量子临界普适性如何编码进精确密度泛函

论文整体框架、逐式推导、文献核查与数值研究方案

研究工作稿（作者信息待填写）

2026 年 10 月 4 日

Abstract

本工作稿把项目 README 的设想整理为可验证的研究命题：在密度与临界序参量有非零重叠、响应和泛函曲率在相同物理子空间定义的前提下，Legendre 对偶把静态临界响应的发散转化为精确密度泛函 Hessian 本征值的软化。进一步，只有在适当定义的 Kohn–Sham（KS）临界通道曲率解析、且投影不引入或抵消奇异项时，才能把分数幂归于 Hartree–交换关联（Hxc）核。以二聚化扩展 Hubbard 链为候选模型，给出 Ising 和三临界 Ising 的条件性预测、傅里叶振幅、有限范围不可精确性命题、矩阵混合修正，以及 ED、DMRG、有限场响应、KS 积分和误差控制方案。本文特别区分约化泛函、全密度泛函和动量依赖本征通道；原文中的平滑密度导数耦合使这种区分不可省略。已执行的计算仅为六格点 ED 与非相互作用 KS 核查；尚无大系统临界指数或 Hxc 尾部的数值验证，所有对应图表均明确列为待完成。

Keywords 格点密度泛函 · 量子临界性 · Legendre 对偶 · 静态响应 · 非局域核

Contents

1 论文定位、结论层级与整体结构 **3**

1.1 把研究问题写成三个可以分别检验的命题 . . . 3

1.2 建议正文：八节加五组附录 . . . 3

1.3 研究贡献与已有工作之间的边界 . . . 4

1.4 全篇统一约定 . . . 4

2 从基态能量到临界泛函：逐式推导 **4**

2.1 固定内部参数的 Hamiltonian 与系综泛函 . . . 4

2.2 Hellmann–Feynman、谱响应和符号 . . . 5

2.3 去除零模，再做 Legendre 反演 . . . 5

2.4 KS 分解、Hxc 与 Dyson 恒等式 . . . 5

2.5 一般量子临界标度及密度算符的选择 . . . 6

2.6 有限尺寸、有限场和等时结构因子 . . . 6

2.7 Ising 与三临界 Ising 的指数链 . . . 7

2.8 从 CFT 时空关联推导响应振幅 . . . 7
2.9 何时能进一步得到 Hxc 非解析性 . . . 7
2.10 分数动量幂的实空间尾：常数、符号和接触项 . . . 8
2.11 固定有限范围命题及其真正适用范围 . . . 8
2.12 离临界标度与均匀状态方程补充 . . . 9

3 二聚化 Hubbard 模型、KS 参考与矩阵混合 9
3.1 微观模型、对称性与临界点的文献依据 . . . 9
3.2 两格点胞与 Fourier 规范 . . . 9
3.3 为什么零场 KS 可以选相同 hopping 加常势 . . . 10
3.4 Lindhard 矩阵：由粒子–空穴激发逐项构建 . . . 10
3.5 三种不同对象：投影、限制与约化 . . . 10
3.6 原参考文献中不可忽略的导数耦合 . . . 11
3.7 论文中怎样报告这项风险与解决途径 . . . 11
3.8 已经完成的 KS 核查 . . . 12

4 可执行的计算计划、误差预算与判据 12
4.1 阶段 A：ED 验证链条，先解决方法正确性 . . . 12
4.2 本次已完成的 ED 结果及其范围 . . . 13
4.3 阶段 B：独立复现目标临界点 . . . 13
4.4 阶段 C：真正的静态响应与复数矩阵重建 . . . 14
4.5 阶段 D：矩阵反演、KS 比较与噪声控制 . . . 14
4.6 阶段 E：指数、模型比较、振幅与有限尺寸塌缩 . . . 15
4.7 阶段 F：实空间尾、离临界与控制实验 . . . 15
4.8 阶段 G：三临界扩展的额外成本 . . . 16
4.9 如要做真实量子模拟实验，应测什么 . . . 16
4.10 七幅主图、优先级与原始数据规范 . . . 16

5 文献证据表、README 公式覆盖与写作检查 17
5.1 本地 15 份文献的逐项用途 . . . 17
5.2 网上补充的主要一手来源 . . . 18
5.3 README 各组公式在本稿中的覆盖位置 . . . 18
5.4 最需要修改的原始表述 . . . 19
5.5 写作与提交前的核对表 . . . 19

1 论文定位、结论层级与整体结构

1.1 把研究问题写成三个可以分别检验的命题

建议论文暂题为 *Quantum Criticality in the Exact Density Functional*。待完整 Hxc 通道验证后，再考虑 *Universal Critical Nonlocality of the Exact Density Functional*。题目中的 universal 指临界指数及合适归一化后的振幅关系，不指微观模型之间完全相同的核振幅。本文是详细研究蓝图，而非已有大规模数值结果的论文。

第一层：全泛函的曲率。在固定粒子数、可微且局部可逆的密度–势映射上，证明 Hessian 与静态响应互逆。若某响应本征值按临界标度发散，相应全泛函曲率本征值按逆幂趋于零。此结论不需要 KS 参考体系。

第二层：Hxc 分解。在相同密度、相同密度坐标及相同可逆子空间上，分别计算相互作用与 KS 响应，确定非解析项是否进入 Hxc。KS 有带隙只保证响应矩阵本身在实动量附近解析；不能保证它的整个逆矩阵解析，因为守恒电荷通道的响应会趋于零。

第三层：泛函设计约束。若全密度 Hxc Hessian 在固定、空间局域的密度坐标中确有非整数动量幂，固定范围且二次可微的泛函无法渐近精确地再现该 Hessian。对经过非局域投影或消去其他场得到的有效标量核，必须先证明该投影没有制造非解析性，才可用它证明原始 Hxc 泛函的非局域性。

依据与归属：DFT 与 KS 基础见 [1–4]；Legendre 框架见 [5, 6]；临界标度见 [7]。上述三层区分是本项目的组织方式，并不是这些文献已经完成了本项目的全部结论。

1.2 建议正文：八节加五组附录

节	建议标题	要回答的问题与应交付的证据
I	Introduction	四段：强关联泛函的响应问题；DFT–QPT 已有联系；缺失的空间核证据；本文有条件的命题与研究贡献。避免把 Legendre 恒等式本身宣称为新发现。
II	Exact functional and response	从凹能量和凸对偶推导 Hessian；处理固定粒子数零模、静态 Lehmann 和可表示性。正文保留关键证明，谱推导放附录。
III	Critical scaling and nonlocality	推出本征曲率指数；给出标量 Hxc 命题及适用条件；推导分数 Laplacian 与有限范围命题，放 Gaussian 反例。
IV	Model and matrix channels	二聚化扩展 Hubbard 模型、粒子–空穴对称性、两格点胞、KS 带结构、平滑密度导数耦合。定义每一幅图究竟使用哪一个核。
V	Numerical methods and validation	ED 符号和归一化检验；DMRG 参数、边界条件、有限场外推、KS 积分、矩阵病态控制。
VI	Ising critical kernel	待取得结果后填入：定位临界点；响应与本征曲率标度；KS 与 Hxc 比较；独立 CFT 振幅检验；动量窗与误差条。
VII	Controls and extensions	离临界塌缩、一阶两侧、Gaussian、固定范围核的跨尺寸失效；三临界 Ising 为扩展，不能拖延基本结论的检验。
VIII	Discussion	哪些层已建立；矩阵混合和坐标依赖限制；对局域/半局域泛函的精确约束；后续可研究的非局域架构。
A–E	Technical appendices	A：Legendre 与谱表象；B：Fourier/CFT 振幅；C：胞坐标和矩阵混合；D：收敛、误差、原始数据；E：有限范围命题及反例。

正文可控制在约 10–14 页，附录容纳详细推导和收敛数据；本工作稿故意比最终正文更详尽。最终英文摘要可依次写 “问题—恒等式—条件性约束—已验证模型—意义”，在 DMRG 完成前不写 “we demonstrate numerically”。

1.3 研究贡献与已有工作之间的边界

Wu、Nagy 等已经把 QPT 控制参数、广义密度和纠缠联系起来；2026 年 Romera–Nagy 的文章是综述性整理，不能当作新的 Hxc 长尾证明 [8–10]。Moreno 等已经指出跨相变学习 HK 映射较困难，并讨论 Legendre 非解析性 [11]。因此“相变会影响泛函”不构成充分的新颖性。

Aryasetiawan–Gunnarsson 已经通过相互作用与 KS 响应的逆之差构建核，并明确讨论零模与核的规范自由度 [12]。Cronin 等已有可调范围的 Hubbard 半局域 Hxc 模型 [13]。本项目应争取的新结果是：在明确定义的格点密度通道中，定量验证普适类所决定的空间动量非解析性及其对泛函导数的限制。有限检索不能证明“文献中从未出现”；投稿前仍应做前向引用和近邻课题检索。

Mao 与 Costa 研究中的广义密度主要是横向磁化，对应 Ising 能量型算符而非纵向序参量。不能因为名称中有 Ising，就直接把本项目的磁性标度维数 $x_\sigma = 1/8$ 用到它们的密度响应 [14, 15]。同样，Cheng–Marianetti 的 1-RDM 变分泛函与本项目的精确格点标量密度泛函不是同一对象 [16]。

1.4 全篇统一约定

格距 $a = 1$、$\hbar = 1$、能量单位 $t = 1$。L 为格点数，$M = L/2$ 为晶胞数，D 为 MPS bond dimension；不再用 χ 表示 bond dimension。q 是单格点动量，$k = q - \pi$，$K = 2k$ 是折叠后的胞动量。v 表示外势，v_{cr} 表示临界传播速度；δ 为无量纲键二聚化，δ_h 为状态方程指数，两者不能混用。

全文采用外场项 $+\sum_i v_i n_i$，因而

$$\chi_{ij} = \frac{\partial n_i}{\partial v_j} \preceq 0, \qquad X = -\chi \succeq 0, \qquad F^{(2)} = X^{-1} = -\chi^{-1}. \tag{1.1}$$

式中 $\preceq$ 指矩阵半定性，不表示每个实空间矩阵元都为负。脚本中变量名 `C` 就是这里的 X。所有幂律都对正的临界响应 X_c 表述；若沿用 README 的 χ，其发散振幅应为负。式 (1.1) 的完整推导在下一节。

2 从基态能量到临界泛函：逐式推导

2.1 固定内部参数的 Hamiltonian 与系综泛函

令 $g = (U, V, \delta)$ 固定，写作

$$\hat{H}_g[\boldsymbol{v}] = \hat{T}_\delta + \hat{W}_{U,V} + \sum_i v_i \hat{n}_i, \quad E_g[\boldsymbol{v}] = \min_\Gamma \mathrm{Tr}\,\Gamma \hat{H}_g[\boldsymbol{v}]. \tag{2.1}$$

Γ 是固定粒子数 Hilbert 空间上的密度矩阵，满足正性和迹为一。这里二聚化进入动能，故 T_s 也依赖 δ；把 g 改变理解为扫描一族泛函，而非对同一个泛函改变外势。式 (2.1) 是变分定义。因为每个 Γ 对应一个关于 $\boldsymbol{v}$ 的仿射函数，仿射函数的逐点下确界是凹函数，故 E_g 凹。

先对固定密度的态最小化内部能量，再对密度最小化，得

$$F_g[\boldsymbol{n}] = \min_{\Gamma \mapsto \boldsymbol{n}} \mathrm{Tr}\,\Gamma(\hat{T}_\delta + \hat{W}_{U,V}), \tag{2.2}$$

$$E_g[\boldsymbol{v}] = \min_{\boldsymbol{n}} \{F_g[\boldsymbol{n}] + \boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{n}\},$$

$$F_g[\boldsymbol{n}] = \sup_{\boldsymbol{v}} \{E_g[\boldsymbol{v}] - \boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{n}\}. \tag{2.3}$$

