

专题: 镍基超导研究进展

双层镍酸盐 $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_7$ 超导转变温度的压力依赖:
巡游电子与局域自旋图像*路洪艳^{1)†} 王强华^{2)‡}

1) (曲阜师范大学物理工程学院, 曲阜 273165)

2) (南京大学物理学院, 固体微结构物理全国重点实验室, 南京 210093)

(2025 年 6 月 30 日收到; 2025 年 7 月 23 日收到修改稿)

对于双层 Ruddlesden-Popper 相镍酸盐 $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_7$, 近期的实验研究表明, 在超导区, 随着压力增大, 其超导转变温度从 18 GPa 压力下的 83 K 单调下降, 表现出近直角三角形的超导转变温度-压力相图, 与铜氧化物超导体和铁基超导体中掺杂或压力下的穹顶形超导相图不同. 解释该反常相图对揭示 $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_7$ 的超导机制至关重要. 由于电声耦合机制无法解释镍基超导体的高超导转变温度, 因此, 本文从巡游电子和局域自旋图像出发, 探讨超导转变温度的压力依赖性. 通过将理论结果与实验结果进行对比, 为揭示其超导机制提供线索.

关键词: Ruddlesden-Popper 相双层镍酸盐, 超导相图, 泛函重整化群, 巡游电子图像, 局域自旋图像

PACS: 74.20.Mn, 74.20.Rp, 74.25.Dw, 71.27.+a

DOI: 10.7498/aps.74.20250696

CSTR: 32037.14.aps.74.20250696

1 引言

2019 年, 斯坦福大学 Hwang 团队^[1]成功制备了 $\text{Nd}_{0.8}\text{Sr}_{0.2}\text{NiO}_2$ 薄膜, 并观测到约 15 K 临界温度的超导转变, 这是首次在镍氧化物中观测到超导电性. 2023 年, Sun 等^[2]发现双层 Ruddlesden-Popper(RP)相 $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_7$ 在 14 GPa 以上压力下呈现出转变温度 T_c 接近 80 K 的超导电性, 这一发现立即吸引了广泛的实验^[3-19]和理论^[16,20-50]研究. RP 相镍酸盐 $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_7$ 具有双层 Ni-O 八面体结构, 其中, 镍原子的平均价态为 $\text{Ni}^{2.5+}$ ($3d^{7.5}$), 为介于 $3d^8$ 和 $3d^7$ 之间的混合价态. 费米能附近 $3d_{3z^2-r^2}$ 和 $3d_{x^2-y^2}$ 轨道分别呈现近似半填充和 1/4 填充. 考虑到其具有 3 个费米口袋和多轨道特

性, $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_7$ 更接近于铁基超导体的情形. 相比之下, 无限层镍酸盐中并不存在顶角氧, 形成 Ni-O 方平面结构. 因此, 其镍的电子构型为 Ni^{1+} ($3d^9$), 更接近铜酸盐中具有 Cu-O 方平面结构的 Cu^{2+} ($3d^9$)^[1,51]. 目前, 针对 $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_7$ 提出的理论模型表明, Ni 的 $3d_{3z^2-r^2}$ 轨道间强烈的垂直层间耦合对形成库珀对具有重要作用, 可能形成 $s_{\pm}$ 波配对对称性^[21-23,28-30,33,36,37,42,43]或 d 波配对对称性^[32,35,44,45,48]. 目前, $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_7$ 的超导机制仍尚无定论. 研究表明, 基于电声耦合机制得到的超导转变温度趋于 0 K^[52], 而实验测得的超导转变温度远远超过 McMillan 极限^[53]. 因此, 可以排除常规的电声耦合机制. 近期的理论研究主要基于巡游电子图像^[23,43,54-58]或局域自旋图像^[29,33,34,47,59]开展. Zhou 等^[60,61]和 Ko 等^[62]分别发现双层 RP 相镍酸盐 $(\text{La},\text{Pr})_3\text{Ni}_2\text{O}_7$ 薄膜

* 国家自然科学基金 (批准号: 12074213, 12374147, 12274205, 92365203, 11874205, 11574108)、国家重点研发计划 (批准号: 2022YFA1403201) 和山东省自然科学基金重大基础研究项目 (批准号: ZR2021ZD01) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: hylu@qfnu.edu.cn

‡ 通信作者. E-mail: qhwang@nju.edu.cn

和 $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_7$ 薄膜在常压下的超导起始转变温度突破 40 K, 确立了镍酸盐成为继铜基、铁基之后的第 3 类常压高温超导体。

最近, Li 等^[63] 将 $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_7$ 高压实验研究的压力范围扩展至 104 GPa. 研究发现, 在 0—14 GPa 压力范围, $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_7$ 呈现弱绝缘特性; 当压力超过 14 GPa 时出现结构相变, 在 18 GPa 时超导转变温度最高, 为 83 K, 随后随着压力的增大单调递减, 形成近直角三角形 T_c -压力相图 (图 1). 该相图与铜氧化物超导体和铁基超导体中掺杂或压力下的穹顶形超导相图明显不同^[64–66]. 解释该反常相图对揭示 $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_7$ 的超导机制至关重要. 我们分别从巡游电子图像和局域自旋图像出发, 探讨超导转变温度的压力依赖性. 利用泛函重整化群 (FRG) 方法深入研究了巡游电子图像下压力对电

子关联效应与超导电性的影响. 同时, 基于局域自旋图像, 对超导转变温度的压力依赖性进行了估算. 通过将两种图像的理论结果与实验结果进行对比, 为揭示其超导机制提供线索. 目前该研究成果已发表^[57], 本文对其加以介绍并拓展讨论.

