

新型镍氧超导体的理论研究

姚道新^{1,2,3}

- 中山大学物理学院, 广州 510275
- 广东省磁电物性分析与器件重点实验室, 广州 510275
- 广东省磁电物性基础学科研究中心, 广州 510275

摘要 高压下双层镍氧超导体的发现引发国际上广泛的关注, 理论研究发挥很大的作用。目前, 理论计算表明 $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_7$ 中镍的 2 个 e_g 轨道对超导的产生起到关键作用, 同时氧的 p 轨道也出现在费米面上, 相应的多轨道模型已经提出。各种计算表明, 新型镍氧超导体可能具有 s^+ 波的特性, 对其进行掺杂或加压可以改变超导配对特性。基于强关联相互作用的模型, 已经能够较好地解释实验观测的现象。顶点氧空位的存在对于超导的发生会有明显的影响。三层镍氧超导体的发现进一步丰富了镍氧超导体的家族, 目前其电子能带结构、多轨道模型、超导配对对称性等都有理论探究。

关键词 镍基超导体; 理论模型; 超导配对; 关联效应

2023年5月, 中山大学团队与合作者报道双层镍氧化物 $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_7$ 在 14 GPa 压力下出现了 80 K (开尔文) 的高温超导电性^[1], 并得到相关实验的证实^[2-4], 这是继铜氧化物高温超导体之后第二类进入液氮温区的氧化物超导体, 引发广泛关注。如此高的转变温度预示着 $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_7$ 很可能是非常规超导体, 其超导机理可能源自电子关联效应, 但如何进一步理解这一微观机理, 压力在其中扮演什么作用, 以及其与铜氧超导体、铁基超导体系的联系, 则是理论工作者迫切关注的问题。本文将从其基本晶格结构入手, 理解其相应的电子特性。

1 $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_7$ 晶格结构与电子特性

$\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_7$ 属于 $R_{n+1}\text{Ni}_n\text{O}_{3n+1}$ 体系的一员, 为 Ruddle-Popper (RP) 型结构。而 $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_7$ 则对应于 $n=2$ 的情形, 故而又称作双层镍氧超导体, 其中每一层都为类似铜氧超导体的 NiO_2 平面, 而双层之间还存在顶点氧, 并形成沿 c 轴方向的 Ni-O-Ni 结构, 这使得每 1 个 Ni 原子都被包围在由 6 个 O 原子形成的八面体构型中。从晶体场的角度, 首先形成 Ni-3d 轨道的 e_g 、 t_{2g} 劈裂, 即 d 电子优先填充与 O 原子交叠较少的 d_{xz} 、 d_{yz} 、 d_{xy} 轨道, 进而形成满占据状

收稿日期: 2024-03-25; 修回日期: 2024-05-14

基金项目: 国家重点研发计划项目 (2022YFA1402802, 2018YFA0306001); 国家自然科学基金项目 (92165204); 广东特支计划领军人才项目 (201626003)

作者简介: 姚道新, 教授, 研究方向为关联电子体系、高温超导、量子磁性、量子蒙特卡罗、拓扑物质等, 电子信箱: yaodaox@mail.sysu.edu.cn

引用格式: 姚道新. 新型镍氧超导体的理论研究[J]. 科技导报, 2024, 42(20): 6-13; doi:10.3981/j.issn.1000-7857.2024.03.01184

态,而剩余电子则填充 $d_{x^2-y^2}$ 与 d_{z^2} 轨道,形成部分占据状态。这一基本认识也很好地反映在第一性原理计算中^[5],即其费米能级附近主要由 $d_{x^2-y^2}$ 与 d_{z^2} 轨道刻画,而3个 t_{2g} 轨道则远在费米能之下。第一性原理进一步揭示 d_{z^2} 轨道具有较窄的带宽,并形成成键与反键的双能级结构。 d_{z^2} 轨道的局域化特性与其主要耦合发生在沿 c 轴的2层之间有关;而 $d_{x^2-y^2}$ 轨道的带宽则非常接近于铜氧化物,即其能够相对自由地在整个 NiO_2 面内进行跃迁^[1-5]。层间 d_{z^2} 轨道实际上形成一种稳定的 σ 成键态,有利于高温超导的产生^[6]。有关理论分析得到ARPES实验的支持^[7]。进一步考察电子填充,根据 $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_7$ 化学组分可以粗略得知,电离氧原子需要额外的 $2 \times 7 = 14$ 个电子,其中La原子提供其未充满壳层的总共 $3 \times 3 = 9$ 个,剩余的5个电子则由Ni原子提供。考虑到Ni原子的外层为 $4s^2 3d^8$,在优先提供 $2 \times 2 = 4$ 个 $4s$ 电子情况下,平均一个Ni原子还需剥离0.5个 $3d$ 电子,使其最终形成 $3d^{7.5}$ 组分。在扣除满占据的6个 t_{2g} 电子情况下, d_{z^2} 和 $d_{x^2-y^2}$ 轨道将分别得到~1和~0.5个电子,即形成接近半满与1/4填充,如图1^[10]所示。这一占据特征进一步表明 $d_{x^2-y^2}$ 轨道与铜氧超导体的相似性,预示着类似的超导形成机理,但是如果进一步考察轨道耦合与电子关联,则情况有所不同。由于这一体系中 d_{z^2} 轨道能谱的显著抬升,使得其与 $d_{x^2-y^2}$ 轨道杂化增强,同时 $d_{x^2-y^2}$ 与 d_{z^2} 轨道间

