arXiv:2603.14874v1 [cond-mat.quant-gas] 16 Mar 2026

利用开壳层分子实现 Haldane 相的量子模拟

Suman Aich,[1] Ceren B. Dag,[1,2] H.A. Fertig,[1,2] Debayan Mitra,[1,2] 和 Babak Seradjeh[1,2]1美国印第安纳州布卢明顿 *47405*，印第安纳大学物理系2美国印第安纳州布卢明顿 *47405*，印第安纳大学量子科学与工程中心

光学阱中的偶极分子为研究强长程相互作用下的量子物质多体相提供了一个灵活的平台。在此类装置中，可以通过微波驱动分子的相反宇称转动态来实现偶极相互作用。我们发现，在小磁场存在时，使用圆偏振微波将 $N = 0, J = 1/2, F = 1$ 态与 $N = 1, J = 3/2, F = 2$ 流形耦合，可产生自旋-1 量子磁性哈密顿量；这是由于电子自旋与轨道解耦，而这种特性为基态分子所独有。我们证明，在一维中，通过张量网络方法计算得到的这一哈密顿量对应的相图包含著名的 Haldane 相。我们发现，即使存在破坏哈密顿量 SU(2)代数的 SU(3)修正项，Haldane 相仍然存在。我们讨论了该方案用于转动常数较大的分子的可行性，例如可直接激光冷却的分子 MgF，以供未来实验使用。

I. 引言

被囚禁在光学势中的极性分子，已成为量子信息处理的强大而灵活的平台。电子基态中永久电偶极矩的存在，使其产生类似于 Dy [1] 和 Er [2] 等磁性原子以及里德堡原子阵列 [3, 4]的长程相互作用。然而，正是分子复杂的内部结构带来了量子计算与模拟的新机遇。例如，微波诱导偶极相互作用可以加以调控，从而构造用于库珀对配对的吸引性长程势 [5] ，或用于碰撞屏蔽的排斥势 [6]。这些相互作用还可经过设计，以稳健地存储量子信息；在 RbCs 等分子的核自旋中，相干时间已超过 6.9 秒 [7]。事实上，研究人员已在光镊中两个 CaF 分子的转动态之间实现了双量子比特纠缠，相干时间约为 30 毫秒 [8, 9]。此外，分子的低熵强关联态也已实现，例如 KRb [10]和 NaK [11] 的简并费米气体，以及 NaCs 分子的玻色-爱因斯坦凝聚态 [12]。这些进展进一步提升了向光学晶格和光镊阵列中装载分子的能力，从而实现更高的填充率。

尽管基于原子和分子系统的量子计算受量子比特退相干、占空比和系统可扩展性限制，模拟量子模拟已成为一种强有力的平台，可用于深入了解强关联量子多体系统及其产生的多体纠缠态。随着系统规模增大，使用经典计算工具分析此类系统很快就会变得棘手 [13]。这种构造合成材料的技术已在阐明玻色-哈伯德 [2, 14–16], Fermi-Hubbard模型 [17, 18]和自旋哈密顿量 [19, 20] 的相图方面取得巨大成功，涵盖最近邻（超交换）和长程相互作用。量子自旋哈密顿量尤其受到关注，因为理论预测在某些参数范围内可实现自旋液体 [21]和拓扑态 [5, 16, 22]。然而，使用偶极分子平台开展的大多数研究都聚焦于自旋-$\frac{1}{2}$ 哈密顿量，包括利用 KRb [23]实现的t-J_模型，以及利用 NaRb 分子实现的海森堡XXZ模型 [24]。

尽管自旋-$\frac{1}{2}$ 粒子（如电子）能够描述许多物质的磁性相，但轨道或谷等额外自由度可使多体量子系统中出现具有高角动量的组分。对于存在诸如Kitaev自旋液体 [25], 螺旋自旋液体 [26], Kagome磁体 [27], Haldane 相 [28]以及自旋-1海森堡反铁磁材料 [29–37]等相的材料而言，这一点尤为重要。在本研究中，我们提出一种新颖的量子模拟方案，可实现高自旋（例如自旋-1）的量子自旋哈密顿量；该哈密顿量满足SU(2)代数，仅含微弱的SU(3)修正。此方案利用了开壳层分子转动态复杂的超精细子结构，这类分子独特地存在于普遍存在的 $^2\Sigma$自由基中。

具体而言，我们提出的冷分子平台由一维开壳层分子阵列组成，如图1(a)所示；该阵列与近共振微波驱动相互作用，失谐量为 δ ，拉比频率为Ω_R。与此同时，静磁场使该跃迁产生 ϵ_z的塞曼位移。由此形成的微波缀饰分子通过偶极-偶极相互作用彼此作用，最近邻分子间的相互作用强度为 $V_{dd} \approx 50$ 千赫。我们用盖尔曼矩阵写出相互作用哈密顿量，由此得到自旋-1 XXZ哈密顿量以及纯SU(3)相互作用项；这些项使其偏离自旋-1 XXZ模型的SU(2)代数，见下文式(15)。

我们采用有限矩阵乘积态（MPS）的密度矩阵重整化群（DMRG）算法，获得了 XXZ 哈密顿量的相图，并证明由拓扑上平庸的 XY、反铁磁（AFM）和铁磁（FM）相夹着的对称性保护拓扑（SPT）Haldane 相会出现，

这些相在拓扑上平庸。重要的是，我们发现，即使在哈密顿量中加入 SU(3) 相互作用项，Haldane 相仍会因键中心反演对称性 [38] 得以稳定。这使多体基态的纠缠谱完全呈现双重简并。

我们在图 1(b) 中展示了 ϵ_z-Ω_R 相图中 Haldane 相所占据的区域。为展示纠缠谱的二重简并性，我们采用物理量 $P_\varrho = \sqrt{\sum_{q\geq 1} |\varrho_{2q-1} = \varrho_{2q}|^2}$，其中$\varrho_q$ 是多体基态的施密特分解系数。在 Haldane 相中，$P_\varrho \to 0$[39]。使用链长为 $L = 200$ 的有限矩阵乘积态，以及频率为 $|\delta| = 2\,V_{dd} \approx 0.1$ 兆赫的红失谐微波，我们发现，对于玻色型 ^{24}Mg^{19}F 分子，在最高达 $\epsilon_z \approx 1.1\,V_{dd} \approx 55$ 千赫的可实现实验参数（静态场为 $B \approx 40$ 毫高斯）和 $\Omega_R \approx 7\,V_{dd} \approx 350$ 千赫的条件下，Haldane 相确实可以实现。因此，我们的理论为模拟 SPT 有序相和高自旋量子磁性提供了一个新颖的平台。

本文结构如下：第二节说明分子能级图以及产生自旋-1量子磁性哈密顿量的实验条件，相关哈密顿量将在第三节推导。第四节利用弦序参量和纠缠谱绘制相图。随后在第五节讨论相图中实验上可实现的区域。最后，第六节总结并展望未来研究方向。

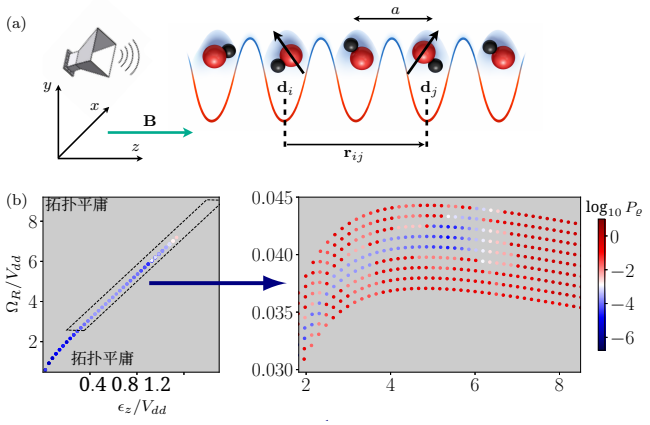

图 1。（a）实验装置示意图，显示双原子偶极分子被装载到间距为 a 的一维晶格中。晶格深度足够大，使分子被固定在各自的格点上，跃迁受到抑制。分子受到圆偏振微波 $\mathbf{E}$ 照射，其频率为 ω；微波由微波喇叭产生，并沿 z 方向传播；同时施加静磁场 $\mathbf{B}$，方向也沿 z。（b）相图显示 $\log_{10} P_\varrho$ 随塞曼位移 ϵ_z/V_{dd} 和拉比频率 Ω_R/V_{dd} 的变化（左下）。右下图展示了左下图中矩形区域的放大图，坐标轴经过旋转，横轴为 $(\epsilon_z \cos\eta + \Omega_R \sin\eta)/V_{dd}$，纵轴为 $(-\epsilon_z \sin\eta + \Omega_R \cos\eta)/V_{dd}$，其中 $\eta = \arccos(1/\sqrt{1+5.45^2})$。蓝色数据点对应拓扑非平庸的 Haldane 相；灰色背景以及右下图中的红色数据点对应拓扑平庸相。为清晰起见，左下图省略了红色数据点。根据左下图，Haldane 相存在的最大值为 $\epsilon_z \approx 1.1\,V_{dd} \approx 55$ 千赫（$B \approx 40$ 毫高斯），且 $\Omega_R \approx 7\,V_{dd} \approx 350$ 千赫

II. 微波缀饰分子态

我们首先考虑一个受到频率为 ω的圆偏振微波辐照的单分子。微波频率选为接近基态转动跃迁的共振频率，该跃迁发生在 $|N=0,\ +\rangle$与 $|N=1,\ -\rangle$ 态之间，两者的能量差为 $\omega_0 \sim 31$ GHz，如图 2 所示。转动流形分裂为自旋-转动态，这些态又进一步分裂为超精细态。在 $^2\Sigma$ 分子的基态中，未配对电子自旋与轨道自由度相互解耦。这意味着基态的 g因子几乎等于自由电子的因子，而且在极低磁场下，$(F,\ m_F)$是良好的量子数。

