奇物态更是具有巨大的潜在应用价值. 以具有量子阻挫的莫特绝缘体为例, 其中可能存在具有长程纠缠的量子自旋液体态, 可支持具有非阿贝尔统计的任意子激发<sup>[19]</sup>, 具有用于量子计算的潜力.

尽管强关联电子体系已经发现数十年并且较为普遍存在, 但如何理解其中的物理依然是如今凝聚态物理研究的重要课题. 微扰论的角度是一个非常好的出发点, 可惜很多强关联电子问题却是不可微扰计算的 (本文中后面提到的巡游磁性量子临界问题就是一个非常好的例子), 因而其中一条极其艰难的道路就是寻找强关联电子模型的严格解, 无论是解析上还是数值上的严格解均具有重要意义. 量子蒙特卡罗计算是一类标准的非微扰数值计算方法, 广泛运用于凝聚态和高能物理中. 给定一个体系  $w$ , 在某个特定的表象下给出体系的配分函数  $Z_w = \sum_c w_c$ , 这里给配分函数引入一个下标  $w$ , 用以标记该配分函数是以  $w_c$  标记的权重对所有构型  $c$  的求和, 这一标记对于后面的讨论会有帮助. 对于一个量子问题, 如果可以找到一个表象使得  $w_c$  总是非负实数, 那么  $w_c$  就可以被解释成经典概率, 从而可以设计蒙特卡罗算法来做重要性抽样计算; 如果不考虑可能会出现抽样慢化等问题, 通常这也就意味着找到了一个多项式复杂度的计算方法, 并且通过增加样本数, 大数定理可以保证观测量的误差是可控收敛的. 但是, 对于很多模型我们目前还不知道如何找到表象使得  $w_c$  总是非负实数, 通常的做法就是引入一个具有同样构型空间的参考系统  $v$ , 其配分函数为  $Z_v = \sum_c v_c$ , 它的所有构型的权重  $v_c$  都是非负实数. 依赖这个参考系统的抽样, 观测量可写成  $\langle O \rangle = \langle O \rangle_v / \langle \text{sign} \rangle_v$ ,  $\langle O \rangle_v$  是观测量在该参考系统中的观测值  $\langle O \rangle_v = \sum_c O_c v_c / Z_v$ ;

$\langle \text{sign} \rangle_v$  是所谓的符号观测值, 它等于两个系统配分函数的比值,  $\langle \text{sign} \rangle_v \equiv \frac{Z_w}{Z_v} \sim e^{-\beta N \Delta f}$ , 这里  $\Delta f$  是原始系统和参考系统的自由能密度差, 且通常  $\Delta f \geq 0$  (例如通常取  $v_c = |w_c|$ , 可证  $Z_w \leq Z_v$ ). 可见这个符号观测值通常与系统尺寸成指数关系衰减到零, 使得观测量误差出现指数性的放大. 为了取得可控的蒙特卡罗误差, 样本数也需要指数性地增大, 因此计算复杂度变为指数型, 这就是所谓的负符号问题, 以及人们对它的通常理解. 人们曾经证明如果可以有效解决非确定性多项式 (non-deterministic polynomial, NP) 问题, 那么解决 NP 问题的方案可以用来解决符号问题<sup>[20]</sup>, 这样一来很多强关联电子问题就可以迎刃而解, 然而这还未发生. 但这一点并不表明负符号问题是一个 NP 问题, 并且事实上一些量子多体模型的负符号问题已经被解决, 感兴趣的读者可以参考文献<sup>[21]</sup>中引用的诸多文献.

行列式量子蒙特卡罗方法是一类重要的量子蒙特卡罗算法, 主要用于处理关联电子体系, 特别是定义在晶格上的强关联电子模型. 行列式量子蒙特卡罗方法又称 BSS (Blankenbecler-Scalapino-Sugar) 算法<sup>[22]</sup>, 可以直接用于计算费米子-玻色子耦合格点模型, 也可以用于处理费米子多体相互作用模型, 其中相互作用项可以通过 HS (Hubbard-Stratonovich) 变换转换成费米子与玻色子耦合的形式. 行列式量子蒙特卡罗方法已经广泛运用于强关联电子体系, 比较具有代表性的有求解半满二分晶格上的哈伯德模型<sup>[23–28]</sup>、Kane-Mele-哈伯德模型<sup>[29–31]</sup>、半满近藤模型<sup>[32]</sup>、Holstein 模型<sup>[33,34]</sup>、 $t$ - $V$  模型<sup>[35,36]</sup> 和规范场与费米子物质场耦合模型<sup>[37–39]</sup> 等, 不一而足. 近年来随着对于去负符号的人工设计模型的探索<sup>[40–42]</sup>, 行列式量子蒙特卡罗也推动了巡游磁性量子临界行为的研究.

本文将总结我们在去负符号关联电子模型设计方面的思路, 介绍我们提出的符号边界理论, 并列举几个典型的量子蒙特卡罗计算的具体实例, 包括: 1) 研究巡游磁性量子临界行为, 观测巡游磁性量子临界点上的非费米液体行为, 并在非微扰的数值计算中发现巡游铁磁量子临界区中费米子自能与频率的幂律关系; 2) 研究有节点的 d-波超导和反铁磁序的竞争, 以及可能产生的新的物质相和相变; 3) 研究魔角双层石墨烯相关有效模型中的丰

富物质态. 限于篇幅, 这里无法具体介绍所有无负符号强关联电子问题量子蒙特卡罗计算方向的重要进展, 希望读者可以借助文中引用的一些最新的综述类参考文献 [40–43], 获得一个更为全面的认识. 同时, 本文的侧重点主要分析负符号问题, 因此, 不会重点介绍具体的行列式量子蒙特卡罗算法, 感兴趣的读者可以参考文献 [22, 44, 45]; 对于其中具体模型的计算结果仅做简要介绍, 感兴趣的读者请参考每个模型研究对应的特定文献.

## 2 负符号问题与去负符号关联电子模型的设计

### 2.1 行列式量子蒙特卡罗计算中的负符号问题

接下来将借助于行列式量子蒙特卡罗方法的框架具体讨论负符号问题, 其中的一些结论也可能运用于其他量子蒙特卡罗方法. 以哈伯德模型为例, 介绍行列式量子蒙特卡罗方法的基本思路. 从系统的配分函数出发,  $Z = \text{Tr}(e^{-\beta H})$ , 对虚时作 Trotter 分解, 即把  $\beta$  分成  $L_\tau$  小份, 每小份为  $\Delta_\tau$  ( $\beta = L_\tau \Delta_\tau$ ), 同时把系统哈密顿量  $H$  写成无相互作用和相互作用两部分,  $H = H_0 + H_1$ . 在  $\Delta_\tau$  很小时, 可作近似  $e^{-\Delta_\tau H} \approx e^{-\Delta_\tau H_0/2} e^{-\Delta_\tau H_1} e^{-\Delta_\tau H_0/2}$ , 其中对于相互作用部分  $H_1 = U \sum_i (n_{i\uparrow} - \frac{1}{2})(n_{i\downarrow} - \frac{1}{2})$ , 作 HS 变换  $e^{-U \Delta_\tau (n_{i\uparrow} - \frac{1}{2})(n_{i\downarrow} - \frac{1}{2})} = \lambda \sum_{s_{i,l} = \pm 1} e^{\alpha s_{i,l} (n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow} - 1)}$ . 这里  $\alpha = \text{acosh}(e^{-\frac{1}{2} U \Delta_\tau})$ ;  $\lambda = \frac{1}{2} e^{\frac{1}{4} U \Delta_\tau}$ ,  $U$  是相互作用强度,  $n_{i\uparrow}$  和  $n_{i\downarrow}$  分别是  $i$  格点上的上自旋和下自旋的密度算符;  $s_{i,l}$  为辅助场,  $i$  是空间格点指标,  $l$  是虚时格点指标. 方便起见, 记无相互作用部分哈密顿量  $H_0$  的费米子双线性项的系数矩阵为  $\mathbf{K}$ , 记 HS 变换后相互作用部分哈密顿量  $H_1$  的费米子双线性项系数矩阵为  $\mathbf{V}_l$ , 并引入虚时演化矩阵  $\mathbf{B}_l = e^{-\Delta_\tau \mathbf{K}/2} e^{\mathbf{V}_l} e^{-\Delta_\tau \mathbf{K}/2}$ . 由于 HS 变换之后系统中只含有费米子双线性项, 费米子自由度可以很容易地被求迹掉 [22,45],  $Z = \sum_{\{s_{i,l}\}} w_b[\{s_{i,l}\}] w_f[\{s_{i,l}\}]$ , 其中  $w_f[\{s_{i,l}\}] = \det(\mathbf{I} + \mathbf{B})$ ,  $w_b[\{s_{i,l}\}] = \lambda^N e^{-\alpha \sum_{i,l} s_{i,l}}$ ,  $\mathbf{B} = \prod_l \mathbf{B}_l$ . 显然对于吸引相互作用  $U < 0$ ,  $\alpha$  是一个实数, 所以  $w_b[\{s_{i,l}\}] > 0$ ; 对于费米子部分, 假设  $H_0$  部分是自旋等价的且只含有实数, 那么  $w_f[\{s_{i,l}\}]$  可以写成两个相等的实数行列式的平方, 所以也是非负实数. 可见吸引相互作用的哈伯德模型通常是