的洪特耦合也变得不可忽视,这些都使得 $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_7$ 明显偏离单轨道图像而区别于铜氧超导体。从这个角度上看,这一镍基超导体又具有类似铁基超导体的多轨道图像,而多轨道的引入进一步带来轨道涨落、高自旋-低自旋态涨落等问题,这些涨落是如何与实验上观察到的自旋密度波、电荷密度波、超导配对,以及非费米液体相联系,目前仍是学术界争论的焦点。例如,Shen等^[8]考虑层间 d_{z^2} 轨道之间的有效反铁磁相互作用和层内 $d_{x^2-y^2}$ 轨道电子的巡游性。Lu和Qu等^[9-10]指出,由于强的洪特耦合的存在^[11-12],考虑到 d_{z^2} 轨道局域性很强,系统超导态应该主要是由2层巡游性较强的 $d_{x^2-y^2}$ 轨道之间的磁关联所导致。而Yang等^[13]则提出应当使用一个 $S=1$ 的Type-II t - J 模型来描述这一体系。

2 $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_7$ 双层两轨道模型与超导配对

研究晶格体系中的非常规超导电性,一个重要的手段就是利用第一性原理计算的电子能带,进行瓦尼尔轨道投影,建立一个低能紧束缚模型,在此基础上引入电子间的库仑相互作用、洪特相互作用等描述关联效应。对于 $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_7$ 体系,基于密度泛函方法的电子能带,可以建立一个包含Ni的 $d_{x^2-y^2}$ 与 d_{z^2} 轨道的“双层两轨道 Hubbard模型”(四轨道模型),如图2(a)^[5]。通过这一模型,可以发现相邻2层 d_{z^2} 轨道之间的跃迁系数能够达到 -0.64 eV,使得其打开一个 ~ 1.28 eV的成键-反键能隙,如图2(b)^[5]所示。同时在 ab 面内,Ni的 $d_{x^2-y^2}$ 轨道进行着类似于铜氧 $d_{x^2-y^2}$ 的跃迁过程。更重要的是, $d_{x^2-y^2}$ 与 d_{z^2} 轨道近邻格点发生跃迁,其强度约为 0.24 eV。这些特征共同导致三口袋 α, β, γ 结构。其中 α 口袋以 Γ 点为中心,而 β, γ 口袋以 M 点为中心。需要注意的是 β 口袋的位置和轮廓类似于铜氧超导体,但其组分是由 $d_{x^2-y^2}$ 与 d_{z^2} 轨道混合而成,而 γ 则由 d_{z^2} 口袋单独形成,其正是源自层间2个 d_{z^2} 轨道耦合形成的成键态。Cao等^[11]和Zhang等^[14-18]得到类似的电子能带和费米面。费米面的嵌套可以给出特定

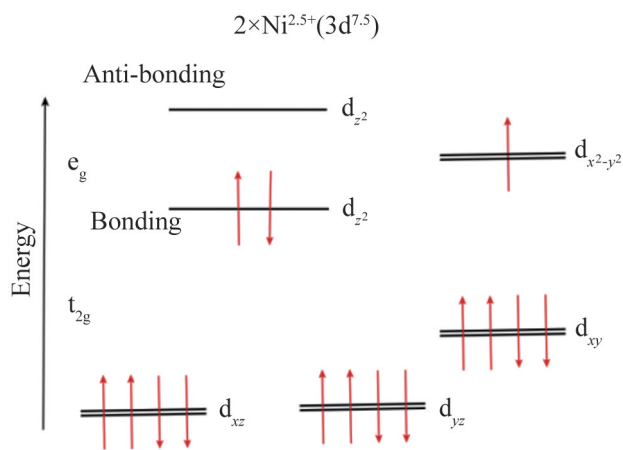


图1 $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_7$ 中Ni原子的d轨道电子占据示意

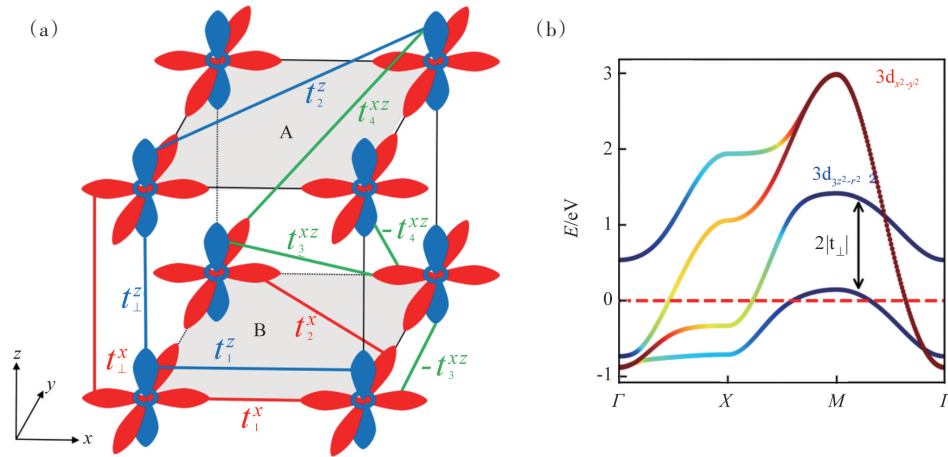


图2 $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_7$ 双层两轨道格子示意(a); 双层两轨道模型计算的 $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_7$ 能带(b)