第一式的系综混合保证凸性；有限维闭凸定义域上，闭凸对偶给第二行的反变换。在纯态约束搜索中凸性不自动成立，不能无条件将纯态泛函替换为这个双共轭。对于密度–势映射不唯一或不可微的格点态，变分关系依然有效，但后续普通 Hessian 不一定存在。

依据与归属：式 (2.2)–(2.3) 使用 [5, 6] 的凸对偶结构。格点可表示性和例外见 [17]；不把连续空间 HK 唯一性直接当作任意有限图上的定理。

2.2 Hellmann–Feynman、谱响应和符号

在有限系统非简并基态附近，$\hat{H}|0\rangle = E_0|0\rangle$。对 v_i 求导并用归一化消去态导数项，得到

$$\frac{\partial E_0}{\partial v_i} = \langle 0|\hat{n}_i|0\rangle = n_i. \tag{2.4}$$

取规范 $\langle 0|\partial_j 0\rangle = 0$，把微扰后的 Schrödinger 方程投影到激发态，逐项解出

$$|\partial_j 0\rangle = \sum_{m>0} |m\rangle \frac{\langle m|\hat{n}_j|0\rangle}{E_0 - E_m}. \tag{2.5}$$

对式 (2.4) 的 bra 和 ket 分别求导，即得

$$\chi_{ij} = -2\,\mathrm{Re}\sum_{m>0} \frac{\langle 0|\delta\hat{n}_i|m\rangle\langle m|\delta\hat{n}_j|0\rangle}{E_m - E_0}, \qquad \delta\hat{n}_i = \hat{n}_i - n_i. \tag{2.6}$$

对任意实向量 $\boldsymbol{a}$，$\boldsymbol{a}^T\chi\boldsymbol{a} = -2\sum_{m>0} |\langle m|\sum_i a_i\delta\hat{n}_i|0\rangle|^2/(E_m - E_0) \le 0$，与能量凹性一致。这证明了式 (1.1) 的符号。对 $\tau > 0$，插入完备态后每一项含 $e^{-\tau(E_m - E_0)}$，积分产生能量分母；加上负时间的时序部分得

$$X_{ij} = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\tau\, \langle T_\tau \delta\hat{n}_i(\tau)\delta\hat{n}_j(0)\rangle. \tag{2.7}$$

因此等时相关只含矩阵元权重，静态响应还含激发能倒数。式 (2.7) 在有限系统先定义；临界无限系统应保留有限 L、有限质量或非零动量的红外正则化，不可把发散的实空间时间积分当作普通收敛函数。

依据与归属：这是标准基态线性响应的直接微扰推导；与 [12] 的响应谱表示及 [6] 的密度有效作用量一致。本工作只使用静态、平衡、零温极限，不把任意有限频 TDDFT 核当作基态能量 Hessian。

2.3 去除零模，再做 Legendre 反演

总粒子数固定时，$E[\boldsymbol{v} + c\mathbf{1}] = E[\boldsymbol{v}] + cN$，密度不变；故 $\chi\mathbf{1} = 0$。设 B 的列为允许密度变化空间的一组正交基，$B^TB = I$、$B^T\mathbf{1} = 0$。若有其他精确零模，也须单独解释并移除。取

$$P = BB^T, \quad \boldsymbol{x} = B^T(\boldsymbol{n} - \boldsymbol{n}_0), \quad \boldsymbol{w} = B^T\boldsymbol{v}, \quad \chi_P = B^T\chi B, \quad X_P = -\chi_P. \tag{2.8}$$

对式 (2.3) 中极值条件求导：$\partial_{w_a} E = x_a + (B^T n_0)_a$。对最优势随密度的变化使用包络定理，得到 $\partial F/\partial x_a = -w_a$（常数参考项不影响 Hessian）。再次求导，并用链式法则 $\partial x_a/\partial w_b = (\chi_P)_{ab}$，得

$$\frac{\partial^2 F}{\partial x_a \partial x_b} = -\frac{\partial w_a}{\partial x_b} = -(\chi_P^{-1})_{ab}, \qquad K = BX_P^{-1}B^T. \tag{2.9}$$

K 是原始格点坐标上的一个规范固定扩展，满足 $K\mathbf{1} = 0$。伪逆只是这种子空间逆的表示；不是在无证据时删除所有小本征值的理由。在密度域边界、简并或非可微点，改用 $-\boldsymbol{v} \in \partial F$ 的次梯度关系，先有限尺寸定义，再研究 Hessian 的极限。

2.4 KS 分解、Hxc 与 Dyson 恒等式

固定动能算符，定义非相互作用系综约束搜索 $T_s[\boldsymbol{n}]$，假定参考密度局部非相互作用可表示。定义

$$F = T_s + E_{\mathrm{Hxc}}, \quad \boldsymbol{v}_s = \boldsymbol{v} + \frac{\partial E_{\mathrm{Hxc}}}{\partial \boldsymbol{n}}, \quad f_{\mathrm{Hxc}} = F^{(2)} - T_s^{(2)} = X^{-1} - X_s^{-1} = \chi_s^{-1} - \chi^{-1}. \tag{2.10}$$

第一式是定义；第二式由相互作用和 KS 的 Euler 方程相减而来，常势由同一规范消去；第三式分别代入式 (2.9)。独立检验：对 KS 密度变化写 $\delta n = \chi_s(\delta v + f_{\mathrm{Hxc}}\delta n)$，移项后得

$$\chi = \chi_s + \chi_s f_{\mathrm{Hxc}}\chi, \qquad X = X_s - X_s f_{\mathrm{Hxc}} X. \tag{2.11}$$

乘法顺序不能交换。数值上检查这两个式子的残差，比只比较一条拟合曲线更直接。

依据与归属：KS 分解见 [2, 3]；[12] 式 (8)、(12) 已经给出相应逆响应关系和零模处理。本项目并不声称这个恒等式是新结果。

若要另外报告 f_{xc}，必须声明 Hartree 约定。对无自旋极化的总密度，一种方便的定义为

$$E_H = \frac{U}{4}\sum_j (n_j-1)^2 + V\sum_j (n_j-1)(n_{j+1}-1), \quad f_H(q) = \frac{U}{2} + 2V\cos q, \quad f_{\mathrm{xc}} = f_{\mathrm{Hxc}} - f_H. \tag{2.12}$$

第一项来自 $U(n_\uparrow - 1/2)(n_\downarrow - 1/2)$ 的顺磁平均场替换；二阶导产生 $U/2$，每条邻接键分别贡献两个矩阵方向 V，其 Fourier 和为 $2V\cos q$。此局域/邻近项解析，不能消去非整数动量幂。自旋分辨泛函须改用相应自旋矩阵，不能沿用相同因子。

2.5 一般量子临界标度及密度算符的选择

设临界序参量 ϕ 的标度维数为 x_ϕ，密度含 $\delta n_j \sim A_n e^{iQj}\phi + \cdots$，且 $A_n \neq 0$。在空间重标度 b 下，$\tau \to b^z\tau$，连通时空相关满足

$$G(b\boldsymbol{r}, b^z\tau; g-g_c) = b^{-2x_\phi} G(\boldsymbol{r}, \tau; b^{1/\nu}(g-g_c)), \quad 2x_\phi = d + z - 2 + \eta. \tag{2.13}$$

第二式是 η 的定义。对第一式做空间和虚时 Fourier 变换，测度贡献 b^{d+z}，两个场贡献 b^{-2x_ϕ}，故

$$X_c(Q+k, i\omega; g) = b^{2-\eta}\mathcal{X}(bk, b^z\omega, b^{1/\nu}(g-g_c)), \tag{2.14}$$

$$\xi = \xi_0|g-g_c|^{-\nu}, \qquad X_c(Q+k, 0; g) = \xi^p \Phi_\pm(k\xi), \quad p = 2-\eta. \tag{2.15}$$

临界点选 $b = |k|^{-1}$，并假定此通道无额外主导对数或危险无关变量，得

$$X_c(Q+k, 0) = A_X|k|^{-p}[1+o(1)], \quad A_X > 0, \qquad K_c(Q+k) = A_X^{-1}|k|^p[1+o(1)]. \tag{2.16}$$

这里 X_c 必须是响应本征值，或明确约化问题中的标量响应。后式由前式求倒数，使用 $(1+\epsilon)^{-1} = 1-\epsilon+O(\epsilon^2)$；它不适用于把任意矩阵元的倒数当作 Hessian 矩阵元。

命题 2.1 (全泛函本征曲率)**.** *若有限系统在规定物理子空间可微可逆，X 的一条归一化本征通道在规定极限中满足式 (2.16) 的第一式，则 $F^{(2)}$ 在同一本征向量上的本征值满足第二式。*

Proof. 谱分解 $X = \sum_a \lambda_a u_a u_a^\dagger$。在物理空间 $F^{(2)} = \sum_a \lambda_a^{-1} u_a u_a^\dagger$，故临界本征值为 $1/\lambda_c$。先有限 L 取场导数，再取给定动量与系统尺寸的标度极限，即避免对无限大矩阵先做未定义的逆。 □

依据与归属：临界标度的理论输入为 [7]。此命题是将已知标度与 Legendre 恒等式组合后的条件性推论。若密度只耦合到另一个算符，应改用该算符 x，其静态幂为 $d+z-2x$，不是机械使用磁性 η。

2.6 有限尺寸、有限场和等时结构因子

取归一化格点模式 $e_j(q) = e^{iqj}/\sqrt{L}$，则 $X(q) = e^\dagger X e$。对于实交错模式 $s_j = (-1)^j$，定义总算符 $O = \sum_j s_j(n_j - 1)$ 与强度归一化的响应

$$X_\pi = -\frac{1}{L}\left.\frac{\mathrm{d}\langle O\rangle}{\mathrm{d}\lambda}\right|_0 = -\frac{1}{L}\left.\frac{\mathrm{d}^2 E[\lambda s]}{\mathrm{d}\lambda^2}\right|_0. \tag{2.17}$$

所以未除以 L 的 $-E''$ 在一维临界点按 L^{1+p} 而非 L^p 增长。一般余弦源 $s_j = (-1)^j\cos kj$ 应除以 $\sum_j s_j^2$；非特殊动量的周期链中该和为 $L/2$。

场项的 Euclidean 作用量为 $\int \mathrm{d}^d x \mathrm{d}\tau\, h\phi$。要求它无量纲，得到

$$y_h = d + z - x_\phi = \frac{d+z+2-\eta}{2}. \tag{2.18}$$

由奇异能量密度 $e_{\mathrm{sing}} = L^{-(d+z)}\mathcal{E}((g-g_c)L^{1/\nu}, hL^{y_h})$ 对 h 求两次导，得

$$X_c(Q, L) \sim L^{2y_h-(d+z)} = L^p, \qquad K_c(Q, L) \sim L^{-p}, \qquad |h|L^{y_h} \ll 1. \tag{2.19}$$

更一般的尺度是 $\ell_{\mathrm{IR}} \sim \min(L, \xi, \xi_D, |k|^{-1}, v_{\mathrm{cr}}/T)$，条件变为 $|h|\ell_{\mathrm{IR}}^{y_h} \ll 1$（场含非普适度量因子）。对 L2 归一化模式 $s_j = (-1)^j/\sqrt{L}$，其系数 λ 对应局域场 $h = \lambda/\sqrt{L}$；不能把 $\lambda L^{15/8}$ 直接用于脚本里的这种源。

等时相关在临界点为 $G(r, 0) \sim r^{-2x_\phi}$，因此一维 $S(Q, L) = \sum_r e^{-iQr}G(r, 0) \sim L^{1-2x_\phi}$（当 $2x_\phi < 1$）。Ising 中 $S \sim L^{3/4}$，静态 $X \sim L^{7/4}$；相差的 L^z 正是时间积分产生的。

