

# 物理诺奖之 Haldane 相的来龙去脉\*

张广铭<sup>†</sup>

(清华大学物理系 北京 100084)

2016-11-21 收到

<sup>†</sup> email: gmzhang@tsinghua.edu.cn

DOI: 10.7693/wl20161202

## The origin of the Haldane gapped phase

ZHANG Guang-Ming<sup>†</sup>

(Department of Physics, Tsinghua University, Beijing 100084, China)

**摘要** 文章系统地介绍了量子反铁磁海森伯自旋链中“Haldane 猜想”提出的历史背景和导致的物理后果,以及相关研究工作的发展、演化的来龙去脉。可以从中看到,正是“Haldane 相”的研究,开辟了当今凝聚态物理学的一个崭新领域,即对称保护拓扑量子物态。

**关键词** 量子反铁磁自旋链, 整数自旋, 量子拓扑物态, Haldane 相

**Abstract** We present a comprehensive review of the history and physical consequences of the Haldane conjecture proposed with regard to quantum antiferromagnetic Heisenberg spin chains. In particular, we focus on the various related historic developments, and show that the study of the Haldane gapped phase has opened up a new research field in condensed matter physics—symmetry protected topological phases.

**Keywords** quantum antiferromagnetic spin chains, integer spins, topological phases of matter, Haldane gapped phase

2016年诺贝尔物理学奖授予了美国华盛顿大学的 David J. Thouless 教授、普林斯顿大学的 F. Duncan M. Haldane 教授和布朗大学的 J. Michael Kosterlitz 教授,以表彰他们三位在“拓扑相变和奇异物态”方面的重大理论发现。诺贝尔委员会在声明中指出, Haldane 教授最早发现了拓扑的概念可以用于理解某些一维磁性材料中的物理特性。这一重要的理论发现在上世纪八十年代受到凝聚态物理学家们的普遍关注,被称为 Haldane 猜想。为了证明这个猜想,人们进行了大量的理论研究。很快,在一些具体的一维磁性材料中,物理学家们运用多种实验手段证实了这个猜想的正确。后来人们发现“Haldane 相”是具有对称

保护拓扑序的一类拓扑物态。那么“Haldane 相”是如何建立的呢?

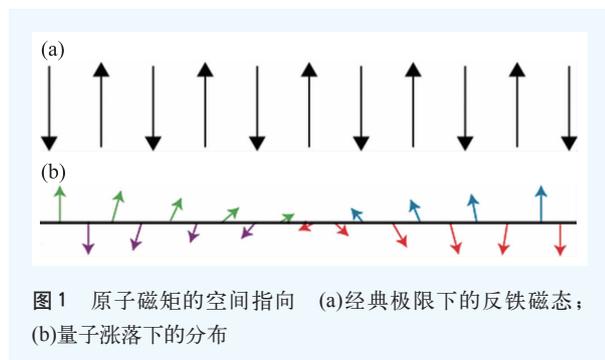
自从二十世纪初量子力学建立以来,人们在原子尺度上对自然界微观规律的认识进入了新的时代,量子力学基本理论在解释各种物理实验现象上取得了巨大的成功。然而,在面对由大量粒子组成的多体系统时,尽管微观粒子的运动规律满足量子力学的运动方程——薛定谔方程,但是求解粒子数在  $10^{23}$  量级组成的系统所对应的薛定谔方程是一个不可能完成的任务。随着超导、超流等众多新奇宏观量子效应的发现,人们逐渐认识到大量粒子组成的复杂体系,其整体行为不能通过其微观组成单元的性质外推而得。因此,在量子多体系统中寻找新的方法,发展新的概念,一直是凝聚态物理学研究中的重要课题。这一领

\* 本文曾于2016年10月19日在公众号《赛先生》发布。

域的不断发 展，逐步形成了一种新的科学指导思想——演生论(Emergence)，即认为自然界依据尺度和复杂性分为不同的层次，每一个层次都有其特有的基本规律，并与其组成部分的微观细节相对独立。1977年诺贝尔物理学奖得主 P. W. Anderson 对演生论有一个精辟概述：More is different。