没有负符号问题的. 对于排斥相互作用  $U > 0$ ,  $\alpha$  是一个纯虚数,  $w_b[\{s_{i,l}\}], w_f[\{s_{i,l}\}]$  通常都不是非负实数, 我们只能证明在特殊情况下, 例如在二分晶格上仅具有不同子格间跃迁且半填充的时候是没有负符号问题的. 以上讨论都是基于我们用的特定的 HS 变换, 对于不同的 HS 变换, 负符号问题的表现通常会不同. 但需要说明的一点是, 对于具有一般填充的排斥相互作用的哈伯德模型, 目前还没有找到一个可行的 HS 变换来完全避免负符号问题.

### 2.2 去负符号关联电子模型的设计思路

近年来人们对于负符号问题的理解取得了很多重要进展, 特别是在寻找对称性或者数学操作用来规避负符号问题方面有了很多新的见解, 其中较为普遍的是反么正对称性的使用 [46–49]. 我们继续在行列式量子蒙特卡罗方法的框架下来讨论, 假设 HS 变换之后所有的费米子双线性算符均满足粒子数守恒, 记为  $\hat{h}_l(c)$ . 可以证明, 如果存在反么正算符  $\mathcal{U}$ , 且  $\mathcal{U}^2 = -1$ , 对任意的费米子双线性算符  $\hat{h}_l(c)$  均满足  $\mathcal{U} \hat{h}_l \mathcal{U}^{-1} = \hat{h}_l$ , 那么  $W(c) = \text{Tr}[\prod_l e^{\hat{h}_l(c)}] = \det(\mathbf{I} + \mathbf{B}) \geq 0$ . 详细证明可以参考文献 [49].

这一无负符号问题的充分条件在设计人工去负符号问题关联电子模型方面具有较为广泛的指导意义. 比如对于一个单轨道且考虑费米子自旋的晶格模型, 在 HS 变换之后, 粒子数守恒的费米子双线性算符记为  $c^\dagger h c$ , 可以通过给定一个反么正算符来约束费米子双线性算符的形式. 比如给定反么正算符  $\mathcal{U} = i\sigma^2 \mathcal{K}$  ( $\mathcal{U}^2 = -1$ ,  $i$  为虚数单位,  $\sigma^{i=1,2,3}$  为泡利矩阵,  $\mathcal{K}$  为复共轭操作), 与该反么正算符对易的费米子双线性算符在自旋空间具有通式  $h \sim \sigma^0 + i\sigma^1 + i\sigma^2 + i\sigma^3$ , 这里省去了泡利矩阵前的实数系数和格点指标,  $\sigma^0$  表示单位矩阵. 符合该通式的模型就是没有负符号问题的. 2.1 节提到的吸引相互作用的哈伯德模型, 其 HS 变换后的费米子双线性项  $h \sim \sigma^0$  就符合以上通式, 所以从这个角度看也是没有负符号问题的. 这种讨论可以很容易推广到更多轨道问题, 比如对于一个两轨道问题, 可供选择的反么正且  $\mathcal{U}^2 = -1$  的算符有  $\mathcal{U} = i\sigma^{02} \mathcal{K}$ ,  $\mathcal{U} = i\sigma^{12} \mathcal{K}$  和  $\mathcal{U} = i\sigma^{23} \mathcal{K}$ , 这里  $\sigma^{ij} = \sigma^i \otimes \sigma^j$ , 额外引入的泡利矩阵用于表示轨道自由度. 利用这一规则规避负符号问题的例子很多, 比如在文献 [50]

中, 费米子双线性算符具有  $\sigma^{00} + \sigma^{11} + \sigma^{12} + \sigma^{13}$  的形式, 与反么正算符  $i\sigma^{32}\mathcal{K}$  对易; 在文献 [51] 中, 费米子双线性算符具有  $\sigma^{00} + \sigma^{03}$  的形式, 与反么正算符  $i\sigma^{20}\mathcal{K}$  对易; 在文献 [52] 中, 费米子双线性算符具有  $\sigma^{00} + \sigma^{01} + \sigma^{02}$  的形式, 与反么正算符  $i\sigma^{21}\mathcal{K}$  对易.

同时, 还要补充一点, 对于二分晶格体系上具有粒子空穴对称性的模型, 有时可以通过部分粒子空穴变换来获得无负符号的费米子双线性算符形式. 例如对于二分晶格上半填充排斥相互作用的费米子哈伯德模型, 如果仅有不同子格间跃迁, 那么可以重新定义费米子产生和湮灭算符, 例如定义新的上自旋湮灭算符  $\tilde{c}_{i,\uparrow} = c_{i,\uparrow}$ , 新的下自旋湮灭算符  $\tilde{c}_{i,\downarrow} = (-)^i c_{i,\downarrow}^\dagger$ , 新的产生算符由新的湮灭算符取厄密共轭得到, 在该定义下跃迁部分的形式不变, 相互作用部分从  $\frac{U}{2} \sum_i (n_{i,\uparrow} + n_{i,\downarrow} - 1)^2$  变为  $\frac{U}{2} \sum_i (\tilde{n}_{i,\uparrow} - \tilde{n}_{i,\downarrow})^2$ , 当 HS 变换到新的“自旋”通道时费米子双线性算符在自旋空间具有  $\sigma^0 + i\sigma^3$  的形式, 与反么正算符  $i\sigma^2\mathcal{K}$  对易, 因而没有负符号问题.

自从 2013 年以来, 又发现了更多类型对称保护的无负符号问题. 首先是半满的自旋极化的具有排斥相互作用的电子模型 ( $t$ - $V$  模型) 的负符号问题被通过所谓的费米口袋方法所解决 [53]. 之后又发现了更多新的框架可解决  $t$ - $V$  模型的负符号问题, 包括连续时间蒙特卡罗 [54] 以及突破性地采用 Majorana 表象 [35] 等, 更有意思的是这些新的框架显示了一定的可拓展性, 可用于解决一些其他类型模型的负符号问题. 这些发展也启发了后续总结和发现分裂正交群 [36]、Majorana 时间反演 [55]、Majorana 反射正性 [56]、半群 [57]、赝么正群 [39] 等一系列无负符号问题指导规则, 限于篇幅我们不能一一介绍.

### 2.3 符号边界理论

尽管规避负符号问题的指导规则非常有用, 但是还有很多重要模型的负符号问题没有得到解决, 极具代表性的有一般填充的排斥相互作用哈伯德模型、 $t$ - $J$  模型等. 因此, 很有必要搞清楚负符号问题本身的特性, 可惜人们在这方面的见解还很有限.

正如引言中的说明, 人们通常认为如果无法找到一个表象使得任意构型的权重都是非负的, 那么需要引入权重非负的参考系统, 在参考系统中符号

测量平均值会随着系统大小指数衰减为零. 然而, 我们近期的研究发现符号测量平均值的行为是很丰富的, 在一些情况下呈指数衰减, 而在另外一些情况下却可以是多项式衰减 [58]. 基于此, 我们提出了符号边界理论 [21], 认为低温下符号问题的表现与原始系统以及参考系统的基态能量和基态简并度有关, 这建立了负符号问题与模型本身物理性质的直接联系, 对于规避、减轻、甚至运用负符号问题均具有重要意义.