2.7 Ising 与三临界 Ising 的指数链

在 $d=z=1$ 时，$2x_\sigma=\eta$。普通 Ising 的 $x_\sigma=1/8$、$\nu=1$ 给 $\eta=1/4$、$p=7/4$、$y_h=15/8$。三临界 Ising 的 $\beta=1/24$、$\nu=5/9$，由 $m\sim\xi^{-x_\sigma}\sim|g-g_c|^{\nu x_\sigma}$，有

$$x_\sigma=\beta/\nu=\frac{3}{40},\quad \eta=2x_\sigma=\frac{3}{20},\quad p=\frac{37}{20},\quad y_h=\frac{77}{40}. \tag{2.20}$$

一般维数下的关系是 $2\beta/\nu=d+z-2+\eta$，README 的 $\eta=2\beta/\nu$ 只在此处 $d+z=2$ 且适用超标度时成立。

普适类	c	ν	x_σ	p	$d+p$	y_h
Ising	$1/2$	1	$1/8$	$7/4$	$11/4$	$15/8$
三临界 Ising	$7/10$	$5/9$	$3/40$	$37/20$	$57/20$	$77/40$

依据与归属：目标模型的序参量辨识与关联指数见 [18] 第 IV 节及附录 A；β,ν 的模型数值确认见 [19]。三临界处另有相关调谐方向，表中的 ν 对应已控制其他相关场的主热方向。

2.8 从 CFT 时空关联推导响应振幅

设在物理格点坐标、同一密度算符归一化下测得

$$G_{\text{stag}}(r,\tau)=A_\sigma(r^2+v_{\text{cr}}^2\tau^2)^{-x_\sigma}. \tag{2.21}$$

这里 A_σ 是相关函数的振幅，已经含格点密度与 CFT 场之间映射系数的平方。令 $y=v_{\text{cr}}\tau$，测度变为 $\mathrm{d}r\mathrm{d}y/v_{\text{cr}}$。在非零二维动量 $\boldsymbol{p}=(k,\omega/v_{\text{cr}})$ 下，对 $0<x<1$ 用 Gamma 积分

$$(r^2+y^2)^{-x}=\frac{1}{\Gamma(x)}\int_0^\infty \mathrm{d}s\, s^{x-1}e^{-s(r^2+y^2)}. \tag{2.22}$$

对两个坐标分别做 Gaussian Fourier 积分，得到 $\pi s^{-1}e^{-p^2/(4s)}$。再置 $u=p^2/(4s)$，则

$$\int \mathrm{d}^2R\, e^{-i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{R}}(R^2)^{-x}=\frac{\pi}{\Gamma(x)}\int_0^\infty \mathrm{d}s\, s^{x-2}e^{-p^2/(4s)} \tag{2.23}$$

$$=2^{2-2x}\pi\frac{\Gamma(1-x)}{\Gamma(x)}|\boldsymbol{p}|^{2x-2}. \tag{2.24}$$

这里的变换没有前向 2π 因子；红外正则化和分布极限先保留到 $\boldsymbol{p}\neq 0$，不在 $k=0$ 直接交换发散积分。置 $\omega=0$ 后

$$X_c(k,0)=\frac{A_\sigma}{v_{\text{cr}}}\mathcal{C}_x|k|^{2x-2},\quad \mathcal{C}_x=2^{2-2x}\pi\frac{\Gamma(1-x)}{\Gamma(x)},\quad K_c(k)=\frac{v_{\text{cr}}}{A_\sigma\mathcal{C}_x}|k|^{2-2x}. \tag{2.25}$$

Ising 的 $\mathcal{C}_{1/8}\simeq 1.52833331$。这是由临界相关的 Fourier 变换得到的本征/约化标量振幅预测；胞坐标 $K=2k$、算符 n_A-n_B 与 $(n_A-n_B)/\sqrt{2}$ 会改变振幅，必须转换后比较。矩阵混合存在时，不能把这个系数直接赋给任意 f_{Hxc}^{AA}。

依据与归属：CFT 相关输入在 [18] 的算符辨识中；式 (2.22)–(2.25) 为本文写出的 Fourier 推导。分数幂算子及 Fourier 约定可交叉核对 [20]。

2.9 何时能进一步得到 Hxc 非解析性

命题 2.2 (标量 Hxc 结论，附条件)**.** *对一个确已解耦的物理密度通道，若 $K_c=A_K|k|^p[1+o(1)]$，$A_K>0$，p 非非负偶整数，且该同一通道的 KS 曲率 $K_{s,c}$ 在 $k=0$ 解析，则 $f_{\text{Hxc},c}=K_c-K_{s,c}$ 必含系数 A_K 的非解析项。*

Proof. 反演/时间反演对称的实标量通道满足 $K_{s,c}=b_0+b_2k^2+b_4k^4+\cdots$。逐项相减得

$$f_{\text{Hxc},c}(k)=-b_0+A_K|k|^p-b_2k^2+\cdots. \tag{2.26}$$

解析 Taylor 级数没有该分数幂，故不能将其抵消。若对称性不适用，可有解析奇数项，但仍不能消去分数幂。矩阵版需要在相同解析、局域定义的密度坐标中验证这项未被投影效应改变。 □

临界点标量极限满足 $f_{\text{Hxc},c}(0)=-K_{s,c}(0)$，即两项的常数部分恰好使总曲率软化；$E_{\text{Hxc}}$ 自身无需凸，凸性约束是 T_s+E_{Hxc}。

2.10 分数动量幂的实空间尾：常数、符号和接触项

定义 $f(r)=\int \mathrm{d}k\, e^{ikr} f(k)/(2\pi)$。对 $0<p<2$、$r\neq 0$，先加入 $e^{-\epsilon|k|}$：

$$I_{p,\epsilon}(r)=\frac{1}{\pi}\,\mathrm{Re}\int_0^\infty \mathrm{d}k\, k^p e^{-(\epsilon-ir)k}=\frac{\Gamma(p+1)}{\pi}\,\mathrm{Re}(\epsilon-ir)^{-p-1}, \tag{2.27}$$

$$I_p(r)=-\frac{\Gamma(p+1)\sin(\pi p/2)}{\pi|r|^{1+p}}\equiv -\frac{c_{1,p}}{|r|^{1+p}}. \tag{2.28}$$

所以正的 $A_K|k|^p$ 对应负的非对角实空间尾，不是正振幅自动保留。$r=0$ 的接触项依赖紫外正则化；格点上应以光滑周期延拓把小动量奇异项嵌入 Brillouin 区。生硬截断 $|k|<k_{\max}$ 会引入人工振铃，不能用于证明渐近尾。

一般维数的同一分布恒等式可由 $|k|^p=\Gamma(-p/2)^{-1}\int_0^\infty \mathrm{d}s\, s^{-1-p/2}(e^{-sk^2}-1)$ 推出。对 $r\neq 0$，-1 只贡献原点分布，Gaussian 积分后置 $u=r^2/(4s)$ 得

$$\int \frac{\mathrm{d}^d k}{(2\pi)^d} e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}|k|^p=\frac{2^p\Gamma((d+p)/2)}{\pi^{d/2}\Gamma(-p/2)}|r|^{-d-p}=-c_{d,p}|r|^{-d-p},\quad c_{d,p}=\frac{2^p\Gamma((d+p)/2)}{\pi^{d/2}|\Gamma(-p/2)|}. \tag{2.29}$$

于是移回 $Q=\pi$ 后，具有上述标量奇异项的 *CDW* 核在一维为

$$f_c^{\mathrm{sing}}(r)\sim -A_K c_{1,p}(-1)^r|r|^{-1-p}. \tag{2.30}$$

Ising 有 $c_{1,7/4}\simeq 0.19591735$、指数 $11/4$，三临界为 $57/20$。对一般不等价的 $\pm Q$ 要将两处奇异性合并为实的余弦并避免重复计数；$Q=\pi$ 在格点 Brillouin 环上只有一处。

同一 Fourier 恒等式给出正的分数梯度二次型：

$$F^{[2]}_{\mathrm{sing}}[\phi]=\frac{A_K}{2}\int\frac{\mathrm{d}^d k}{(2\pi)^d}|k|^p|\phi_k|^2=\frac{A_K c_{d,p}}{4}\int \mathrm{d}^d x\mathrm{d}^d y\,\frac{[\phi(x)-\phi(y)]^2}{|x-y|^{d+p}}. \tag{2.31}$$

推导为：利用 Parseval 将动量乘子写成 $(-\nabla^2)^{p/2}$；其积分表达为 $c_{d,p}\,\mathrm{PV}\int(\phi(x)-\phi(y))/|x-y|^{d+p}\,\mathrm{d}y$；交换 x,y 后平均，产生 $1/2$，再乘原二次能量中的 $1/2$。正的整体二次能量与负的非对角核完全一致。它只描述围绕参考密度的二阶奇异部分，不能据此声称已构造全部 $F[n]$。

依据与归属：式 (2.28)–(2.31) 为显式推导，分数 Laplacian 积分定义、常数和边界条件讨论见 [20]。

2.11 固定有限范围命题及其真正适用范围

考虑真实格点密度上的显式泛函

$$E^{(R)}[n]=\sum_i \varepsilon_i(n_{i-R},\dots,n_{i+R}),\quad f^{(R)}_{jl}=\sum_i\frac{\partial^2\varepsilon_i}{\partial n_j\partial n_l}. \tag{2.32}$$

若每个 ε_i 在参考密度二次可微，两导数非零要求 j,l 同在至少一个窗口内，故 $|j-l|\le 2R$。平移不变背景中 $f^{(R)}(q)=\sum_{r=-2R}^{2R} f_r e^{iqr}$ 是有限三角多项式；两格点胞时每个矩阵元仍是有限 Laurent 多项式。因此它在实动量上解析。若需精确再现某固定物理矩阵元中的非零 $|k|^p$（p 非偶整数），就产生矛盾。

这里“渐近精确”要求重现奇异项的相对标度，不能只要求绝对误差趋零。k^2 与 $|k|^{7/4}$ 都趋零，但前者与后者之比为 $|k|^{1/4}\to 0$。有限数据点总能被较高阶多项式拟合；命题针对固定 R、固定模型参数、固定规则，在热力学极限 $k\to 0$ 的行为。允许 R 随 L 增大、显式全局特征、非局域辅助场，或本身非解析的密度函数，会超出假设。

对 KS-DFT，应对显式 *Hxc* 泛函应用此命题；T_s 本来就是由轨道最小化产生的隐式非局域泛函。局域 Hxc 加上奇异 T_s 可以产生非平凡响应，故必须额外检验 KS 临界块。也不能把有限范围裸量子场论作用量与已经包含全部量子涨落的精确密度泛函混为一谈；局域微观模型当然可以具有非 Gaussian 临界性。

作为反例，定义正响应和其对应泛函

$$X_G(k)=\frac{1}{m^2+k^2},\quad \xi=1/m,\quad K_G=m^2+k^2,\quad F_G^{[2]}=\frac{1}{2}\int \mathrm{d}^d x\,[m^2\phi^2+|\nabla\phi|^2]. \tag{2.33}$$

Fourier 中 k^2 对应 $-\nabla^2\delta(r)$，所以即使 $m\to 0$、$\xi\to\infty$，Hessian 仍局域。更精确的触发条件是非解析的动量依赖，不是简单的 "$\eta\neq 0$"：偶整数幂、对数修正、长程微观作用、密度与序参量不重叠均需另外分析。

依据与归属：有限范围证明是本文基于有限和与链式法则的推论；[13, 15] 提供相关架构背景，并未在原文证明这里提出的临界不可精确性命题。

2.12 离临界标度与均匀状态方程补充

式 (2.15) 逐点求逆得 $K_c=\xi^{-p}\Phi_\pm^{-1}(k\xi)$。所以画 $\xi^p K_c$ 对 $k\xi$ 才是检验；两侧通常有不同的 Φ_+ 和 Φ_-，密度场归一化和相关长度定义也须固定。若存在单一标度区，换元 $u=k\xi$ 得奇异实空间部分 $K^{\rm sing}(r;\xi)=\xi^{-(d+p)}\mathcal{K}(r/\xi)$。这并不证明存在一个唯一的 "泛函相关长度"，更不证明其等于多体相关长度。

