

专题: 镍基超导研究进展

## 镍基 327 超导体的弱耦合理论\*

苗舰舰<sup>1)</sup> 陈伟强<sup>1)2)†</sup>

1) (粤港澳大湾区 (广东) 量子科学中心, 深圳 518045)

2) (南方科技大学物理系, 深圳 518055)

(2025 年 10 月 9 日收到; 2026 年 1 月 29 日收到修改稿)

镍基 327 超导体作为继铜基和铁基超导体之后的新型高温超导体, 在高压下其超导临界温度进入液氮温区, 引发了广泛的研究兴趣. 本文从弱耦合理论的角度, 系统综述了近年来关于镍基 327 超导体的超导配对机制和配对对称性的理论研究进展. 重点介绍了随机相位近似、涨落交换近似和泛函重整化群等方法在分析该体系电子结构、自旋涨落和有效配对相互作用中的应用. 研究表明, 在双层两轨道模型中, 费米面的嵌套结构特别是由  $d_{3z^2-r^2}$  轨道构成的  $\gamma$  口袋在促进自旋涨落和超导配对中起到关键作用. 多数弱耦合理论预测主导的超导配对对称性为  $s_{\pm}$  波, 其能隙函数在  $\gamma$  和  $\alpha$  口袋上符号相同, 在  $\beta$  口袋上符号相反. 此外, 研究还揭示了晶体场劈裂、层间耦合和压力对配对对称性的影响, 并与实验观测一致. 本文总结了弱耦合理论在揭示镍基 327 超导体超导机制方面的成果, 并指出未来需结合强耦合理论与更精确的实验数据进一步阐明其超导起源.

**关键词:** 镍基高温超导, 随机相位近似, 涨落交换近似, 泛函重整化群**DOI:** 10.7498/aps.75.20251361**CSTR:** 32037.14.aps.75.20251361

## 1 引言

高温超导体的电子配对机制是凝聚态物理中极具挑战性和争议性的研究课题之一, 高温超导理论大致可根据相互作用的强弱分为强关联理论和弱耦合理论两类. 强关联理论一般考虑强库仑相互作用的情况, 掺杂莫特绝缘体<sup>[1]</sup>即是代表性的强关联理论之一, 而 Hubbard 模型 (大  $U$  情况)、 $t$ - $J$  模型<sup>[2]</sup>等则是常见的强关联模型. 弱耦合理论则是以朗道费米液体为出发点, 通过分析费米面附近准粒子间的有效相互作用, 以及费米面的不稳定性, 来对超导机制进行研究. 交换反铁磁自旋涨落的理

论<sup>[3]</sup>是比较常见的弱耦合理论之一. 当然也有许多高温超导理论不能进行这种简单的二元分类, 如解释铜氧化物高温超导体中奇异金属<sup>[4]</sup>、欠掺杂区的赝能隙<sup>[5]</sup>等现象的唯一理论等. 随着 2019 年镍基 112 超导体<sup>[6]</sup>的发现, 以及 2023 年镍基 327 超导体<sup>[7]</sup>在高压下实现了接近 80 K 的超导转变温度, 高温超导研究领域继铜基和铁基之后迎来第三波热潮. 本文主要总结了近年来镍基 327 超导体相关的部分弱耦合理论的进展, 包含基于随机相近似、涨落交换近似、泛函重整化群等理论方法对超导配对机制和超导配对对称性等问题的相关研究. 为了方便读者, 正文中也对相应的理论方法进行了简单的介绍.

\* 国家重点基础研究发展计划 (批准号: 2024YFA1408101)、国家自然科学基金 (批准号: 12334002, 12404171)、广东省项目 (批准号: 2024QN11X176)、广东省量子科学战略专项 (批准号: SZZX2401001)、深圳市科技创新委员会 (批准号: ZDSYS20190902092905285) 和南方科技大学计算科学与工程中心资助的课题.