2 压力依赖的电子结构与紧束缚模型构建

图 2(a) 展示了高压下 $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_7$ 的晶体结构. 基于密度泛函理论进行电子结构计算, 更多计算细节参见文献^[57]. 能带结构和态密度分析 (图 2(b), (c)) 显示费米能级 E_F 附近的能带结构基本不变, 而远离 E_F 的能带色散显著增强导致带宽增大, 同时态密度在 70 GPa 前后呈现先降后升的非单调变化 (图 2(c) 插图). 轨道投影分析证实 E_F 附近的电子态主要来源于 Ni 的 $3d_{3z^2-r^2}$ 和 $3d_{x^2-y^2}$ 轨道, 这与已有研究结论一致^[2,20,22,23,43]. 值得注意, 上述结果都给出了一个能带结构的重要特征, 即 M 点存在空穴口袋. 理论研究认为, 压力的增大使得原本位于费米能级以下的能带穿过了费米能级, 在 M 点形成了空穴口袋, 与此同时形成了金属化的 σ 键^[2], 这被认为是导致超导电性的重要原因. 目前, 常压下的角分辨光电子能谱的结果表明, $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_7$ 不存在 M 点的空穴口袋^[14]. 另一方面, 在最近关于常压下 Pr 掺杂 $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_7$ 薄膜的角分辨光电子能谱实验表明, M 点空穴口袋是否存在似乎并不影响超导电性^[67,68]. 因此, 需要进一步的理论和实验研究 M 点空穴口袋和超导电性的内在关联.

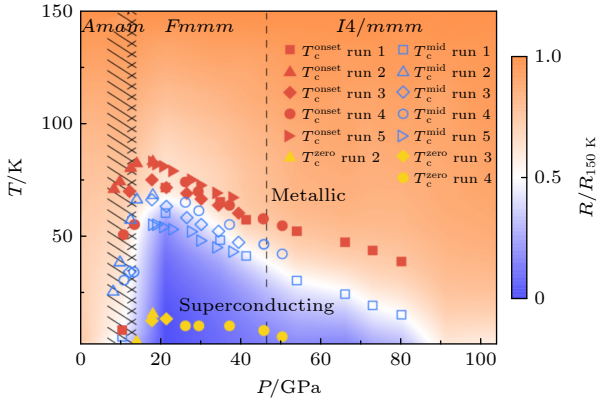


图 1 $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_7$ 从常压到 104 GPa 压力的超导相图^[63]

Fig. 1. The superconducting phase diagram of $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_7$ single crystals under ambient pressure to 104 GPa^[63].

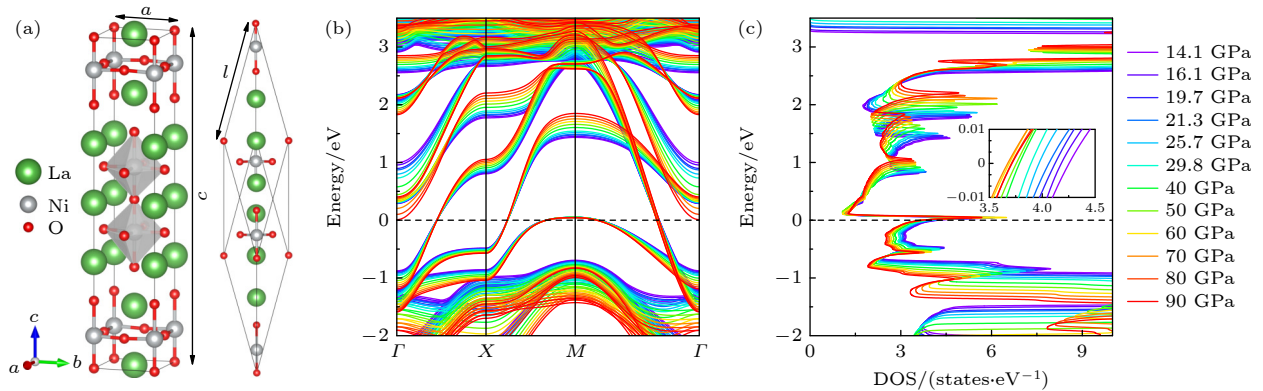


图 2 (a) 高压下 $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_7$ 的晶胞与原胞结构示意图; (b) 不同压力下原胞的能带结构及 (c) 态密度 (DOS) 分布, 其中插图展示了费米能级 E_F 附近的 DOS 特征^[57]

Fig. 2. (a) Conventional cell and primitive cell for $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_7$ under high pressure; (b) band structure and (c) DOS under different pressures for primitive cell, the insert shows the DOS near the E_F ^[57].

由于 Ni 的 $3d_{3z^2-r^2}$ 和 $3d_{x^2-y^2}$ 轨道在整个超导压力区间主导 E_F 附近的电子态, 因此, 基于最大化局域化 Wannier 函数方法^[69], 我们构建了基于 Ni 原子 $3d_{3z^2-r^2}$ 和 $3d_{x^2-y^2}$ 的双层两轨道模型:

$$H_0 = \sum_{i\delta, ab, \sigma} t_{\delta}^{ab} c_{ia\sigma}^{\dagger} c_{i+\delta b\sigma} + \sum_{ia\sigma} \varepsilon_a c_{ia\sigma}^{\dagger} c_{ia\sigma}, \quad (1)$$

其中, t_{δ}^{ab} 表示格点 i 的 a 轨道与格点 $i+\delta$ 的 b 轨道之间的跃迁矩阵元, σ 代表自旋, ε_a 为 a 轨道的在位能. 为简化表述, 下文以 x 和 z 分别代表 $3d_{x^2-y^2}$ 和 $3d_{3z^2-r^2}$ 轨道. 不同压力下的在位能及跃迁参数列于表 1, 其中 z 轨道间的垂直层间跃迁 $t_{(00\frac{1}{2})}^{zz}$ 强度最大, 这与 $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_7$ 已有研究结果一致^[20,22,23,57].