再令临界点有限均匀序参量场 h 为唯一红外尺度，奇异能量密度满足 $e_{\rm sing}(h)\propto -|h|^{(d+z)/y_h}$。求导得 $|m|\propto |h|^{x_\sigma/y_h}$，所以 $\delta_h=y_h/x_\sigma$。Legendre 变换 $f=e-hm$ 消去 h，得

$$f_{\rm sing}(m)\propto |m|^{\delta_h+1},\qquad \delta_h^{\rm Ising}=15,\quad \delta_h^{\rm TCI}=\frac{77}{3}. \tag{2.34}$$

它说明均匀模式的临界二次曲率可以为零，而非均匀模式仍有分数梯度代价。此式依赖状态方程超标度，只作补充，不是替代空间核验证的证据。

3 二聚化 Hubbard 模型、KS 参考与矩阵混合

3.1 微观模型、对称性与临界点的文献依据

采用周期偶数链、半填充 $N_\uparrow=N_\downarrow=L/2$：

$$\begin{aligned}H=&-t\sum_{j,\sigma}[1+\delta(-1)^j](c^\dagger_{j\sigma}c_{j+1,\sigma}+\text{h.c.})\\&+U\sum_j(n_{j\uparrow}-\tfrac12)(n_{j\downarrow}-\tfrac12)+V\sum_j(n_j-1)(n_{j+1}-1)+\sum_j v_j(n_j-1).\end{aligned} \tag{3.1}$$

式 (3.1) 是研究对象的定义，不是从 DFT 推出的 Hamiltonian。展开平移后的相互作用会得到常数和均匀化学势项；在固定半填充下不影响密度响应。文献有时把二聚化写成有能量量纲的 $\delta_{\rm lit}$，这里对应 $\delta_{\rm lit}/t=\delta$。从 $j=0$ 还是 $j=1$ 起数会交换强弱键位置；周期链不改变体相，但开放链的边缘态会改变。

粒子–空穴变换 $c_{j\sigma}\mapsto(-1)^j c^\dagger_{j\sigma}$ 将 $n_j-1\mapsto -(n_j-1)$；相邻格点的费米反对易关系使 hopping 保持不变，中心化的相互作用也保持不变。若有限系统零场基态保持此对称性，则

$$\langle n_j-1\rangle=-\langle n_j-1\rangle=0,\qquad n_A=n_B=1. \tag{3.2}$$

自发破缺 CDW 分支不满足这个论证。有限链对称态、PI 一侧和对称临界参考态应与热力学破缺态分开处理。

文献可直接支持的候选起点为 $U/t=4,\delta=0.2$：Ejima 2016 附录 A、图 8 标 $V_c/t\simeq 2.503$，Ejima 2018 第 3.1 节使用约 2.5035；这只是扫描中心，不能当作无限精度输入。2016 图 5 的三临界候选为 $(U_t/t,V_t/t)\simeq(10.56,5.497)$，该文正文还用约 $U_t/t\simeq 10.6$ 描述。强耦合 $U/t=12$ 为一阶对照起点，须重新扫描相界 [18, 19]。未显式二聚化的扩展 Hubbard 模型相图不能直接替代本模型 [21]；SU(n) 模型的 Mott/二聚化也不是这里 Ising 指数的证据 [22]。

3.2 两格点胞与 Fourier 规范

令 $A=2m, B=2m+1$，$m=0,\dots,M-1$。定义胞 Fourier 坐标

$$n_\alpha(K)=\frac{1}{\sqrt{M}}\sum_m e^{-iKm}\delta n_{m\alpha},\quad X_{\alpha\beta}(K)=\int \mathrm{d}\tau\,\langle T_\tau n_\alpha(K,\tau)n_\beta(-K,0)\rangle. \tag{3.3}$$

该规范不含胞内坐标。物理格点 Fourier 密度 $n(q)=L^{-1/2}\sum_j e^{-iqj}\delta n_j$ 在 $q=\pi+k$ 时为

$$n(\pi+k)=\frac{1}{\sqrt{2}}[n_A(2k)-e^{-ik}n_B(2k)]. \tag{3.4}$$

推导只需把偶数和奇数格点分开求和，并用 $e^{-i\pi(2m+1)} = -1$。故 $k \neq 0$ 时，物理 CDW 源带有胞内相位，不能始终使用 $(1,-1)/\sqrt{2}$ 而不说明坐标。

在 $K = 0$ 定义 $e_- = (1,-1)^T/\sqrt{2}$ 和 $e_+ = (1,1)^T/\sqrt{2}$。e_+ 为总数零模，e_- 为 CDW 密度模式。对 $K \neq 0$，两者都属于允许变化空间；固定总粒子数只排除严格 $K = 0$ 的均匀向量。删除所有小 K 的 e_+ 会改变泛函。

3.3 为什么零场 KS 可以选相同 hopping 加常势

半填充零场的同 hopping 非相互作用二聚化链也满足式 (3.2)，因此它是 $n_j = 1$ 的一个明确 KS 表示。常数势可取零。这里只需构造存在的表示；局部唯一性与逆响应的条件另行检验。任意非均匀有限场下，KS 势不再自动等于常数，须做密度反演，不能把零场结论外推。

令 $t_1 = t(1+\delta)$、$t_2 = t(1-\delta)$，取相同胞 Fourier 规范，每个自旋的 Bloch 矩阵为

$$h_s(K) = -\begin{pmatrix} 0 & t_1 + t_2 e^{-iK} \\ t_1 + t_2 e^{iK} & 0 \end{pmatrix}. \tag{3.5}$$

行列式方程 $\det(h_s - \epsilon I) = \epsilon^2 - |t_1 + t_2 e^{iK}|^2 = 0$ 给

$$\epsilon_\pm(K) = \pm E_K, \quad E_K = \sqrt{t_1^2 + t_2^2 + 2t_1 t_2 \cos K}, \quad \Delta_s = 2|t_1 - t_2| = 4t|\delta|. \tag{3.6}$$

最后一步取最小值 $K = \pi$；$\delta = .2$ 时 $\Delta_s = .8t$。这是该参考体系的单粒子带隙，不是多体中性激发隙。

3.4 Lindhard 矩阵：由粒子–空穴激发逐项构建

密度算符在带表象的顶角为 $M^\alpha_{nm}(p,K) = u^*_{n,p,\alpha} u_{m,p+K,\alpha}$。把非相互作用谱表象中的粒子–空穴态代入式 (2.6)，或把占据与未占据两方向合并，得到

$$\chi_s^{\alpha\beta}(K) = \frac{2}{M} \sum_{p,n,m} \frac{f_{n,p} - f_{m,p+K}}{\epsilon_{n,p} - \epsilon_{m,p+K}} M^\alpha_{nm}(p,K)[M^\beta_{nm}(p,K)]^*. \tag{3.7}$$

前面的 2 来自自旋；$1/M$ 来自胞归一化；$f_- = 1, f_+ = 0$ 是零温半填充。不要在同时保留 $(n,m) = (-,+),(+,-)$ 后再额外乘一次“正负激发因子 2”。能量分母不为零的带间项给负半定 χ_s，代码以 $X_s = -\chi_s$ 保存。

在 $K = 0$，e_- 的单粒子顶角为 $\sigma_z/\sqrt{2}$；h_s 在 xy 平面，故带间 $|\langle -|\sigma_z/\sqrt{2}|+\rangle|^2 = 1/2$。两带方向各贡献 $-1/(2E_p)$ 再计自旋，合并可得

$$X_{s,--}(0) = \frac{1}{M} \sum_p \frac{1}{E_p} > 0, \qquad X_s(0) e_+ = 0. \tag{3.8}$$

这给数值积分一个无需有限差分的检查。带隙使带投影和响应在实 K 邻域解析。但对守恒电荷，绝缘体通常有 $X_{s,++} \propto K^2$；混合项可为 $O(iK)$，所以 X_s^{-1} 仍可能有 K^{-2} 与 K^{-1} 项。README 中“gapped 所以逆响应矩阵解析”需要改为“gapped 且所考察可逆通道不趋于零，才保证该逆解析”。

3.5 三种不同对象：投影、限制与约化

用 $(s,\rho) = (-,+)$ 坐标，把 X 写成 $\begin{pmatrix} a & b \\ b^* & c \end{pmatrix}$。简单矩阵求逆给

$$(X^{-1})_{ss} = \frac{1}{a - |b|^2/c}, \qquad \frac{1}{X_{ss}} = \frac{1}{a}. \tag{3.9}$$

因此有三种问题：

1. 全密度 *Hessian* 的固定方向限制：固定 $\delta\rho = 0$ 改变 s，其曲率为 $(X^{-1})_{ss}$，需约束势阻止其他密度松弛。
2. 消去其他密度后的约化泛函：$\bar{F}[s] = \min_\rho F[s,\rho]$，在背景外势为零时 $\bar{F}'' = F''_{ss} - F''_{s\rho}(F''_{\rho\rho})^{-1}F''_{\rho s} = 1/X_{ss}$。这是 Schur 补，是只施加 s 源、允许 ρ 响应的实验所得曲率。

3. 响应本征通道：$Xu_c = \lambda_c u_c$，则 $u_c^\dagger F'' u_c = 1/\lambda_c$。$u_c$ 依赖动量且可能自身含非解析修正；其 Fourier 变换未必对应局域密度坐标。

约化泛函的差 $\bar{F} - \bar{T}_s$ 可以定义，但一般不等于将 E_{Hxc} 在同一 ρ 上直接限制或最小化，因为两个最小化问题的最优 ρ 不同。因此 $1/X_{ss} - 1/X_{s,ss}$ 应标为约化曲率差，未经证明不能称为原始全密度 $f_{\mathrm{Hxc},ss}$。

3.6 原参考文献中不可忽略的导数耦合

Ejima 2016 的式 (23) 及附录 A 指出，临界场辨识不止包含交错密度，还包含平滑密度：

$$\rho_\pi(x) \sim A\sigma(x) + \cdots, \qquad \rho_0(x) - \bar{\rho} \sim B\partial_x\sigma(x) + \cdots. \tag{3.10}$$

胞密度组合还会叠加相邻格点 Taylor 展开的 $\partial_x\sigma$，因此其系数是含胞内定义的非普适数。这一事实由原文第 235118-5 页式 (23)–(27) 和附录 A 支持，不能假设 $B = 0$。

从 Fourier 中 $\partial_x\sigma \mapsto ik\sigma$ 直接可得临界响应矩阵的可能领先结构

$$X_{ss}^{\mathrm{sing}} \sim A^2|k|^{-p}, \quad X_{s\rho}^{\mathrm{sing}} \sim -iABk|k|^{-p}, \quad X_{\rho\rho}^{\mathrm{sing}} \sim B^2k^2|k|^{-p}. \tag{3.11}$$

所以相互作用平滑密度响应可按 $|k|^{2-p} = |k|^\eta$ 趋零；它不是 KS 的普通 k^2 背景。三个奇异项同源，形成秩一矩阵。只取它们而丢掉次领先背景后，矩阵不可逆；必须保留非临界激发的贡献再反演。

一个解析示例而非 *Hubbard* 拟合结果说明后果。令 $S = A_X|k|^{-p}$、$a > 0$，取

$$X(k) = \begin{pmatrix} S & -ibkS \\ ibkS & k^2(b^2S + a) \end{pmatrix}, \quad X^{-1}(k) = \begin{pmatrix} S^{-1} + b^2/a & ib/(ak) \\ -ib/(ak) & 1/(ak^2) \end{pmatrix}. \tag{3.12}$$

行列式为 $ak^2S > 0$，用二阶矩阵伴随公式立即得到逆。$1/X_{ss} = 1/S \to 0$，但 $(X^{-1})_{ss} \to b^2/a$。$k = 0$ 严格去除规范模式后仅剩 S；所以 $k \to 0$ 的限制矩阵元可与 $k = 0$ 伪逆不同。沿解析临界密度方向 $w = (1, ibk)^T$ 则 $w^\dagger X^{-1} w = S^{-1}$，这表明可以有受控的通道选择，但不能不经计算地假设它。