自然界中有很多磁性系统(也叫自旋系统)，其中自旋可以有不同的大小，也可以有所谓的反铁磁相互作用，也就是相邻的自旋总是想处于反平行的状态。量子多体系统中的一个重要领域是对量子磁性(自旋)系统的研究。早在量子力学建立初期的1931年，理论物理学家 H. Bethe 就对一维量子自旋  $1/2$  反铁磁链进行了研究，证明它是一个无能隙的态；也就是轻微的扰动，就能产生像水波一样的自旋波。对于高维情形下的反铁磁体，Anderson 等人在五十年代发展了自旋波理论，预言了反铁磁 Heisenberg 模型具有反铁磁长程序。它无能隙的低能激发对应于自旋扰动的自旋波。这些反铁磁态，可以被轻易地扰动，产生像水波一样的自旋波。然而，Mermin—Wagner—Coleman 指出，在一维具有自旋连续对称性体系中，即使在零温下，量子涨落所对应的自旋扰动会很强。这些强扰动会完全破坏反铁磁长程序的存在。这意味着一维量子自旋系统中可能存在许多不同寻常的物理。特别是这些没有反铁磁序的一维物质，对其轻微的扰动，能不能产生像水波一样的自旋波？

如果构成一维磁性材料的单个原子具有一个电子的磁矩时， $S=1/2$ ，单个原子磁矩的空间指向可以是任意方向，并具有自旋旋转不变性。如果



考虑最近邻原子间存在磁性耦合，那么每个原子磁矩的空间指向受到极大的限制。特别是，当磁性耦合为反铁磁性时，近邻原子磁矩的反平行排布会使整个系统能量较低。在经典极限下，所得基态(能量最低态)为对称性破缺的反铁磁有序态，如图1(a)所示。但是，从量子力学的角度看，这样的基态不能稳定地存在。因为在量子涨落的影响下，这些自旋可以连续随机地转动(图1(b))。

这些自旋随机扭曲的量子态的等权叠加构成了自旋液体态。因此，自旋  $1/2$  量子反铁磁链的基态中不存在任何的磁有序；所对应的基态波函数包含有强烈的自旋涨落，其中每个原子磁矩都在试图恢复它自身的旋转对称不变性。这样的量子叠加态所构成的多体基态波函数，实际上描述了一种量子液体，今天被人们称之为量子临界物态。

事实上，构成磁性材料的单个原子可以具有几个电子磁矩的大小，这时量子反铁磁 Heisenberg 模型中的自旋  $S$  可以取  $1, 3/2, 2, 5/2, 3, \dots$  等正整数和半奇整数。研究这种推广的量子反铁磁自旋链的物理性质已经成为理论物理的重要课题，它涉及了凝聚态物理、量子场论、数学物理等多个研究领域，一直是物理学发展中的常青树。为研究这类体系的物理性质，人们发展了许多解析方法，如可积模型、玻色化、共形场论等许多有力的理论工具，还有若干重要的精确数值计算方法。

结合多种理论处理方法，人们确认量子自旋  $1/2$  反铁磁链的基态没有长程序，自旋—自旋两点关联函数呈幂律形式衰减，低能激发为分数化的准粒子。简单地说，自旋  $1/2$  的反铁磁链可以很容易地被扰动，从而产生像水波一样的自旋波。尽管自旋  $S > 1/2$  的量子反铁磁自旋链不能严格求解，但人们长期以来认为这类体系的物理性质与自旋  $1/2$  的情形定性相似，也有像水波一样的自旋波。