波矢量的自旋密度波和特殊的电荷密度波。基于这一类似模型,许多研究组展开一系列关于超导配对对称性的理论计算,这些计算方法从不同层面考虑相互作用对电子能谱的重整化效应,得出的结论大都倾向于 $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_7$ 具有扩展 s 波配对对称性 (s^+ 波)^[10,16,19-26]。这样一种 s 波主要源自层间 d_z 电子的配对而被称作“扩展”。从动量空间角度来看,这种超导配对能隙主要在 γ 口袋打开能隙,这与 d_z 轨道具有较强的电子关联与窄带特性密切相关。从超交换作用来看,沿 c 轴方向的 $d_z - p_z - d_z$ 结构使得 Ni 的 2 个 d_z 轨道之间形成较强的反铁磁超交换作用,其数值可达 0.17~0.2 eV。对于 ab 面,团簇动力学平均场理论计算表明, $d_{x^2-y^2}$ 轨道间的反铁磁超交换作用仅为前者的一半左右或者更低,约为 0.1 eV^[20,27]。根据这些超交换作用的大小,通过重整化平均场理论(RMFT)可以发现:在不对任何配对结构进行约束的情况下, $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_7$ 在高压下的母体总是倾向于优先形成层间 d_z 轨道配对的扩展 s 波^[20],而只有在引入电子掺杂情况下,才有可能形成 d 或 d+is 波对称性,如图 3^[20]所示。从电子构型的角度, $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_7$ 的 $3d^{7.5}$ 可以看作是重空穴掺杂情况下的铜氧超导体,因而可以预料引入电子掺杂会使其物理上靠近半满莫特绝缘体图像,进而产生 d 波^[20,28-31]。实验上发现的线性电阻率所对应的非费米液体相也印证这一基本观点。Yang 等^[32]基于

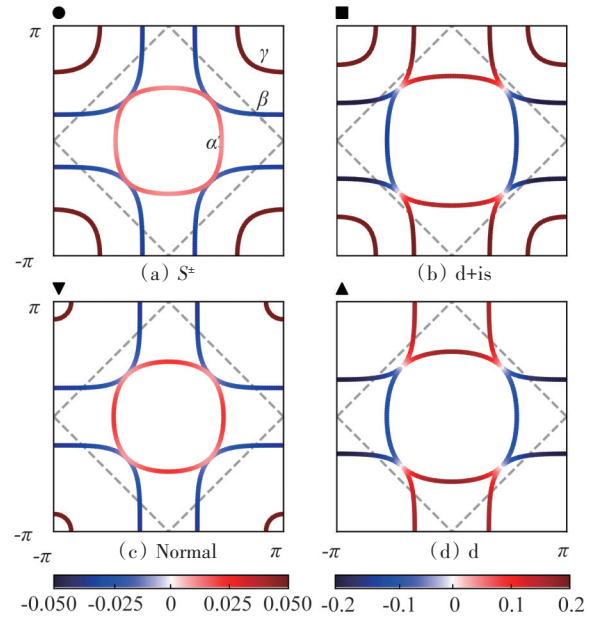


图3 不同掺杂下 $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_7$ 的费米面及其可能对应的超导配对对称性

two-component 理论进一步指出,在层间 d_z 轨道提供配对能隙基础上,通过与 $d_{x^2-y^2}$ 轨道的杂化可以形成整个 NiO_2 面的相位相干,进而形成宏观的超导态,这对于实验上最终观测到零电阻效应十分重要。从这个意义上看, $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_7$ 体系开辟一个崭新的高温超导相区间,这一相区间从“掺杂一个莫特绝缘体”图像中沿着重空穴掺杂与多轨道延伸,并同时具备显著的超导电性以及相应的物理简洁性,不同于无限层镍基超导体 RNiO_2 中一直存在争议

的R-5d电子的作用。同时, NiO₂层与CuO₂层相同的结构促使人们从更基本的层面理解其关联效应, 即其中的dp电子电荷转移特性, 而这一特性是理解铜氧超导体中的张-莱斯单态的核心^[33]。下节将借助一个包含氧轨道的11轨道模型进一步探讨La₃Ni₂O₇的电荷转移特性。