更一般地，令 $D_k = \mathrm{diag}(1, k)$，假设可在小 $k \neq 0$ 区间写成

$$X = D_k[B(k) + S(k)ww^\dagger]D_k^\dagger, \quad s = w^\dagger B^{-1} w > 0, \tag{3.13}$$

其中 B, w 解析，B 正定且在 $k = 0$ 可逆。这是一个需要检验的足够条件，不是从单个相关函数自动推出的事实。Sherman–Morrison 公式给

$$X^{-1} = D_k^{-\dagger}\left[B^{-1} - \frac{B^{-1}ww^\dagger B^{-1}}{S^{-1} + s}\right]D_k^{-1}, \tag{3.14}$$

$$= D_k^{-\dagger}\left[B^{-1} - \frac{B^{-1}ww^\dagger B^{-1}}{s} + S^{-1}\frac{B^{-1}ww^\dagger B^{-1}}{s^2} + O(S^{-2})\right]D_k^{-1}. \tag{3.15}$$

第二行来自 $(s + S^{-1})^{-1} = s^{-1} - S^{-1}s^{-2} + \cdots$。这展示全矩阵的非解析项可分别按 $|k|^p$、$|k|^p/k$、$|k|^{p-2}$ 出现，并伴随解析或守恒导致的极点。某个系数可能因对称性或背景结构为零，式 (3.12) 就是一种简化情形。不能无条件将完整格点核的所有矩阵元都写成 $(-1)^r r^{-11/4}$。

若选择解析嵌入 $u_0 = D_k w/\|D_k w\|$，则 $u_0^\dagger X^{-1} u_0 \sim S^{-1}/\|D_k w\|^2$。证明是用 $w^\dagger[B^{-1} - B^{-1}ww^\dagger B^{-1}/(S^{-1} + s)]w = sS^{-1}/(s + S^{-1})$。若进一步 $X_s = D_k B_s(k) D_k^\dagger$、$B_s$ 解析可逆，则 $u_0^\dagger X_s^{-1} u_0 = w^\dagger B_s^{-1} w/\|D_k w\|^2$ 解析，从而该密度方向上的 Hxc 分数幂成立。真实数值本征向量可含 S^{-1} 修正；把它代入 KS 投影时也可能产生相同阶分数幂，须共同拟合，不可默认系数等于 A_X^{-1}。

3.7 论文中怎样报告这项风险与解决途径

主证据分三条同时保存：$\lambda_c(X)$ 与倒数、固定胞密度坐标的完整 f_{Hxc}、以及明确定义的解析 CDW 密度方向投影。拟合 $X_{s\rho}/(ikX_{ss})$ 的极限以估计临界嵌入；用两种胞规范交叉检查物理量；检查式 (3.13) 中背景是否规律。只有在这些检查通过后，才把投影 Fourier 尾解释为原始 Hxc 的 CDW 奇异成分。

如果矩阵背景使简单标量形式失效，仍可发表全泛函本征曲率结果或矩阵标度的修正理论；应据实收窄主张，而不是通过删除平滑密度通道让 7/4 出现。有限范围命题最终应在固定局域坐标的矩阵元或可证明解析的局域变换后陈述。

3.8 已经完成的 KS 核查

用 `research/benchmark.py` 对式 (3.7) 做 8192 点积分，$\delta = .2, t = 1$。倍增至 16384 点时，$K = 0$ 响应矩阵差的范数约 1.6×10^{-15}。实际得到 $X_{s,--}(0) = 0.9600584242$；在严格 $K = 0$ 的物理子空间，曲率为 1.0416032762。但 $K = 0.0005$ 的全逆矩阵 CDW 对角投影为 1.2560032005。差异来自式 (3.9) 的混合，不是带隙消失。

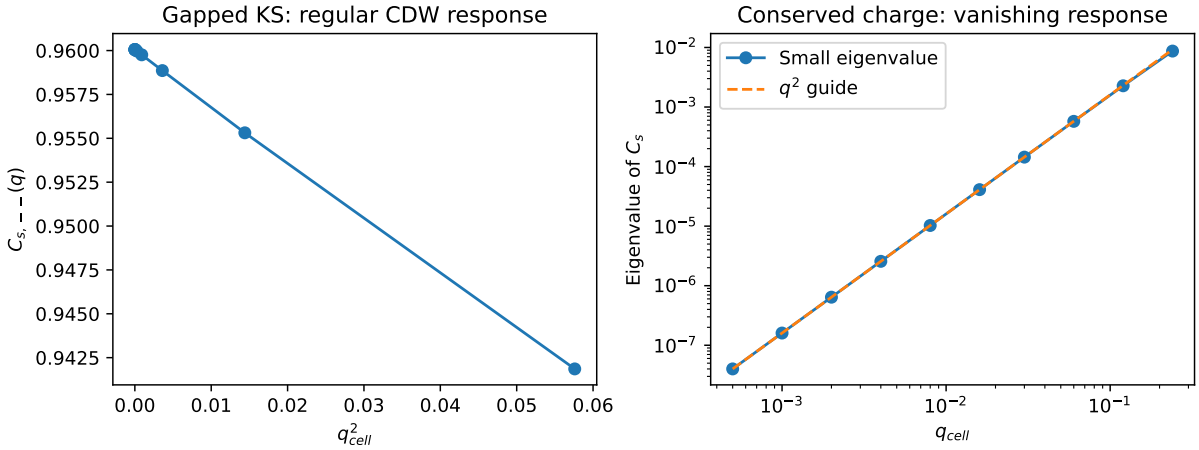


Figure 1: 本次实际执行的非相互作用 KS 检查。左：CDW 响应在小胞动量可按解析偶次幂变化。右：较小响应本征值按 K^2 趋零，使其逆出现奇异性。该图不包含相互作用 QCP 数据。

4 可执行的计算计划、误差预算与判据

4.1 阶段 A：ED 验证链条，先解决方法正确性

先做 $L = 6, 8, 10$，有余力再做 12。固定 $N_\uparrow = N_\downarrow = L/2$ 的 Fock 空间维数为 $\binom{L}{L/2}^2$：分别为 $400, 4900, 63504, 853776$。这个数来自分别选择两自旋的占据位置并取直积。$L \geq 10$ 应使用稀疏矩阵、矩阵自由算符及迭代求解；不能把六格点脚本的稠密全谱算法直接放大到 $L = 12$。

A1：Hamiltonian。先比较 $U = V = 0$ 多体基态与填满单粒子负能带的能量、$\delta \to 1$ 的孤立二聚体极限、平移两格点和粒子–空穴对称性。记录费米轨道排序，周期边界 hopping 的费米符号必须由占据奇偶计算。

A2：三种静态响应。第一种用完整激发态的式 (2.6)。第二种用有限场。对实模式 s，$O_s = \sum_j s_j(n_j - 1)$、$\mathcal{N}_s = \sum_j s_j^2$，定义

$$X_s(h) = -\frac{\langle O_s\rangle_{+h} - \langle O_s\rangle_{-h}}{2h\mathcal{N}_s} = X_s(0) + ah^2 + O(h^4), \tag{4.1}$$

$$X_s^{(E)}(h) = -\frac{E(+h) + E(-h) - 2E(0)}{h^2\mathcal{N}_s}. \tag{4.2}$$

式 (4.1) 来自 $O(h)$ 的奇部 Taylor 展开；h^2 误差来自三阶项。式 (4.2) 来自 $E(h)$ 的偶部 Taylor 展开，常数与一阶项被抵消，保留 $E''h^2$。至少用 3–5 个按几何比例减小的 h，对 h^2 外推而不是只取最小值。由 $X(h) = X_0 + ah^2 + \cdots$ 可直接消去 a 得 Richardson 值 $[4X(h/2) - X(h)]/3$，比较外推窗口稳定性。

第三种是不求完整激发谱的 resolvent 方法。令 $Q_0 = I - |0\rangle\langle 0|$，在正交空间解

$$Q_0(H - E_0)Q_0|x_j\rangle = Q_0\delta n_j|0\rangle, \quad X_{ij} = 2\,\mathrm{Re}\langle 0|\delta n_i|x_j\rangle. \tag{4.3}$$

把左端在 $|m\rangle$ 上对角化，$|x_j\rangle = \sum_{m>0}|m\rangle\langle m|\delta n_j|0\rangle/(E_m - E_0)$，代入右式恰为式 (2.6) 的负号转换。这条方法可推广到 MPS 线性响应，但近临界线性系统会病态，应报告求解残差与有效能隙。

A3：独立检验 Legendre Hessian。在零和势空间产生小幅 v，算实际基态密度与能量，构造 $F[n(v)] = E(v) - v \cdot n(v)$。零场参考点一阶项消失，检验

$$F[n_0 + \delta n] - F[n_0] = \tfrac{1}{2}\delta n^T K \delta n + O(\|\delta n\|^3), \quad K = X^+. \tag{4.4}$$

这不是把 $K = X^+$ 直接画出来冒充验证：左边必须由独立有限势基态计算，或用多方向数据拟合二次型后再比较 X^+。若仅沿一个势模式改变，其他密度也松弛，拟合的是约化曲率，不能无条件说验证了整个矩阵。还可反求给定目标密度所需势，固定密度方向检验全 Hessian。

A4：KS/Hxc。在同一个 L、边界条件、总粒子数、密度与 Fourier 规范下计算 X_s；用共同物理基底 B 构建逆；验证 Dyson 残差。在零场均匀密度上足以检验核，无需重构整个 $E_{\mathrm{Hxc}}[n]$。若验证非均匀参考点，迭代 KS 势直至 $\|n_s - n\|$ 小于核所需精度。

4.2 本次已完成的 ED 结果及其范围

运行 `research/benchmark.py`，实际完成 $L = 6$、周期边界、$U = 4, V = 2.5035, \delta = .2$、$N_\uparrow = N_\downarrow = 3$。400 维全谱得到 $E_0 = -12.8203360178$、中性隙约 0.7982207854；密度偏离 $n_j = 1$ 不超过 2.1×10^{-15}，$\|X\mathbf{1}\| \simeq 1.1 \times 10^{-15}$。归一化交错模式的 $X_\pi = 6.1210603747$。这只是小系统方法检查，中性隙非零不否定热力学临界点。

归一化模式场幅	X 中央差分	相对谱公式误差	Legendre 二次式相对误差
10^{-3}	6.1210232768	6.06×10^{-6}	3.03×10^{-6}
3×10^{-4}	6.1210570358	5.45×10^{-7}	2.76×10^{-7}
10^{-4}	6.1210600037	6.06×10^{-8}	1.02×10^{-8}

另一零和非纯交错势扰动的全矩阵 Legendre 二次型相对误差约 4.48×10^{-7}。原始数值在 `research/checks/summary.json`。本次没有完成 $L = 8, 10, 12$ 的 ED、相互作用全动量 Hxc 扫描或 DMRG；表中不存在临界指数拟合。

4.3 阶段 B：独立复现目标临界点

推荐初始网格是 $U/t = 4, \delta = .2, V/t \in [2.45, 2.56]$；先以约 10^{-2} 步长粗扫，再在响应、熵或相关长度峰附近逐级细化到 10^{-3} 和更小。$L = 32, 48, 64, 96, 128$ 是起步尺寸；$D = 400, 800, 1200, 1600$ 是起步 bond dimensions，二者都只是计划参数，不是保证收敛的阈值。

边界条件分工。OBC DMRG 适合基态关联与相界定位；选择强键终止以减少边界态，并将中央区与全链分开分析。PBC 响应直接对应离散动量块但纠缠成本较高；若只能使用 OBC，不能默认响应平移不变并套用 2×2 Fourier 逆。可用 OBC 全矩阵或明确的窗函数模态响应，辅以小尺寸 PBC 和无限链周期源验证。