在没有外部磁场的情况下，$|N=0, F=1, m_F=0,\pm1\rangle$ 态彼此简并，$|N=1, F=2, m_F=0,\pm1,\pm2\rangle$ 态也彼此简并。每个分子具有永久基态偶极矩$\mathbf{d}_0 = d_0$(sin θcos ϕ, sin θ si n ϕ, cos θ)，其中 θ和 ϕ是三维空间中的极角。我们考察该分子与圆偏振微波场$\mathbf{E}(t)$耦合的情形，其振幅为 E_0，频率为 ω，失谐为 $\delta = \omega - \omega_0$。我们假设$|\delta| \ll \omega, \omega_0$。因此，微波驱动电偶极跃迁发生在 $N=0$ 和 $N=1$流形之间。由于选择定则，只有三种跃迁允许：$|0,1,-1\rangle \to |1,2,0\rangle$, $|0,1,0\rangle \to |1,2,1\rangle$ 以及$|0,1,1\rangle \to |1,2,2\rangle$。对于这三种跃迁中的每一种，含时光物质哈密顿量都是一个二能级系统，可表示为：

$$\hat{H}(t) = \hat{H}_0 + \hat{\mathbf{d}}_0 \cdot \hat{\mathbf{E}}(t) \tag{1}$$

ˆ 在实验室系中，其中 H_0 是分子裸哈密顿量。然而，由于 Clebsch-Gordon 系数不同，三个跃迁的电偶极跃迁矩阵元也各不相同。对式 (1) 中的哈密顿量进行幺正旋波变换，即可将其对角化，从而得到微波缀饰态及其相应的能量。

在外部磁场存在时，$|N=0, F=1, m_F=0,\pm1\rangle$ 态以及 $|N=1, F=2, m_F=0,\pm1,\pm2\rangle$ 态均发生塞曼位移，位移量为 $g\epsilon_z$，其中 $\epsilon_z = \mu_B B$。对于跃迁|0、1、−1⟩ → |1、2、0⟩、|0、1、0⟩ → |1、2、1⟩ 以及 |0、1、1⟩ →|1、2、2⟩，g因子分别为 2.0023、1.0007 和 0。因此，在圆偏振

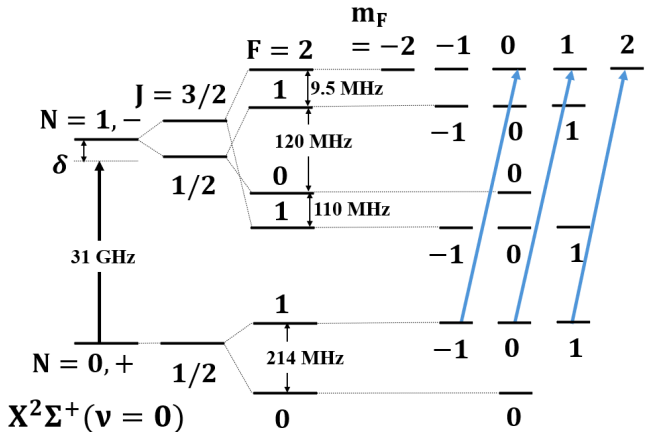

图 2. $^2\Sigma$ 分子的相关转动与超精细结构。最低转动态为 $N=0$，宇称为 $+$；第一激发转动态为 $N=1$，宇称相反。两者之间的能量差为 ω_0。子能级结构用量子数 $|J,F,m_F\rangle$ 表示，对应图示的各个态。微波驱动为右旋圆偏振（σ^+），相对于该跃迁的失谐量为 δ，驱动的拉比频率为 Ω_R。尽管此分析适用于任意 $^2\Sigma$ 分子，我们对 ^{24}MgF 分子进行了数值模拟，该分子种类对应的频率已在图中标出 [40]。

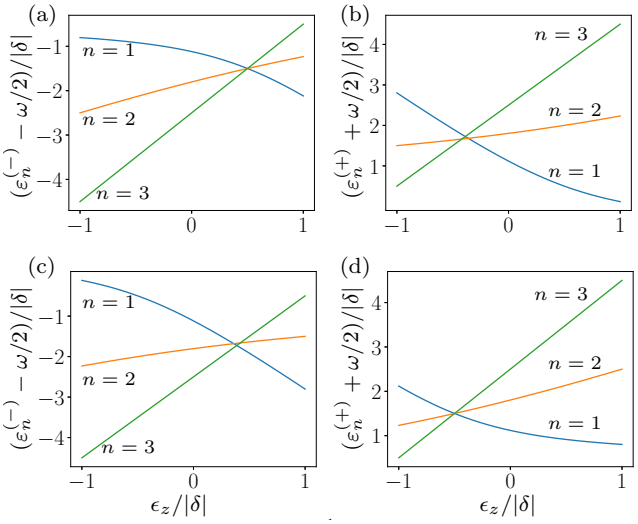

图3. 式（5）—（7）中的微波缀饰能级 $\varepsilon_n^{(-)}-\omega/2$（左）和 $\varepsilon_n^{(+)}+\omega/2$（右）随塞曼位移 ϵ_z 的变化，其中拉比频率 $\Omega_R=2.45\,|\delta|$固定。上（下）图对应蓝色（红色）失谐微波 $\omega>\omega_0$（$\omega<\omega_0$）。

微波和静磁场的作用下，我们在实验室系中得到形式为

$$|+\rangle_n = a_n\,|N=0,F=1,m_F=n-2\rangle + b_n e^{-i\omega t}\,|N=1,F=2,m_F=n-1\rangle\,, \quad (2)$$

$$|-\rangle_n = b_n e^{i\omega t}\,|N=0,F=1,m_F=n-2\rangle - a_n\,|N=1,F=2,m_F=n-1\rangle\,, \quad (3)$$

对于 $n=1,2,3$。这里

$$a_n = -\frac{A_n}{\sqrt{A_n^2+(\Omega_R/x_n)^2}}, b_n = \frac{\Omega_R/x_n}{\sqrt{A_n^2+(\Omega_R/x_n)^2}}, \quad (4)$$

其中 $(x_1,x_2,x_3)=(\sqrt{6},\sqrt{2},1)$，$\Omega_R=d_0E_0/\sqrt{3}$为拉比频率，且 $A_n=\left(\frac{\delta-(3-n)\epsilon_z}{2}\right)+\sqrt{\left(\frac{\delta-(3-n)\epsilon_z}{2}\right)^2+\left(\frac{\Omega_R}{x_n}\right)^2}$。缀饰态能量为

$$\varepsilon_1^{(\pm)} = \mp\frac{\omega}{2}\pm\left(\sqrt{\left(\frac{\delta}{2}-\epsilon_z\right)^2+\frac{\Omega_R^2}{6}}\mp\epsilon_z\right), \quad (5)$$

$$\varepsilon_2^{(\pm)} = \mp\frac{\omega}{2}\pm\left(\sqrt{\left(\frac{\delta-\epsilon_z}{2}\right)^2+\frac{\Omega_R^2}{2}}\pm\frac{\epsilon_z}{2}\right), \quad (6)$$

$$\varepsilon_3^{(\pm)} = \mp\frac{\omega}{2}\pm\left(\sqrt{\frac{\delta^2}{4}+\Omega_R^2}\pm 2\epsilon_z\right). \quad (7)$$

我们关注 $\Omega_R,\epsilon_z,|\delta|\ll\omega,\omega_0$ 的情形。计算详情见附录 A。

由于微波缀饰态是 $|N,F,m_F\rangle$ 和 $|N',F',m_F'\rangle$ 在 $|N-N'|=|F-F'|=1$ 条件下形成的叠加态，因此在以 $\sigma,\sigma'=\pm$ 为基底的缀饰态中，它们具有诱导偶极矩，其矩阵元为 $[\mathbf{d}]^{\sigma\sigma'}_{nn'} = {}_n\langle\sigma|\hat{}\,\mathbf{d}_0\,|\sigma'\rangle_{n'}$。因此，微波缀饰分子可以通过长程偶极-偶极相互作用发生相互作用。由方程 (5)-(7) 可得出关于这一问题中相关能量尺度的一个重要结论：$|+\rangle_n$ 和 $|-\rangle_n$ 态之间的能级劈裂为 $O(\omega)\sim$千赫，这远高于 $^2\Sigma$ 分子的偶极相互作用强度 $d_0^2/a^3\sim$千赫，其中 a 是我们所考虑的光学阱的典型晶格间距。这意味着由偶极相互作用导致的散射过程 $|-\rangle_n\leftrightarrow|+\rangle_k$ 可以忽略不计，因此三个 $|-\rangle_n$ 态在能量上与 $|+\rangle_n$ 态充分分离。

此外，塞曼位移使我们能够调节每个 $|\pm\rangle$ 子空间内缀饰态之间的能级劈裂。具体而言，缀饰能级 $\varepsilon_n^{(\pm)}$可以调节至近简并，如图3所示。对于蓝色（$\omega>\omega_0$）和红色（$\omega<\omega_0$）失谐微波，能级（图3左侧各图）均在塞曼位移 ϵ_z 为正值时交叉；而 $\varepsilon_n^{(+)}$能级（图3右侧各图）则在 $\epsilon_z/|\delta|$为负值时交叉。这里，$\epsilon_z/|\delta|$ 的符号约定为：正向 z方向上的磁场会产生正的 $\epsilon_z/|\delta|$。因此，在近简并时，偶极相互作用成为 $|\pm\rangle_n$ 缀饰态各子空间内的主导能量尺度。

这一观察，加上 $|\pm\rangle_n$态彼此在能量上相互隔离这一事实，使我们能够

在分子的任一$|\pm\rangle_n$子空间中有效编码一个自旋-1自由度。最后，这些分子在晶格几何结构中被光学俘获时，能够通过强而长程的偶极相互作用彼此作用。对于本研究，我们考虑将分子制备在深晶格中的转动振动基态，从而基本冻结其运动自由度。在这种情况下，可以忽略分子在相邻晶格格点之间的隧穿。