3 电荷转移特性

基于密度泛函理论的能带, 将这一体系投影到一个11轨道模型^[5], 这一模型除了原先的4个Ni-e_g轨道外, 还包含面内氧的p_x, p_y与层间顶点氧的p轨道, 同样很好地符合了费米面附近的能谱特征。通过这一模型, 看到d_{z²}与顶点氧的p_z轨道之间, 以及面内d_{x²-y²}与p_x或p_y之间均存在显著杂化。格点能(site energy)的计算表明, La₃Ni₂O₇的这些轨道具有较小的电荷转移能, 并介于铜氧超导体和无限层镍氧超导体RNiO₂之间。基于11轨道模型, 通过团簇动力学平均场理论, 同时考虑八格点团簇方案和近邻d_{z²}与d_{x²-y²}的自能, 可以发现这一体系会形成2类自旋单态, 其中一类对应于类铜氧超导的张-莱斯单态, 另一类对应于层间d_{z²}的反铁磁关联, 并具有显著的窄带特性^[5,20]。进一步的掺杂计算表明, 从一个半满的3d⁸出发, 引入的空穴会主要集中在面

内的p_x/p_y轨道, 然后是d_{x²-y²}轨道, 这正是电荷转移特性, 而集中在层间p_z以及d_{z²}轨道的比例则远小于前者^[27]。这些计算均表明氧轨道在这一体系是十分重要的。过往的实验表明, 即使是微弱的氧缺陷的引入, 都会明显抑制电子跃迁使体系形成弱绝缘相。对于La₃Ni₂O₇, Yang等^[32]和Liu等^[21]基于无规相的理论研究表明, 顶点氧缺陷会使其磁临界相互作用降低而更容易形成局域的反铁磁矩, 进而抑制超导配对。一个极端的情况是, 当顶点氧全部被移除后, 系统会变成La₃Ni₂O₆的结构, 导致超导相完全消失^[14]。

4 压力效应、自旋-电荷密度波和元素替代

压力作为诱发这一体系形成超导的先决条件, 一直备受理论研究的关注。目前理论和实验研究表明, 压力的作用使得晶格结构发生一定形变, 而晶格结构的形变进一步导致d_{z²}轨道抬升至费米面。目前认为, 正是这一轨道抬升为超导配对提供充足的电子, 因而保证超导的产生。具体地, La₃Ni₂O₇在压力下空间群由Amam转变为I4/mmm相, 同时c轴方向Ni-O-Ni键由168°转变为180°, 其相图如图4^[34]。压力的另一个关键影响还体现在

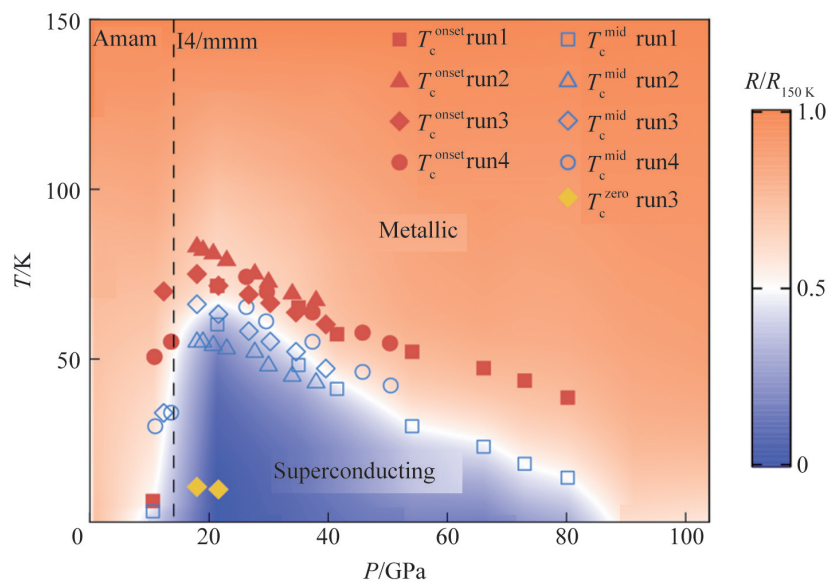


图4 La₃Ni₂O₇单晶在常压至104 GPa压力范围内的超导相图

密度波序上。实验上的电导率、比热测量普遍表明 $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_7$ 体系在常压下存在密度波序,且很大可能是自旋密度波序(SDW)与电荷密度波序(CDW)的共存相,其特征温度为 $110\sim 150\text{ K}$ ^[2,35-37]。并且随着外压的引入,这类密度波被逐渐抑制并最终形成超导相。这一现象似乎预示着这些密度波源于低压下结构弛豫,而非单纯的费米面嵌套过程,因为低压与高压的费米面轮廓仅有较小差异,并不足以显著改变某一嵌套波矢。最近的共振非弹性 X 光散射(RIXS)揭示一个特定波矢量的自旋序,其对应于一个双条纹型(double stripe)的反铁磁结构^[38]。值得注意的是,这种磁结构与 $\text{La}_{3/2}\text{Sr}_{1/2}\text{NiO}_4$ 体系中的类似^[39-40]。如何理解这样一个磁结构,仍有待于进一步的理论研究。关于压力在动力学上是如何诱使相应的晶格结构与电子特性转变,在下节中有进一步阐述。