必做的物理诊断如下。

1. **密度关联**。计算连通 $C_{ij} = \langle (n_i - 1)(n_j - 1) \rangle - \langle n_i - 1 \rangle \langle n_j - 1 \rangle$，分别保存偶/奇起点和两子晶格。由 $\rho_\pi \sim \sigma$ 推出 $C_{\mathrm{stag}} \sim r^{-2x_\sigma}$；Ising 拟合 $1/4$，同时看平滑分量的导数幂。不能先绝对值化所有数据而丢失振荡与符号。
2. **中性隙**。在相同 N, S^z 扇区计算 $\Delta_n = E_1 - E_0$，其定义就是最低中性激发代价。动力学标度 $\tau \sim \xi^z$ 给 $\Delta_n \sim \xi^{-z} \sim |V - V_c|^{z\nu}$；Ising $z = 1$。另计算自旋或带电隙有助于辨认仅中性模软化，不能要求所有隙都关闭。
3. **纠缠与相关长度**。MPS 转移矩阵最大两本征值满足 $|\lambda_0| > |\lambda_1|$ 时，关联沿胞距离 m 为 $(\lambda_1/\lambda_0)^m$，与 e^{-2m/ξ_D} 比较得 $\xi_D = -2/\log|\lambda_1/\lambda_0|$（物理格点单位）。不同对称扇区可有不同长度，需选 CDW 耦合扇区，不能只拿全局第二本征值不加说明。

共形诊断可用

$$S_{\mathrm{PBC}}(\ell)=\frac{c}{3}\log\left[\frac{L}{\pi a}\sin\frac{\pi\ell}{L}\right]+s_1, \tag{4.5}$$

$$S_{\mathrm{OBC}}(\ell)=\frac{c}{6}\log\left[\frac{2L}{\pi a}\sin\frac{\pi\ell}{L}\right]+s_b+\cdots, \quad S_{\mathrm{half,iMPS}}=\frac{c}{6}\log(\xi_D/a)+s_D. \tag{4.6}$$

简要来源：共形映射把平面间距替换为圆柱弦长；区间 Rényi 矩是两端 twist 场相关，$\mathrm{Tr}\,\rho^n\propto d(\ell)^{-(c/6)(n-1/n)}$；对 n 在 1 处求 $-\partial_n$ 得 $c/3$。开放边界或半无限切割只有一个独立端点，系数减半。边界熵、键振荡、有限 D 修正进入省略项，拟合应避开边界并分开奇偶键。

依据与归属：这些共形纠缠公式来自 [23]；有限纠缠标度与有限 D 红外截断见 [24]；MPS/DMRG 的定义、转移矩阵与求解框架见 [25]。本项目没有重新证明整套 CFT 或 DMRG 算法。

若要做式 (2.25) 的独立振幅检验，临界速度可由已辨识 CFT 能级的 $\Delta_a(L)=2\pi v_{\mathrm{cr}}x_a/L+\cdots$ 求得；这是圆柱 Hamiltonian $H-E_{\mathrm{bulk}}=(2\pi v_{\mathrm{cr}}/L)(L_0+\bar{L}_0-c/12)$ 的本征值差。另一检查是 $E_0(L)=e_\infty L-\pi c v_{\mathrm{cr}}/(6L)+\cdots$，由同一式的基态 $L_0=\bar{L}_0=0$ 得出 [26]。需辨认动量、粒子数和对称扇区，不能把任意最低能隙一律赋给 x_σ。关联振幅 A_σ 与 v_{cr} 分开拟合后再预测响应幅度，才称得上独立检验。

进入下一阶段的判据。随 L,D 增大，V_c 的估计一致，c 兼容 $1/2$，中性隙与密度关联支持同一 Ising 通道。不要用拟合目标指数 $7/4$ 反过来微调 V_c 直至看起来吻合。

4.4 阶段 C：真正的静态响应与复数矩阵重建

对周期系统取 $K=2\pi m/M$。每个 $\beta=A,B$ 分别施加 $v_{m\beta}=h\cos Km$ 与 $h\sin Km$，另一子晶格为零；对每一种做 $\pm h$ 和多个场幅。设中央差分密度导数为 $d^c_{m\alpha}$、$d^s_{m\alpha}$。对非 $0,\pi$ 的胞动量，卷积 $\delta n(K)=\chi(K)v(K)$ 与余弦正动量幅度 $h/2$ 给

$$\chi_{\alpha\beta}(K)=\frac{2}{M}\sum_m e^{-iKm}d^c_{m\alpha}=\frac{2i}{M}\sum_m e^{-iKm}d^s_{m\alpha}. \tag{4.7}$$

两种源应相互验证。$K=0,\pi$ 时正负动量重合，余弦系数由 $h/2$ 变为 h，故去掉前面的 2；正弦此时恒为零。只施加余弦但保留完整密度 Fourier 相位在原则上也能重建复数列；只记录同相投影会丢掉允许的虚部混合。

对每个场幅先比较反向扫场与不同初态，确认未跳到不同破缺分支；然后 $h^2\to0$ 外推，再将 $\chi\to(\chi+\chi^\dagger)/2$。应先记录原始反 Hermitian 残差再对称化，不能以此掩盖系统误差。检查 $X=-\chi$ 的半正定性、$X(-K)=X(K)^*$ 与严格 $K=0$ 的守恒零模。对临界本征向量按相邻 K 的重叠连续追踪，避免本征值排序交换造成假跳变。

Ising 局域场可从 $h/t\sim\epsilon_hL^{-15/8}$ 起步，$\epsilon_h=0.1,0.03,0.01$ 作为寻找平台的初猜，再根据数值噪声调整。$L=128$ 时 $L^{-15/8}\approx1.12\times10^{-4}$，例如 $\epsilon_h=0.03$ 对应约 $3.4\times10^{-6}t$。这只是量级估计；场度量因子未知，最终标准是外推平台和多尺度一致性。

若过小的场导致能量差淹没在求解误差中，优先用密度差或式 (4.3) 的线性求解。有限尺寸与有限 D 应分开收敛：有限链要求影响目标 observable 的 ξ_D 显著大于 L，或显式联合拟合；无限 MPS 的动量拟合窗口则要求 $\xi_D^{-1}\ll|k|\ll1$。$k\sim1/L$ 的数据属于有限尺寸标度，不能当作无限系统 k 幂律的一般采样。

4.5 阶段 D：矩阵反演、KS 比较与噪声控制

在 $K=0$ 先用已知 $B=e_-$ 投影；$K\neq0$ 保留完整 2×2。在确有守恒诱导病态时，按式 (3.13) 对行列尺度重标定后求解，并核对未重标定的物理结果。优先线性求解而非反复构造大逆矩阵。相互作用和 KS 必须使用相同规范模式，不能各自按相对最大本征值的任意阈值删去不同物理方向。

对可逆 $X+\delta X$ 展开 $(X+\delta X)^{-1}X=I-(X+\delta X)^{-1}\delta X$，一阶得

$$\delta K=-X^{-1}(\delta X)X^{-1}+O(\delta X^2), \quad \delta f=\delta K-\delta K_s. \tag{4.8}$$

临界大响应本征值的标量倒数并不会神秘地放大相对误差：$\delta K_c/K_c = -\delta X_c/X_c$。真正困难的是同时存在的很小响应本征值、基底混合，以及相减后留下的小奇异项。记录条件数、本征值的绝对误差，并将采样扰动传播至完整逆与投影，不用一个统一的 "10^{-12} 伪逆阈值" 代替物理判断。

数值误差预算按来源区分：有限 h 截断为 $O(h^2)$，密度噪声除以 h，能量噪声除以 h^2，有限 D 和 L 是系统误差，相界偏离通过 $(V - V_c)L^{1/\nu}$ 进入。应先要求这些误差显著小于待分辨的非解析项，再谈指数小数位。DMRG 扫描不是独立随机样本；bootstrap 主要用于原始场/尺寸块和残差模型，不能将同一收敛序列当作许多独立实验人为缩小置信区间。

4.6 阶段 E：指数、模型比较、振幅与有限尺寸塌缩

先对 $X_c(0, L)$ 和 $K_c(0, L)$ 做联合有限尺寸分析。由式 (2.15) 加入无关场可写

$$X_c(0, L, V) = L^p \left[\mathcal{F}((V - V_c)L^{1/\nu}) + L^{-\omega_{\rm irr}}\mathcal{F}_1((V - V_c)L^{1/\nu}) + \cdots\right] + X_{\rm reg}. \tag{4.9}$$

$\omega_{\rm irr} > 0$ 是修正指数，不是频率。先固定已知 p, ν 检验塌缩，再允许一个指数自由，避免把 $V_c, p, \nu, \omega_{\rm irr}$ 全部自由导致不适定拟合。有效指数 $p_{\rm eff} = \log[X(sL)/X(L)]/\log s$ 来自相邻尺度比值消去振幅，只是诊断而非最终统计估计。

对已定义清楚的 Hxc 标量或固定矩阵元，比较

$$\begin{aligned} M_0 &: f(k) = f_0 + b_2k^2 + b_4k^4, \\ M_1 &: f(k) = f_0 + A|k|^{7/4} + b_2k^2, \\ M_2 &: f(k) = f_0 + A|k|^p + b_2k^2. \end{aligned} \tag{4.10}$$

这些是候选拟合模型，不是已证明包含所有修正的精确表达。反演 regular background 可产生 $|k|^{2p}$ 等修正；本征向量投影也可能引入额外幂。每次拟合记录 $k_{\min}, k_{\max}, L, D, h$ 外推方法与协方差；检查移去最小/最大点后稳定性；用不同尺寸/动量块做留出预测，不能只比较训练误差。信息准则可辅助，但相关系统误差主导时不得机械当作显著性检验。

不要在 f_0 未知时直接画 $\log|f(k)|$ 的斜率；不能用精确 $k = 0$ 的伪逆矩阵元减去 $k \neq 0$ 的全逆矩阵元而忽视不连续极限。可拟合共同截距、使用同一连续分支上的差分，或单独分析总泛函本征曲率，后者不需要减去 KS 常数背景。

若得到独立 $A_\sigma, v_{\rm cr}$，式 (2.25) 预测 $A_K = v_{\rm cr}/(A_\sigma \mathcal{C}_x)$。近似独立测量下，$\mathrm{var}(\log A_K) = \mathrm{var}(\log v_{\rm cr}) + \mathrm{var}(\log A_\sigma)$；如共用数据则需减去两者协方差项。这是对对数振幅求一阶微分得到的误差传播。固定 p 的核振幅与此独立预测一致，会比只给 $p = 1.75$ 更有说服力。

4.7 阶段 F：实空间尾、离临界与控制实验

实空间尾。只在动量证据成立后做离散逆变换。对两子晶格完整保存 $f_{\alpha\beta}(R) = M^{-1}\sum_K e^{iKR} f_{\alpha\beta}(K)$；先说明是否已扣除守恒极点、解析背景与胞内坐标。对隔离出的 CDW 奇异部分，用光滑周期窗或晶格分数幂 $(2 - 2\cos k)^{p/2}$ 作为小 k 延拓。由 $2 - 2\cos k = k^2 + O(k^4)$ 可知它保留 $|k|^p$，又不在区边界产生人为跳跃。延拓仅用于稳健性检验，不是新的测量数据。

拟合距离应满足 $1 \ll r \ll L/2$ 且 $r \ll \xi_D$；不同 L 的周期像误差可用 $\sum_{m\in\mathbb{Z}} |r + mL|^{-1-p}$ 检查。先用人工给定的精确分数幂核和相同动量网格、误差水平检验恢复流程，再对真实数据使用。人工曲线必须标 "analytic/synthetic control"，不能混作 DMRG 结果。

离临界。优先从唯一 PI 分支取 $V < V_c$，独立提取 ξ，画 $\xi^p K_c$ 对 $k\xi$。预期 $k\xi \gg 1$ 接近临界幂，$k\xi \ll 1$ 进入有质量区。CDW 一侧若研究单一破缺分支，先 $L \to \infty$ 再去除选态场；必须用连通响应。若用有限链猫态，其隧穿劈裂可能导致巨大的序参量响应，不能当作体相常规响应；两种极限不可混合。

