

向涛报告笔记： σ -bonding 高温超导与 Neural Tensor Network State

报告整理笔记

2026 年 6 月 22 日

报告主线。这场报告可以理解成两条线的连接：第一条是材料物理线索，即通过金属化强成键电子，特别是 σ -bonding electrons，寻找高 T_c 超导；第二条是计算物理线索，即用 tensor network state 和 neural quantum state 表示强关联多体波函数。前者试图回答“什么材料自由度可能给出高能量尺度”，后者试图回答“如何准确求解这些强关联自由度”。

目录

1 从 graphite 到 high- T_c : 金属化 σ -bonding electrons	2
2 把这个思想用于 cuprate 时要非常小心	2
3 Cuprate 高温超导的关键难题	3
3.1 不是简单的 rigid-band metallization	3
3.2 d -wave 配对对称性	3
3.3 Pseudogap 是什么?	3
3.4 Strange metal 为什么如此简单?	3
3.5 Charge order, stripe, nematic, PDW 是敌人还是朋友?	4
4 为什么报告转向 tensor network 与 neural quantum state?	4
5 Disentangler: 消除短程纠缠, 而不是抹掉所有量子性	4
6 Neural Tensor Network State: DNN 作为变分 disentangler	5
7 J_1 - J_2 方格反铁磁模型: 为什么是 benchmark?	5
8 报告中两条线的统一理解	6
9 听报告时最应该抓住的几个问题	6

1 从 graphite 到 high- T_c : 金属化 σ -bonding electrons

石墨的基本问题不是缺少强相互作用，而是强的面内 sp^2 σ 键已经填满并位于费米能级以下。低能处主要是 p_z 形成的 π 电子。因此普通 graphite 的强 C-C 共价键并没有直接变成低能配对自由度。

graphite: σ band filled and deep, π band near E_F .

向涛报告中所谓 “How to turn graphite into high- T_c superconductor” 的核心不是字面上把石墨掺杂成高温超导，而是问：能否让强 σ 键本身变成金属态？其最清楚的原型是 MgB_2 。 MgB_2 中 B honeycomb layer 类似 graphite-like 结构，但 B-B 面内 σ band 穿过费米能级，存在 σ -hole，并强烈耦合 B-B bond-stretching phonon。

filled σ bonding band \rightarrow partially filled σ bonding band at E_F

strong covalent bond + metallic carriers + strong electron-phonon coupling \Rightarrow potential high T_c

这个思想由 Gao-Lu-Xiang 等人概括为：提高 T_c 的一个材料设计方案，是把 σ -bonding bands 提到费米能级，或者说金属化 σ -bonding electrons。 MgB_2 、部分 borocarbides、hydrides 是这条路线最自然的正例。

2 把这个思想用于 cuprate 时要非常小心

报告中提到：

Hole doping lifts the bonding state to the Fermi level, leading to high- T_c superconductivity. Antiferromagnetic fluctuations enforce the metallization and relieve the lattice instability induced by metallization. Cu^{2+} spin and O $2p$ hole form Zhang-Rice singlet.

这句话有启发性，但不能按普通能带论逐字理解。Cuprate 不是 MgB_2 式的弱关联 σ -band metal，而是 charge-transfer Mott insulator。母体中 Cu^{2+} 为 $3d^9$ ，带有 $S = 1/2$ 局域自旋；掺杂空穴主要进入氧 $2p_\sigma$ 轨道，并与中心 Cu 自旋形成 Zhang-Rice singlet。

$$Cu^{2+} : 3d^9, quad S = \frac{1}{2}, \quad O 2p_\sigma \text{ hole} : S = \frac{1}{2},$$

$$Cu \text{ spin} + O 2p \text{ hole} \rightarrow \text{Zhang-Rice singlet}, \quad S_{tot} = 0.$$