然而，在1983年，Haldane 提出了著名的 Haldane 猜想<sup>[1, 2]</sup>：自旋为  $S$  的量子反铁磁自旋链

的物理性质可分为整数自旋和半奇整数自旋两个不同的普适类。整数自旋情形下，体系低能激发谱有能隙，自旋—自旋两点关联函数随距离呈指数形式衰减。简单地说，体系对任何轻微的扰动没反应，没有像水波一样的自旋波。半奇整数情形下，低能激发无能隙，自旋—自旋两点关联函数随距离呈幂律形式衰减。这时对体系的轻微扰动就能产生像水波一样的自旋波。这一惊人结论彻底改变了人们认为整数自旋  $S$  的量子反铁磁链与自旋  $1/2$  情形定性相同的传统看法。

自旋链是一维的，加上时间我们就得到二维时空。自旋的量子涨落就是二维时空上的一个自旋分布。这一分布可以是拓扑平凡的，比如所有自旋都是平行或反平行某一个方向；也可以是拓扑不平凡的：如果把这些自旋的原点都放在一起，这些自旋像刺猬的刺一样向外发散(图2)。Haldane 发现，对于整数自旋和半整数自旋两种情况，拓扑不平凡的自旋分布有完全不同的量子效应。这使他得出结论：整数自旋链和半整数自旋链具有完全不同的物理性质，前者对轻微扰动没反应，而后者对其轻微扰动能产生像水波一样的自旋波。更为奇特的是，整数  $S$  自旋链如果有端点的话，端点竟然会带有半整数  $S/2$  的分量化自旋。

在量子一维反铁磁 Heisenberg 模型中，由于存在很强的量子涨落，反铁磁长程序不能真正形成，但是我们仍然可以期待在晶格尺度上有短程的反铁磁关联。为此，Haldane 在自旋相干态表象下，准确写下带有 Berry 相位的体系配分函数。依据 Wilson 重整化群的思想，在长波极限下将体系中的“高能”的快变量进行了有效处理，从而导出能描述体系“低能”有效的物理模型。在这个低能有效物理模型中，人们惊奇地发现，Berry 相因子变为一个时空变量积分的拓扑项，它的系数为  $2\pi S$ 。只有当自旋的涨落在时空上的分布是拓扑不平凡的时候，这一拓扑项才有贡献。当  $S$  为整数时，配分函数中的拓扑项可以忽略，低能有效物理模型约化为量子场论中可求解的  $O(3)$ 非线性  $\sigma$ 模型<sup>[3]</sup>。该模型的低能激发谱有能

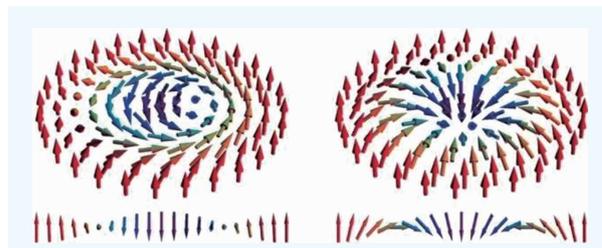


图2 二维时空中的自旋涨落。图中的两个自旋分布，都是拓扑不平凡的



图3 Haldane 在植物园里做理论计算(图片来自文小刚教授)

隙，关联函数在长距离下呈指数形式衰减，所对应的量子多体基态是一种没有任何对称性破缺的量子物态，被后人称为“Haldane相”。非常有趣的是，在开放边界条件下，拓扑项则会出现在自旋链的两端，给出一个渐近自由的自旋  $S/2$  边缘态，这正是 Haldane 相的拓扑特征的体现。

然而，当  $S$  为半奇整数自旋时，拓扑项不可忽略，将导致体系中自旋涨落的量子干涉效应异常强烈。此时体系的有效作用量，在量子场论领域被称为带有拓扑项的  $O(3)$ 非线性  $\sigma$ 模型。人们对这个模型的认识远比不含拓扑项的情形要少得多，但大家普遍认为拓扑项的存在将会产生重要的非微扰量子效应。进一步的研究表明<sup>[4-6]</sup>，拓扑