除了元素 La, 可以将其替换为镧系其他的稀土元素,从而构成双层的 $\text{R}_3\text{Ni}_2\text{O}_7$ 。第一性原理计算表明,从 La 到 Lu, 晶格参数和原胞体积逐渐下降,导致新的材料结构的有效电子关联效应减弱,超导转变温度 T_c 预期下降, $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_7$ 可能已是最佳的镍基高温超导材料^[41]。

理论上也有考虑将 La 替换为铷系元素(铷、铯等),或者将 La-O 面替换为 Ba-F 和 Sr-F 面,它们具有与 $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_7$ 高压相类似的电子能带结构,从而有可能在较低的压力或者常压下实现超导电^[41-43]。

最近实验表明, $\text{La}_2\text{PrNi}_2\text{O}_7$ 也发生加压超导转变,同时其转变温度、晶格、能带结构也与 $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_7$ 高度相似。这进一步表明 RP 体系的超导电性是由其结构本征决定的。

5 三层结构的 $\text{La}_4\text{Ni}_3\text{O}_{10}$ 体系

2023 年下半年,南京大学、复旦大学、上海科技大学等单位研究团队报道三层镍氧超导体 $\text{La}_4\text{Ni}_3\text{O}_{10}$ 材料的加压超导转变^[44-47],其转变温度为 $20\sim 30\text{ K}$ 。由于其与双层同属于 RP 型结构,因而具有极其重要的意义。实验和计算都表明, $\text{La}_4\text{Ni}_3\text{O}_{10}$ 材料在压力下同样经历结构相变,从低压的单斜 P21/a 相转变为高压的四方 I4/mmm 相^[48]。镍的 d_{z^2} 轨道能带在费米面附近具有 3 个分支:成键态、非键态和反键态。在高压下,镍的成键态穿过费米面,并具有平带的特征,对超导的发生具有关键的作用^[47-49]。第一性原理计算表明,内层镍氧面和外层镍氧面具有不同的电子填充数^[49-50],甚至具有磁序^[51-53]。在此基础上,数个团队提出基于镍的三层两轨道模型(6 轨道模型)^[46-47,49,53-55],Chen 等^[49]进一步提出包含氧的 p 轨道的 16 轨道模型,其能带如图 5^[49]所示。目前理论和计算都倾向于认为, $\text{La}_4\text{Ni}_3\text{O}_{10}$ 同样具有扩展 s 波的超导配对特性^[53-57]。由于三层镍氧超导体有更复杂的电子能带和层间的超导配对阻挫效应,超导转变温度比双层镍氧超导体更低。

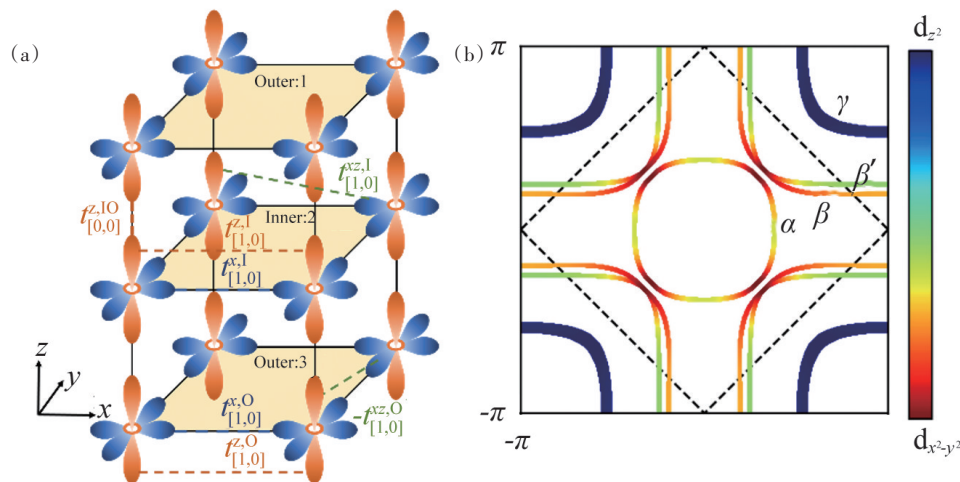


图 5 $\text{La}_4\text{Ni}_3\text{O}_{10}$ 的三层双轨道格子示意(a);基于三层双轨道模型计算的 $\text{La}_4\text{Ni}_3\text{O}_{10}$ 费米面(b)

6 结论

新型镍氧化物超导体系的发现无疑开辟了高温超导研究领域的一个全新平台,目前人们仍致力于进一步理解其超导机理与强关联特性,这将有助于寻求降低超导转变所需压力的方法,乃至实现常压超导。同时,这些理论探索也密切依赖于实验对其进一步的物性表征。在这些方面,中国研究人员无疑作出了杰出贡献并走在了最前沿。

致谢 本文撰写过程中得到陈翠群、罗志辉、谢钟逸的帮助。

参考文献(References)