III. 偶极-偶极相互作用哈密顿量

每个分子的偶极矩$\hat{\mathbf{d}}_0 = (\hat{d}_x, \hat{d}_y, \hat{d}_z)$是一个矢量算符，其矩阵元为$[\mathbf{d}]_{nn'} = {}_n\langle\pm|\hat{\mathbf{d}}_0|\pm\rangle_{n'}$，而偶极-偶极相互作用算符表示为

$$\hat{V}_{dd} = \frac{\hat{\mathbf{d}}_i \cdot \hat{\mathbf{d}}_j - 3(\hat{\mathbf{d}}_i \cdot \hat{\mathbf{r}}_{ij})(\hat{\mathbf{d}}_j \cdot \hat{\mathbf{r}}_{ij})}{r^3}. \tag{8}$$

这导致了一个特征性的偶极相互作用强度，其正比于$d_0^2(1-3\cos^2\theta_{ij})/r^3$，其中$\theta_{ij}$是连接两个偶极分子的位置矢量$\mathbf{r}_{ij}$与由微波场传播方向设定的量子化轴之间的夹角。在一维链中，为方便起见，我们可以选择$\theta_{ij} = 0$，见图 1(a)；而在二维系统中，偶极相互作用矩阵元可通过θ_{ij}进行调节。因此，可以实现吸引（负）相互作用和排斥（正）相互作用，预计这将产生多种量子多体相，例如p-波拓扑超流体、电荷密度波和莫特绝缘体 [5, 41, 42]。

偶极矩矩阵元，$[\mathbf{d}(t)]_{nn'}$，通常在实验室系中随时间变化。然而，由于微波驱动频率满足$\omega \gg d_0^2/a^3$，在高频近似下，$\hat{V}_{dd}$的主导阶贡献来自时间平均$\hat{V}_{dd}^{(0)} = \int_0^T \hat{V}_{dd}(t)\frac{dt}{T}(T = 2\pi/\omega)$。$[\mathbf{d}(t)]_{nn'}$和$\hat{V}_{dd}^{(0)}$的具体表达式见附录 B。

接下来，我们在高频近似下，于实验室系中推导分子阵列的有效自旋-1哈密顿量。由于分子具有三维希尔伯特空间，矩阵V_{dd}可写为盖尔曼矩阵（包括单位矩阵）的张量积的线性组合，$\boldsymbol{\lambda} = \{\lambda_0, \lambda_1, \cdots, \lambda_8\}$，其中$\lambda_0 = \sqrt{2/3}\,\mathbb{1}$，满足归一化条件$\mathrm{tr}(\lambda_k\lambda_l) = 2\delta_{kl}$。随后，我们选择一个特定的 SU(2)子代数，在其中自旋-1矩阵$\mathbf{S} = \{S^x, S^y, S^z\}$可写为$S^x = (\lambda_1+\lambda_6)/\sqrt{2}$、$S^y = (\lambda_2+\lambda_7)/\sqrt{2}$和$S^z = (\lambda_3+\sqrt{3}\lambda_8)/2$。这使我们能够将$\mathrm{V}_{dd}$分解为

$$\mathbb{V}_{dd} = \sum_{\alpha\beta} J_{\alpha\beta} S^\alpha \otimes S^\beta + \tilde{\mathbb{V}}, \tag{9}$$

其中第一项包含双线性自旋-1算符（$\alpha,\ \beta = 0,\ x,\ y,\ z$，其中$S^0 = \mathbb{1}$），第二项$\tilde{\mathrm{V}}$则包含双二次自旋-1项以及纯 SU(3)项。这里，$J_{\alpha\beta}$为自旋-1交换耦合。矩阵V_{dd}、$S^\alpha \otimes S^\beta$和$\tilde{\mathrm{V}}$也可写为盖尔曼矩阵张量积的线性组合

$$\mathbb{V}_{dd} = \sum_{kl} v_{kl}\lambda_k \otimes \lambda_l, \tag{10}$$

$$S^\alpha \otimes S^\beta = \sum_{kl} \Xi_{kl}^{\alpha\beta}\lambda_k \otimes \lambda_l, \tag{11}$$

$$\tilde{\mathbb{V}} = \sum_{kl} \Lambda_{kl}\lambda_k \otimes \lambda_l, \tag{12}$$

其中，展开系数为$v_{kl} = \frac{1}{4}\mathrm{tr}[(\lambda_k \otimes \lambda_l)\mathrm{V}_{dd}]$、$\Xi_{kl}^{\alpha\beta} = \frac{1}{4}\mathrm{tr}[(\lambda_k \otimes \lambda_l)(S^\alpha \otimes S^\beta)]$以及$\Lambda_{kl} = \frac{1}{4}\mathrm{tr}[(\lambda_k \otimes \lambda_l)\tilde{\mathrm{V}}]$。为了使$\mathrm{V}_{dd}$中的 SU(2)贡献占主导地位，我们将 V 的展开系数Λ_{kl}的平方和最小化，

$$\sum_{kl} |\Lambda_{kl}|^2 = \sum_{kl} \Big| v_{kl} - \sum_{\alpha\beta} J_{\alpha\beta}\Xi_{kl}^{\alpha\beta} \Big|^2, \tag{13}$$

关于$J_{\alpha\beta}$，

$$\frac{\partial}{\partial J_{\alpha\beta}} \sum_{kl} |\Lambda_{kl}|^2 = 0. \tag{14}$$

由此得到一个线性矩阵方程，可通过数值方法高效求解，从而获得自旋-1 交换耦合$J_{\alpha\beta}$。有趣的是，对于满足$\theta_{ij} = 0$的一维链，最小化过程使大多数相互作用消失，唯一非零的相互作用是$J_{xx} = J_{yy}$、J_{zz}和$J_{0z} = J_{z0} \equiv J_z$。

因此，描述排列成一维链并通过长程各向异性偶极相互作用的分子的有效哈密顿量，具有自旋-1 XXZ模型的形式，并受到高阶 SU(2) 相互作用项和纯SU(3)相互作用项的扰动，

$$\begin{aligned} H_{\mathrm{eff}} = &\sum_{i<j} \frac{1}{|i-j|^3}\Big[\frac{J_{xx}}{2}(S_i^+S_j^- + S_i^-S_j^+) + J_{zz}S_i^zS_j^z \\ &+ J_{+-}\left((S_i^+)^2(S_j^-)^2 + \mathrm{h.c.}\right)\Big] \\ &+ \sum_i \left[h_i^zS_i^z + D(S_i^z)^2\right] + \mathbb{V}_{\mathrm{SU(3)}}. \end{aligned} \tag{15}$$

其中$S^\pm = S^x \pm iS^y$, $h_i^z = D_z + \sum_{j\neq i} J_z/|i-j|^3$是横场强度，其中$D_z = (\varepsilon_1^{(\pm)} - \varepsilon_3^{(\pm)})/2$，而$D = (\varepsilon_1^{(\pm)} - 2\varepsilon_2^{(\pm)} + \varepsilon_3^{(\pm)})/2$是由缀饰分子态$|\pm\rangle_n$之间的能级劈裂产生的单点各向异性。SU(3)项由偶极相互作用产生，因此既包含单体项，也包含长程二体项，并且可以写成

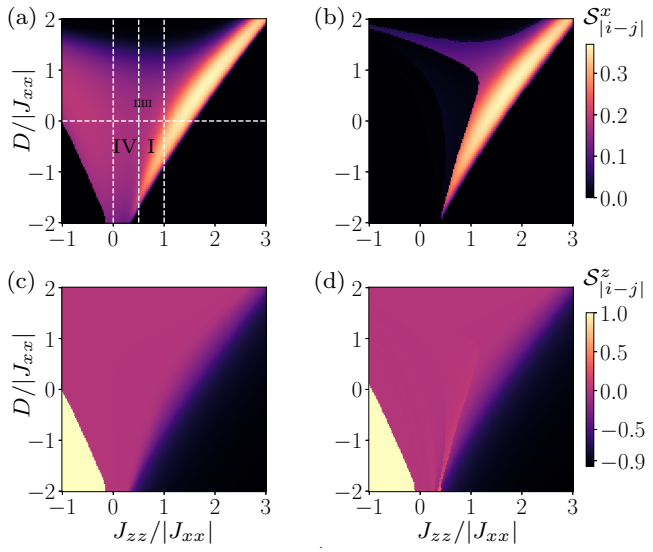

图 4. 式 (15) 中 H_{eff} 随 $J_{zz}/|J_{xx}|$ 和 $D/|J_{xx}|$ 变化的相图，分别对应 $h_i^z = 0$（左图）和 $h_i^z = 0.1J_{xx}$（右图），两种情况下均取 $J_{xx} < 0$ 和 $\mathrm{V}_{\mathrm{SU}(3)} = 0$。色彩图显示了采用有限系统密度矩阵重整化群计算得到的弦序参量 $\mathrm{S}^x_{|i-j|}$（下图）和 $\mathrm{S}^z_{|i-j|}$（上图）；计算所用链长为 $L = 100$，距离为 $j - i = 80$，最大键维数为 $\chi_{\max} = 100$，最大相互作用范围为 4。(a) 中的区域 I、II、III 和 IV 表示相图中实验可及的区域。表 II 总结了进入这些区域所需的失谐和塞曼位移实验参数值，以及偶极分子的初态。

表示为

$$\mathbb{V}_{\mathrm{SU}(3)} = \sum_{i<j} \frac{1}{|i-j|^3} \sum_{k,l\geq 1} \Lambda_{kl} \lambda_{k,i} \otimes \lambda_{l,j} + \sum_i \sum_{k\geq 1} \Lambda_{k,i} \lambda_{k,i}, \tag{16}$$