具体来说, 考虑一个有能隙的厄密体系 (蒙特卡罗计算中考虑的有限大小体系都是有能隙的), 其配分函数在低温极限下与系统的基态能量  $E_w$  和基态简并度  $g_w$  的关系为:  $Z_w = g_w e^{-\beta E_w}$ . 假设原始体系是有负符号问题的, 引入参考体系  $v$ , 并假设可以找到它对应的物理系统, 其基态能量为  $E_v$ , 基态简并度为  $g_v$ , 则参考体系中符号测量值在低温极限下为  $\langle \text{sign} \rangle_v \equiv \frac{Z_w}{Z_v} = \frac{g_w e^{-\beta E_w}}{g_v e^{-\beta E_v}}$ . 在计算中, 通常定义参考系统的权重为  $v = |\Re w|$ , 这里  $\Re w$  表示取  $w$  的实部, 但是寻找  $|\Re w|$  对应的物理系统是很困难的, 实际发现权重为  $|w|^2$  或者  $|w|$  的参考系统可能更容易找到其对应的物理系统. 利用关系  $\langle \Re w \rangle \leq \langle |\Re w| \rangle \leq \langle |w| \rangle$  (不带下标的  $\langle \cdot \rangle$  表示算术平均, 有时可以从体系  $w$  中分离出一个依赖构型的归一化因子,  $w_c \rightarrow p_c w_c$ , 参考系统中也分离出同样的归一化因子,  $v_c \rightarrow p_c v_c$ , 其中  $p_c \geq 0$ , 且  $\sum_c p_c = 1$ , 此时  $\langle \cdot \rangle$  表示在该归一化因子  $p_c$  下的加权平均 [21]), 可以得到符号测量值的不等关系为

$$\frac{g_w e^{-\beta E_w}}{\sqrt{g_{|w|^2} e^{-\beta E_{|w|^2}}}} \leq \langle \text{sign} \rangle_{|\Re w|} \leq 1, \quad (1)$$

$$\frac{g_w e^{-\beta E_w}}{g_{|w|} e^{-\beta E_{|w|}}} \leq \langle \text{sign} \rangle_{|\Re w|} \leq 1. \quad (2)$$

以上关系意味着: 1) 如果  $E_w = E_v$ , 符号的测量值的边界仅与两个系统的基态简并度比值有关, 而系统的基态简并度通常可能只是系统大小的多项式函数; 2) 如果  $E_w \neq E_v$ , 符号测量值指数趋于零; 3) 通过对符号的有限尺度行为分析和参考系统的基态能量和基态简并度的计算, 可以反推系统的基态性质.

在第 5 节中, 结合 (1) 式和 (2) 式, 构造了两类模型, 其参考系统与目标系统的基态能量相等, 并

且基态简并度是系统尺寸的多项式函数,因而具有代数符号边界行为. 需要指出,如何从一般意义上构造与目标系统具有相同基态能量的参考系统是极其困难的问题,也是后续研究努力的方向之一.

### 3 去负符号自旋-费米子耦合模型

#### 3.1 巡游磁性量子临界行为

巡游磁性量子临界现象通常发生在铜基和铁基超导、重费米子以及过渡金属合金中磁性连续相变的边缘,在巡游磁性量子临界区里准粒子权重随着温度降低趋于零,说明在这里面建立在准粒子图像上的费米液体理论不再适用,表现出非费米液体行为,又称奇异金属行为. 解析上的工作可以追溯到著名的基于单圈图计算的 Hertz-Millis-Moriya 理论框架<sup>[59-61]</sup>,在这一框架下,无论动力学临界指数  $z = 2$  (对应反铁磁情况),还是  $z = 3$  (对应铁磁或者向列序的情况),当维度  $d \geq 2$  时,  $d + z$  总是大于等于上临界维度 4,因此它会预言平均场型的临界指数. 虽然单圈图计算对于费米液体是可靠的,但对于非费米液体却还未有定论. 对于巡游铁磁量子临界问题,二阶微扰理论发现费米子自能具有  $\omega^{2/3}$  的形式,数幂次也表明在任意阶微扰都能重现费米子自能的  $\omega^{2/3}$  形式<sup>[62]</sup>,并且早期人们相信大  $N$  展开可以让任意阶的微扰收敛可控<sup>[63-65]</sup>,似乎问题已经解决. 但是来自 McMaster 大学的 Lee<sup>[66]</sup> 发现了前人遗漏的一类费曼图使得大  $N$  展开不再是收敛的,所以巡游铁磁量子临界问题仍然是未解之谜. 后续的代表性工作还包括更多圈图的计算,发现可能存在的对数修正<sup>[67]</sup>. 对于巡游反铁磁量子临界问题,微扰重整化群的计算<sup>[68,69]</sup> 发现了反常维度的存在,且动力学临界指数显示出偏离  $z = 2$ . 这些解析工作极大推动了我们对于巡游磁性量子临界问题的理解. 在数值上,一般填充的哈伯德模型等强关联电子模型在已知的量子蒙特卡罗计算框架下是有负符号问题的,因此直接通过求解这些关联电子模型来获得巡游磁性量子临界问题的非微扰的数值理解目前还不可行. 但这并不表明我们无法取得任何进展,特别是如果我们主要只关心巡游磁性量子临界区里的普适物理,那么可以忽略很多材料细节,设计出一个有效模型,它描写了巡游费米子和磁性涨落的耦合,同时还可以设计成无负符号问题. 有了这样的无负符号问题的自

旋-费米子耦合模型,通过研究它们的相图,找出量子临界点的位置,就可以具体研究巡游量子临界点上的普适性质. 这一数值研究的路径似乎是很完美的,2012年 Berg 等<sup>[50]</sup> 发表在科学杂志上的工作以及后续工作<sup>[70,71]</sup> 首次进行了这样的尝试. 然而可惜的是在这些研究中巡游磁性量子临界区被很大的超导区域掩盖,从而难以研究临界点本身的性质. 可见,设计一个超导区域被极大压制的巡游磁性量子模型是很有必要的. 接下来将介绍我们围绕这个方向进行的探索<sup>[51]</sup>.

在介绍反么正对称性保护无负符号问题中,提到费米子双线性算符具有  $\sigma^{00} + \sigma^{03}$  的形式是没有负符号问题的,这一形式可用于设计费米子与伊辛自旋耦合格点模型. 这是一个两轨道简并的模型,并且对于每个自旋均具有一个轨道空间的  $U(2)$  对称性,即体系的对称性为  $U(2) \times U(2) \times Z_2$ , 这里的  $Z_2$  是伊辛对称性. 并且发现,其中最易于发生配对的通道是两分量的轨道单态-自旋三重态,由于在我们的模型中自旋仅有  $U(1)$  对称性,轨道单态-自旋三重态在有限温是可以存在的,但在很低的温度下都没有发现超导转变,表明这个模型非常适合用来研究量子临界点的性质. 具体的晶格模型为  $H = H_f + H_b + H_c$ , 其中  $H_f$  是费米子项,描写了晶格上费米子的跃迁,费米面的大小由化学势  $\mu$  来调控,

$$H_f = - \sum_{\langle i,j \rangle} t_{ij} (c_i^\dagger \sigma^{00} c_j + \text{h.c.}) - \mu \sum_i n_i;$$

$H_b$  是横场伊辛项,伊辛量子涨落由横场和伊辛自旋相互作用的比值  $h/J$  来调控,

$$H_b = J \sum_{\langle i,j \rangle} Z_i Z_j - h \sum_i X_i;$$

$H_c$  是耦合项,伊辛自旋涨落和费米子的耦合由  $\xi$  来调控,

$$H_c = -\xi \sum_i Z_i (c_i^\dagger \sigma^{03} c_i).$$

这里,费米子算符  $c_i$  是四分量的 (两自旋和两轨道),  $i$  是格点指标;  $n_i = c_i^\dagger \sigma^{00} c_i$  是单格点密度算符;  $X, Y, Z$  表示自旋算符的 3 个分量. 根据  $J$  的正负可以研究反铁磁或铁磁的情况.  $h/J$  可以调控伊辛自旋的磁有序到无序的相变,通过耦合项,费米子也会发生磁有序到无序的相变. 计算发现,耦合项会驱动磁性相变偏离普通的伊辛相变,实现巡游磁性量子临界点.

### 3.2 反铁磁自旋-费米子模型中的非费米液体行为

首先考虑  $J > 0$ , 即反铁磁的情况, 并且选择类似铜基超导材料的费米面. 费米面上被  $Q = (\pm\pi, \pm\pi)$  联系的热点附近的物理是我们关注的, 为了更有效地抓住这部分的物理, 我们提出了动量选择的超大尺寸 (EMUS) 量子蒙特卡罗方法<sup>[72]</sup>. 图 1(a) 是巡游反铁磁量子临界模型示意图<sup>[73]</sup>, 其中  $\lambda = 1, 2$  是上下层 (轨道) 指标, 费米子仅在层 (轨道) 内跃迁, 中间层为横场伊辛自旋模型, 与上下层 (轨道) 通过自旋相互作用耦合. 图 1(b) 所示为 EMUS 动量空间网络, 其中  $K$  和  $K'$  都是热点, 通过  $(\pm\pi, \pm\pi)$  联系起来, 在 EMUS 的框架下, 只关注热点附近的费米子, 从而大大减少了参与计算的费米子自由度. 图 1(c) 是巡游反铁磁量子临界模型的相图, DQMC 表示利用常规行列式量子蒙特卡罗方法计算的结果, EQMC 表示利用 EMUS 计算的结果, 发现虽然 EMUS 给出相变点的位置不同, 但具有和 DQMC 结果类似的临界行为. 此外, 热点附近的准粒子权重随着温度趋于零, 表现出非费米液体行为, 并且通过对自旋关联的标度分析发现可能存在反常维度的修正<sup>[73]</sup>.