- [1] Sun H L, Huo M W, Hu X W, et al. Signatures of superconductivity near 80 K in a nickelate under high pressure [J]. *Nature*, 2023, 621(7979): 493–498.
- [2] Zhang Y N, Su D J, Huang Y N, et al. High-temperature superconductivity with zero-resistance and strange metal behavior in $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_{7-\delta}$ [J]. *Nature Physics*, 2024, 20: 1269–1273.
- [3] Hou J, Yang P T, Liu Z Y, et al. Emergence of high-temperature superconducting phase in pressurized $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_7$ crystals[J]. *Chinese Physics Letters*, 2023, 40(11): 117302.
- [4] Wang G, Wang N N, Shen X L, et al. Pressure-induced superconductivity in polycrystalline $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_{7-\delta}$ [J]. *Physical Review X*, 2024, 14: 011040.
- [5] Luo Z H, Hu X W, Wang M, et al. Bilayer two-orbital model of $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_7$ under pressure[J]. *Physical Review Letters*, 2023, 131(12): 126001.
- [6] 高森, 卢仲毅, 向涛. 通过金属化 σ 电子寻找高温超导体[J]. *物理*, 2015, 44(7): 421–426.
- [7] Yang J, Sun H, Hu X, et al. Orbital-dependent electron correlation in double-layer nickelate $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_7$ [J]. *Nature Communications*, 2024, 15: 4373.
- [8] Shen Y, Qin M P, Zhang G M. Effective Bi-layer model Hamiltonian and density-matrix renormalization group study for the high- T_c superconductivity in $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_7$ under high pressure[J]. *Chinese Physics Letters*, 2023, 40(12): 127401.
- [9] Lu C, Pan Z M, Yang F, et al. Interlayer-coupling-driven high-temperature superconductivity in $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_7$ under pressure[J]. *Physical Review Letters*, 2024, 132(14): 146002.
- [10] Qu X Z, Qu D W, Chen J L, et al. Bilayer t - J - j_{\perp} model and magnetically mediated pairing in the pressurized nickelate $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_7$ [J]. *Physical Review Letters*, 2024, 132(3): 036502.
- [11] Cao Y Y, Yang Y F. Flat bands promoted by Hund's rule coupling in the candidate double-layer high-temperature superconductor $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_7$ under high pressure [J]. *Physical Review B*, 2024, 109(8): L081105.
- [12] Ouyang Z F, Wang J M, Wang J X, et al. Hund electronic correlation in $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_7$ under high pressure[J]. *Physical Review B*, 2024, 109(11): 115114.
- [13] Yang H, Oh H, Zhang Y H. Strong pairing from small Fermi surface beyond weak coupling: Application to $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_7$ [EB/OL]. (2023–11–28). <http://arxiv.org/abs/2309.15095>.
- [14] Zhang Y, Lin L F, Moreo A, et al. Electronic structure, magnetic correlations, and superconducting pairing in the reduced Ruddlesden-Popper bilayer $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_6$ under pressure: Different role of $d_{3z^2-r^2}$ orbital compared with $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_7$ [J]. *Physical Review B*, 2024, 109(4): 045151.
- [15] Lechermann F, Gondolf J, Bötzel S, et al. Electronic correlations and superconducting instability in $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_7$ under high pressure[J]. *Physical Review B*, 2023, 108(20): L201121.
- [16] Gu Y H, Le C C, Yang Z S, et al. Effective model and pairing tendency in bilayer Ni-based superconductor $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_7$ [EB/OL]. (2023–08–31). <http://arxiv.org/abs/2306.07275>.
- [17] Christiansson V, Petocchi F, Werner P. Correlated electronic structure of $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_7$ under pressure[J]. *Physical Review Letters*, 2023, 131(20): 206501.
- [18] Shilenko D A, Leonov I V. Correlated electronic structure, orbital-selective behavior, and magnetic correlations in double-layer $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_7$ under pressure[J]. *Physical Review B*, 2023, 108(12): 125105.
- [19] Liu Y Q, Liu Y B, Wang W S, et al. Electronic orders on the kagome lattice at the lower Van Hove filling[J]. *Physical Review B*, 2024, 109(7): 075127.
- [20] Luo Z H, Lv B, Wang M, et al. High- T_c superconductivity in $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_7$ based on the bilayer two-orbital t - J model [J]. *NPJ Quantum Materials*, 2024, 9: 61.
- [21] Liu Y B, Mei J W, Ye F, et al. S^* -wave pairing and the destructive role of apical-oxygen deficiencies in $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_7$