一阶。例如固定 $U/t = 12$ 扫描候选边界，跟踪两侧能量密度、序参量跳跃、亚稳分支和局部激发隙。远离严格共存点比较每个分支的小 k 核，不主张 "一阶必解析"。相变处有限体积近简并可造成异常大的响应，不能凭一个峰高区分 Ising。

Gaussian。用式 (2.33) 作为解析对照，证明相关长度发散与局域 Hessian 可以并存。格点版本用 $m^2+2-2\cos k$，其逆变换只有对角与最近邻，能直接验证 Fourier 代码与有限范围判据。

固定范围。先直接截断/拟合已知 kernel，比训练 ML 更便于定位误差。对于以尾部权重重建的分数核，常数项调到临界后，其低动量部分可写为 $\sum_{r\le R} w_r(1-\cos kr)$，$w_r \propto r^{-1-p}$。当 $kR \ll 1$，Taylor 展开得

$$K_R(k) \propto k^2 \sum_{r\le R} r^{1-p} \sim k^2 R^{2-p}, \qquad \frac{K_R(k)}{|k|^p} \propto (kR)^{2-p} \longrightarrow 0. \tag{4.11}$$

第一步用 $1-\cos kr \simeq (kr)^2/2$；第二步用积分估计 $\sum r^{1-p} \sim R^{2-p}/(2-p)$，要求 $0<p<2$。这是一个截断核的具体诊断，不是对所有学习器的误差下界。若未正确调临界常数，还会出现人为质量项。应固定 R 和参数，在更大 L 上留出测试；每个 L 重新训练可掩盖渐近失效。

之后再选 $R=1,2,4,8$ 的二次可微架构学习局域能量密度，比较能量、势导数、Hessian、响应误差。可采用设计损失

$$\mathcal{L} = w_E|E_{\text{pred}}-E|^2 + w_v\|P(\nabla F_{\text{pred}}+v)\|^2 + w_K\|B^T(F^{(2)}_{\text{pred}}-K)B\|_F^2. \tag{4.12}$$

三项分别来自能量数据、Euler 方程及 Hessian 恒等式，权重须先按能量单位和自由度归一化。这是研究建议，不是现有文献中的唯一方案。验证必须包括跨尺寸及邻近相界的留出集合；能量精度好并不保证微分精度 [13, 27]。

4.8 阶段 G：三临界扩展的额外成本

三临界点有至少两个相关偶宇称调谐方向；固定二聚化后要同时定位 U_t, V_t。不能只固定近似 $U_t = 10.56$ 扫 V 就声称已到达三临界。先检验 $c \simeq 7/10$、$C_{\text{stag}} \sim r^{-3/20}$，再检验 $X \sim L^{37/20}$。使用临界场维数 $y_h = 77/40$ 设计有限场，有限尺寸和有限纠缠的 crossover 必须显式纳入分析。

Ising 的 $p = 1.75$ 与三临界的 $p = 1.85$ 仅差 0.10，需要系统误差明显小于这一区分量。应报告能够排除另一指数的联合收敛证据，而不是各自用固定指数画出看似良好的线。没有达到此精度时，三临界部分可作为未来工作而非完成的结论。

4.9 如要做真实量子模拟实验，应测什么

本课题作为理论/计算论文并不要求搭建实验装置。若有能实现二聚化 hopping、可调在位与最近邻作用、局域势调制及密度读出的量子模拟平台，可用同样的 $\pm h$ 调制测密度导数；只测等时密度涨落不足以给零温静态响应。需要独立标定 t_1, t_2, U, V、填充、温度与势空间图样，并验证参数变化不同时改变多个未控制项。这里列的是平台功能要求，不声称某个现有装置已同时满足它们。

实验应选择 $T \ll v_{\text{cr}}/L$（有限尺寸基态区）或 $T \ll v_{\text{cr}}|k|$（有限动量临界区）；这来自热时间 $1/T$ 要长于目标模的 $1/\Delta$。先测响应矩阵，再与经密度匹配构造的计算 KS 参考相减；Hxc 本身不是直接可测观测量。需把势标定误差和有限温度混合态误差传播到逆响应。若目标为有限温度，改用自由能的 Legendre 变换，不能称所得曲率为零温 $F[n]$ 的 Hessian。

4.10 七幅主图、优先级与原始数据规范

图	内容与横纵轴	判据和最可能的伪信号
1	理论链与通道定义	区分 X 本征值、全矩阵逆和约化泛函；标注 T_s 解析条件。概念图不作为数值证据。
2	相界定位与物理基准	$\xi, \Delta_n, c, C_{\text{stag}}$ 对 V, L, r；检查 V_c、边界态和有限 D。
3	$X_c(0,L)$ 与 $K_c(0,L)$	log–log、尺度比及塌缩；归一化正确后测试 $L^{\pm 7/4}$，用能隙和密度通道交叉辨认。
4	$K_c(k)$ 的动量标度	多个 L, D 与窗口，自由指数和修正；避免将 $k \sim 1/L$ 当作热力学动量数据。

5	$X_s^{-1}, X^{-1}, f_{\mathrm{Hxc}}$	全矩阵及清晰的 CDW 投影并列；先处理守恒极点与混合，再判非解析项归属。
6	奇异部分实空间尾	$(-1)^r f_c^{\mathrm{sing}}(r)$ 与带符号振幅预测；窗函数、周期像和噪声恢复对照。
7	对照和泛函约束	离临界塌缩、Gaussian、一阶分支、固定 R 跨尺寸测试；三临界可增为第八图。

建议优先级为：ED/KS 方法检查；普通 Ising 物理与静态响应；全矩阵 Hxc 的归属；振幅、长尾及有限范围测试；最后三临界。无需一开始同时投入 ML 与昂贵三临界扫描。

每个数据文件至少包含 $L, M, N_\uparrow, N_\downarrow, U, V, \delta$、边界/胞内规范、$D$、能量方差或截断误差、sweep 数与收敛条件、场幅/图样、原始 E, n、完整复数 χ、Hermitian 残差、逆的物理基底、代码版本与随机初态。响应、Hessian、拟合结果分层保存，不能只保留最终指数。拟合表应含所有失败窗口和排除原因，以便他人复算。

完成层级。完成全泛函本征曲率标度是第一层；完整核与投影分析支持 Hxc 非解析归属是第二层；验证振幅和固定范围失效为第三层。当前交付完成理论蓝图、文献核查与小规模方法检查，尚未达到以上任一多体热力学数值完成层级。

5 文献证据表、README 公式覆盖与写作检查

5.1 本地 15 份文献的逐项用途

以下目录编号直接对应项目的 `files/编号/`，页码优先指原文印刷页/文章页；注明 “PDF 页” 时指本地文件的物理页序。已提取文本到 `research/sources/`，OCR 式文本可能丢失数学符号；关键算符辨识同时核看了原 PDF 第 5 页图像。表中“不能支持”用于约束论文措辞，不是否定原文贡献。

目录	文献	核查位置、可用证据与适用边界
358	Tsuchiizu–Furusaki 2004 [21]	摘要、引言及关于键交替的分析：说明显式二聚化改变相图和临界类型；用作选模动机，不提供本项目精确 Hxc 核。
361	Ejima 等 2016 [18]	II–III 节：模型、gap、相图和熵；IV.B 式 (23)–(27)：$\rho_\pi \sim \sigma$、$\rho_0 \sim \partial_x \sigma$；图 5：三临界坐标与相关幂；附录 A 和图 8：$U = 4, V_c \simeq 2.503$ 的 Ising 密度关联。这是通道映射的核心依据。
364	Schönhammer 等 1995 [3]	格点 DFT/KS 的早期模型构造，比较 exact 与 LDA gap；用于基本框架。不能借它替代现代格点可表示性条件。
367	Carrascal 等 2015，含勘误 [4, 28]	本地文件前部包含 2017 corrigendum，修正原文 (56)、(114)、(115)；后附原综述。本文只引用 dimer 的 DFT 基础，未依赖这些被修正的插值式。若以后复制其解析公式，必须以勘误为准。
369	Cronin 等 2025 [13]	第 195103-4 页式 (8)、(9)：窗口密度能量与自动微分 KS 势；III.B、III.C 及后文极化率：范围与精度研究。原文采用 ELU 保障一阶导连续，不能不检查二阶可微性就在所有密度点应用本文 Hessian 命题。
372	Sondhi 等 1997 [7]	时空映射、动力学标度与有限尺寸/温度标度的背景。给出缩放框架，不独立证明所选格点密度必耦合到磁性序参量。
375	Pollmann 等 2009 [24]	PDF 第 1–3 页的有限纠缠和相关长度理论。用于有限 D 截断判据；不是任意截断误差阈值都可保证响应收敛的依据。
379	Fukuda 等 1994 [6]	§2：Legendre 定义；§3：与 HK 关系；§4：响应/激发；§7：反演方法。本文采用静态凸对偶版，并另补 fixed-N 零模与系综条件。

382	Ejima 等 2018 [19]	§3.1、图 4：$V_c \simeq 2.5035$、$\beta = 1/8$；中性隙给 $\nu = 1$；三临界段给 $\beta = 1/24, \nu = 5/9$。本文 $p = 37/20$ 是进一步推论，不是原文已经计算了泛函核。
386	Buchta 等 2007 [22]	本地为 arXiv 版本，首页有重排版日期；正式期刊为 PRB 75,155108 (2007)。研究 SU(n) Mott 与自发二聚化，作背景阅读，不能替代显式二聚化 SU(2) 的 Ising 证据。
389	Aryasetiawan–Gunnarsson 2002 [12]	第 165119-2 页式 (8)、(12) 及其后文字：Dyson、逆响应核、常势零模、规范非唯一性。研究含有限频的二维小 Hubbard 模型，本项目只借其静态结构，不能借用该模型的数值结论。
392	Nagy–Romera 2013 [9]	从非简并推广到基态子空间/简并情形。用于提示相变与泛函映射的既有研究，不是保证共存点 ordinary Hessian 存在的定理。
394	Mao 等 2021 [14]	摘要、模型定义、式 (11)–(13) GGA 结构：广义密度是横场方向极化；研究局域/半局域近似误差。不能给该通道直接贴 $x_\sigma = 1/8$。
396	Costa 等 2023 [15]	II–IV 节的 DFT 定义、Ising 测试模型及可扩展网络；第 125113-3–4 页讨论感受野与导数稳定。研究随机横场与相关性的影响，不是本文洁净 CDW 普适指数的直接验证。
401	Robledo Moreno 等 2020 [11]	PDF 第 4 页关于跨相变 HK 映射和 Legendre 非解析性的讨论。说明“学习跨相变映射困难”已有先例；本文的新主张必须落实到空间 Hessian 和 KS 分配。

5.2 网上补充的主要一手来源

DFT 基础补充 [1, 2, 5]；格点映射例外补充 [17]；有限尺寸 CFT 和 MPS 方法补充 [23, 25, 26]；Fourier 非局域算子补充 [20]。这些来源的 DOI 或 arXiv 链接在文末 BibTeX 生成的文献表中，公式旁已明确各自使用范围。

README 中仅提到作者/年份的 2026 资料已进一步核查：Romera–Nagy 是 *Entropy* 28,170；Cheng–Marianetti 的工作正式刊于 PRB 113,L081108，同时有 arXiv:2508.14110；Salmon 等可核对 arXiv:2603.00802[10, 16, 27]。这里只让这些工作支持研究背景、1-RDM 与密度泛函的区别及微分一致性问题，不用它们代替空间核定理。

5.3 README 各组公式在本稿中的覆盖位置

README 多次重复相同等式，下表按独立公式族合并，不把重复排版当成不同推导。模型 Hamiltonian、参数值、候选拟合式及损失函数属于定义或设计；它们说明来源与用途，而不是伪装成可由公理推出来的数值结果。