† 通信作者. E-mail: chenwq@sustech.edu.cn

## 2 多轨道 Hubbard 模型

La<sub>3</sub>Ni<sub>2</sub>O<sub>7</sub> 的理论起点是镍 (Ni) 的形式价态为 2.5+ (对应 3d<sup>7.5</sup> 电子组态), 这直接意味着其具有多轨道电子结构. 考虑晶体场劈裂和层间耦合的简化图像表明, Ni 的 t<sub>2g</sub> 轨道和成键的 3d<sub>z<sup>2</sup>-r<sup>2</sup></sub> 态是全占据的, 留下 3d<sub>x<sup>2</sup>-y<sup>2</sup></sub> 轨道处于四分之一填充<sup>[7]</sup>, 反键的 3d<sub>z<sup>2</sup>-r<sup>2</sup></sub> 轨道则是空的. 这与密度泛函理论 (DFT) 的计算结果定性一致. DFT 识别出费米能级附近的三个关键能带: 两个源自 Ni 3d<sub>x<sup>2</sup>-y<sup>2</sup></sub> 轨道 (α 和 β 能带), 一个源自成键的 Ni 3d<sub>z<sup>2</sup>-r<sup>2</sup></sub> 态 (γ 能带), 如图 1 所示<sup>[8-13]</sup>. 这个 γ 能带相对于费米能级的位置已成为当前争论的中心点. 在非超导的常压块体样品中, DFT 和角分辨光电子能谱 (ARPES) 一致发现 γ 能带完全位于费米能级以下, 只有 α 和 β 能带构成费米面<sup>[14-16]</sup>. 然而, 对于超导态的理论图像则更具争议性. 在压力下, 许多 DFT 计算预测结构变化会诱导产生 γ 能带衍生的空穴口袋, 这一特征最初被一些研究者认为是实现高-T<sub>c</sub> 所至关重要的<sup>[7,13,17-19]</sup>. 然而 γ 口袋在常压 327 薄膜中是否存在, 无论是在实验上<sup>[20-22]</sup>, 还是在理论上都还存在争议<sup>[23-27]</sup>.

尽管如此, 镍基 327 材料的电子输运主要源于镍的 3d<sub>x<sup>2</sup>-y<sup>2</sup></sub> 和 3d<sub>z<sup>2</sup>-r<sup>2</sup></sub> 轨道这一点已经得到了大多数研究者的认可. 在弱耦合理论中, 对镍基 327 超导体的微观描述一般采用一个双层方晶格上构建的两轨道 Hubbard 模型, 其包含两部分, 分别是无相互作用的紧束缚模型和多轨道 Hubbard

相互作用. 紧束缚模型部分的哈密顿量写作

$$H_0 = \sum_{ij, \mu\nu, \sigma} t_{ij}^{\mu\nu} c_{i\mu\sigma}^\dagger c_{j\nu\sigma}, \quad (1)$$

其中,  $i/j$  标记格点,  $\sigma$  标记自旋,  $\mu/\nu$  标记轨道 (d<sub>x<sup>2</sup>-y<sup>2</sup></sub> 或 d<sub>z<sup>2</sup>-r<sup>2</sup></sub>). 跃迁积分  $t_{ij}^{\mu\nu}$  可通过密度泛函理论计算获得<sup>[8]</sup>. 密度泛函计算的结果见图 1, 在高压下费米能级仅与四条能带中的三条相交, 从而产生三个费米口袋, 在这些口袋中, 标记为 α 的是电子口袋, 而 β 和 γ 口袋是空穴口袋. 值得注意的是, α 和 β 口袋彼此非常接近. 这两个口袋显示出两个轨道之间的显著杂化, 而 γ 口袋主要由 d<sub>z<sup>2</sup>-r<sup>2</sup></sub> 轨道构成. 重要的是, DFT 计算表明, γ 口袋仅在压力下出现, 这与超导电性在压力下存在相吻合. 这表明 γ 口袋可能在系统的超导中扮演关键角色.