### 3.3 铁磁自旋-费米子模型中的非费米液体行为

在巡游反铁磁问题中, 费米面上仅有有限个热点, 而在巡游铁磁中整个费米面都是热点, 这是二者的根本区别. 在巡游铁磁模型的计算中, 发现整

个费米面上的准粒子权重都随温度趋于零, 表现出非费米液体行为. 通过对自旋关联的标度分析发现, 自旋磁化率具有类似 Hertz-Millis 的形式, 并且可能存在反常维度<sup>[51]</sup>. 进一步的数据分析表明, 费米子的自能和频率的关系可以很好地被修正的 Eliashberg 理论所描述<sup>[74]</sup>, 有限温费米子的自能可以分成两部分. 其中一部分来自于热涨落的贡献, 在低频下具有类似  $1/\omega_n$  的行为, 如图 2(b) 所示; 另一部分来自于量子贡献, 在低频极限下逼近费米子自能和频率的  $2/3$  幂律行为, 如图 2(c) 所示.

## 4 非常规超导无负符号问题模型

在强关联体系中非常规超导的出现通常伴随着和磁序的交织竞争, 因此非微扰地理解非常规超导和磁序间可能存在的相变是非常重要的. 非常规超导可以通过掺杂莫特绝缘体来实现, 比如铜基中有节点的 d-波超导. 从数值计算的角度来说, 这是非常具有挑战性的. 同时考虑关联和掺杂通常会带来负符号问题, 因此数值上还不能非微扰地研究有节点的超导和反铁磁序的竞争. 但是需要注意的是有节点的 d-波超导和反铁磁的实现并不一定需要掺杂, 因此可能存在半满的无负符号问题的关联电子模型可以实现它们的竞争. 从实验上来说, 人们的确发现一些材料在压力调控下可以实现反铁磁莫特绝缘体到非常规超导的转变<sup>[75–80]</sup>.

图 3(a) 是 d-波超导和反铁磁竞争晶格模型示意图<sup>[81]</sup>. 考虑方格子上的关联电子模型, 为了实现

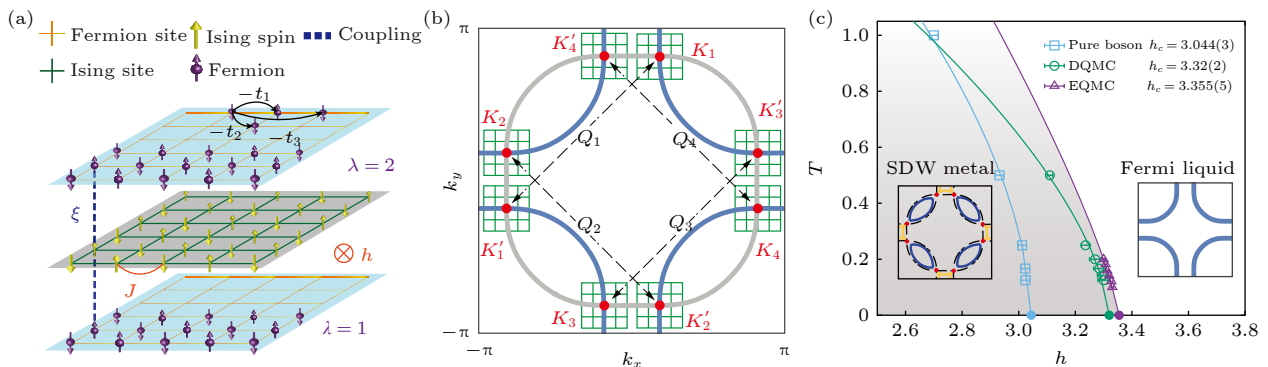


图 1 巡游反铁磁量子临界晶格模型和计算结果<sup>[73]</sup> (a) 巡游反铁磁量子临界模型示意图; (b) EMUS 动量空间网格; (c) 巡游反铁磁量子临界模型的相图

Fig. 1. Itinerant antiferromagnetic quantum critical lattice model and results<sup>[73]</sup>: (a) Schematic diagram of itinerant antiferromagnetic quantum critical lattice model; (b) momentum mesh for EMUS; (c) phase diagram of itinerant antiferromagnetic quantum critical lattice model.

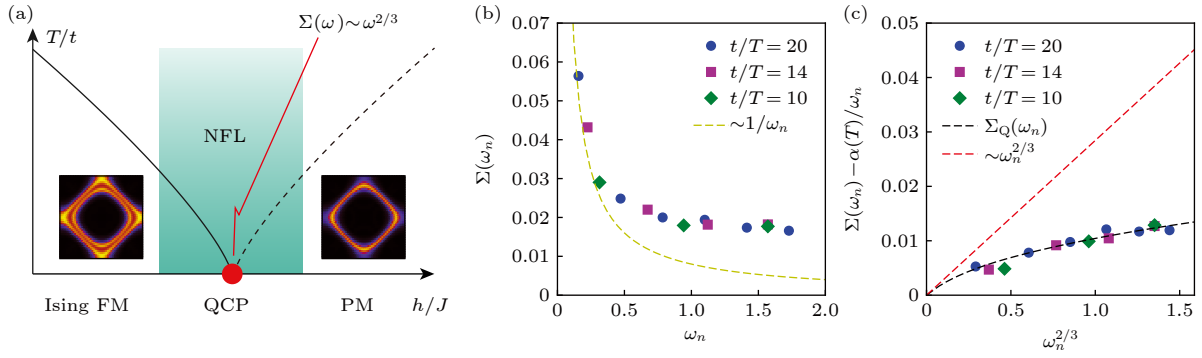


图2 巡游铁磁量子临界晶格模型计算结果<sup>[74]</sup> (a) 巡游铁磁量子临界晶格模型示意图; (b) 巡游铁磁量子临界点上费米子自能虚部和频率的关系; (c) 扣除热涨落的贡献之后, 费米子自能虚部与频率的关系

Fig. 2. Results of itinerant ferromagnetic quantum critical lattice model<sup>[74]</sup>: (a) Schematic phase diagram of itinerant ferromagnetic quantum critical lattice model; (b) the relation between imaginary part of fermionic self-energy at itinerant ferromagnetic quantum critical point and Matsubara frequency; (c) after deducting the thermal effect, the relation between the imaginary part of the fermionic self-energy at itinerant ferromagnetic quantum critical point and Matsubara frequency.

莫特绝缘体, 哈密顿量的一部分是仅有最近邻跃迁的半满哈伯德模型,  $H_t + H_U = -t \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} (c_{i, \sigma}^\dagger c_{j, \sigma} + \text{h.c.}) + \frac{U}{2} \sum_i (\rho_{i, \uparrow} + \rho_{i, \downarrow} - 1)^2$ , 这里  $\rho_{i, \sigma}$  是格点  $i$  上自旋为  $\sigma$  ( $\uparrow$  或  $\downarrow$ ) 的密度算符. 为了描述 d-波超导, 引入了玻色子自由度, 具体来说引入一个量子转子哈密顿量, 用来描写库珀对的涨落,  $H_{XY} = K \sum_{\langle ij \rangle} n_{ij}^2 - J \sum_{\langle ij, il \rangle} \cos(\theta_{ij} - \theta_{il})$ , 其中  $n_{ij}$  是转子的角动量;  $e^{\pm i\theta_{ij}}$  具有库珀对产生湮灭的意义,  $[n_{ij}, e^{\pm i\theta_{ij}}] = \pm e^{\pm i\theta_{ij}}$ . 最后把库珀对的涨落和费米子库珀对算符耦合起来,  $H_V = V \sum_{\langle ij \rangle} [\tau_{ij} e^{i\theta_{ij}} \times (c_{i, \uparrow}^\dagger c_{j, \downarrow}^\dagger - c_{i, \downarrow}^\dagger c_{j, \uparrow}^\dagger) + \text{h.c.}]$ , 其中  $\tau_{i, i \pm \hat{x}} = 1$ ,  $\tau_{i, i \pm \hat{y}} = -1$ . 如上构造的哈密顿量  $H = H_t + H_U + H_{XY} + H_V$  具有哈伯德模型同样的对称性, 包括自旋  $SU(2)$  对称、电荷  $U(1)$  对称. 其中电荷  $U(1)$  对称称为  $c_{i, \sigma} \rightarrow c_{i, \sigma} e^{i\phi}$ ,  $\theta \rightarrow \theta + 2\phi$ . 该模型还具有粒子空穴对称性,  $c_{i, \sigma} \rightarrow \epsilon_i c_{i, \sigma}^\dagger$ ,  $\theta \rightarrow -\theta$ . 尤其重要的是该模型还具有一个反么正对称性  $\mathcal{U}$ :  $c_{i, \uparrow} \rightarrow \epsilon_i c_{i, \downarrow}^\dagger$ ,  $c_{i, \downarrow} \rightarrow -\epsilon_i c_{i, \uparrow}^\dagger$ ,  $i \rightarrow -i$ , 且  $\mathcal{U}^2 = -1$ , 使得没有负符号问题. 具体到蒙特卡罗计算, 首先重新定义费米子基  $\tilde{c}_{i, \uparrow} = c_{i, \uparrow}$ ,  $\tilde{c}_{i, \downarrow} = (-)^i c_{i, \downarrow}^\dagger$ , 在该定义下跃迁部分的形式不变 (在自旋/子格空间为  $\sigma^{01}$ ), 哈伯德相互作用通过 HS 变换到新的基底下的“自旋”通道 (在自旋/子格空间为  $i\sigma^{30}$ ), 耦合项部分的形式变为  $(\sigma^{22} + \sigma^{12})$  (自旋/子格空间), 因此费米子双线性算符均与反么正算符  $\mathcal{U} = i\sigma^{20}K$  对易, 且  $\mathcal{U}^2 = -1$ , 故没有负符号问题.