- under pressure[J]. *Physical Review Letters*, 2023, 131(23): 236002.
- [22] Qin Q, Yang Y F. High- T_c superconductivity by mobilizing local spin singlets and possible route to higher T_c in pressurized $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_7$ [J]. *Physical Review B*, 2023, 108(14): L140504.
- [23] Sakakibara H, Kitamine N, Ochi M, et al. Possible high t_c superconductivity in $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_7$ under high pressure through manifestation of a nearly half-filled bilayer Hubbard model[J]. *Physical Review Letters*, 2024, 132(10): 106002.
- [24] Tian Y H, Chen Y, Wang J M, et al. Correlation effects and concomitant two-orbital s^+ -wave superconductivity in $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_7$ under high pressure[J]. *Physical Review B*, 2024, 109(16): 165154.
- [25] Lu D C, Li M, Zeng Z Y, et al. Superconductivity from doping symmetric mass generation insulators: Application to $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_7$ under pressure[EB/OL]. (2023-09-14). <http://arxiv.org/abs/2308.11195>.
- [26] Huang J K, Wang Z D, Zhou T. Impurity and vortex states in the bilayer high-temperature superconductor $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_7$ [J]. *Physical Review B*, 2023, 108(17): 174501.
- [27] Wú W, Luo Z H, Yao D X, et al. Charge transfer and Zhang-rice singlet bands in the nickelate superconductor $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_7$ under pressure[J]. *Science China Physics Mechanics and Astronomy*, 2024, 67(11): 117402.
- [28] Jiang K, Wang Z Q, Zhang F C. High-temperature superconductivity in $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_7$ [J]. *Chinese Physics Letters*, 2024, 41(1): 017402.
- [29] Liu H Q, Xia C L, Zhou S J, et al. Role of crystal-field-splitting and long-range-hoppings on superconducting pairing symmetry of $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_7$ [EB/OL]. (2023-11-13). <http://arxiv.org/abs/2311.07316>
- [30] Fan Z, Zhang J F, Zhan B, et al. Superconductivity in nickelate and cuprate superconductors with strong bilayer coupling[J]. *Physical Review B*, 2024, 110(2): 024514.
- [31] Wang Y X, Jiang K, Wang Z Q, et al. Electronic structure and superconductivity in bilayer $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_7$ [EB/OL]. (2024-01-24). <http://arxiv.org/abs/2401.15097>.
- [32] Yang Y F, Zhang G M, Zhang F C. Interlayer valence bonds and two-component theory for high- T_c superconductivity of $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_7$ under pressure[J]. *Physical Review B*, 2023, 108(20): L201108.
- [33] Zhang F C, Rice T M. Effective Hamiltonian for the superconducting Cu oxides[J]. *Physical Review B*, 1988, 37(7): 3759-3761.
- [34] Li J Y, Ma P Y, Zhang H Y, et al. Pressure-driven right-triangle shape superconductivity in bilayer nickelate $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_7$ [EB/OL]. (2024-04-24). <http://arxiv.org/abs/2404.11369>.
- [35] Liu Z, Huo M W, Li J, et al. Electronic correlations and partial gap in the bilayer nickelate $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_7$ [J]. *Nature Communications*, 2024, 15(1): 7570.
- [36] Chen K W, Liu X Q, Jiao J C, et al. Evidence of spin density waves in $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_{7-\delta}$ [EB/OL]. (2024-05-13). <http://arxiv.org/abs/2311.15717>.
- [37] Liu Z J, Sun H L, Huo M W, et al. Evidence for charge and spin density waves in single crystals of $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_7$ and $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_6$ [J]. *Science China Physics, Mechanics & Astronomy*, 2022, 66(1): 217411.
- [38] Chen X Y, Choi J, Jiang Z C, et al. Electronic and magnetic excitations in $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_7$ [EB/OL]. (2024-01-23). <http://arxiv.org/abs/2401.12657>.
- [39] Freeman P G, Boothroyd A T, Prabhakaran D, et al. Spin dynamics of half-doped $\text{La}_{3/2}\text{Sr}_{1/2}\text{NiO}_4$ [J]. *Physical Review B*, 2005, 71(17):174412.
- [40] Yao D X, Carlson E. Spin-wave dispersion in half-doped $\text{La}_{3/2}\text{Sr}_{1/2}\text{NiO}_4$ [J]. *Physical Review B*, 2006, 75(1): 012414.
- [41] Zhang Y, Lin L F, Moreo A, et al. Trends in electronic structures and s^+ -wave pairing for the rare-earth series in bilayer nickelate superconductor $\text{R}_3\text{Ni}_2\text{O}_7$ [J]. *Physical Review B*, 2023, 108(16): 165141.
- [42] Geisler B, Hamlin J J, Stewart G R, et al. Structural transitions, octahedral rotations, and electronic properties of $\text{A}_3\text{Ni}_2\text{O}_7$ rare-earth nickelates under high pressure [J]. *npj Quantum Materials*, 2024, 9(1): 38.
- [43] Wu S Q, Yang Z H, Ma X, et al. $\text{Ac}_3\text{Ni}_2\text{O}_7$ and $\text{La}_2\text{AeNi}_2\text{O}_6\text{F}$ (Ae = Sr, Ba): Benchmark materials for bilayer nickelate superconductivity[EB/OL]. (2024-03-18). <http://arxiv.org/abs/2403.11713>.
- [44] Li Q, Zhang Y J, Xiang Z N, et al. Signature of superconductivity in pressurized $\text{La}_4\text{Ni}_3\text{O}_{10}$ [J]. *Chinese Physics Letters*, 2024, 41(1): 017401.
- [45] Zhu Y H, Zhang E K, Pan B Y, et al. Superconductivity in trilayer nickelate $\text{La}_4\text{Ni}_3\text{O}_{10}$ single crystals[J]. *Nature*, 2024, 631(8021): 531-536.
- [46] Zhang M X, Pei C Y, Du X, et al. Superconductivity in trilayer nickelate $\text{La}_4\text{Ni}_3\text{O}_{10}$ under pressure[EB/OL]. (2024-03-12). <https://arxiv.org/abs/2311.07423>.
- [47] Sakakibara H, Ochi M, Nagata H, et al. Theoretical analysis on the possibility of superconductivity in the trilay-