而 Hubbard 相互作用项一般写为

$$H_I = U \sum_{i\mu} n_{i\mu\uparrow} n_{i\mu\downarrow} + V \sum_{i\sigma\sigma'} n_{i1\sigma} n_{i2\sigma'} + J_H \left[ \sum_{i\sigma\sigma'} c_{i1\sigma}^\dagger c_{i2\sigma'}^\dagger c_{i1\sigma'} c_{i2\sigma} + \sum_i c_{i1\uparrow}^\dagger c_{i1\downarrow}^\dagger c_{i2\downarrow} c_{i2\uparrow} + \text{H.c.} \right], \quad (2)$$

其中  $U(V)$  项表示轨道内 (轨道间) Hubbard 排斥作用,  $J_H$  项表示洪特耦合和电子对跃迁, 且一般有  $U = V + 2J_H$ . 当相互作用参数  $U$  不是很大的情况下, 该模型可以用弱耦合方法进行处理. 接下来将主要介绍基于随机相近似、涨落交换近似、泛函重整化群等理论方法对这一模型中超导配对机制及配对对称性的研究.

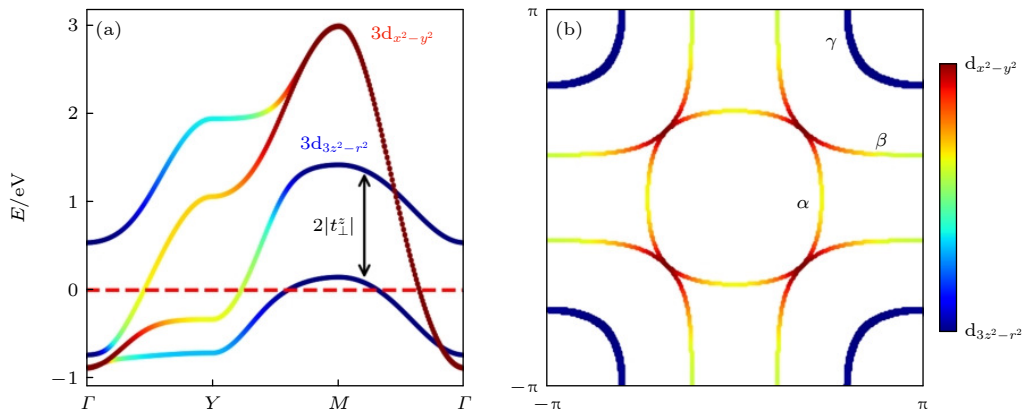


图 1 (a) 双层两轨道模型的能带结构<sup>[8]</sup>; (b) 双层两轨道模型的费米面<sup>[8]</sup>. 彩色条表明两个轨道 d<sub>x<sup>2</sup>-y<sup>2</sup></sub> 和 d<sub>z<sup>2</sup>-r<sup>2</sup></sub> 的相对权重  
Fig. 1. (a) The band structure and (b) the Fermi surface of the bilayer two-orbital model<sup>[8]</sup>. The colored bar indicates the orbital weight of the two orbitals d<sub>x<sup>2</sup>-y<sup>2</sup></sub> and d<sub>z<sup>2</sup>-r<sup>2</sup></sub>.

### 3 随机相近似

随机相位近似 (random phase approximation, RPA) 最早是 Bohm 和 Pines<sup>[28]</sup> 在处理具有长程库仑相互作用的简并电子气时发展出来的量子多体方法, 其揭示了电子间的有效相互作用是短程的屏蔽库仑相互作用. 在更加现代的量子多体理论中, 随机相位近似其实和大  $N$  极限 (large- $N$  limit) 等价, 其核心思想是将简并电子气中具有两个自旋自由度的电子推广为具有  $N$  个自由度的费米子, 相应的对称性也从  $SU(2)$  推广为  $SU(N)$ , 当  $N$  很大时, 可以按  $1/N$  的幂级数展开, 从而区分不同量级的贡献. 当  $N \rightarrow \infty$  时就可以给出随机相位近似的结果. 以计算简并电子气的有效相互作用为例, 利用费曼图技术, 可以用不同的图表示不同的贡献. 如图 2 所示<sup>[29]</sup>, 双波浪线代表的有效相互作用可以表示成一个无穷阶几何级数展开, 其中单波浪线代表未被屏蔽的长程库仑相互作用, 每个单波浪线贡献一个  $1/N$  的因子. 其他各种复杂贡献对应的费曼图全部打包放进用  $\chi$  标记的极化气泡中, 剩下的核心难题是极化气泡的计算. 极化气泡也能用费曼图进行展开, 见图 3<sup>[29]</sup>, 并且可以按照图中包含单波浪线的数目来区分不同量级的贡献, 其中带箭头的实线表示电子的格林函数. 若只考虑最低阶的贡献, 即两个电子的格林函数对应的线首尾相接形成的气泡, 同时忽略其他高阶的贡献, 在这个极限下, 通过对之前的无穷阶几何级数求和,