其中 $\Lambda_{k,\,i} = \sum_{j\neq i} \Lambda_{k0}/|i-j|^3$。请注意，横向场 h_i^z 与塞曼位移 ϵ_z 是不同的量：h_i^z是由偶极相互作用和缀饰能级劈裂产生的有效场，而 ϵ_z 则源于使分子超精细态发生位移的外部磁场。

我们在本节最后讨论 $\mathrm{V}^{\mathrm{SU}(3)}$ 的起源。由于跃迁偶极矩阵元 $[\mathrm{d}_z]_{12} \neq [\mathrm{d}_z]_{23}$ 中出现的 Clebsch-Gordon 系数，以及对角矩阵元 $[\mathrm{d}_x - i\mathrm{d}_y]_{11} \neq [\mathrm{d}_x - i\mathrm{d}_y]_{22} \neq [\mathrm{d}_x - i\mathrm{d}_y]_{33}$ 存在差异，最小化过程 [式（14）] 得到了矩阵元的对称与反对称组合，分别对双线性自旋-1耦合 $J_{\alpha\beta}$ 和 SU(3)项作出贡献。此外，我们还得到了对双二次自旋耦合 J_{+-}有贡献的矩阵元 $[\mathrm{d}_x - i\mathrm{d}_y]_{13}$。我们通过数值计算确认，$|J_{+-}| \ll |J_{xx}|$，$|J_{zz}|$，$|J_z|$，$|\Lambda_{kl}|$，因此从此以后我们将其从式（15）中略去。

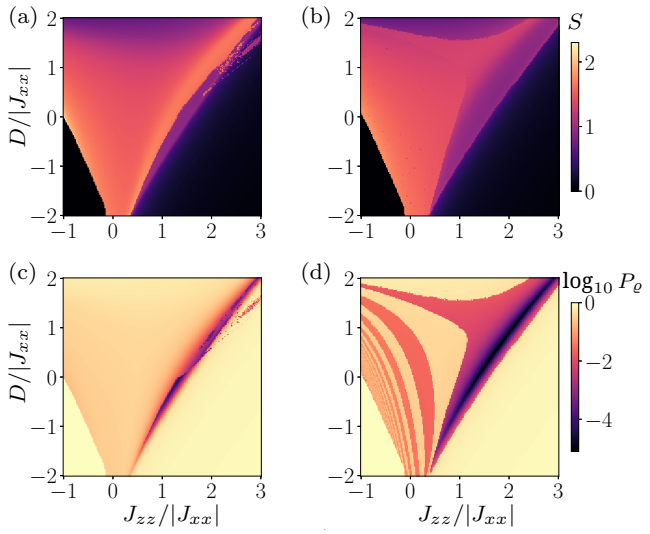

图 5. 方程 (15) 中 H_{eff} 随 $J_{zz}/|J_{xx}|$ 和 $D/|J_{xx}|$ 变化的相图，其中 $h_i^z = 0$（左图）和 $h_i^z = 0.1J_{xx}$（右图），两种情况下均取 $J_{xx} < 0$ 和 $\mathrm{V}_{\mathrm{SU}(3)} = 0$。色彩图显示了纠缠熵 S（上图）和 P_ϱ（下图）。图中结果通过有限系统密度矩阵重整化群计算得到，所用参数组与图 4 相同。

IV. 相图

现在，我们研究式（15）所描述的 H_{eff} 在一维链几何中的相图。首先固定 $\mathrm{V}_{\mathrm{SU}(3)} = 0$，并考虑有无横向场 h_i^z两种情况。我们使用 TeNPy库 [43, 44]进行有限系统密度矩阵重整化群计算，得到多体基态及相应的相图。

不含横向场的最近邻自旋-1 XXZ链具有伊辛铁磁相（FM）、反铁磁相（AFM）、Haldane相、自旋-1 XY相，以及在较大 D [22, 45–47], 时出现的平庸绝缘相；这些相在长程各向异性相互作用 [39, 48]下仍然存在。当伊辛型相互作用占主导时，J_{zz} 取较大的负值和正值时分别存在铁磁相和反铁磁相。具体而言，在铁磁相中，所有自旋均处于 $|+1\rangle$或 $|-1\rangle$态；而在反铁磁相中，相邻自旋的取向相反。因此，铁磁相和反铁磁相都是具有长程序的有隙相，其特征可由平均磁化强度 $\langle S_i^z \rangle$ 和平均交错磁化强度 $\langle (-1)^i S_i^z \rangle$等局域序参量来描述。对于铁磁相和反铁磁相，非零关联函数 $\langle S_i^z S_j^z \rangle$ 和 $\langle (-1)^{|i-j|} S_i^z S_j^z \rangle$ 也体现了长程序。当 D 较大且为正时，$(S^z)^2$ 项占主导，基态倾向于使所有自旋处于 $|0\rangle$态，从而形成平庸绝缘体。

对于 $J_{zz} \sim D$，基态可能处于自旋-1 XY 相或 Haldane 相，这两种相都具有较大的量子涨落。自旋-1 XY 相是一种无能隙超流相，并且是铁磁的（对于 $J_{xx} < 0$）或反铁磁的（对于 $J_{xx} > 0$）。其特征是具有准长程有序，或——

序（空间中的关联呈幂律衰减），存在于 $\langle S_i^+ S_j^- \rangle$（对于 $J_{xx} < 0$）或 $\langle (-1)^{|i-j|} (S_i^+ S_j^- \rangle$（对于 $J_{xx} > 0$））一维中的 Haldane 相是一种对称性保护拓扑相，具有分数化的自旋-$\frac{1}{2}$ 边缘态，这些边缘态在零能量处四重简并 [49]。其特征是在 $|i-j| \to \infty$ 极限下，弦序参量 [50, 51] $\mathrm{S}^{\alpha}_{|i-j|} = \langle S_i^{\alpha} \Pi_{i<k<j} \exp(i\pi S_k^{\alpha}) S_j^{\alpha} \rangle$（$\alpha = x,\ y,\ z$）非零；相比之下，自旋-1 XY 相的 $\mathrm{S}^{z}_{|i-j|}$ 为零。

虽然在 XY 相和 Haldane 相中，弦序参量 $\mathrm{S}^{x}_{|i-j|}$ 和 $\mathrm{S}^{y}_{|i-j|}$ 不为零，但在铁磁相、反铁磁相和无拓扑的大-D 相中，它们完全为零。此外，弦序参量 $\mathrm{S}^{z}_{|i-j|}$在 Haldane 相、铁磁相和反铁磁相中不为零，而在 XY 相和大-D 相中为零。因此，$\mathrm{S}^{x}_{|i-j|}$或 $\mathrm{S}^{y}_{|i-j|}$ 可用于区分 Haldane 相和反铁磁相，而 $\mathrm{S}^{z}_{|i-j|}$ 可用于区分 Haldane 相和 XY 相。图 4 左侧各图中的色彩图展示了不同相在 $h^z = 0$条件下的弦序参量 $\mathrm{S}^{x}_{|i-j|}$ 和 $\mathrm{S}^{z}_{|i-j|}$。

Haldane 相的拓扑性质受到某些对称性的保护，例如键中心反演、时间反演，以及绕一对正交轴旋转的 π 二面体群，这使纠缠谱呈现双重简并 [38, 52]。图 5 左侧各图中的色彩图展示了不同相在 h^z =0 条件下的纠缠熵 $S = -\sum_q \varrho_q^2 \ln \varrho_q^2$和 $P_\varrho = \sqrt{\sum_{q\geq 1} |\varrho_{2q-1} - \varrho_{2q}|^2}$。由于纠缠谱双重简并，Haldane 相中的 P_ϱ 为零。

沿 z 轴施加非零横向场后，可以立即看出时间反演对称性以及旋转对称性 $e^{-i\pi S^x}$ 和 $e^{-i\pi S^y}$ 遭到破坏。尽管如此，该模型仍具有键中心反演对称性，以及时间反演与绕x 或 y旋转 π 的组合，即 TR$\times e^{-i\pi S^x}$ 或 TR $\times e^{-i\pi S^y}$。重要的是，仅凭键中心反演对称性就能稳定 Haldane 相 [38]。在这种情况下，弦序参量并不能有效地用于表征 Haldane 相，因为弦序和自旋-$\frac{1}{2}$ 边缘态可能不存在 [38, 53, 54]。

在这种一般情况下，由键中心反演对称性导致的整个纠缠谱的二重简并，是 Haldane 相的决定性特征。图 5 右侧面板中的色彩图展示了纠缠熵

S 和 $\log_{10} P_\varrho$对应不同的相，其中 $h_i^z = 0.1|J_{xx}|$。我们发现，在自旋-1 XY 相中，P_ϱ 会振荡，并出现具有 $P_\varrho \approx 10^{-1} - 10^{-2}$的区域；而对于 $h_i^z = 0$，P_ϱ 则保持恒定。在图 6(a) 和 (b) 中，我们分别展示了固定 $D = 0.5|J_{xx}|$时 $h_i^z = 0$ 和$h_z = 0.5|J_{xx}|$ 的纠缠谱。两种情况下都存在一个狭窄区域，其谱完全呈双重简并，揭示了 Haldane 相。另一方面，自旋 -1 XY 相（ XY1 ）中既有孤立的本征值，也有少数双重简并的本征值。在图 6 中，我们