3 巡游电子图像

我们通过引入原子多轨道库仑相互作用来研究电子关联效应, 其相互作用哈密顿量表示为

$$H_I = \sum_{i,a<b,\sigma\sigma'} \left(U' n_{ia\sigma} n_{ib\sigma'} + J_H c_{ia\sigma}^{\dagger} c_{ib\sigma} c_{ib\sigma'}^{\dagger} c_{ia\sigma'} \right) + \sum_{ia} U n_{ia\uparrow} n_{ia\downarrow} + \sum_{i,a\neq b} J_P c_{ia\uparrow}^{\dagger} c_{ia\downarrow}^{\dagger} c_{ib\downarrow} c_{ib\uparrow}, \quad (2)$$

其中 U 表示轨道内 Hubbard 排斥势, U' 为轨道间库仑相互作用, J_H 是洪特耦合, J_P 为配对跃迁相互作用. 根据 Kanamori 关系^[70], 轨道间排斥势满足 $U = U' + 2J_H$, 且轨道间配对跃迁 $J_H = J_P$. 通过约束无规相近似^[71] 估算得到 U 的特征值范围

为 2.0—3.4 eV, 表明电子关联处于中等强度, 因此, 本研究选取轨道内 Hubbard 排斥势 $U = 2$ eV 和 $U = 3$ eV 进行计算.

奇异模泛函重整化群 (SM-FRG) 是一种先进的量子多体非微扰方法, 可以无偏地处理超导 (SC)、自旋密度波 (SDW) 和电荷密度波 (CDW) 3 个通道的竞争及相互作用, 在弱至中等耦合强度范围内具有较好的计算结果. 该方法的核心在于对 Wetterich 方程进行截断处理, 得到单粒子不可约四点顶角函数 Γ_A 随着红外截断能标 Λ 演化的流动方程 (忽略自能修正和频率依赖性). 通过将 Γ_A 重新投影至 SC, SDW 和 CDW 通道并进行因式分解, 可获得费米子双线性算符间的散射矩阵. 通过迭代求解流动方程, 我们得到依赖能标的散射矩阵最负奇异值 S_A . 当 S_A 在某个通道中首次发散时, 标志着相变的发生, 其相由散射通道和散射矩阵奇异模式决定, 相变温度 T_c 正比于发散能标 Λ_c . SM-FRG 的优势在于消耗较少计算资源的同时得到较为精确的系统的失稳性质, 例如 T_c 、超导配对对称性、密度波序配对形式等. 综上, SM-FRG 方法不仅能够平等处理所有可能的有序态, 还具有直接获得转变温度 $T_c \sim \Lambda_c$ 的优势. 因此, 我们采用奇异模泛函重整化群 (SM-FRG) 方法来确定系统的序. 更多技术细节可参考文献^[57]. 下文将首先展示 3 种典型情况下的 FRG 计算结果, 继而系统讨论 T_c 的压力依赖性.

表 1 不同压力下 $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_7$ 双层双轨道紧束缚模型的在位能 ε_a 与跃迁积分 t_{δ}^{ab} 参数表 (其中 x 和 z 分别表示 $3d_{x^2-y^2}$ / $3d_{3z^2-r^2}$ 轨道, 垂直层间距设定为 $1/2$). 压力单位为 GPa, ε_a 与 t_{δ}^{ab} 单位均为 eV^[57]

Table 1. On-site energies ε_a and hopping integrals t_{δ}^{ab} of the bilayer two-orbital tight-binding model for $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_7$ under different pressures. Here, x and z denote the $3d_{x^2-y^2}$ / $3d_{3z^2-r^2}$ orbitals, respectively. Note that the vertical interlayer distance is assigned as $1/2$. The unit of pressure is GPa, and the unit of ε_a and t_{δ}^{ab} are eV^[57].

Pressure	ε_x	ε_z	$t_{(100)}^{xx}$	$t_{(100)}^{zz}$	$t_{(100)}^{xz}$	$t_{(00\frac{1}{2})}^{xx}$	$t_{(00\frac{1}{2})}^{zz}$	$t_{(110)}^{xx}$	$t_{(110)}^{zz}$	$t_{(10\frac{1}{2})}^{xz}$
14.1	0.728	0.402	-0.470	-0.118	0.235	0.008	-0.623	0.071	-0.018	-0.036
16.1	0.737	0.407	-0.476	-0.119	0.238	0.009	-0.629	0.071	-0.018	-0.037
19.7	0.747	0.411	-0.483	-0.121	0.242	0.009	-0.637	0.071	-0.018	-0.037
21.3	0.749	0.412	-0.486	-0.123	0.243	0.008	-0.640	0.071	-0.018	-0.037
25.7	0.761	0.416	-0.495	-0.125	0.247	0.009	-0.647	0.072	-0.018	-0.037
29.8	0.769	0.417	-0.501	-0.126	0.249	0.010	-0.651	0.072	-0.018	-0.036
40.0	0.803	0.426	-0.521	-0.134	0.259	0.009	-0.674	0.071	-0.015	-0.040
50.0	0.833	0.437	-0.535	-0.139	0.269	0.010	-0.698	0.073	-0.016	-0.042
60.0	0.847	0.435	-0.552	-0.145	0.273	0.011	-0.703	0.075	-0.016	-0.040
70.0	0.871	0.447	-0.566	-0.149	0.283	0.010	-0.723	0.073	-0.017	-0.041
80.0	0.896	0.453	-0.580	-0.153	0.287	0.009	-0.738	0.072	-0.015	-0.045
90.0	0.918	0.461	-0.593	-0.155	0.293	0.008	-0.753	0.071	-0.016	-0.046