README 节号	公式/论点	本稿对应推导或处理
一–二	研究问题、DFT/QPT 文献链	第 1 节；文献归属与新颖性边界。
三	$H_g, E_g, F_g, n_i, \chi, F''$	式 (2.1)–(2.9)；补系综、凹凸、零模、谱符号。
四–五	$\xi, \eta, \chi(k,\omega), F_c''$	式 (2.13)–(2.16)；附本征通道命题与假设。
六	$F = T_s + E_{\mathrm{Hxc}}$，逆响应差	式 (2.10)–(2.11)、(2.26)；补 KS 同密度和投影条件。
七	有限范围 Fourier、实空间幂律	式 (2.28)–(2.32)；补常数、负号、接触项和矩阵限定。
八–十	Hubbard、KS bands/gap、两胞响应	式 (3.1)–(3.8)；明确 $K = 2k$ 与胞内相位。
十一	$7/4, 11/4$ 预测	式 (2.16)、(2.30)；Hxc 为条件性通道预测。
十二	ED、Hellmann–Feynman、Legendre 重建	式 (2.4)–(2.6)、(4.1)–(4.4)；附本次实际小系统数据。

十三–十四	gap、熵、等时关联与静态响应	式 (2.7)、(2.17)；阶段 B–C 详述观测量和时间积分差别。
十五–十七	场维数、响应矩阵、$L^{7/4}$	式 (2.18)–(2.19)、(4.7)；修正未归一化总响应的额外 L。
十八–十九	Lindhard 与 Hxc 投影	式 (3.7)、(3.9)–(3.15)；这是本稿对原方案最重要的补充。
二十–二十二	拟合、Fourier、CFT 振幅	式 (4.10)、(2.21)–(2.25)、(2.28)；给独立幅度与不确定度路线。
二十三–二十六	离临界塌缩、一阶、Gaussian	第 2 节末及阶段 F；式 (2.33)，不定义未经证明的 $\xi_F = \xi$。
二十七	三临界 $37/20, 57/20$	式 (2.20)；阶段 G 添加第二相关场和指数分辨率要求。
二十八–三十	finite-range no-go、ML 导数	式 (2.32)、(4.11)、(4.12)；明确固定范围及 C^2 条件。
三十一–三十二	go/no-go、病态、极限次序	阶段 B–G；式 (4.8) 修正“取倒数总会放大误差”的笼统说法。
三十三–三十五	模块、参数与七幅图	第 4 节的阶段化方案、数据规范及图表计划。
三十六–四十	完成层级、学习路线与第一批工作	第 1 节结构及下文完成判据；不承诺特定期刊档次。

5.4 最需要修改的原始表述

1. 将“$\chi \sim A|k|^{-p}$，$A > 0$”改为正响应 $X = -\chi$ 的表述；原 $+vn$ 约定下 χ 负半定。
2. 将所有 $\partial\langle\sum n\rangle/\partial h$ 的尺寸标度明确除以源范数。全系统总量与强度归一化响应不能混写。
3. 将“KS gapped，所以 χ_s^{-1} 解析”改为通道条件；本次实际计算已经展示完整逆矩阵与 CDW 投影倒数不同。
4. 不忽略 [18] 的平滑密度导数耦合。不把本征值的 Fourier 变换自动视为某个实空间格点矩阵元。
5. 将 $r^{-11/4}$ 写为分离出的 *CDW* 分数幂成分的预测；在证明矩阵背景条件前，不声称它是完整 Hxc 核唯一或主导的长程尾。
6. 不把“非 Gaussian”视为充分数学假设；检查密度重叠、实际幂/对数结构、KS 分配、可微性和极限次序。
7. 不将一阶共存点的非可微性或有限链隧穿响应当作普通分支曲率；不把总粒子数方向的导数不连续性与固定 N 的 CDW 空间核混同。
8. “固定范围不能精确”限定为固定参数规则下的泛函 *Hessian* 临界奇异部分；不推出任何有限数据训练都无法获得良好的能量。

5.5 写作与提交前的核对表

每个核心等式在稿中应有四个信息：变量/归一化、假设、推导或出处、可否由数据检验。式 (2.9) 是恒等式；式 (2.16) 是临界假设下的推论；式 (2.26) 是额外 KS 条件下的命题；式 (3.11) 的算符输入来自参考文献；式 (4.10) 是统计候选模型。这五种性质必须让读者一眼区分。

没有 DMRG 数据前，正文 VI–VII 应保持研究计划时态。未来填入结果时应同时给相界估计、场幅外推、bond dimension/尺寸/窗口依赖、矩阵混合、原始响应和拟合脚本；不能只给最佳拟合图。若 Hxc 归属条件失败，改写题目与摘要围绕已成立的全泛函或矩阵结果，不隐藏失败条件。

本稿使用项目提供的 `arxiv.sty`，保留原 `template.tex` 与示例文献库，另外建立自己的正文和 BibTeX。中文采用 TeX Live 自带 Fandol 字体，不依赖模板中的 Windows 手写体。编译采用 XeLaTeX、BibTeX、XeLaTeX 两遍；中文工作稿是内部研究文档，最终投稿语言、篇幅与目标期刊格式应再单独处理。

References

[1] P. Hohenberg and W. Kohn. Inhomogeneous electron gas. *Physical Review*, 136:B864–B871, 1964. doi:10.1103/PhysRev.136.B864.

[2] W. Kohn and L. J. Sham. Self-consistent equations including exchange and correlation effects. *Physical Review*, 140:A1133–A1138, 1965. doi:10.1103/PhysRev.140.A1133.

[3] K. Sch"onhammer, O. Gunnarsson, and R. M. Noack. Density-functional theory on a lattice: Comparison with exact numerical results for a model with strongly correlated electrons. *Physical Review B*, 52:2504–2510, 1995. doi:10.1103/PhysRevB.52.2504.

[4] D. J. Carrascal, J. Ferrer, J. C. Smith, and K. Burke. The Hubbard dimer: a density functional case study of a many-body problem. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 27:393001, 2015. doi:10.1088/0953-8984/27/39/393001.

[5] Elliott H. Lieb. Density functionals for Coulomb systems. *International Journal of Quantum Chemistry*, 24: 243–277, 1983. doi:10.1002/qua.560240302.

[6] Reijiro Fukuda, Takao Kotani, Yoko Suzuki, and Satoshi Yokojima. Density functional theory through Legendre transformation. *Progress of Theoretical Physics*, 92:833–862, 1994. doi:10.1143/ptp/92.4.833.

[7] S. L. Sondhi, S. M. Girvin, J. P. Carini, and D. Shahar. Continuous quantum phase transitions. *Reviews of Modern Physics*, 69:315–333, 1997. doi:10.1103/RevModPhys.69.315.

[8] L.-A. Wu, M. S. Sarandy, D. A. Lidar, and L. J. Sham. Linking entanglement and quantum phase transitions via density-functional theory. *Physical Review A*, 74:052335, 2006. doi:10.1103/PhysRevA.74.052335.

[9] Á. Nagy and E. Romera. Quantum phase transitions via density-functional theory: Extension to the degenerate case. *Physical Review A*, 88:042515, 2013. doi:10.1103/PhysRevA.88.042515.

[10] Elvira Romera and Ágnes Nagy. Density functional theory and information-theoretic diagnostics of quantum phase transitions. *Entropy*, 28:170, 2026. doi:10.3390/e28020170.

[11] Javier Robledo Moreno, Giuseppe Carleo, and Antoine Georges. Deep learning the Hohenberg–Kohn maps of density functional theory. *Physical Review Letters*, 125:076402, 2020. doi:10.1103/PhysRevLett.125.076402.

[12] F. Aryasetiawan and O. Gunnarsson. Exchange-correlation kernel in time-dependent density functional theory. *Physical Review B*, 66:165119, 2002. doi:10.1103/PhysRevB.66.165119.

[13] Eoghan Cronin, Rajarshi Tiwari, and Stefano Sanvito. Machine learning semilocal exchange-correlation functionals for Kohn–Sham density functional theory of the Hubbard model. *Physical Review B*, 112:195103, 2025. doi:10.1103/vm99-khkz.

[14] Jiahao Mao, Haifeng Tang, Wenhui Duan, and Zheng Liu. Testing density functional theory in a quantum Ising chain. *Physical Review B*, 104:155145, 2021. doi:10.1103/PhysRevB.104.155145.

[15] E. Costa, R. Fazio, and S. Pilati. Deep learning nonlocal and scalable energy functionals for quantum Ising models. *Physical Review B*, 108:125113, 2023. doi:10.1103/PhysRevB.108.125113.

[16] Zhengqian Cheng and Chris A. Marianetti. Mott transition from the nonanalyticity of the one-body reduced density-matrix functional. *Physical Review B*, 113:L081108, 2026. doi:10.1103/z7qw-99jc.

[17] Markus Penz and Robert van Leeuwen. Density-functional theory on graphs. *The Journal of Chemical Physics*, 155:244111, 2021. doi:10.1063/5.0074249.

[18] Satoshi Ejima, Fabian H. L. Essler, Florian Lange, and Holger Fehske. Ising tricriticality in the extended Hubbard model with bond dimerization. *Physical Review B*, 93:235118, 2016. doi:10.1103/PhysRevB.93.235118.

[19] Satoshi Ejima, Florian Lange, Fabian H. L. Essler, and Holger Fehske. Critical behavior of the extended Hubbard model with bond dimerization. *Physica B: Condensed Matter*, 536:474–478, 2018. doi:10.1016/j.physb.2017.09.001.

[20] Anna Lischke, Guofei Pang, Mamikon Gulian, Fangying Song, Christian Glusa, Xiaoning Zheng, Zhiping Mao, Wei Cai, Mark M. Meerschaert, Mark Ainsworth, and George Em Karniadakis. What is the fractional Laplacian? a comparative review with new results. *Journal of Computational Physics*, 404:109009, 2020. doi:10.1016/j.jcp.2019.109009.

[21] M. Tsuchiizu and A. Furusaki. Ground-state phase diagram of the one-dimensional half-filled extended Hubbard model. *Physical Review B*, 69:035103, 2004. doi:10.1103/PhysRevB.69.035103.

[22] K. Buchta, Ö. Legeza, E. Szirmai, and J. Sólyom. Mott transition and dimerization in the one-dimensional $SU(n)$ Hubbard model. *Physical Review B*, 75:155108, 2007. doi:10.1103/PhysRevB.75.155108.

[23] Pasquale Calabrese and John Cardy. Entanglement entropy and quantum field theory. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, page P06002, 2004. doi:10.1088/1742-5468/2004/06/P06002.

[24] Frank Pollmann, Subroto Mukerjee, Ari M. Turner, and Joel E. Moore. Theory of finite-entanglement scaling at one-dimensional quantum critical points. *Physical Review Letters*, 102:255701, 2009. doi:10.1103/PhysRevLett.102.255701.

[25] Ulrich Schollw"ock. The density-matrix renormalization group in the age of matrix product states. *Annals of Physics*, 326:96–192, 2011. doi:10.1016/j.aop.2010.09.012.

[26] H. W. J. Bl"ote, J. L. Cardy, and M. P. Nightingale. Conformal invariance, the central charge, and universal finite-size amplitudes at criticality. *Physical Review Letters*, 56:742–745, 1986. doi:10.1103/PhysRevLett.56.742.

[27] Octavio D. R. Salmon, Minos A. Neto, J. Roberto Viana, and Griffith Mendonça. Revisiting the machine-learning density functional for the one-dimensional Hubbard model with random external potential, 2026. URL https://arxiv.org/abs/2603.00802. 本文使用已核查的 arXiv 版本.

[28] D. J. Carrascal, J. Ferrer, J. C. Smith, and K. Burke. Corrigendum: The Hubbard dimer: a density functional case study of a many-body problem. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 29:019501, 2017. doi:10.1088/0953-8984/29/1/019501.