这说明 cuprate 的低能载流子已经不是裸的 bonding electron，而是强关联背景中的复合对象。Zhang-Rice singlet 的作用是把三带 Cu-O 问题下推为一个有效一带模型，但这个下推本身已经包含强关联投影。

3 Cuprate 高温超导的关键难题

3.1 不是简单的 rigid-band metallization

如果把 cuprate 说成“hole doping 把 bonding state 抬到 E_F ”，容易误以为这是普通半导体的刚性能带掺杂。实际上，cuprate 的母体是 charge-transfer insulator，掺杂带来的是谱权重分布、赝能隙、Fermi arc、局域自旋背景的重整化，而不是简单 band crossing。

第一个硬问题。 Cuprate 中真正的低能自由度是什么？是一带 Hubbard/ t - J 模型足够，还是必须保留 Cu $3d_{x^2-y^2}$ 与 O $2p_x, 2p_y$ 的三带结构？

3.2 d -wave 配对对称性

实验上，cuprate 的主导配对对称性是

$$\Delta(\mathbf{k}) \sim \cos k_x - \cos k_y.$$

这说明配对相互作用必须有强动量依赖和符号结构。单纯“ σ -bonding 金属化”很自然导向 strong electron-phonon coupling 与常规 s -wave 图像，但 cuprate 需要解释为什么出现 $d_{x^2-y^2}$ -wave。

第二个硬问题。 到底是什么相互作用给出高能量尺度的 d -wave pairing？是 RVB、超交换、spin fluctuation、charge fluctuation，还是 intertwined orders 的集体结果？

3.3 Pseudogap 是什么？

Underdoped cuprate 在 T^* 以下出现 pseudogap。它不是超导能隙的简单高温延拓，因为它和超导既相互竞争又可能有共同来源。Pseudogap 还伴随 Fermi surface reconstruction、charge order、nematicity、可能的 PDW 或其他隐藏序。

第三个硬问题。 Pseudogap 是 preformed Cooper pairs、竞争序、分数量子态，还是 doped Mott insulator 的新型金属相？

3.4 Strange metal 为什么如此简单？

Cuprate 正常态最反常之处，是没有清晰 Landau quasiparticle，却常常表现出简单的

$$\rho(T) \sim T.$$

这种 T -linear resistivity 延伸到很低温，常被称为 Planckian dissipation 的候选例子。问题在于：强关联体系的谱函数极其复杂，输运却异常简单。

第四个硬问题。 为什么 strange metal 没有良好准粒子，却有近似普适的 T -linear 散射率？它是否来自 pseudogap endpoint 的量子临界涨落？

3.5 Charge order, stripe, nematic, PDW 是敌人还是朋友？

现在的观点越来越不是单纯“competing orders”，而是“intertwined orders”。Charge order 可能压制均匀超导，也可能是同一强关联机制的自然产物；stripe 和 PDW 甚至可能是局域配对与电荷调制共存的组织方式。

第五个硬问题。 Charge order/stripe/PDW 是高 T_c 的竞争者、旁观者，还是配对本身的空间组织形式？

4 为什么报告转向 tensor network 与 neural quantum state ?

上述问题的共同点是：它们都不能靠简单平均场或刚性能带图像完全解决。需要直接处理强关联多体波函数。

多体波函数可写作

$$|\Psi\rangle = \sum_{\sigma_1 \cdots \sigma_N} C_{\sigma_1 \cdots \sigma_N} |\sigma_1 \cdots \sigma_N\rangle.$$

一般 $C_{\sigma_1 \cdots \sigma_N}$ 有指数多个分量。Tensor network 的思想是利用物理基态的纠缠结构，把这个巨大张量分解成局域小张量。例如 MPS：

$$C_{\sigma_1 \cdots \sigma_N} = \text{Tr} [A_1^{\sigma_1} A_2^{\sigma_2} \cdots A_N^{\sigma_N}].$$

tensor network does not approximate Hilbert space blindly; it approximates entanglement structure.