图 3(a) 展示了在 14.1, 50 和 90 GPa 压力下, $U = 3$ eV, $J_H = 0.4$ eV 时, SC, SDW 和 CDW 通道中 S^{-1} 随 Λ 的变化关系. 3 种压力下高能标区域的初始 FRG 流行为相似, 此时裸相互作用占主导地位, 表现为 SDW 通道较强而 CDW 通道因库仑屏蔽而衰减. 然而, 在低能标区域, 由于低能粒子-空穴激发的相空间受限, SDW 和 CDW 通道变为次要通道并趋于饱和 (图 3(a) 右插图展示 SDW 通道动量依赖的本征值, 在 (1,0) 和 (0,1) 方向呈现峰值). 在中能标区域, 随着 SDW 通道增强, SC 和 CDW 通道通过通道耦合开始被增强. SC 通道最终通过 Cooper 机制发散, 这是以自旋涨落为媒介的超导电性的典型表现. 表 1 所列所有压力情况均获得类似结果. 通过分析 SC 通道的本征散射模式, 我们获得费米口袋上的配对能隙函数 (图 3(a) 左插图), 显示为 $s_{\pm}$ 波对称性. 在 C_{4v} 对称性下, 存在连接两个具有相反配对符号费米口袋的特征动量 q_1 , 该动量恰好对应 SDW 通道的峰值动量 (图 3(a) 右插图), 再次证实了配对与自旋涨落的关联性.

从图 3(a) 可以观察到, $U = 3$ eV, $J_H = 0.4$ eV 时, 随着压力从 14.1 GPa 增至 50 GPa 和 90 GPa, 临界能标 Λ_c 显著降低, 这一现象与自旋涨落的减弱 (在 FRG 流方程求解的最终阶段) 直接相关.

这表明转变温度 $T_c \sim \Lambda_c$ 对压力具有高度敏感性. 为此, 针对表 1 所列压力序列进行了系统的 SM-FRG 计算, 获得转变温度 T_c^{cal} 的压力依赖性 (图 3(b) 中倒三角符号). 作为对比, 图中同时展示了实验测量的超导起始温度 T_c^{onset} (实心方块) 和中间温度 T_c^{mid} (实心圆) 数据 [63]. 为验证 SM-FRG 结果的稳健性, 通过改变 U 和 J_H 参数进行系统计算. 图 3(b) 中给出了 3 套 U 和 J_H 参数下超导 T_c 随压力的变化规律. 结果表明, 除最低 J_H 对应最低 T_c (体现洪特耦合的重要性) 外, 其他两种情况 T_c 随着压力的增大逐渐降低, 与实验中 T_c^{onset} 和 T_c^{mid} 的变化规律定性相似. 这里要说明的是, SM-FRG 中计算的超导通道发散能标 $\Lambda_c \sim T_c$ 对应的是材料完全进入超导态的临界温度, 即零电阻温度 T_c^{zero} . 通过和 Li 等 [63] 实验相图 (见图 1) 对比可以看到, 实验测得的零电阻温度 T_c^{zero} 与我们采用 $(U, J_H) = (3, 0.3)$ eV 计算的 T_c^{zero} 曲线高度符合. 由于材料的电子相互作用参数 U 和 J_H 无法严格确定, 因此计算得到的 T_c 是近似结果. 但是我们计算的 T_c 随压力的变化趋势与实验相符. 另外, 值得注意的是, 虽然 80 GPa 时正常态 DOS (黄色三角) 高于 70 GPa, 但理论 T_c 并未跟随 DOS 变化趋势, 而是与实验相符. 这表明必须如我们的 FRG 计算那样, 对能带结构和关联效应进行系统处理才能正确描