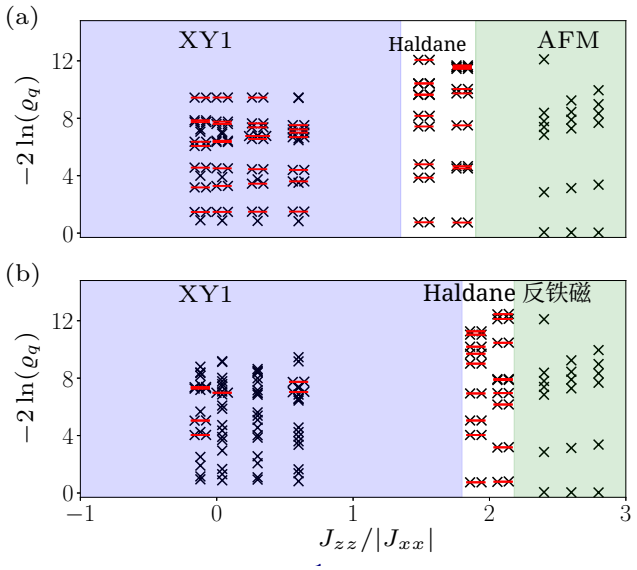

图 6. 对于 (a) $h_i^z = 0$ 和 (b) $h_i^z = 0.5J_{xx}$，在固定 $D = 0.5J_{xx}$、且两种情况下均取 $J_{xx} < 0$ 和 $\mathrm{V}_{\mathrm{SU}(3)} = 0$ 时，方程 (15) 中 H_{eff} 的多体基态纠缠谱随 $J_{zz}/|J_{xx}|$ 的变化。不同相以不同颜色着色。对于简并的施密特值，交叉标记稍作偏移以表示其多重度，简并施密特值组之间以红色线段连接。图中结果采用有限系统密度矩阵重整化群计算得到，链长为 $L = 200$，最大键维数为 $\chi_{\max} = 100$，最大相互作用范围为 4。

将系统尺寸增大到 $L = 200$，以减小有限尺寸效应，并发现 XY1 中 P_ϱ 的振荡行为依然存在。因此，我们认为这些振荡是由横向场引起的。最后，我们还观察到，随着 h_i^z增大，Haldane 相向较大的$J_{zz}/|J_{xx}|$ 方向移动，以补偿其影响。

V. 实验参数空间与相图

虽然上述形式体系适用于任何 $^2\Sigma$分子，但在本提案中，我们选择氟化镁（MgF）作为目标分子。由于质量较轻、具有波长为 359 nm 的强（近乎）循环激光跃迁，且存在玻色和费米同位素，MgF 非常适合用于量子气体显微术。在本研究中，粒子的统计性质并不重要，因为我们将分子位置视为静止。因此，我们将形式体系限制为具有较简单超精细结构的玻色同位素 ^{24}MgF。MgF 的性质汇总于表 I，本研究相关的能级结构见图 2。MgF 在 $\lambda = 359$ nm 处的近紫外（UV）跃迁可用于通过高数值孔径（NA）显微镜物镜，在光学阱中进行直接成像。其分辨率为

属性	符号（单位）	数值
$X^2\Sigma^+$ 转动常数	B（2π 兆赫）	15,496.8125
$J=0\rightarrow J=1$ 跃迁频率	ω_0（2π 兆赫）	31,010.3
$X^2\Sigma^+$ 偶极矩	d （德拜）	2.88
最近邻距离	a (纳米)	376
$A^2\Pi_{1/2}$ 衰减率	$\Gamma(2\pi$ 兆赫)	20.95*
$X^2\Sigma^+(\nu=0)\leftarrow A^2\Pi_{1/2}(\nu=0)$ 弗兰克-康登因子	$\mathcal{F}_{00}$	0.96763*

表 I. 与本方案相关的实验平台特性。 ^{24}MgF 的分子特性取自参考文献 [40]，标有 (*) 的特性除外，它们取自参考文献 [55]。最近邻距离由激光波长和构型决定。

该成像系统的分辨率为 $0.61\frac{\lambda}{NA}$，预计能够在阱中实现较小的最近邻间距，并进行单点分辨成像。此处我们假设间距为 $a=376$ nm。利用空间光调制器，可将系统几何结构从二维调节为准一维。

我们从光学阱中电子基态（$X^2\Sigma^+$）的第一转动态（$N=1,-$）MgF 分子开始。在没有外场的情况下，由于磁子能级简并，分子分布在（$N=1,-$）态的超精细流形内（即 $F=1,0,1,2$）。在光抽运循环期间，有选择地关闭针对不同超精细态的激光边带，可使分子布居主要累积在所需的$J=3/2, F=2$ 流形中。其他流形中残留的布居可通过光抽运去除。此时，同时逐渐增强一个近共振、具有 σ^+ 偏振的微波驱动（频率为 ~ 31 千兆赫）以及大小为 ~ 40 毫高斯的静磁场。为使系统绝热地制备到 $\Omega_R\sim 350$ 千赫和 $\epsilon_z\sim 50$ 千赫这一目标点，需要较小的微波功率。这样可将分子制备成 $|-\rangle_n$ 态的叠加态，其中所有态均简并。

对于偶极矩为 $d_0=2.88$D、晶格常数为 $a=376$ nm的最近邻MgF分子，偶极相互作用强度为 $V_{dd}=d_0^2/a^3$ ~50 千赫。实验参数空间由三个量描述：微波场的失谐 δ 和拉比频率 Ω_R，以及塞曼位移 ϵ_z 由直流磁场引起。特别是，ϵ_z可调节至使缀饰态接近简并，从而增强分子间的偶极相互作用（见图3）。式（9）中的偶极相互作用矩阵 $\hat{V}_{dd}$，以及式（15）中的 $H_{\rm eff}$，均由实验参数（δ，ϵ_z，Ω_R）决定。此外，我们可以自由选择 δ的符号：$\delta>0$ 对应微波蓝失谐，$\delta<0$ 对应红失谐；也可以独立选择 ϵ_z的符号：将 B-场沿 $+z$-方向取向时为 $\epsilon_z>0$，沿 $-z$-方向取向时为 $\epsilon_z<0$。这拓展了 $H_{\rm eff}$中各种自旋-1耦合和位点项的可取值范围，并使我们能够探索相图中的四个不同区域。这些区域如图4(a)所示；表 II 总结了各区域的类型及其所需的

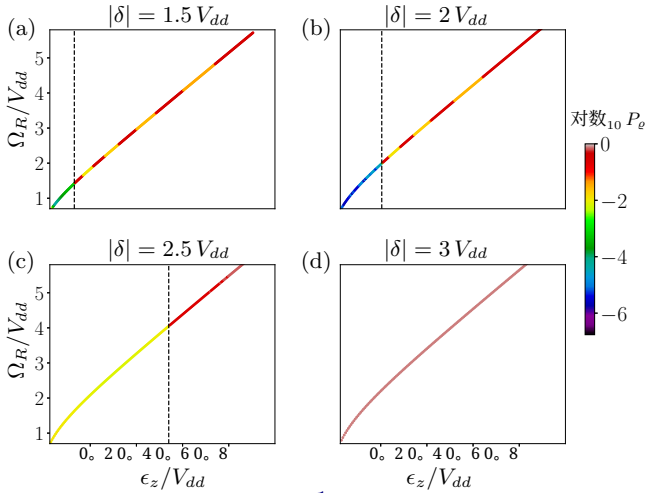

图 7. 展示红失谐微波下，式 (15) 中 $H_{\rm eff}$ 的多体基态的 log $_{10}P_e$ 随 ϵ_z/V_{dd} 和 Ω_R/V_{dd} 变化的图，其中 (a) $|\delta|=1.5\,V_{dd}\approx 75$ 千赫、(b) $|\delta|=2\,V_{dd}\approx 100$ 千赫、(c) $|\delta|=2.5\,V_{dd}\approx 125$ 千赫、(d) $|\delta|=3\,V_{dd}\approx 150$ 千赫。对于每个坐标 (ϵ_z/V_{dd}，Ω_R/V_{dd})，颜色表示 $\log_{10}P_e$ 的值。(a)–(c) 中的黑色虚线表示从 Haldane 相到拓扑平庸相的相界，虚线左侧为 Haldane 相，右侧为拓扑平庸相。(d) 中整个相均为拓扑平庸相。密度矩阵重整化群参数与图 6 中相同。

区域	失谐	塞曼位移	初始分子态
I	红色（$\omega<\omega_0$）	$\epsilon_z>0$	$\|-\rangle_n$
II	蓝色（$\omega>\omega_0$）	$\epsilon_z<0$	$\|+\rangle_n$
III	红色 ($\omega<\omega_0$)	$\epsilon_z<0$	$\|+\rangle_n$
IV	蓝色 ($\omega>\omega_0$)	$\epsilon_z>0$	$\|-\rangle_n$

表 II. 总结在图 4 中进入区域 I、II、III 和 IV 所需的失谐类型、塞曼位移的符号 ϵ_z 以及初始偶极分子态。

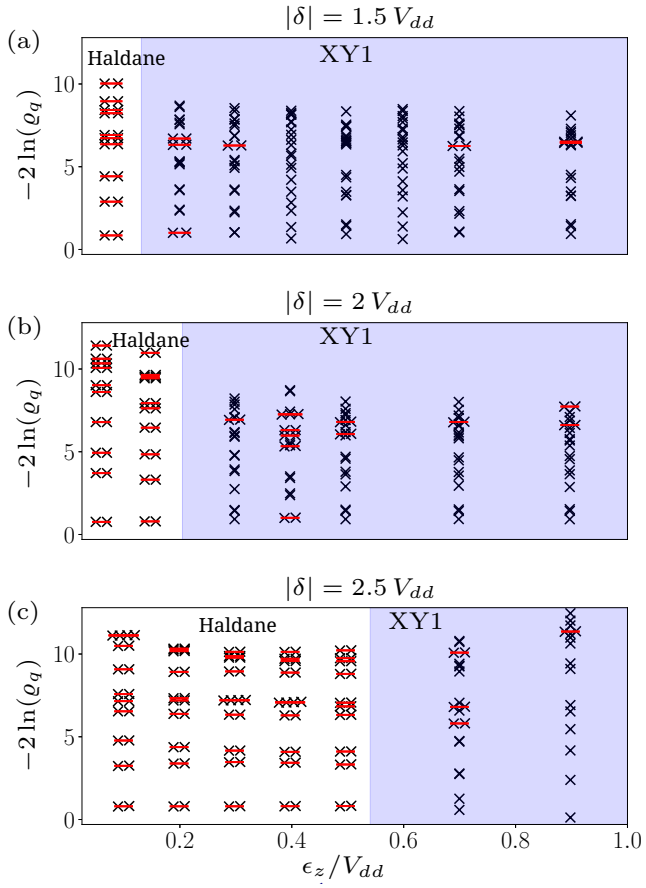

图 8. 方程 (15) 中 H_{eff} 的多体基态纠缠谱，随 ϵ_z/V_{dd} 变化，取值沿图 7(a)–(c) 所示曲线。对于简并的施密特值，十字标记在水平方向略微错开以表示简并度，简并施密特值组由红色线连接。Haldane 相和 XY 相的配色方案以及密度矩阵重整化群参数与图 6 相同。