Area law 是其物理基础：

$$S_A \sim |\partial A|, \quad \text{not } S_A \sim |A|.$$

MPS 在一维极其成功；PEPS 是二维推广；MERA/TNR 则进一步把 entanglement renormalization 放进 coarse graining。

5 Disentangler: 消除短程纠缠，而不是抹掉所有量子性

MERA/TNR 中的 disentangler 是局域酉变换 u ：

$$u^\dagger u = 1.$$

它的目标是在 coarse graining 之前先去掉短程纠缠，使有效自由度更干净。

local entanglement \xrightarrow{u} less entangled variables $\xrightarrow{\text{coarse grain}}$ renormalized theory.

这里的“disentangle”不能理解成把强关联态变成平庸态。局域 disentangler 主要移除短程纠缠；长程临界纠缠、拓扑纠缠、分数化结构不能被有限深度局域酉完全消掉。

6 Neural Tensor Network State: DNN 作为变分 disentangler

向涛最近工作的关键想法，是把 deep neural network 与 tensor network 结合。报告中说的 ν TNS 可能指 variational TNS；而他最新文章中的专门名称是 ν TNS，即 Neural Tensor Network States。

其结构可以抽象写成

$$\Psi(\sigma) = \Phi_A(\tilde{\sigma}), \quad \tilde{\sigma} = f_\theta(\sigma).$$

这里 f_θ 是 deep neural network，作用类似一个 learned disentangler； Φ_A 是 tensor network/back-flow tensor network，用来编码重整化变量的剩余纠缠。

核心分工。

DNN: extract nonlocal correlations and disentangle, TNS: compress residual entanglement.

与 MERA 的局域酉 disentangler 不同，neural disentangler 通常不是严格局域酉变换，而是一个变分的、非线性的、可以带有非局域表达能力的映射。因此它更像一种工程化的 entanglement preprocessing。

7 J_1 - J_2 方格反铁磁模型：为什么是 benchmark ?

报告中提到用 ν TNS/ ν TNS 计算 J_1 - J_2 模型。其哈密顿量为

$$H = J_1 \sum_{\langle ij \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j + J_2 \sum_{\langle\langle ij \rangle\rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j, \quad J_1, J_2 > 0.$$

物理图像是：

$$J_1 : \text{Néel AFM}, \quad J_2 : \text{stripe/collinear AFM}.$$

当 $J_2/J_1 \sim 0.5$ 时，两种倾向强烈竞争，体系高度受挫，普通 QMC 有 sign problem，因此它是二维强关联算法的典型试金石。

参数区域	典型物理图像
$J_2/J_1 \ll 0.5$	Néel 反铁磁长程序
$J_2/J_1 \sim 0.45-0.6$	最困难区域：spin liquid、VBS、DQCP 等方案竞争
$J_2/J_1 \gg 0.5$	stripe/collinear 反铁磁

向涛组 ν TNS 的 claim 是：在 $J_2/J_1 = 0.5$ 的强受挫点，DNN+MPS/back-flow TNS 可以得到很低的变分能，并在有限尺寸标度中看到 spin、dimer、plaquette correlation 都呈 power-law 衰减，且没有明显磁长程序或 VBS 长程序，因此支持 gapless quantum spin liquid 图像。

需要保留的判断。 J_1 - J_2 中间相仍然是争论问题。不同 DMRG、PEPS、VMC、NQS、 ν TNS 工作可能分别支持 gapless spin liquid、plaquette/columnar VBS、或 Néel-VBS deconfined quantum criticality。因此报告中的数值结果应理解为强有力证据，而不是最终定论。

8 报告中两条线的统一理解

这场报告表面上从高温超导讲到 neural tensor network, 跨度很大; 但核心其实一致:

寻找合适的低能自由度, 并用合适的表示压缩它。

在材料层面:

graphite/MgB₂: σ -bonding electrons \rightarrow metallic carriers;

在 cuprate 层面:

Cu spin + O hole \rightarrow Zhang-Rice singlet;

在数值层面:

physical spins $\xrightarrow{\text{DNN disentangler}}$ renormalized variables $\xrightarrow{\text{TNS}}$ compact wavefunction.