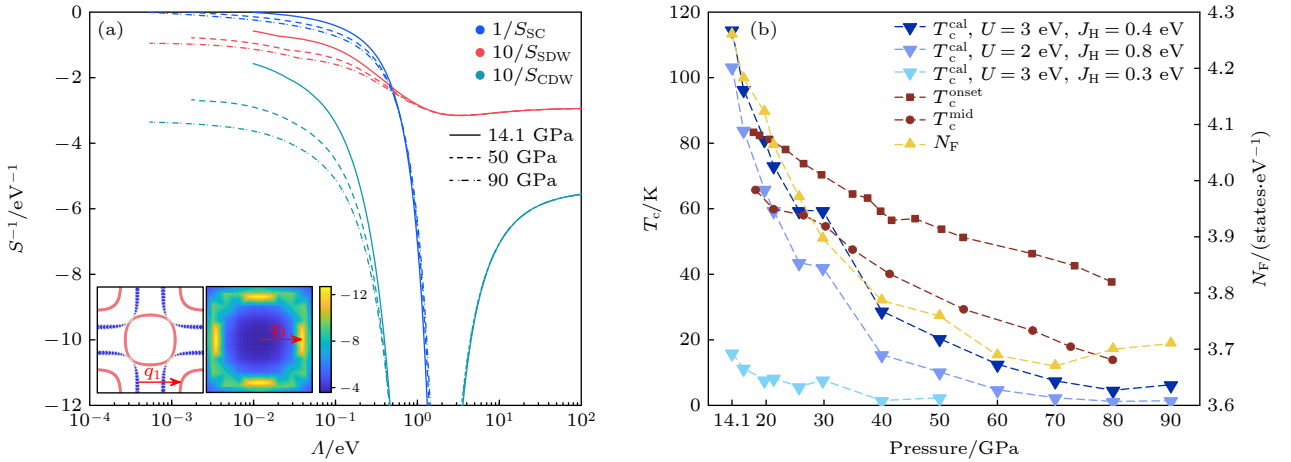


图 3 (a) $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_7$ 在 14.1, 50 和 90 GPa 压力下, $U = 3$ eV, $J_H = 0.4$ eV 时, 超导 (SC)、自旋密度波 (SDW) 和电荷密度波 (CDW) 通道中 S^{-1} 随 Λ 变化的 FRG 流方程计算结果, 左插图展示 50 GPa 压力下费米面上的能隙函数分布, 右插图显示同压力下 SDW 通道最负奇点 $S(\mathbf{q})$ 的空间分布特征 [57]; (b) $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_7$ 超导转变温度 T_c 随压力的相图 [57], T_c^{onset} 和 T_c^{mid} 引自实验数据 [63] 用于对比, 费米能态密度也展示出来用于对比

Fig. 3. (a) FRG flows of S^{-1} versus Λ in the SC, SDW, and CDW channels of $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_7$, respectively, at pressures 14.1, 50, and 90 GPa with $U = 3$ eV, $J_H = 0.4$ eV; the left subfigure present the gap function on the Fermi surfaces, the right subfigure presents the leading negative $S(\mathbf{q})$ in the SDW channel, both subfigures are the results at pressure 50 GPa [57]; (b) phase diagram of superconducting T_c versus pressure of $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_7$ [57], the T_c^{onset} and T_c^{mid} are extracted from the experimental work [63] for comparison, the DOS at the E_F (N_F) versus pressure is also shown for comparison.

述这一物理现象. 以上研究表明, 基于巡游电子图像可以很自然地得到与实验定性一致的超导转变温度-压力相图.

4 局域自旋图像

基于电子局域自旋图像 (例如多轨道 t - J 模型), 超导转变温度的粗略估计式为 $T_c \sim \exp\left[-\frac{1}{N_F J}\right]$, 其中 J 为有效自旋交换能, N_F 为 E_F 处的电子态密度. 考虑到 $J \propto t^2$ 且 $N_F \propto 1/t$ (t 为代表性跃迁积分), 而静水压条件下 t 必然增大, 这将导致 J 和 $N_F J$ 同时增大, 从而预测 T_c 应随压力升高而增大——这与实验结果^[63] 明显不符. 当然, 这只是粗略的估计, 有待更深入的理论研究.

5 总结与展望

通过结合密度泛函理论和奇异模泛函重整化群计算, 本文系统研究了 $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_7$ 超导区域不同压力下的电子结构、紧束缚模型、配对机制及配对对称性. 研究发现体系始终呈现 $s_{\pm}$ 波配对对称性, 该配对源于自旋涨落, 而涨落强度随压力增强逐渐减弱, 从而导致超导转变温度下降. 这一结论说明基于巡游电子图像, 可以很自然地得到与实验一致的结果; 而基于局域自旋图像, 简单估计发现超导转变温度的压力依赖性与实验结果相反. 因此, 实验和理论结果表明, 至少在超导区域, 超导转变温度随着压力的演化规律更倾向于巡游电子图像. 当然, 我们只是基于局域自旋图像做了简单估计, 不一定准确. 目前, 暂时还没有基于此图像研究压力依赖性的详细报道, 期待从该图像出发有进一步更细致的研究. 最近, 有研究表明, 通过考虑强关联巡游电子图像与电声耦合的叠加效应, 存在增强超导的可能性^[56]. 这为理解双层镍基超导体中的高温超导提供了新视角和潜在的理论机制, 值得进一步研究讨论此机制下的压力依赖性.