$$iV_{\text{eff}}(q) = \frac{V_q}{N} + \frac{V_q}{N} \chi + \frac{V_q}{N} \chi \chi + \frac{V_q}{N} \chi \chi \chi + \dots$$

图 2 电子间有效相互作用的费曼图展开, 单波浪线代表未被屏蔽的长程库仑相互作用, 双波浪线代表有效相互作用  
Fig. 2. The Feynmann diagram expansion of the effective interaction, the single wavy lines represent the unscreened long-range Coulomb interaction, and the double wavy line represents the effective interaction.

$$\chi = \text{bubble} + \text{bubble} + \text{bubble} + \text{bubble} + \dots = iN\chi(q)$$

图 3 极化气泡的费曼图展开, 带箭头的实线表示电子的格林函数  
Fig. 3. The Feynmann diagram expansion of the polarization bubble, and the solid lines with arrows represent the electron Green's function.

便可以得到和随机相近似下相同的有效相互作用, 在实空间, 该相互作用具有指数衰减的形式, 也即短程的屏蔽库仑相互作用.

随机相位近似还可以用于相互作用体系中磁化率和电极化率的研究, 它们分别描述了体系的自旋和电荷密度涨落. 无相互作用情况下, 在费曼图中可以用两个电子格林函数对应的线首尾相接形成的气泡来表示. 这些无相互作用的磁化率和极化率都可以严格计算, 而且它们全部都相等. 对于相互作用体系, 不同的磁化率和极化率一般难以得到严格的结果. 但是, 可以在微扰论的框架下利用费曼图技术对其进行计算, 在随机相位近似下, 可以仅保留首尾相接的气泡, 这将磁化率和极化率的计算简化为一个无穷阶几何级数的求和问题, 如图 4<sup>[29]</sup>. 通过将无穷级数求和问题化为 Dyson 方程, 就可以反解出随机相位近似下的磁化率和电极化率.

$$\text{bubble} = \text{bubble} + \text{bubble} + \text{bubble} + \dots$$

$$= \text{bubble} + \text{bubble} + \text{bubble}$$

图 4 磁化率和极化率在随机相位近似下的费曼图展开, 第二行是 Dyson 方程的费曼图表示  
Fig. 4. The Feynmann diagram expansion of the susceptibility in the RPA level, and the second line is the Feynmann diagram representation of the Dyson equation.

通过电极化率和磁化率, 可以研究体系在电荷密度和自旋密度涨落下的不稳定性. 随着相互作用的逐渐增大, 极化率/磁化率在某些特定的波矢会迅速增大, 趋向于发散, 这预示着体系倾向于形成具有特定波矢的电荷/自旋有序态, 即电荷密度波/自旋密度波序. 电荷和自旋密度涨落发散时所对应的相互作用强度, 被称为临界相互作用强度, 通常用  $U_c^{\text{CDW}}$  和  $U_c^{\text{SDW}}$  表示. 通过比较电极化率和磁化率趋于发散的快慢, 或者比较相应的  $U_c$  的大小, 可以判断体系更倾向于形成电荷密度波还是自旋密度波, 以及具体的波矢. 对于多轨道 Hubbard 模型且排斥相互作用情况 ( $U > 0$ ), 一般  $U_c^{\text{CDW}} > U_c^{\text{SDW}}$ , 也就是说通常更容易形成自旋密度波序. 当相互作用  $U$  大于临界相互作用  $U_c$  时, 微扰论失效, 随机相位近似下计算得到的结果也变得不可信. 所以随机相位近似的适用范围仅限于电极化率和磁化率都未完全发散时. 对磁化率贡献占主导的一般是费米面附近的低能散射过程, 所以磁化率的大小十分

依赖于费米面的结构, 自旋密度波中的特定波矢往往对应于具有嵌套结构费米面的嵌套波矢.