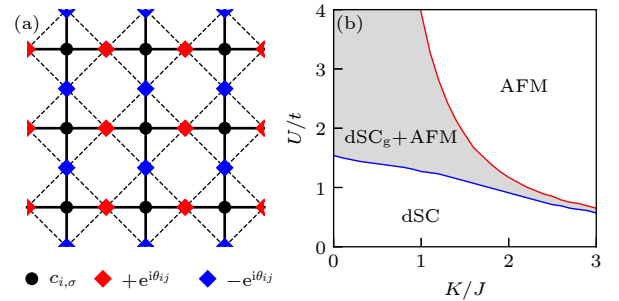


图3 d-波超导和反铁磁竞争晶格模型<sup>[81]</sup> (a) 模型示意图 (黑色圆点表示费米子格点, 上面定义了一个仅有最近邻跃迁的哈伯德模型; 菱形点上定义了量子转子模型, 红色和蓝色表示转子与费米子横向和纵向库珀对算符的耦合具有相反的相位); (b)  $V/t = 0.5$  时, 模型的平均场相图

Fig. 3. Lattice model with competition of d-wave superconductivity and antiferromagnetic<sup>[81]</sup>: (a) Schematic diagram of the lattice model (The black dots denote fermion sites, inside is a Hubbard model with only nearest neighbor hopping. A quantum rotor model is defined on diamond points, where red and blue colors denote opposite phase of the coupling between the rotors and the cooper pairing operator along horizontal direction and the vertical direction); (b) the mean-field phase diagram of the model at  $V/t = 0.5$ .

通过考虑几种特殊情况可以获得以上模型相图的初步认识. 当  $U/t \gg 1$  且  $K/J \gg 1$ , 体系处于反铁磁态; 当  $U/t \ll 1$  且  $K/J \ll 1$ , 体系处于 d-波超导态. 平均场的计算也表明了这一点, 如图 3(b) 所示, 除了反铁磁态 (AFM) 和 d-波超导态 (dSC), 还存在一个有能隙的 d-波超导和反铁磁共存态 (dSC<sub>g</sub>+AFM).

由于该模型没有负符号问题, 进一步进行量子蒙特卡罗计算, 确认了 dSC<sub>g</sub>+AFM 态的存在, 更

有意思的是发现  $dSC_g+AFM$  态到反铁磁态的相变属于 3 维  $XY$  相变,  $d$ -波超导态到  $dSC_g+AFM$  态的相变可以被 Heisenberg-Gross-Neveu 理论所描述.

## 5 量子莫尔材料关联电子模型

通过晶格失配或者转角产生莫尔势场对电子态的调控是近几年的热点问题 [13, 14]. 目前得到热点关注的石墨烯和过渡金属二硫化物莫尔体系的莫尔势场的周期通常都在几十个晶格常数的量级, 由于能带折叠和杂化, 费米面附近出现窄带, 电子动能受到压制, 相互作用的效果显现出来. 比如在转角双层石墨烯中, 当转角在所谓的魔角 (约为  $1.1^\circ$ ) 附近时, 库仑相互作用大概为 25 meV 左右, 而根据能带计算费米面附近的能带带宽在 10 meV 以下, 可见体系可能处在一个中间到强关联的区域 [82]. 魔角双层石墨烯的另一个显著特征是由于电子态的拓扑性质而缺乏一个尽可能对称且简洁的紧束缚的描述 [83–85]. 在魔角双层石墨烯的早期研究中主要考虑关联效应, 发现定义在蜂窝晶格上的团簇电荷关联模型可能是一个出发点 [85, 86], 更进一步的理论分析发现在团簇电荷相互作用的基础上, 还需要考虑修正 [82], 这一修正显著改变了基态的相图, 可能用于理解半满的魔角石墨烯的基态. 除了实空间模型, 另一条互补的路径是考虑动量空间的模型 [87, 88, 21]. 基于 Bistritzer-MacDonald 模型 [89], 仅考虑费米面附近的四条窄带 (谷自由度 (又称为轨道自由度) 和子格自由度) 以及自旋自由度, 并考虑相互作用在这四条窄带上的投影, 这样构造的模型在粒子空穴对称近似和半满情况下也是没有负符号问题的.

### 5.1 团簇电荷关联模型

接下来介绍团簇电荷关联模型 [85, 86, 90, 91]. 团簇电荷关联模型的建立与魔角双层石墨烯的瓦尼尔函数形状有关. 如果将瓦尼尔函数的中心放在一个三角格子上, 那么布洛赫波函数在  $K$  点和  $\Gamma$  点应该具有同样的对称变换性质, 而计算表明  $K$  点和  $\Gamma$  点上布洛赫波函数属于不同的表示, 恰好可以将瓦尼尔函数的中心放在一个蜂窝格子上, 尽管粒子数密度的中心是在蜂窝格子的对偶格子 (三角格子) 上 [83–85]. 这种瓦尼尔函数具有指尖陀螺的形

状, 使得在位、近邻、次近邻和次次近邻相互作用都很重要. 团簇电荷关联模型可以将这些相互作用都囊括其中. 具体来说我们考虑的团簇电荷关联模型是定义在一个蜂窝晶格上. 把每个最小六角单元 (用  $P$  标记) 上各格点电荷之和定义为团簇电荷  $Q_P = \frac{1}{3} \sum_{i \in P} \rho_i$ ; 团簇电荷相互作用项为  $H_U = U \sum_P (Q_P - \nu)^2$ . 分别考虑了单谷和双谷模型, 分别对应只考虑一个谷自由度和两个谷自由度的情况.  $\rho_i$  是电子数密度算符, 对于单轨道模型, 定义  $\rho_i = c_i^\dagger \sigma^0 c_i$ ; 对于双轨道模型, 定义  $\rho_i = c_i^\dagger \sigma^{00} c_i$ . 文献 [86] 中, 我们考虑电子动能部分简单被最近邻跃迁描述, 研究此时该模型本身可以实现什么样的基态. 对于半填充的情况, 如果定义  $\tilde{c}_{i,\uparrow} = c_{i,\uparrow}$ ,  $\tilde{c}_{i,\downarrow} = (-)^i c_{i,\downarrow}$ , 那么在 HS 变换之后, 费米子双线性算符在自旋空间具有形式  $\sigma^0 + i\sigma^3$ , 与反么正算符  $U = i\sigma^2 \mathcal{K}$  对易, 且  $U^2 = -1$ , 所以是没有负符号问题的. 通过量子蒙特卡罗计算, 发现对于单谷模型, 增大相互作用体系实现从狄拉克半金属态 (SM) 到具有 Kekulé 图案的柱状价键固体态 (cVBS) 转变, 进一步增大相互作用体系进入反铁磁绝缘体态 (AFMI) (如图 4(a) 和图 4(b) 所示); 对于双谷模型增大相互作用体系从 SM 到块状价键固体态 (pVBS), 进一步增大相互作用体系进入 cVBS 态 (如图 4(c) 和图 4(d) 所示).