失谐、ϵ_z 的符号，以及制备偶极分子初态所需的条件。

在实现 Haldane 相方面，区域 I 最有希望。请注意，使用实验参数时，我们模拟方程 (15) 中完整的 H_{eff}，包括 $V^{\text{SU}(3)}$。即使横向场 $h_i^z = 0$，我们也预计 $V^{\text{SU}(3)}$ 会导致相边界偏移。此外，$V^{\text{SU}(3)}$ 会破坏时间反演对称性和 π 旋转对称性，但会保留键中心反演对称性，如附录 C 所示。因此，尽管这会破坏自旋-$\frac{1}{2}$ 边缘态以及 Haldane 相的 $Z_2 \times Z_2$ 分类，但由于键中心反演的存在，该相仍能保持稳定，从而产生二重简并的纠缠谱和消失的P_ϱ。

图 7 展示了利用伪序参量 P_ϱ 绘制的式（15）中 H_{eff} 多体基态的相图，该相图以实验参数 ϵ_z/V_{dd} 和 Ω_R/V_{dd}为函数，并对应红失谐微波；数据点的颜色表示 $\log_{10} P_\varrho$的值。图 7(a)-(c) 中的黑色虚线表示 Haldane 相（左侧）与拓扑平庸相（右侧）之间的边界，我们通过监测 P_ϱ的变化来标记该边界。(ϵ_z/V_{dd}，Ω_R/V_{dd}) 的具体取值选自图 1(b) 所示数据点的一个子集，对应右下角面板中最底一行的数据点，但 $|\delta|$取值不同，因此展示了相图随 $|\delta|$的演变。随着 $|\delta|/V_{dd}$增大，我们沿区域 I 向下移动，Haldane 相的宽度随之增加，直至完全跃迁至反铁磁相 [，如图 7(d)]所示。与此相符，图 8 展示了对应于图 7(a)-(c) 中 $|\delta|$ 取值时，纠缠谱 $\{-2\ln(\varrho_q)\}$ 随 ϵ_z/V_{dd} 的变化。纠缠谱中的二重简并贯穿始终，在白色区域清晰可见；该区域被确定为 Haldane 相。

尽管该区域内 P_ϱ 的数值很小，但并非严格为零。这是有限尺寸效应造成的。我们聚焦于 $|\delta| = 2.5V_{dd}$ 的 Haldane 区域，对 $\epsilon_z/V_{dd} = 0.1$，0.3，0.5 时的 P_ϱ 进行了有限尺寸标度。图9显示，~ 1 随链长呈幂律衰减，这意味着在热力学极限下 $P_\varrho \to 0$，从而证实这确实是 Haldane 相。

图1、图7–9 展示了本研究的主要结果。它们显示，在实验上可实现的参数空间内，出现了拓扑非平庸的 Haldane 相，并实现了有效的自旋-1 哈密顿量。用于生成所有数据和图的 DMRG 代码以及 TeNPy库可见参考文献 [56]。

VI. 结论与展望

我们提出了一种基于极性分子的全新量子磁性模拟平台。$^2\Sigma$ 普遍具有独特的转动结构和超精细耦合，使我们能够构造具有多个能级的微波缀饰态，其数量与转动量子数成正比。利用圆偏振微波将$N = 1$，$F = 2$ 态与 $N = 0$，$F = 1$ 态耦合起来，我们可以同时耦合三组能级。此外，我们还可以利用静磁场使这些微波缀饰态接近简并。我们证明，有效偶极-偶极相互作用哈密顿量呈现多种量子物质相，其中尤为突出的是 SPT Haldane相。

我们重点研究了被囚禁在一维晶格中的 $^{24}Mg^{19}F$ 分子。由于该分子的近紫外跃迁波长，可以实现 376 nm 的短晶格间距，从而增强相互作用强度 V_{dd}。通过量子气体显微镜获得的单格点分辨率图像，可直接提供空间关联函数，例如 z 基底下的弦序参量。由于弦序参量具有 Haldane 相的特征，因此单格点分辨率图像能够提供拓扑

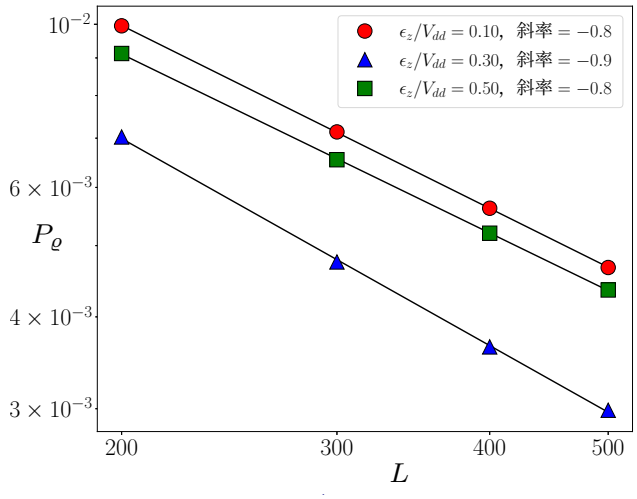

图 9. 对于 $|\delta| = 2.5\,V_{dd} \approx 125$ 千赫、 $L = 200$、300、400、500 以及 $\epsilon_z/V_{dd} = 0.1$、0。3、0。5，在 Haldane 相中选取的 P_ϱ 的有限尺寸标度，参见图 7(c)。

对称性保护的证据，适用于 SU(3) 项可以忽略的区域。

我们的研究表明，Haldane 相对于 SU(3) 微扰具有鲁棒性，并且在合理的实验参数范围内可以实现。当 SU(3)项不可忽略时，实验平台应能够探测纠缠熵或纠缠谱 [57]。尤其是，Rényi 纠缠熵可以通过对多个副本进行干涉测量[58] 或使用随机化测量工具箱 [59]来获取。另一方面，纠缠谱的测量更具挑战性，尤其是在模拟量子模拟平台中，可能需要将分子系统耦合到腔 [60] 或采用量子学习算法 [61]。

上述平台并不局限于实现自旋-1 XXZ 哈密顿量。通过允许分子在不同格点之间发生量子隧穿，可以模拟巡游磁性模型。模拟器的维度可以轻松扩展到二维。改变填充率可以有效地产生具有随机耦合的模型，从而形成自旋玻璃相。通过耦合更高的转动态，可以生成更高有效自旋哈密顿量。这对于研究 SU(N) 磁性尤其有用 [62]。此外，由于分子的偶极相互作用比原子更强，实验室中可以更全面地探索偶极 Bose-Hubbard 模型。将分子同位素体换为 ^{25}Mg^{19}F，即可在该平台中引入费米子。

因此，光学晶格中的 MgF 分子具有巨大的潜力，可构建一个多用途平台，用以展现各种关联与拓扑多体态。本文的研究甚至证明，即使对于分子被囚禁在一维晶格这一相对受限的情形，也可以模拟自旋-1 链，并获得极为丰富的相。其中包括著名的 Haldane 相，而且这种设置还允许检测其独特的关联。

致谢

我们感谢 Ana Maria Rey 富有成效的讨论。本研究部分由印第安纳州大学研究发展办公室通过 Bridge and Emerging Frontiers Programs 提供支持，并由国家科学基金会通过资助项目 DMR-2533543 和 DMR-2531425 提供支持。

附录 A：微波缀饰态

这里我们推导缀饰态及其能量。我们从式 (1) 给出的单分子时变哈密顿量出发。对于电偶极跃迁 $|N = 0,\ F = 1,\ m_F = n-2\rangle \to |N = 1,\ F = 2,\ m_F = n-1\rangle$,

$$H_n(t) = \begin{pmatrix} -\frac{\omega_0}{2} + 2(n-2)\epsilon_z & -\frac{\Omega_R}{x_n} e^{i\omega t} \\ -\frac{\Omega_R}{x_n} e^{-i\omega t} & \frac{\omega_0}{2} + (n-1)\epsilon_z \end{pmatrix}. \quad \text{(A1)}$$

随后，我们对分子进行幺正变换，变换到其旋转框架中，变换由 $R(t) = \exp\left[i(\mathbb{1} - \sigma_z)\omega t/2\right]$ 给出，从而得到旋转框架中的定态哈密顿量，

$$\begin{aligned} H_{n,\mathrm{rot}} &= R(t) H_n(t) R^\dagger(t) - iR(t)\frac{d}{dt} R^\dagger(t) \\ &= \begin{pmatrix} -\frac{\omega_0}{2} + 2(n-2)\epsilon_z & -\frac{\Omega_R}{x_n} \\ -\frac{\Omega_R}{x_n} & \frac{\omega_0}{2} + (n-1)\epsilon_z - \omega \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad \text{(A2)}$$