- er Ruddlesden–Popper nickelate $\text{La}_4\text{Ni}_3\text{O}_{10}$ under pressure and its experimental examination: Comparison with $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_7$ [J]. *Physical Review B*, 2024, 109(14): 144511.
- [48] Li J Y, Chen C Q, Huang C X, et al. Structural transition, electric transport, and electronic structures in the compressed trilayer nickelate $\text{La}_4\text{Ni}_3\text{O}_{10}$ [J]. *Science China Physics, Mechanics & Astronomy*, 2024, 67(11): 117403.
- [49] Chen C Q, Luo Z H, Wang M, et al. Trilayer multi-orbital models of $\text{La}_4\text{Ni}_3\text{O}_{10}$ [J]. *Physical Review B*, 2024, 110: 014503.
- [50] Wang J X, Ouyang Z F, He R Q, et al. Non-Fermi liquid and Hund correlation in $\text{La}_4\text{Ni}_3\text{O}_{10}$ under high pressure[J]. *Physical Review B*, 2024, 109(16): 165140.
- [51] Leonov I V. Electronic structure and magnetic correlations in the trilayer nickelate superconductor $\text{La}_4\text{Ni}_3\text{O}_{10}$ under pressure[J]. *Physical Review B*, 2024, 109(23): 235123.
- [52] LaBollita H, Kapeghian J, Norman M R, et al. Electronic structure and magnetic tendencies of trilayer $\text{La}_4\text{Ni}_3\text{O}_{10}$ under pressure: Structural transition, molecular orbitals, and layer differentiation[J]. *Physical Review B*, 2024, 109(19): 195151.
- [53] Yang Q G, Jiang K Y, Wang D, et al. Effective model and s_x -wave superconductivity in trilayer nickelate $\text{La}_4\text{Ni}_3\text{O}_{10}$ [J]. *Physical Review B*, 2024, 109(22): L220506.
- [54] Zhang Y, Lin L F, Moreo A, et al. Prediction of s^+ -wave superconductivity enhanced by electronic doping in trilayer nickelates $\text{La}_4\text{Ni}_3\text{O}_{10}$ under pressure[J]. *Physical Review Letters*, 2024, 133(13): 136001.
- [55] Tian P F, Ma H T, Ming X, et al. Effective model and electron correlations in trilayer nickelate superconductor $\text{La}_4\text{Ni}_3\text{O}_{10}$ [J]. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 2024, 36(35): 355602.
- [56] Zhang M, Sun H Y, Liu Y B, et al. The s^+ -wave superconductivity in the pressurized $\text{La}_4\text{Ni}_3\text{O}_{10}$ [EB/OL]. (2024-03-07). <http://arxiv.org/abs/2402.07902>.
- [57] Lu C, Pan Z M, Yang F, et al. Superconductivity in $\text{La}_4\text{Ni}_3\text{O}_{10}$ under pressure[EB/OL]. (2024-02-14). <http://arxiv.org/abs/2402.06450>.

Theoretical study of $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_7$ and $\text{La}_4\text{Ni}_3\text{O}_{10}$

YAO Daoxin^{1,2,3}

1. School of Physics, Sun Yat-Sen University, Guangzhou 510275, China

2. Guangdong Provincial Key Laboratory of Magnetoelectric Physics and Devices, Guangzhou 510275, China

3. Guangdong Research Center for Magnetoelectric Physics, Guangzhou 510275, China

Abstract The discovery of bilayer nickelate superconductor $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_7$ under high pressure has attracted worldwide attention, in which theoretical research plays a vital role. So far, theoretical calculations show that the two e_g Ni $3d_{x^2-y^2}$ and $3d_{z^2}$ orbitals in $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_7$ are crucial to the formation of superconductivity, while the O_2 p orbital also appears on the Fermi surface. Multi-orbital models have been proposed based on the above analysis. Various calculations show that $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_7$ has a s^+ wave pairing symmetry although other pairing symmetries can be obtained. Theoretical calculations shows that the superconducting mechanism is unconventional and closely related to antiferromagnetic fluctuation. The vacancy of apical oxygen has a significant impact on the occurrence of superconductivity. The discovery of trilayer nickelate superconductor $\text{La}_4\text{Ni}_3\text{O}_{10}$ under pressure has further enriched the family of nickelate superconductors. And its electronic band structure, multi-orbital model, superconducting pairing symmetry and so on have been investigated and explored theoretically.

Keywords nickelate superconductors; theoretical model; pairing symmetry; correlation effect ●



(责任编辑 赵庆圆)