参考文献

- [1] Li D F, Lee K, Wang B Y, Osada M, Crossley S, Lee H R, Cui Y, Hikita Y, Hwang H Y 2019 *Nature* **572** 624
- [2] Sun H L, Huo M W, Hu X W, Li J Y, Liu Z J, Han Y F, Tang L Y, Mao Z Q, Yang P T, Wang B S, Cheng J G, Yao D X, Zhang G M, Wang M 2023 *Nature* **621** 493
- [3] Liu Z, Huo M W, Li J, Li Q, Liu Y C, Dai Y M, Zhou X X, Hao J H, Lu Y, Wang M, Wen H H 2024 *Nat. Commun.* **15** 7570
- [4] Hou J, Yang P T, Liu Z Y, Li J Y, Shan P F, Ma L, Wang G, Wang N N, Guo H Z, Sun J P, Uwatoko Y, Wang M, Zhang G M, Wang B S, Cheng J G 2023 *Chin. Phys. Lett.* **40** 117302
- [5] Zhang Y N, Su D J, Huang Y E, Shan Z Y, Sun H L, Huo M W, Ye K X, Zhang J W, Yang Z H, Xu Y K, Su Y, Li R, Smidman M, Wang M, Jiao L, Yuan H Q 2024 *Nat. Phys.* **20** 1269
- [6] Zhang M X, Pei C Y, Wang Q, Zhao Y, Li C H, Cao W Z, Zhu S H, Wu J F, Qi Y P 2024 *J. Mater. Sci. Technol.* **185** 147
- [7] Wang G, Wang N, Wang Y, Shi L, Shen X, Hou J, Ma H, Yang P, Liu Z, Zhang H, Dong X, Sun J, Wang B, Jiang K, Hu J, Uwatoko Y, Cheng J 2023 arXiv: 2311.08212[cond-mat.supr-con]
- [8] Wang L H, Li Y, Xie S Y, Liu F Y, Sun H L, Huang C X, Gao Y, Nakagawa T, Fu B Y, Dong B, Cao Z H, Yu R Z, Kawaguchi S I, Kadobayashi H, Wang M, Jin C Q, Mao H K, Liu H Z 2024 *J. Am. Chem. Soc.* **146** 7506
- [9] Zhou Y Z, Guo J, Cai S, Sun H L, Li C Y, Zhao J Y, Wang P Y, Han J Y, Chen X T, Chen Y J, Wu Q, Ding Y, Xiang T, Mao H K, Sun L L 2025 *Matter Radiat. Extremes* **10** 027801
- [10] Cui T, Choi S, Lin T, Liu C, Wang G, Wang N N, Chen S R, Hong H T, Rong D K, Wang Q Y, Jin Q, Wang J O, Gu L, Ge C, Wang C, Cheng J G, Zhang Q H, Si L, Jin K j, Guo E J 2024 *Commun. Mater.* **5** 32
- [11] Chen K, Liu X, Jiao J, Zou M, Jiang C, Li X, Luo Y, Wu Q, Zhang N, Guo Y, Shu L 2024 *Phys. Rev. Lett.* **132** 256503
- [12] Wang H Z, Chen L, Rutherford A, Zhou H D, Xie W W 2024 *Inorg. Chem.* **63** 5020
- [13] Dong Z H, Huo M W, Li J, Li J Y, Li P C, Sun H L, Gu L, Lu Y, Wang M, Wang Y Y, Chen Z 2024 *Nature* **630** 847
- [14] Yang J G, Sun H L, Hu X W, Xie Y Y, Miao T M, Luo H L, Chen H, Liang B, Zhu W P, Qu G X, Chen C Q, Huo M W, Huang Y B, Zhang S J, Zhang F F, Yang F, Wang Z M, Peng Q J, Mao H Q, Liu G D, Xu Z Y, Qian T, Yao D X, Wang M, Zhao L, Zhou X J 2024 *Nat. Commun.* **15** 4373
- [15] Wang G, Wang N N, Shen X L, Hou J, Ma L, Shi L F, Ren Z A, Gu Y D, Ma H M, Yang P T, Liu Z Y, Guo H Z, Sun J P, Zhang G M, Calder S, Yan J Q, Wang B S, Uwatoko Y, Cheng J G 2024 *Phys. Rev. X* **14** 011040
- [16] Wang M, Wen H H, Wu T, Yao D X, Xiang T 2024 *Chin. Phys. Lett.* **41** 077402
- [17] Lei Y H, Wang Y H, Song J H, Ge J X, Wu D R, Zhang Y L, Li C J 2024 *Chin. Phys. B* **33** 096801
- [18] Shen Y 2024 *Acta Phys. Sin.* **73** 197104 (in Chinese) [沈瑶 2024 物理学报 **73** 197104]
- [19] Huang X, Zhang H Y, Li J Y, Huo M W, Chen J F, Qiu Z Y, Ma P Y, Huang C X, Sun H L, Wang M 2024 *Chin. Phys. Lett.* **41** 127403
- [20] Luo Z H, Hu X W, Wang M, Wu W, Yao D X 2023 *Phys. Rev. Lett.* **131** 126001
- [21] Yang Q G, Wang D, Wang Q H 2023 *Phys. Rev. B* **108** L140505
- [22] Sakakibara H, Kitamine N, Ochi M, Kuroki K 2024 *Phys. Rev. Lett.* **132** 106002
- [23] Gu Y H, Le C C, Yang Z S, Wu X X, Hu J P 2025 *Phys. Rev. B* **111** 174506
- [24] Christiansson V, Petocchi F, Werner P 2023 *Phys. Rev. Lett.* **131** 206501