对式 (A2) 进行对角化，我们得到正文中实验室系缀饰态的式 (2) 和式 (3)，以及缀饰态能量的式 (5)–(7)。

附录 B：偶极矩算符和 $\hat{V}_{dd}^{(0)}$

实验室系中偶极矩算符的矩阵元 $[\mathbf{d}(t)]_{nn'}$ 是利用电偶极跃迁选择定则以及各类跃迁的 Clebsch-Gordon 系数得到的。矢量分量的矩阵表示 $d_\pm(t) = d_x(t) \pm i d_y(t)$ 和 $d_z(t)$ 在 $|-\rangle_n$ 态基底下为，

$$\mathbb{d}_+(t) = -d_0 \begin{pmatrix} \frac{a_1 b_1}{3} e^{i\omega t} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{a_2 b_2}{\sqrt{3}} e^{i\omega t} & 0 \\ -\frac{a_1 b_3}{3} e^{-i\omega t} & 0 & \sqrt{\frac{2}{3}} a_3 b_3 e^{i\omega t} \end{pmatrix} \quad \text{(B1)}$$

and

$$\mathbb{d}_z(t) = d_0 \begin{pmatrix} 0 & \frac{\sqrt{2}}{3}a_1 b_2 e^{i\omega t} & 0 \\ \frac{\sqrt{2}}{3}a_1 b_2 e^{-i\omega t} & 0 & \frac{a_2 b_3}{\sqrt{6}}e^{i\omega t} \\ 0 & \frac{a_2 b_3}{\sqrt{6}}e^{-i\omega t} & 0 \end{pmatrix}. \quad \text{(B2)}$$

将方程（B1）和（B2）代入方程（8），并取时间平均，可得由表达式给出的 $\hat{V}_{dd}^{(0)}$，

$$\hat{V}_{dd}^{(0)} = \Bigg[-\frac{\hat{d}_+^{(1)} \otimes \hat{d}_-^{(-1)} + \hat{d}_-^{(1)} \otimes \hat{d}_+^{(-1)}}{4} + \hat{d}_z^{(1)} \otimes \hat{d}_z^{(-1)} + \text{h.c.} \Bigg] \frac{(1 - 3\cos^2\theta_{ij})}{r^3}, \quad \text{(B3)}$$

其中 $\hat{d}_j^{(\pm 1)} = \int_0^T \hat{d}_j(t) e^{\pm i\omega t} \frac{dt}{T}$ 是 $d_j(t)$ 的傅里叶分量（$j = \pm, z$）。类似的表达式可以通过简单地替换 $b_n \to a_n$ 和 $a_n \to -b_n$，即可得到 $|+\rangle_n$ 态的表达式。

附录 C：$V_{\mathrm{SU}(3)}$的对称性分析

这里我们展示了 π-旋转对$\hat{V}_{\mathrm{SU}(3)}$的作用。按照正文中式（14）所述的最小化过程进行计算后，我们发现，$V_{\mathrm{SU}(3)}$ 中非零的单体相互作用项与盖尔曼矩阵 λ_3 和 λ_8 成正比。在旋转下，$[e^{-i\pi S^{x,y}}, \lambda_3] = \pm i\lambda_5$、$[e^{-i\pi S^{x,y}}, \lambda_8] = \pm i\sqrt{3}\lambda_5$和$[e^{-i\pi S^z}, \lambda_{3,8}] = 0$。因此，$\hat{V}_{\mathrm{SU}(3)}$中的单体项会破坏绕 x 轴和y 轴的 π-旋转以及时间反演对称性。不过，与式（15）中的横向场不同，$V_{\mathrm{SU}(3)}$中的单体项还会破坏 TR$\times e^{-i\pi S^x}$ 和 TR$\times e^{-i\pi S^y}$的组合。因此，$V_{\mathrm{SU}(3)}$ 会破坏对 Haldane 相的 $\mathrm{Z}_2 \times \mathrm{Z}_2$ 保护机制。尽管如此，保留下来的键中心反演对称性仍能稳定 Haldane 相，这一点已在正文中通过数值计算得到证实。

[1]E. Casotti, E. Poli, L. Klaus, A. Litvinov, C. Ulm, C. Politi, M. J. Mark, T. Bland, 和 F. Ferlaino, 《观测到偶极超固体中的涡旋》, 《自然》**635**, 327 2024( ). [2] L. Su, A. Douglas, M. Szurek, R. Groth, S. F. Ozturk, A. Krahn, A. H. Hébert, G. A. Phelps, S. Ebadi, S. Dick- erson, F. Ferlaino, O. Marković, 和 M. Greiner, 《Hubbard 量子模拟器中涌现的偶极量子固体》, 《自然》**622**, 724 (2023). [3] S. Ebadi, T. T. Wang, H. Levine, A. Keesling, G. Semeghini, A. Omran, D. Bluvstein, R. Samajdar, H. Pichler, W. W. Ho, S. Choi, S. Sachdev, M. Greiner, V. Vuletić, 和 M. D. Lukin, 《256 原子可编程量子模拟器上的物质量子相》, 《自然》**595**, 227 (2021). [4] H. J. Manetsch, G. Nomura, E. Bataille, X. Lv, K. H. Leung, 和 M. Endres, 《拥有 6,100 个高相干原子量子比特的光镊阵列》, 《自然》**647**, 60 (2025). [5] N. R. Cooper 和 G. V. Shlyapnikov, 《超冷极性费米分子的稳定拓扑超流体相》, 《物理评论快报》**103**, 155302 (2009). [6] T. Karman 和 J. M. Hutson, 《超冷极性分子的微波屏蔽》, 《物理评论快报》**121**, 163401 (2018). [7] P. D. Gregory, J. A. Blackmore, S. L. Bromley, J. M. Hutson, 和 S. L. Cornish, 《超冷极性分子中的稳健存储量子比特》, 《自然·物理》**17**, 1149 (2021). [8] Y. Bao, S. S. Yu, L. Anderegg, E. Chae, W. Ketterle, K.-K. Ni, 和 J. M. Doyle, 《光学光镊阵列中分子间的偶极自旋交换与纠缠》, 《科学》**382**, 1138 (2023). [9] C. M. Holland, Y. Lu, 和 L. W. Cheuk, 《在可重构光镊阵列中实现分子的按需纠缠》, 《科学》**382**, 1143 (2023). [10] L. D. Marco, G. Valtolina, K. Matsuda, W. G. Tobias, J. P. Covey, 和 J. Ye, 《极性简并费米气体分子, 《科学》**363**, 853 (2019)。[11] A. Schindewolf, R. Bause, X.-Y. Chen, M. Duda, T. Kar- man, I. Bloch, and X.-Y. Luo, 将微波屏蔽的极性分子蒸发至量子简并, 《自然》**607**, 677 (2022)。[12] N. Bigagli, W. Yuan, S. Zhang, B. Bulatovic, T. Kar- man, I. Stevenson, and S. Will, 观测到偶极分子的玻色–爱因斯坦凝聚, 《自然》**631**, 289 2024( )。[13] E. Altman, K. R. Brown, G. Carleo, L. D. Carr, E. Demler, C. Chin, B. DeMarco, S. E. Economou, M. A. Eriks- son, K.-M. C. Fu, M. Greiner, K. R. Hazzard, R. G. Hulet, A. J. Kollár, B. L. Lev, M. D. Lukin, R. Ma, X. Mi, S. Misra, C. Monroe, K. Murch, Z. Nazario, K.-K. Ni, A. C. Potter, P. Roushan, M. Saffman, M. Schleier- Smith, I. Siddiqi, R. Simmonds, M. Singh, I. Spielman, K. Temme, D. S. Weiss, J. Vučković, V. Vuletić, J. Ye, and M. Zwierlein, 量子模拟器：架构与机遇, PRX Quantum **2**, 017003 (2021)。[14] W. S. Bakr, A. Peng, M. E. Tai, R. Ma, J. Simon, J. I. Gillen, S. Fölling, L. Pollet, and M. Greiner, 在单原子尺度探测超流体–莫特绝缘体转变, 《科学》**329**, 547 (2010)。[15] P. Weckesser, K. Srakaew, T. Blatz, D. Wei, D. Adler, S. Agrawal, A. Bohrdt, I. Bloch, and J. Zeiher, 实现里德堡缀饰扩展玻色–哈伯德模型, 《科学》**390**, 849 (2025)。[16] L. Su, R. Sahay, M. Szurek, A. Douglas, O. Markovic, C. B. Dag, R. Verresen, and M. Greiner, 哈伯德量子模拟器中的拓扑相变与混合态序, arXiv 预印本 (2025), arXiv:2505.17009 [cond-mat.quant-gas]。[17] P. Sompet, S. Hirthe, D. Bourgund, T. Chalopin, J. Bibo, J. Koepsell, P. Bojović, R. Verresen, F. Pollmann, G. Sa- lomon, C. Gross, T. A. Hilker, and I. Bloch, 在费米–哈伯德