### 5.2 修正的团簇电荷关联模型

Kang 和 Vafeek [82] 进一步指出在团簇电荷相互作用之外, 还有修正项, 这一修正项来源于近邻瓦尼尔函数的交叠. 修正后的相互作用部分具有形式  $H_U = U \sum_P (Q_P + \alpha T_P - \nu)^2$ ,  $T_P$  是定义在最小六角单元上的跃迁,  $T_P = \sum_{j \in P, \lambda} e^{i\eta_{j,\lambda}} c_{j+1,\lambda}^\dagger c_{j,\lambda} + \text{h.c.}$ , 其中隐含了对自旋指标的求和,  $\lambda$  标记了谷自由度,  $e^{i\eta_{j,\lambda}} = (-)^{j-1} e^{i(-)^{j-1} \theta_\lambda}$ ,  $\theta_{\lambda=1} = -\theta_{\lambda=2} = \theta$ . 这里的  $\theta_\lambda$  可以通过对瓦尼尔函数的  $U(1)$  变换吸收掉. 定义  $\tilde{c}_{j,\uparrow} = c_{j,\uparrow}$ ,  $\tilde{c}_{j,\downarrow} = (-)^j c_{j,\downarrow}^\dagger$ , 考虑半填充, 那么 HS 变换后的费米子双线性算符在自旋/谷/子格空间具有  $i\sigma^{300} + i\sigma^{332} \sin\theta + i\sigma^{001} \cos\theta$  的形式, 与反么正算符  $U = i\sigma^{203} \mathcal{K}$  对易, 且  $U^2 = -1$ , 所以是没有负符号问题的. 在这基础上加上子格间的动能跃迁项 (具有  $\sigma^{001}$  的形式), 同时取  $\theta = \pi/2$  时, 则与反么正算符  $U = i\sigma^{210} \mathcal{K}$  对易, 且  $U^2 = -1$ , 所以也是没有负符号问题的. 修正项极大改变了团簇电

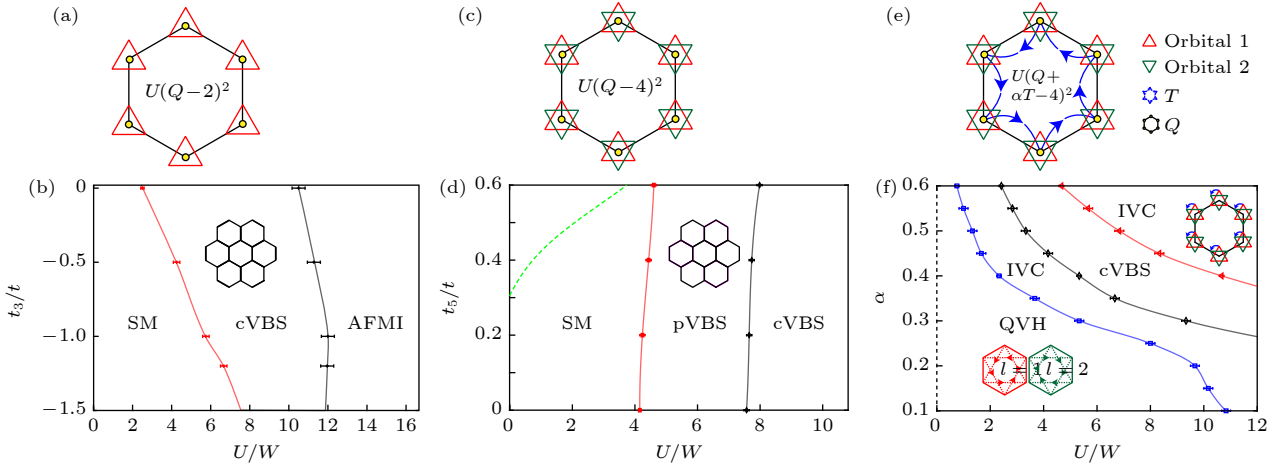


图 4 团簇电荷关联模型示意图 (a), (c), (e) 和相图 (b), (d), (f)<sup>[92]</sup> (a), (b) 单谷 (轨道) 模型; (c), (d) 双谷 (轨道) 模型; (e), (f) 修正后的双谷 (轨道) 模型

Fig. 4. Schematic diagram (a), (c), (e) and phase diagram (b), (d), (f) of cluster charge correlation model<sup>[92]</sup>: (a), (b) Single-valley (orbital) model; (c), (d) two-valley (orbital) model; (e), (f) modified two-valley (orbital) model.

荷的基态相图 (如图 4(e) 和图 4(f) 所示), 在很弱的相互作用下基态是量子谷霍尔态 (QVH), 增大相互作用体系相继进入谷间相干态 (IVC), cVBS, 以及最终再次进入 IVC. 这丰富的相图可能帮助我们理解魔角双层石墨烯半填充时的基态.

要进一步指出对于修正的团簇电荷关联模型的强耦合极限, 即仅考虑相互作用部分, 对于非半填充是有负符号问题的, 但其  $1/4$  填充时的符号测量值具有代数标度行为<sup>[58]</sup>. 这一代数标度行为可以由我们提出的符号边界理论加以理解.

这里给出符号边界理论的一个推论<sup>[21]</sup>: 考虑一个哈密顿量其动能部分为  $K$ , 其相互作用部分具有半正定的形式  $\sum_A (A - \mu)^2$ , 其中  $K$  和  $A$  都是费米子双线性算符,  $\mu$  是化学势. 如果对于某个特定的  $\mu$  没有负符号问题, 那么在低温下, 符号测量值的平均值  $\langle \text{sign} \rangle_{|\mathfrak{R}w|} \geq \frac{g_w e^{-\beta E_w}}{g_{|w|} e^{-\beta E_{|w|}}}$ , 其中  $|w|$  对应于没有负符号问题的系统 (特定的  $\mu$ ). 如果  $E_w = E_{|w|}$ , 那么  $\langle \text{sign} \rangle_{|\mathfrak{R}w|} \geq g_w / g_{|w|}$ .

对于强耦合极限下修正的团簇电荷关联模型, 其半填充时的基态是能量  $E_{|w|} = 0$  的  $SU(4)$  极化态, 基态可以用两行长度为  $N$  的杨图表示<sup>[88, 93, 94]</sup>, 不可约表示个数可以用钩长公式求出, 所以基态简并度是  $g_{|w|} = (N+3)(N+2)^2(N+1)/12$ ,  $N$  是总格点数; 其  $1/4$  填充时的基态是能量  $E_w = 0$  的  $SU(4)$  极化态, 基态可以用一行长度为  $N$  的杨图表示, 基态简并度是  $g_w = (N+3)(N+2)(N+1)/6$ .

$$\text{因此 } \langle \text{sign} \rangle_{|\mathfrak{R}w|} \geq \frac{2}{N+2}.$$

### 5.3 动量空间关联模型

除了实空间模型, 一条互补的路径就是考虑动量空间关联模型. 在动量空间, 库仑相互作用为  $\sum_{q \neq 0} V(q) \rho_{-q} \rho_q = \sum_{q \neq 0} V(q) \rho_q^\dagger \rho_q$ , 其中  $V(q)$  是库仑相互作用的傅里叶变换形式,  $V(q) = V(-q) > 0$ ;  $\rho_q$  是动量空间密度算符,  $\rho_q = \sum_{k, k'} \delta_{k'-k, q} \times (\lambda_{k, k'}(q) c_k^\dagger c_{k'} - \frac{1}{2} \mu_q)$ ,  $\lambda_{k, k'}(q)$  是所谓的形状因子 (form factors), 并且对于半填充系统有  $\text{Tr}(\lambda(q)) = \mu_q$ ,  $\mu_q$  是化学势的傅里叶变换形式. 接下来考虑平带极限的物理, 此时  $H = \sum_{q \neq 0} V(q) \rho_{-q} \rho_q$ . 为了方便 HS 变换, 把它重写为  $H = \sum_{q \neq 0}' \frac{V(q)}{2} (\rho_{-q} + \rho_q)^2 - (\rho_{-q} - \rho_q)^2$ , 其中  $\sum'$  表示求和仅限于一半的  $q$  取值. HS 变换后费米子双线性算符具有形式  $i(\rho_{-q} + \rho_q)$  和  $(\rho_{-q} - \rho_q)$ , 其中依赖  $V(q)$  和构型的实系数省略没写. 由于其是反厄密的, 且  $\text{Tr}(\lambda(q)) = \mu_q$ , 可以证明其构型权重是实数<sup>[87]</sup>. 实际计算发现, 尽管该模型具有负符号问题, 但其符号问题并不严重, 也可以由符号边界理论加以理解.