项的存在使得体系的低能性质被一个重整化群的不动点所控制，即自旋  $1/2$  量子反铁磁 Heisenberg 模型的低能有效场论。这一发现暗示了所有的半奇整数自旋量子反铁磁 Heisenberg 模型与自旋  $1/2$  情形属于同一普适类，即量子临界状态，体系的低能激发为分数化的准粒子，自旋—自旋两点关联函数在长距离下呈幂率衰减。

为进一步理解半奇整数量子反铁磁自旋链的量子临界状态，Affleck 和 Lieb 推广了 Lieb 等人在自旋  $1/2$  体系中 Lieb—Schultz—Mattis 定理的证明<sup>[7]</sup>，他们指出：对于一维具有半奇整数自旋的体系，在平移和自旋旋转不变的情形下，如果体系的基态无简并，则基态之上一定存在无能隙的激发。作为一维量子自旋系统中一条重要的严格定性定理，推广后的 Lieb—Schultz—Mattis 定理为一维半奇整数自旋体系的 Haldane 猜想做了非常必要的补充。

随后，Affleck, Kennedy, Lieb 和 Tasaki (AKLT) 通过构造严格可解模型，为整数量子自旋链的 Haldane 相的波函数提供了一个清晰图像，即可将一个整数自旋  $S$  的原子看成由  $2S$  个全对称化的自旋  $1/2$  粒子组成，全对称化的要求是可通过设定虚拟的自旋  $1/2$  粒子满足玻色统计来实现，而近邻格点之间通过自旋  $1/2$  粒子组成的单态相连接。这样在周期边界条件下，量子自旋链可形成一个具有平移不变和自旋旋转且总自旋为零的量子多体纠缠态<sup>[8, 9]</sup>，即 valence bond solid (VBS) 态。特别地，自旋为 1 和 2 的 VBS 基态波函数可见图 4。

在这类 VBS 态中，Arovas, Auerbach 和 Haldane<sup>[10]</sup> 利用自旋相干态方法，严格计算了自旋—自旋两点关联函数，它们都在长距离下呈指数形

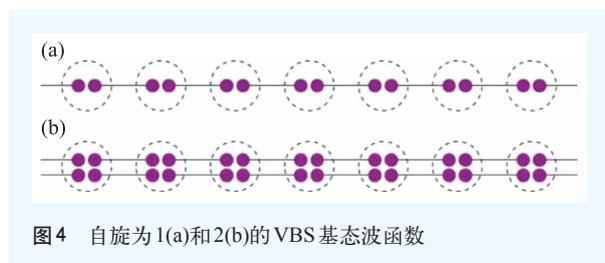


图4 自旋为1(a)和2(b)的VBS基态波函数

式衰减，表明低能激发有能隙。AKLT 模型虽然与标准的 Heisenberg 模型有所不同，但其中自旋间的高阶相互作用项可以看作对 Heisenberg 模型的微扰。结合密度矩阵重整化群的数值计算结果，人们从理论上普遍接受了 VBS 多体纠缠态和拓扑边缘态是整数自旋链 Haldane 相的最基本的特征。

在实验方面，人们很快合成出了 Ni  $(\text{C}_2\text{H}_8\text{N}_2)_2\text{NO}_2(\text{ClO}_4)$  (NENP),  $\text{Y}_2\text{BaNiO}_5$  等自旋  $S=1$  的准一维磁性材料，通过电子自旋共振 (ESR)、核磁共振 (NMR)、中子散射等多种实验手段，Haldane 相的激发能隙 (也就是对轻微扰动无反应的性质) 及其自旋  $1/2$  分数化的端点态，都被实验证实。对于自旋  $S>1$  的量子磁性材料，通常需由洪德 (Hund) 相互作用产生，在实际固体材料中并不多见。近年来，快速发展的超冷原子体系提供了一个新的研究大自旋量子多体系统的实验平台。在超冷原子体系中，基本的研究对象是原子，而原子的自旋由核自旋与外层电子自旋耦合形成，一般均大于 1。在光晶格中，原子的自旋自由度将完全被释放出来，因此光晶格中的超冷原子体系是一个高度可控的大自旋量子关联系统，为研究大自旋量子多体系统中的新奇物态提供了舞台。超冷原子体系，不仅环境非常纯净，而且系统的众多参数可以进行调节。因而，人们有望用冷原子系统来模拟传统的强关联电子体系，甚至以人工量子调控的方式寻找新的量子物态。