- [25] Wú W, Luo Z H, Yao D X, Wang M 2024 *Sci. China Phys. Mech. Astron.* **67** 117402
- [26] Cao Y, Yang Y F 2024 *Phys. Rev. B* **109** L081105
- [27] Chen X J, Jiang P H, Li J, Zhong Z C, Lu Y 2025 *Phys. Rev. B* **111** 014515
- [28] Liu Y B, Mei J W, Ye F, Chen W Q, Yang F 2023 *Phys. Rev. Lett.* **131** 236002
- [29] Lu C, Pan Z M, Yang F, Wu C J 2024 *Phys. Rev. Lett.* **132** 146002
- [30] Zhang Y, Lin L F, Moreo A, Maier T A, Dagotto E 2024 *Nat. Commun.* **15** 2470
- [31] Oh H, Zhang Y H 2023 *Phys. Rev. B* **108** 174511
- [32] Liao Z G, Chen L, Duan G J, Wang Y M, Liu C L, Yu R, Si Q M 2023 *Phys. Rev. B* **108** 214522
- [33] Qu X Z, Qu D W, Chen J, Wu C, Yang F, Li W, Su G 2024 *Phys. Rev. Lett.* **132** 036502
- [34] Yang Y F, Zhang G M, Zhang F C 2023 *Phys. Rev. B* **108** L201108
- [35] Jiang K, Wang Z, Zhang F C 2024 *Chin. Phys. Lett.* **41** 017402
- [36] Huang J, Wang Z D, Zhou T 2023 *Phys. Rev. B* **108** 174501
- [37] Tian Y H, Chen Y, Wang J M, He R Q, Lu Z Y 2024 *Phys. Rev. B* **109** 165154
- [38] Qin Q, Yang Y F 2023 *Phys. Rev. B* **108** L140504
- [39] Xia C L, Liu H Q, Zhou S J, Chen H H 2025 *Nat. Commun.* **16** 1054
- [40] Ouyang Z, Wang J M, Wang J X, He R Q, Huang L, Lu Z Y 2024 *Phys. Rev. B* **109** 115114
- [41] Qu X Z, Qu D W, Li W, Su G 2023 *arXiv*: 2311.12769[cond-mat.str-el]
- [42] Zheng Y Y, Wú W 2025 *Phys. Rev. B* **111** 035108
- [43] Wang Y, Jiang K, Wang Z, Zhang F C, Hu J 2024 *Phys. Rev. B* **110** 205122
- [44] Fan Z, Zhang J F, Zhan B, Lv D, Jiang X Y, Normand B, Xiang T 2024 *Phys. Rev. B* **110** 024514
- [45] Luo Z H, Lv B, Wang M, Wu W, Yao D X 2024 *npj Quantum Mater.* **9** 61
- [46] Shen Y, Qin M L, Zhang G M 2023 *Chin. Phys. Lett.* **40** 127401
- [47] Xue J R, Wang F 2024 *Chin. Phys. Lett.* **41** 057403
- [48] Jiang R S, Hou J N, Fan Z Y, Lang Z J, Ku W 2024 *Phys. Rev. Lett.* **132** 126503
- [49] Huo Z H, Luo Z H, Zhang P, Yang A Q, Liu Z T, Tao X R, Zhang Z H, Guo S M, Jiang Q W, Chen W X, Yao D X, Duan D F, Cui T 2025 *Sci. China Phys. Mech. Astron.* **68** 237411
- [50] Yang Y F 2025 *Chin. Phys. Lett.* **42** 017301
- [51] Zhang F C, Rice T M 1988 *Phys. Rev. B* **37** 3759
- [52] Ouyang Z, Gao M, Lu Z Y 2024 *npj Quantum Mater.* **9** 80
- [53] McMillan W L 1968 *Phys. Rev.* **167** 331
- [54] Zhan J, Le C, Wu X, Hu J 2025 *arXiv*: 2503.18877 [cond-mat.supr-con]
- [55] Wang Y, Chen Z, Zhang Y, Jiang K, Hu J 2025 *arXiv*: 2501.08536 [cond-mat.str-el]
- [56] Zhan J, Gu Y H, Wu X X, Hu J P 2025 *Phys. Rev. Lett.* **134** 136002
- [57] Jiang K Y, Cao Y H, Yang Q G, Lu H Y, Wang Q H 2025 *Phys. Rev. Lett.* **134** 076001
- [58] Liu Y Q, Wang D, Wang Q H 2025 *arXiv*: 2505.07341 [cond-mat.supr-con]
- [59] Zhang J X, Zhang H K, You Y Z, Weng Z Y 2024 *Phys. Rev. Lett.* **133** 126501
- [60] Zhou G D, Lv W, Wang H, Nie Z H, Chen Y Q, Li Y Y, Huang H L, Chen W Q, Sun Y J, Xue Q K, Chen Z Y 2025 *Nature* **640** 641
- [61] Chen Z Y, Huang H L, Xue Q K 2025 *Acta Phys. Sin.* **74** 097401 (in Chinese) [陈卓昱, 黄浩亮, 薛其坤 2025 物理学报 **74** 097401]
- [62] Ko E K, Yu Y, Liu Y, Bhatt L, Li J, Thamby V, Kuo C T, Wang B Y, Lee Y, Lee K, Lee J S, Goodge B H, Muller D A, Hwang H Y 2025 *Nature* **638** 935
- [63] Li J, Peng D, Ma P, Zhang H, Xing Z, Huang X, Huang C, Huo M, Hu D, Dong Z, Chen X, Xie T, Dong H, Sun H, Zeng Q, Mao H k, Wang M 2025 *Natl. Sci. Rev.* nwaf220
- [64] Stewart G R 2011 *Rev. Mod. Phys.* **83** 1589
- [65] Lee P A, Nagaosa N, Wen X G 2006 *Rev. Mod. Phys.* **78** 17
- [66] Sun J P, Matsuura K, Ye G Z, Mizukami Y, Shimozawa M, Matsubayashi K, Yamashita M, Watashige T, Kasahara S, Matsuda Y, Yan J Q, Sales B C, Uwatoko Y, Cheng J G, Shibauchi T 2016 *Nat. Commun.* **7** 12146
- [67] Wang B Y, Zhong Y, Abadi S, Liu Y, Yu Y, Zhang X, Wu Y M, Wang R, Li J, Tarn Y, Ko E K, Thamby V, Hashimoto M, Lu D, Lee Y S, Devereaux T P, Jia C, Hwang H Y, Shen Z X 2025 *arXiv*: 2504.16372[cond-mat.supr-con]
- [68] Li P, Zhou G, Lv W, Li Y, Yue C, Huang H, Xu L, Shen J, Miao Y, Song W, Nie Z, Chen Y, Wang H, Chen W, Huang Y, Chen Z H, Qian T, Lin J, He J, Sun Y J, Chen Z, Xue Q K 2025 *Natl. Sci. Rev.* nwaf205
- [69] Pizzi G, Vitale V, Arita R, Blügel S, Freimuth F, Géranton G, Gibertini M, Gresch D, Johnson C, Koretsune T, Ibañez-Azpiroz J, Lee H, Lihm J M, Marchand D, Marrazzo A, Mokrousov Y, Mustafa J I, Nohara Y, Nomura Y, Paulatto L, Poncé S, Ponweiser T, Qiao J, Thöle F, Tsirkin S S, Wierzbowska M, Marzari N, Vanderbilt D, Souza I, Mostofi A A, Yates J R 2020 *J. Phys.: Condens. Matter* **32** 165902
- [70] Castellani C, Natoli C R, Ranninger J 1978 *Phys. Rev. B* **18** 4945
- [71] Vaugier L, Jiang H, Biermann S 2012 *Phys. Rev. B* **86** 165105