梯子系统中实现对称性保护的 Haldane 相，《自然》606, 484 (2022)。[18] M. Xu, L. H. Kendrick, A. Kale, Y. Gang, C. Feng, S. Zhang, A. W. Young, M. Lebrat, and M. Greiner，低温环境下的中性原子哈伯德量子模拟器，《自然》642, 909 (2025)。[19] I. Cohen, P. Richerme, Z.-X. Gong, C. Monroe, and A. Retzker，利用光场在俘获离子自旋中模拟 Haldane 相，《物理评论 A》92, 012334 (2015)。[20] G. Semeghini, H. Levine, A. Keesling, S. Ebadi, T. T. Wang, D. Bluvstein, R. Verresen, H. Pichler, M. Kali- nowski, R. Samajdar, A. Omran, S. Sachdev, A. Vish- wanath, M. Greiner, V. Vuletić, and M. D. Lukin，在可编程量子模拟器上探测拓扑自旋液体，《科学》374, 1242 (2021)。[21] A. Micheli, G. K. Brennen, and P. Zoller，极性分子晶格自旋模型工具箱，《自然·物理》2, 341 2006( )。[22] F. D. M. Haldane，大自旋海森堡反铁磁体的非线性场论：一维易轴奈尔态的半经典量子化孤子，《物理评论快报》50, 1153 (1983)。[23] A. N. Carroll, H. Hirzler, C. Miller, D. Wellnitz, S. R. Muleady, J. Lin, K. P. Zamarski, R. R. W. Wang, J. L. Bohn, A. M. Rey, and J. Ye，观测到具有可调偶极相互作用的广义*t-J* 自旋动力学，《科学》388, 381 (2025)。[24] L. Christakis, J. S. Rosenberg, R. Raj, S. Chi, A. Morn- ingstar, D. A. Huse, Z. Z. Yan, and W. S. Bakr，探测超冷分子自旋系统中的位点分辨关联，《自然》614, 64 (2023)。[25] Y.-H. Chen, J. Genzor, Y. B. Kim, and Y.-J. Kao，自旋-1 Kitaev自旋液体的激发谱，《物理评论 B》105, L060403 (2022)。[26] S. Gao, O. Zaharko, V. Tsurkan, Y. Su, J. S. White, G. Tucker, B. Roessli, F. Bourdarot, R. Sibille, D. Chernyshov, T. Fennell, A. Loidl, and C. Rüegg，$MnSc_2S_4$，中的螺旋自旋液体及类涡旋态的出现，《自然·物理》13, 157 (2017)。[27] Y. Haraguchi, J.-i. Yamaura, A. Matsuo, K. Kindo, and H. A. Katori，自旋-1 kagome磁体 $BaNi_3(AsO_4)_2(OH)_2$，中的三分之一磁化平台，《物理评论：材料》9, 054408 (2025)。[28] P. Tin, M. J. Jenkins, J. Xing, N. Caci, Z. Gai, R. Jin, S. Wessel, J. Krzystek, C. Li, L. L. Daemen, Y. Cheng, and Z.-L. Xue，平面金属有机框架中的 Haldane拓扑自旋-1链，《自然·通讯》14, 5454 (2023)。[29] W. J. L. Buyers, R. M. Morra, R. L. Armstrong, M. J. Hogan, P. Gerlach, and K. Hirakawa，自旋-1近各向同性反铁磁链中Haldane能隙的实验证据，《物理评论快报》56, 371 (1986)。[30] M. Steiner, K. Kakurai, J. K. Kjems, D. Petitgrand, and R. Pynn，近海森堡一维反铁磁体的非弹性中子散射研究：对 Haldane 猜想的检验，《应用物理学杂志》61, 3953 (1987)。[31] R. M. Morra, W. J. L. Buyers, R. L. Armstrong, and K. Hirakawa，自旋-1准一维反铁磁体 $CsNiCl_3$，中的自旋动力学与 Haldane能隙，《物理评论 B》38, 543 (1988)。[32] L. P. Regnault, I. Zaliznyak, J. P. Renard, and C. Vettier, Haldane能隙系统 $Ni(C_2H_8N_2)_2NO_2ClO_4$，中自旋动力学的非弹性中子散射研究，《物理评论 B》50，9174（1994年）。

[33] P. E. Sulewski 和 S.-W. Cheong，Y_2BaNiO_5 自旋-1 海森堡链化合物中一维自旋涨落的拉曼研究：与简单预期的对比，《物理评论 B》**51**，3021（1995）。[34] S. Ma、D. H. Reich、C. Broholm、B. J. Sternlieb 和 R. W. Erwin，一维反铁磁体中有限温度下的自旋关联，《物理评论 B》**51**，3289（1995）。[35] G. Xu、J. F. DiTusa、T. Ito、K. Oka、H. Takagi、C. Broholm 和 G. Aeppli，Y_2BaNiO_5：反铁磁相互作用海森堡链的近乎理想实现，《物理评论 B》**54**，R6827（1996）。[36] I. A. Zaliznyak、S.-H. Lee 和 S. V. Petrov，通过中子散射观测到的 Haldane 链自旋激发谱连续谱，《物理评论快报》**87**，017202（2001）。[37] M. Kenzelmann、R. A. Cowley、W. J. L. Buyers、Z. Tun、R. Coldea 和 M. Enderle，反铁磁自旋-1 链化合物 CsNiCl 中 Haldane 激发和多粒子态的性质，《物理评论 B》**66**，024407₃，2002。[38] F. Pollmann、A. M. Turner、E. Berg 和 M. Oshikawa，一维拓扑相的纠缠谱，《物理评论 B》**81**，064439（2010）。[39] H. Korbmacher、G. A. Domínguez-Castro、M. Łącki、J. Zakrzewski 和 L. Santos，光学梯子中偶极玻色子的拓扑量子漂浮相，《物理评论 A》**112**，L011301（2025）。[40] M. Doppelbauer、S. C. Wright、S. Hofsäss、B. G. Sartakov、G. Meijer 和 S. Truppe，MgF 中跃迁的超精细分辨光谱，《化学物理杂志》**156**，134301（2022）。[41] E. G. C. P. van Loon、M. I. Katsnelson 和 M. Lemeshko，具有长程相互作用的费米哈伯德模型中的超长程有序，《物理评论 B》**92**，081106（2015）。[42] T. Mendes-Santos、R. Mondaini、T. Paiva 和 R. R. dos Santos，全局偶极取向调控哈伯德模型中的万花筒般的相，《物理评论 B》**108**，205128（2023）。[43] J. Hauschild 和 F. Pollmann，使用张量网络进行高效数值模拟：Tensor Network Python（TeNPy），SciPost Phys. Lect. Notes，5（2018）。[44] J. Hauschild、J. Unfried、S. Anand、B. Andrews、M. Bintz、U. Borla、S. Divic、M. Drescher、J. Geiger、M. Hefel、K. Hémery、W. Kadow、J. Kemp、N. Kirchner、V. S. Liu、G. Möller、D. Parker、M. Rader、A. Romen、S. Scalet、L. Schoonderwoerd、M. Schulz、T. Soejima、P. Thoma、Y. Wu、P. Zechmann、L. Zweng、R. S. K. Mong、M. P. Zaletel 和 F. Pollmann，Tensor Network Python（TeNPy）1 版，SciPost Phys. Codebases，41（2024）。[45] T. Kennedy 和 H. Tasaki，量子自旋链中的隐含对称性破缺与 Haldane 相，《数学物理通讯》**147**，431（1992）。[46] W. Chen、K. Hida 和 B. C. Sanctuary，具有单离子型单轴各向异性的 XXZ链基态相图，《物理评论 B》**67**，104401（2003）。[47] M. Mousa、B. Wehefritz-Kaufmann、S. Kais、S. Cui 和 R. Kaufmann，呈现 Haldane 相的自旋-1系统的精细相图，《物理评论 B》**111**，085303（2025）。

[48] K. Brechtelsbauer、J. Mögerle 和 H. P. Büchler，利用镝对自旋-1 XXZ 海森堡模型和 Haldane 相进行量子模拟，《物理评论 A》**111**，032621（2025）。[49] Z.-C. Gu 和 X.-G. Wen，张量纠缠过滤重整化方法与对称性保护的拓扑序，《物理评论 B》**80**，155131（2009）。[50] M. den Nijs 和 K. Rommelse，晶体表面的预粗糙化转变与量子自旋链中的价键相，《物理评论 B》**40**，4709（1989）。[51] T. Kennedy 和 H. Tasaki，Haldane能隙反铁磁体中的隐含 $Z_2 \times Z_2$ 对称性破缺，《物理评论 B》**45**，304（1992）。[52] F. Pollmann、E. Berg、A. M. Turner 和 M. Oshikawa，一维量子自旋系统中拓扑相的对称性保护，《物理评论 B》**85**，075125（2012）。[53] Z.-C. Gu 和 X.-G. Wen，张量纠缠过滤重整化方法与对称性保护的拓扑序，《物理评论 B》**80**，155131（2009）。[54] F. Anfuso 和 A. Rosch，弦序的脆弱性，《物理评论 B》**76**，085124（2007）。[55] E. B. Norrgard、Y. Chamorro、C. C. Cooksey、S. P. Eckel、N. H. Pilgram、K. J. Rodriguez、H. W. Yoon、L. c. v. F. Pašteka 和 A. Borschevsky，MgF 的辐射衰变率和分支比，《物理评论 A》**108**，032809 (2023).[56] 论文中所展示的数据和图所用的代码可在 10.5281/zenodo.19022548 获取。[57] K. Choo、C. W. von Keyserlingk、N. Regnault 和 T. Neupert，《使用 IBM 量子计算机测量对称性保护拓扑态的纠缠谱》，《物理评论快报》**121**, 086808 (2018). [58] R. Islam、R. Ma、P. M. Preiss、M. Eric Tai、A. Lukin、M. Rispoli 和 M. Greiner，《测量量子多体系统中的纠缠熵》，《自然》**528**, 77 (2015). [59] A. Elben、S. T. Flammia、H.-Y. Huang、R. Kueng、J. Preskill、B. Vermersch 和 P. Zoller，《随机测量工具箱》，《自然综述：物理》**5**, 9 (2023). [60] H. Pichler、G. Zhu、A. Seif、P. Zoller 和 M. Hafezi，《冷原子纠缠谱测量方案》，《物理评论 X》**6**, 041033 (2016). [61] C. Kokail、B. Sundar、T. V. Zache、A. Elben、B. Vermer- sch、M. Dalmonte、R. van Bijnen 和 P. Zoller，《纠缠哈密顿量的量子变分学习》，《物理评论快报》**127**, 170501 (2021). [62] B. Mukherjee、J. M. Hutson 和 K. R. A. Hazzard，《超冷分子中的 SU(N) 磁性》，New Journal of Physics**27**, 013013 (2025).