在 2009 年，美国麻省理工大学的文小刚教授及其合作者揭示了“Haldane 相”的拓扑性的内涵，提出了“对称保护拓扑态”的概念，并用于刻画一大类不能用 Landau 对称破缺理论所描述的新量子物质态<sup>[11]</sup>。他们进一步发现，只有奇整数的 Haldane 相才是真正具有对称保护的拓扑序，而偶整数的 Haldane 相则与拓扑平庸相同属一个相<sup>[12]</sup>。此外，针对奇整数自旋  $S$  的 VBS 态，作者近期的研究表明，引入对称双子格法将自旋链分隔成两个对称部分，通过计算惊奇地发现：子体系的纠缠 Hamiltonian 量、纠缠能谱与半奇整数

的反铁磁自旋链及其本征能谱一一对应<sup>[13, 14]</sup>。此项研究将整数自旋链的 Haldane 相的物理与半奇整数的量子临界物态联系起来。实际上,有关对称保护拓扑物态的研究,近年来已成为凝聚态物理学非常活跃的领域,并已经被推广到二维、

三维相互作用的量子多体系统。

**致谢** 在本文的写作过程中得到了文小刚教授重要的修改意见和悉心帮助,在此表示感谢。

## 参考文献

- [1] Haldane F D M. Phys. Lett. A, 1983, 93:464  
[2] Haldane F D M. Phys. Rev. Lett., 1983, 50:1153  
[3] Polyakov A M. Gauge Fields and Strings. New York: Harwood Academic, 1987  
[4] Affleck I, Haldane F D M. Phys. Rev. B, 1987, 36:5291  
[5] Shankar R, Read N. Nucl. Phys. B, 1990, 336:457  
[6] Zamolodchikov A B, Zamolodchikov A I B. Nucl. Phys. B, 1992, 379:602  
[7] Affleck I, Lieb E H. Lett. Math. Phys., 1986, 12:57  
[8] Affleck I, Kennedy T, Lieb E H *et al.* Phys. Rev. Lett., 1987, 59:799  
[9] Affleck I, Kennedy T, Lieb E H *et al.* Commun. Math. Phys., 1988, 115:477  
[10] Arovas D P, Auerbach A, Haldane F D M. Phys. Rev. Lett., 1988, 60:531  
[11] Gu Z C, Wen X G. Phys. Rev. B, 2009, 80:155131  
[12] Chen X, Gu Z C, Liu Z X *et al.* Phys. Rev. B, 2013, 87:155114  
[13] Rao W J, Wan X, Zhang G M. Phys. Rev. B, 2014, 90:075151  
[14] Rao W J, Zhang G M, Yang K. Phys. Rev. B, 2016, 93:115125

## 读者和编者

### 订阅《物理》得好礼

——超值回馈《岁月留痕》  
——<物理>四十年集萃

为答谢广大读者长期以来的关爱和支持,《物理》编辑部特推出优惠订阅活动:向编辑部连续订阅2年《物理》杂志,将获赠《岁月留痕——<物理>四十年集萃》一本(该书收录了从1972年到2012年在《物理》发表的40篇文章,476页精美印刷,定价68元,值得收藏)。

希望读者们爱上《物理》!

订阅方式(编辑部直接订阅优惠价180元/年)

#### (1) 邮局汇款

收款人地址:北京603信箱,100190

收款人姓名:《物理》编辑部

#### (2) 银行汇款

开户行:农行北京科院南路支行

户名:中国科学院物理研究所

帐号:112 501 010 400 056 99

(请注明《物理》编辑部)

咨询电话:010-82649266; 82649277

Email: physics@iphy.ac.cn