所以, σ -bonding 图像不是 cuprate 的完整机制, 但它强调了强成键能量尺度; Zhang-Rice singlet 告诉我们这个能量尺度在强关联背景中被重整化成低能复合自由度; tensor network/neural disentangler 则是求解这些自由度的现代工具。

9 听报告时最应该抓住的几个问题

1. 金属化 σ -bonding electrons 是材料设计 heuristic, 还是可以成为真正的 microscopic pairing mechanism?
2. 在 cuprate 中, Cu-O σ hybridization 与 Zhang-Rice singlet 的关系, 是否足以解释高 T_c , 还是只给出有效一带模型的出发点?
3. Pseudogap、strange metal、charge order/PDW 与 d -wave superconductivity 之间到底是竞争、伴生, 还是同源?
4. Neural disentangler 是否真的学到了物理上的有效自由度, 还是只是一个高效但难解释的变分参数化?
5. J_1 - J_2 的 $J_2/J_1 \sim 0.5$ 中间相, 到底是 gapless QSL、VBS, 还是 DQCP?

References

- [1] J. G. Bednorz and K. A. Müller, "Possible high T_c superconductivity in the Ba-La-Cu-O system," Z. Phys. B **64**, 189 (1986).
- [2] J. Nagamatsu et al., "Superconductivity at 39 K in magnesium diboride," Nature **410**, 63 (2001).
- [3] J. M. An and W. E. Pickett, "Superconductivity of MgB₂: covalent bonds driven metallic," Phys. Rev. Lett. **86**, 4366 (2001).

- [4] M. Gao, Z.-Y. Lu, and T. Xiang, “Finding high-temperature superconductors by metallizing the σ -bonding electrons,” *Physics* **44**, 421 (2015).
- [5] V. J. Emery, “Theory of high- T_c superconductivity in oxides,” *Phys. Rev. Lett.* **58**, 2794 (1987).
- [6] F. C. Zhang and T. M. Rice, “Effective Hamiltonian for the superconducting Cu oxides,” *Phys. Rev. B* **37**, 3759 (1988).
- [7] P. W. Anderson, “The resonating valence bond state in La_2CuO_4 and superconductivity,” *Science* **235**, 1196 (1987).
- [8] P. A. Lee, N. Nagaosa, and X.-G. Wen, “Doping a Mott insulator: Physics of high-temperature superconductivity,” *Rev. Mod. Phys.* **78**, 17 (2006).
- [9] B. Keimer, S. A. Kivelson, M. R. Norman, S. Uchida, and J. Zaanen, “From quantum matter to high-temperature superconductivity in copper oxides,” *Nature* **518**, 179 (2015).
- [10] D. J. Scalapino, “A common thread: the pairing interaction for unconventional superconductors,” *Rev. Mod. Phys.* **84**, 1383 (2012).
- [11] E. Pavarini et al., “Band-structure trend in hole-doped cuprates and correlation with $T_{c\text{max}}$,” *Phys. Rev. Lett.* **87**, 047003 (2001).
- [12] E. Fradkin, S. A. Kivelson, and J. M. Tranquada, “Theory of intertwined orders in high temperature superconductors,” *Rev. Mod. Phys.* **87**, 457 (2015).
- [13] F. Verstraete and J. I. Cirac, “Renormalization algorithms for quantum-many body systems in two and higher dimensions,” arXiv:cond-mat/0407066.
- [14] G. Vidal, “Entanglement renormalization,” *Phys. Rev. Lett.* **99**, 220405 (2007).
- [15] C. Fan et al., “Disentangling Tensor Network States with Deep Neural Network,” arXiv:2603.14425 (2026).