SPECIAL TOPIC—Research progress on nickelate superconductors

Pressure dependence of superconducting transition temperature in bilayer nickelate $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_7$: Itinerant electrons and local spin picture^{*}

LU Hongyan^{1)†} WANG Qianghua^{2)‡}

1) (*School of Physics and Physical Engineering, Qufu Normal University, Qufu 273165, China*)

2) (*National Laboratory of Solid State Microstructures, School of Physics, Nanjing University, Nanjing 210093, China*)

(Received 30 June 2025; revised manuscript received 23 July 2025)

Abstract

Recent experimental studies on the bilayer Ruddlesden-Popper phase nickelate $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_7$ have shown that in the superconducting region, its superconducting transition temperature decreases monotonically from 83 K at 18 GPa as pressure further increases, exhibiting a nearly right-triangular temperature-pressure phase diagram that is different from the dome-shaped diagrams observed in cuprates and iron-based superconductors under either doping or pressure. It is important to understand this anomalous phase diagram in elucidating the superconducting mechanism of $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_7$. Since the electron-phonon coupling mechanism cannot account for the high superconducting transition temperatures in nickelate superconductors, in this work, the pressure dependence of the transition temperature is investigated from the perspective of the itinerant electrons picture and the local spin picture. By combining the density functional theory (DFT) and the unbiased singular-mode functional renormalization group (SM-FRG) method, it is found that the pairing symmetry is consistently an $s_{\pm}$ -wave, driven by spin fluctuations that become progressively weakened under pressure, thereby decreasing in the superconducting transition temperature, which is in qualitative agreement with the experimental observation. On the other hand, we estimate that the pressure dependence in the local spin picture contradicts with the experimental result. Therefore, the pressure dependence of superconducting transition temperature is more consistent with the itinerant electrons picture. Admittedly, we only made a rough estimation based on the local spin picture. It is expected that further and more detailed research will be conducted on the pressure dependence of superconducting transition temperature from the local spin picture, providing deeper insights into the underlying superconducting mechanism of $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_7$.

Keywords: Ruddlesden-Popper phase nickelate, superconducting phase diagram, functional renormalization group, itinerant electrons picture, local spin picture

PACS: 74.20.Mn, 74.20.Rp, 74.25.Dw, 71.27.+a

DOI: [10.7498/aps.74.20250696](https://doi.org/10.7498/aps.74.20250696)

CSTR: [32037.14.aps.74.20250696](https://cstr.cn/32037.14.aps.74.20250696)

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 12074213, 12374147, 12274205, 92365203, 11874205, 11574108), the National Key Research and Development Program of China (Grant No. 2022YFA1403201), and the National Natural Science Foundation of Shandong Province, China (Grant No. ZR2021ZD01).

[†] Corresponding author. E-mail: hylu@qfnu.edu.cn

[‡] Corresponding author. E-mail: qhwang@nju.edu.cn

双层镍酸盐 $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_7$ 超导转变温度的压力依赖：巡游电子与局域自旋图像

路洪艳 王强华

Pressure dependence of superconducting transition temperature in bilayer nickelate $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_7$: Itinerant electrons and local spin picture

LU Hongyan WANG Qianghua

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 74, 177401 (2025) DOI: 10.7498/aps.74.20250696
CSTR: 32037.14.aps.74.20250696

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.74.20250696>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

常压下双层结构镍氧化物薄膜高温超导电性的发现与研究展望

Ambient-pressure Ruddlesden-Popper bilayer nickelate superconductors: From discovery to prospects

物理学报. 2025, 74(9): 097401 <https://doi.org/10.7498/aps.74.20250331>

Ge掺杂增强Ruddlesden-Popper结构准二维 $\text{Sr}_3\text{Sn}_2\text{O}_7$ 陶瓷杂化非本征铁电性的物理机制

Physical mechanism of Ge doping enhanced Ruddlesden-Popper structure quasi-2D $\text{Sr}_3\text{Sn}_2\text{O}_7$ ceramic hybrid improper ferroelectricity

物理学报. 2024, 73(14): 147702 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20240583>

$n = 2$ Ruddlesden-Popper $\text{Sr}_3\text{B}_2\text{Se}_7$ ($B = \text{Zr}, \text{Hf}$) 非常规铁电性的第一性原理研究

First-principle investigation of hybrid improper ferroelectricity of $n = 2$ Ruddlesden-Popper $\text{Sr}_3\text{B}_2\text{Se}_7$ ($B = \text{Zr}, \text{Hf}$)

物理学报. 2021, 70(11): 116302 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20202142>

亚稳相钙钛矿稀土镍酸盐薄膜材料的可控生长与电子相变性质

Controllable growth and electronic phase transitions for metastable perovskite rare-earth nickelate films

物理学报. 2024, 73(19): 197102 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20240584>

无限层镍基超导薄膜界面结构的电子显微学研究

Electron microscopy study of interface structure in infinite-layer nickelate-based superconducting thin films

物理学报. 2025, 74(12): 128701 <https://doi.org/10.7498/aps.74.20250171>

镍基超导体中电荷序的实验研究进展

Experimental research progress of charge order of nickelate based superconductors

物理学报. 2024, 73(19): 197104 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20240898>