这里给出符号边界理论的另一个推论<sup>[21]</sup>: 对于一个相互作用费米子哈密顿量, 如果其蒙特卡罗权重均为实数, 可以通过引入一个额外的  $U(2)$  自由度作为参考系统, 其基态能量为  $E_{|w|}^2$ , 基态简并度为  $g_{|w|}^2$ , 那么对于原始系统其符号平均值  $\langle \text{sign} \rangle_{|w|} \geq g_w e^{-\beta E_w} / \sqrt{g_{|w|}^2 e^{-\beta E_{|w|}^2}}$ . 若  $E_w =$

$E_{|w|^2}/2$ , 那么  $\langle \text{sign} \rangle_{|w|} \geq g_w / \sqrt{g_{|w|^2}}$ .

可以证明对于前述的平带极限动量空间关联模型, 考虑最低对称性即  $\lambda(q)$  是随机时, 其基态能量为 0, 基态简并度为 2, 此时引入额外的  $U(2)$  自由度作为参考系统<sup>[21]</sup>, 也可以证明其基态能量为 0, 基态简并度为  $N+3$ , 因此  $\langle \text{sign} \rangle_{|w|} \geq 2/\sqrt{N+3}$ . 类似地, 对于魔角石墨烯的手性和平带极限, 并考虑自旋极化和谷极化情形,  $\langle \text{sign} \rangle_{|w|} \geq 2/\sqrt{(N+1)^2+2}$ .

## 6 结 语

本文总结了部分去负符号关联电子模型的设计思路, 其中基于反么正对称性的无负符号条件具有广泛的运用场景, 包括设计巡游磁性量子临界模型和非常规超导与磁性序竞争模型等. 总结了最近提出的符号边界理论, 它为负符号问题提供了新的认识, 将负符号问题与模型的物理性质直接联系起来, 指出符号观测值的尺寸依赖是很丰富的, 除了已知的指数衰减行为, 还可以表现出代数衰减行为, 为进一步规避、减轻、甚至运用负符号问题提供了新的方向. 通过列举具体的具有代数符号行为的模型, 说明符号边界理论是可以用于莫尔量子物质等关联电子模型的计算.

通过去负符号的量子蒙特卡罗计算, 可以从非微扰数值的角度加深对于强关联电子体系的理解. 通过设计无负符号巡游磁性量子临界模型, 观察到了巡游磁性量子临界点上的非费米液体行为, 并发现了巡游铁磁量子临界区中费米子自能与频率的幂律关系. 通过设计无负符号的关联电子模型研究了具有节点的 d-波超导到反铁磁的相变, 并发现了其相变普适类. 借助符号边界理论, 还研究了量子莫尔材料关联电子模型中的丰富物态, 可能帮助理解量子莫尔材料中发现的新奇物态.

我们进一步展望, 通过调节原始系统和参考系统的基态能量差, 符号边界理论可能用于减弱很多模型中存在的负符号问题.

特别感谢张栩、潘高培、孟子杨在符号边界理论工作中的合作和讨论. 感谢孟子杨、Patrick Lee、K. T. Law、Tarun Grover、孙锴、戚扬、Fakher Assaad、刘子宏、陈闯、廖元达、潘高培、张栩、Yoni Schattner、Erez Berg、康健、张龙、许岑珂、Avraham Klein、Andrey Chubukov 等老师和同学的有益合作和讨论.

## 参考文献

- [1] Imada M, Fujimori A, Tokura Y 1998 *Rev. Mod. Phys.* **70** 1039
- [2] Benfatto G, Gallavotti G 1990 *J. Stat. Phys.* **59** 541
- [3] Shankar R 1991 *Phys. A: Stat. Mech. Appl.* **177** 530
- [4] Polchinski J 1992 arXiv: hep-th/9210046
- [5] Shankar R 1994 *Rev. Mod. Phys.* **66** 129
- [6] Anderson P W 1987 *Science* **235** 1196
- [7] Zhang F C, Rice T M 1988 *Phys. Rev. B* **37** 3759
- [8] Lee P A, Nagaosa N, Wen X-G 2006 *Rev. Mod. Phys.* **78** 17
- [9] Bednorz J G, Müller K A 1986 *Z. Phys. B:Condens. Matter.* **64** 189
- [10] Keimer B, Kivelson S A, Norman M R, Uchida S, Zaanen J 2015 *Nature* **518** 179
- [11] Fradkin E, Kivelson S A, Tranquada J M 2015 *Rev. Mod. Phys.* **87** 457
- [12] Löhneysen H V, Rosch A, Vojta M, Wölfle P 2007 *Rev. Mod. Phys.* **79** 1015
- [13] Cao Y, Fatemi V, Fang S, Watanabe K, Taniguchi T, Kaxiras E, Jarillo-Herrero P 2018 *Nature* **556** 43
- [14] Cao Y, Fatemi V, Demir A, Fang S, Tomarken S L, Luo J Y, Sanchez-Yamagishi J D, Watanabe K, Taniguchi T, Kaxiras E, Ashoori R C, Jarillo-Herrero P 2018 *Nature* **556** 80
- [15] Chen G, Jiang L, Wu S, Lyu B, Li H, Chittari B L, Watanabe K, Taniguchi T, Shi Z, Jung J, Zhang Y, Wang F 2019 *Nat. Phys.* **15** 237
- [16] Xie Y, Lian B, Jäck B, Liu X, Chiu C L, Watanabe K, Taniguchi T, Bernevig B A, Yazdani A 2019 *Nature* **572** 101
- [17] Lu X, Stepanov P, Yang W, Xie M, Aamir M A, Das I, Urgell C, Watanabe K, Taniguchi T, Zhang G, Bachtold A, MacDonald A H, Efetov D K 2019 *Nature* **574** 653
- [18] Li T, Jiang S, Li L, Zhang Y, Kang K, Zhu J, Watanabe K, Taniguchi T, Chowdhury D, Fu L, Shan J, Mak K F 2021 *Nature* **597** 350
- [19] Kitaev A 2006 *Ann. Phys.* **321** 2
- [20] Troyer M, Wiese U J 2005 *Phys. Rev. Lett.* **94** 170201
- [21] Zhang X, Pan G, Xu X Y, Meng Z Y 2021 arXiv: 2112.06139 [cond-mat.str-el]
- [22] Blankenbecler R, Scalapino D J, Sugar R L 1981 *Phys. Rev. D* **24** 2278
- [23] Hirsch J E 1985 *Phys. Rev. B* **31** 4403
- [24] Scalapino D 2007 *Handbook of High-Temperature Superconductivity* (New York: Springer) pp495-526
- [25] LeBlanc J P F, Antipov A E, Becca F, Bulik I W, Chan G K-L, Chung C M, Deng Y, Ferrero M, Henderson T M, Jiménez-Hoyos C A, Kozik E, Liu X W, Millis A J, Prokof'ev N V, Qin M, Scuseria G E, Shi H, Svistunov B V, Tocchio L F, Tupitsyn I S, White S R, Zhang S, Zheng B X, Zhu Z, Gull E 2015 *Phys. Rev. X* **5** 041041
- [26] Assaad F F, Herbut I F 2013 *Phys. Rev. X* **3** 031010
- [27] Otsuka Y, Yunoki S, Sorella S 2016 *Phys. Rev. X* **6** 011029
- [28] Zhou Z, Wang D, Meng Z Y, Wang Y, Wu C 2016 *Phys. Rev. B* **93** 245157
- [29] Hohenadler M, Lang T C, Assaad F F 2011 *Phys. Rev. Lett.* **106** 100403
- [30] Zheng D, Zhang G M, Wu C 2011 *Phys. Rev. B* **84** 205121
- [31] He Y Y, Wu H Q, You Y Z, Xu C, Meng Z Y, Lu Z Y 2016 *Phys. Rev. B* **93** 115150
- [32] Assaad F F 1999 *Phys. Rev. Lett.* **83** 796
- [33] Chen C, Xu X Y, Meng Z Y, Hohenadler M 2019 *Phys. Rev. Lett.* **122** 077601
- [34] Zhang Y X, Chiu W T, Costa N C, Batrouni G G, Scalettar

- R T 2019 *Phys. Rev. Lett.* **122** 077602
- [35] Li Z X, Jiang Y F, Yao H 2015 *Phys. Rev. B* **91** 241117
- [36] Wang L, Liu Y H, Iazzi M, Troyer M, Harcos G 2015 *Phys. Rev. Lett.* **115** 250601
- [37] Assaad F F, Grover T 2016 *Phys. Rev. X* **6** 041049
- [38] Gazit S, Randeria M, Vishwanath A 2017 *Nat. Phys.* **13** 484
- [39] Xu X Y, Qi Y, Zhang L, Assaad F F, Xu C, Meng Z Y 2019 *Phys. Rev. X* **9** 021022
- [40] Berg E, Lederer S, Schattner Y, Trebst S 2019 *Annu. Rev. Condens. Matter. Phys.* **10** 63
- [41] Li Z X, Yao H 2019 *Annu. Rev. Condens. Matter. Phys.* **10** 337
- [42] Xu X Y, Hong Liu Z, Pan G, Qi Y, Sun K, Meng Z Y 2019 *J. Phys. Condens. Matter.* **31** 463001
- [43] Chang C C, Gogolenko S, Perez J, Bai Z, Scalettar R T 2015 *Philos. Mag.* **95** 1260
- [44] Loh E Y, Gubernatis J E, Scalettar R T, Sugar R L, White S R 1989 *Interacting Electrons in Reduced Dimensions* (Boston: Springer US) pp55-60
- [45] Assaad F, Evertz H 2008 *Computational Many-Particle Physics* (Berlin: Springer) pp277-356
- [46] Lang G H, Johnson C W, Koonin S E, Ormand W E 1993 *Phys. Rev. C* **48** 1518
- [47] Koonin S E, Dean D J, Langanke K 1997 *Phys. Rep.* **278** 1
- [48] Hands S, Montvay I, Morrison S, Oevers M, Scorzato L, Skullerud J 2000 *Eur. Phys. J. C Part Fields* **17** 285
- [49] Wu C J, Zhang S C 2005 *Phys. Rev. B* **71** 155115
- [50] Berg E, Metlitski M A, Sachdev S 2012 *Science* **338** 1606
- [51] Xu X Y, Sun K, Schattner Y, Berg E, Meng Z Y 2017 *Phys. Rev. X* **7** 031058
- [52] Liu Y, Jiang W, Klein A, Wang Y, Sun K, Chubukov A V, Meng Z Y 2022 *Phys. Rev. B* **105** L041111
- [53] Huffman E F, Chandrasekharan S 2014 *Phys. Rev. B* **89** 111101
- [54] Wang L, Corboz P, Troyer M 2014 *New J. Phys.* **16** 103008
- [55] Li Z X, Jiang Y F, Yao H 2016 *Phys. Rev. Lett.* **117** 267002
- [56] Wei Z C, Wu C, Li Y, Zhang S, Xiang T 2016 *Phys. Rev. Lett.* **116** 250601
- [57] Wei Z C
- [58] Ouyang Y, Xu X Y 2021 *Phys. Rev. B* **104** L241104
- [59] Hertz J A 1976 *Phys. Rev. B* **14** 1165
- [60] Millis A J 1993 *Phys. Rev. B* **48** 7183
- [61] Moriya T 1985 *Spin Fluctuations in Itinerant Electron Magnetism* (Berlin: Springer) pp44-81
- [62] Chubukov A V 2010 *Physics* **3** 70
- [63] Altshuler B L, Ioffe L B, Millis A J 1994 *Phys. Rev. B* **50** 14048
- [64] Kim Y B, Furusaki A, Wen X G, Lee P A 1994 *Phys. Rev. B* **50** 17917
- [65] Polchinski J 1994 *Nucl. Phys. B* **422** 617
- [66] Lee S S 2009 *Phys. Rev. B* **80** 165102
- [67] Metlitski M A, Sachdev S 2010 *Phys. Rev. B* **82** 075127
- [68] Abanov A, Chubukov A V, Schmalian J 2003 *Adv. Phys.* **52** 119
- [69] Metlitski M A, Sachdev S 2010 *Phys. Rev. B* **82** 075128
- [70] Schattner Y, Gerlach M H, Trebst S, Berg E 2016 *Phys. Rev. Lett.* **117** 097002
- [71] Schattner Y, Lederer S, Kivelson S A, Berg E 2016 *Phys. Rev. X* **6** 031028
- [72] Liu Z H, Xu X Y, Qi Y, Sun K, Meng Z Y 2019 *Phys. Rev. B* **99** 085114
- [73] Liu Z H, Pan G, Xu X Y, Sun K, Meng Z Y 2019 *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **116** 16760
- [74] Xu X Y, Klein A, Sun K, Chubukov A V, Meng Z Y 2020 *npj. Quantum. Mater.* **5** 65
- [75] Kagawa F, Miyagawa K, Kanoda K 2005 *Nature* **436** 534
- [76] Lefebvre S, Wzietek P, Brown S, Bourbonnais C, Jérôme D, Mézière C, Fourmigué M, Batail P 2000 *Phys. Rev. Lett.* **85** 5420
- [77] Arai T, Ichimura K, Nomura K, Takasaki S, Yamada J, Nakatsuji S, Anzai H 2001 *Phys. Rev. B* **63** 104518
- [78] Belin S, Behnia K, Deluzet A 1998 *Phys. Rev. Lett.* **81** 4728
- [79] De Soto S M, Slichter C P, Kini A M, Wang H H, Geiser U, Williams J M 1995 *Phys. Rev. B* **52** 10364
- [80] Kanoda K, Miyagawa K, Kawamoto A, Nakazawa Y 1996 *Phys. Rev. B* **54** 76
- [81] Xu X Y, Grover T 2021 *Phys. Rev. Lett.* **126** 217002
- [82] Kang J, Vafeek O 2019 *Phys. Rev. Lett.* **122** 246401
- [83] Koshino M, Yuan N F Q, Koretsune T, Ochi M, Kuroki K, Fu L 2018 *Phys. Rev. X* **8** 031087
- [84] Kang J, Vafeek O 2018 *Phys. Rev. X* **8** 031088
- [85] Po H C, Zou L, Vishwanath A, Senthil T 2018 *Phys. Rev. X* **8** 031089
- [86] Xu X Y, Law K T, Lee P A 2018 *Phys. Rev. B* **98** 121406
- [87] Zhang X, Pan G, Zhang Y, Kang J, Meng Z Y 2021 *Chin. Phys. Lett.* **38** 077305
- [88] Hofmann J S, Khalaf E, Vishwanath A, Berg E, Lee J Y 2022 *Phys. Rev. X* **12** 011061
- [89] Bistrizter R, MacDonald A H 2011 *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **108** 12233
- [90] Liao Y D, Meng Z Y, Xu X Y 2019 *Phys. Rev. Lett.* **123** 157601
- [91] Liao Y D, Kang J, Breiø C N, Xu X Y, Wu H Q, Andersen B M, Fernandes R M, Meng Z Y 2021 *Phys. Rev. X* **11** 011014
- [92] Liao Y D, Xu X Y, Meng Z Y, Kang J 2021 *Chin. Phys. B* **30** 017305
- [93] Lian B, Song Z D, Regnault N, Efetov D K, Yazdani A, Bernevig B A 2021 *Phys. Rev. B* **103** 205414
- [94] Greiter M, Rachel S 2007 *Phys. Rev. B* **75** 184441

SPECIAL TOPIC—Novel properties of low-dimensional materials

**Quantum Monte Carlo study of strongly correlated electrons\***Xu Xiao-Yan<sup>†</sup>*(School of Physics and Astronomy, Shanghai Jiao Tong University, Shanghai 200240, China)*

( Received 11 January 2022; revised manuscript received 12 February 2022 )

**Abstract**

Understanding strongly correlated electrons is an important long-term goal, not only for uncovering fundamental physics behind, but also for their emergence of lots of novel states which have potential applications in quantum control and quantum computations. Meanwhile, the strongly correlated electrons are usually extremely hard problems, and it is generally impossible to understand them unbiasedly. Quantum Monte Carlo is a typical unbiased numeric method, which does not depend on any perturbation, and it can help us to exactly understand the strongly correlated electrons, so that it is widely used in high energy and condensed matter physics. However, quantum Monte Carlo usually suffers from the notorious sign problem. In this paper, we introduce general ideas to design sign problem free models and discuss the sign bound theory we proposed recently. In the sign bound theory, we build a direct connection between the average sign and the ground state properties of the system. We find usually the average sign has the conventional exponential decay with system size increasing, leading to exponential complexity; but for some cases it can have algebraic decay, so that quantum Monte Carlo simulation still has polynomial complexity. By designing sign problem free or algebraic sign behaved strongly correlated electron models, we can approach to several long outstanding problems, such as the itinerant quantum criticality, the competition between unconventional superconductivity and magnetism, as well as the recently found correlated phases and phase transitions in moiré quantum matter.

**Keywords:** sign problem, quantum phase transition, non-Fermi liquid, moiré quantum matter**PACS:** 71.27.+a, 71.10.Fd, 71.10.Hf, 02.70.Ss**DOI:** [10.7498/aps.71.20220079](https://doi.org/10.7498/aps.71.20220079)

---

\* Project supported by the National Key R&D Program of China (Grant No. 2021YFA1401400), the Shanghai Pujiang Program, China (Grant No. 21PJ1407200), and the Yangyang Development Fund, China.

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail: [xiaoyanxu@sjtu.edu.cn](mailto:xiaoyanxu@sjtu.edu.cn)