随机相位近似在超导中的早期应用是 Berk 和 Schrieffer<sup>[30]</sup> 关于铁磁自旋涨落对常规 s 波自旋单态超导的抑制效应的研究. 后续 Anderson 和 Brinkman<sup>[31]</sup> 以及 Nakajima<sup>[32]</sup> 在对氦-3 超流的研究中意识到, 自旋涨落不仅仅能够促进自旋三态 p 波态的稳定性, 而且其本身就是配对机制的关键. 众所周知, 金属与合金中的常规超导体可以用 Bardeen-Cooper-Schrieffer (BCS) 理论来解释, 其中电子配对的关键是通过交换声子产生的电子间有效吸引相互作用在费米面附近克服了电子间的屏蔽库仑排斥相互作用, 从而形成了 Cooper 对, 使得费米面失稳, 最终 Cooper 对相干凝聚形成超导态. 但随着重费米子超导体、有机超导体、铜基超导体等非常规超导体的陆续发现, 人们发现许多实验数据与基于电-声耦合机制的 BCS 理论不符, 于是 Hirsh 等通过研究认为电子间可以通过交换反铁磁涨落或自旋密度波涨落产生有效的吸引相互作用, 从而配对产生超导<sup>[33-35]</sup>.

其基本物理图像源于自旋密度波相变点附近体系具有的强烈自旋涨落. 此时, 费米面附近的电子可以通过交换自旋涨落产生有效的配对相互作用, 从而形成 Cooper 对. 我们可以通过微扰论定量计算有效的配对相互作用, 在随机相位近似下, 有效的配对相互作用的修正来自两类图, 即气泡图和阶梯图, 见图 5<sup>[36]</sup>. 对气泡图和阶梯图的求和类似于在屏蔽库仑相互作用的计算中的无穷几何级数求和, 对有效的配对相互作用的修正即是随机相位近似下的电极化率和磁化率. 在定量的计算中同

时计入了电荷密度和自旋涨落, 但一般磁化率趋于发散更快, 所以其中主要的贡献来自自旋涨落. 随着温度降低, Cooper 对会发生相干凝聚, 使得体系进入超导态. 利用有效的配对相互作用, 结合平均场近似, 可以得到超导能隙函数的自洽方程. 在超导临界温度  $T_c$  附近, 自洽方程可以进一步简化为线性方程, 从而使得超导能隙函数的求解转化为有效的配对相互作用矩阵的本征值问题, 其中最大的本征值对应的本征函数即是占主导的超导能隙函数, 据此可以判断超导的配对对称性.

在铜基和铁基高温超导材料的研究中都有过基于随机相近似的弱耦合理论的应用. 在实验上得到铜基超导配对对称性为 d-波的实验数据之前<sup>[37,38]</sup>, Monthoux 等<sup>[39]</sup> 就基于电子间交换反铁磁涨落的配对机制提前预言了其应具有  $d_{x^2-y^2}$ -波对称性. Scalapino 等<sup>[40]</sup> 通过对三维立方晶格上的单带 Hubbard 模型在随机相位近似下的计算发现, 体系在自旋密度波不稳定性附近倾向于形成非常规的 d-波配对. Kuroki 等<sup>[41]</sup> 构建了铁基超导的五带模型, 包含了所有的 d 轨道, 并利用随机相位近似研究超导电性, 发现不连通的费米面之间的嵌套结构引起的多重自旋涨落使得体系倾向于形成扩展的 s-波配对. Graser 等<sup>[42]</sup> 利用随机相位近似研究了铁基超导体五轨道模型的配对相互作用和配对不稳定性, 发现由于多片费米面之间的近乎嵌套, 铁基超导中占主导的两个配对对称性,  $s_{\pm}$ -波和  $d_{x^2-y^2}$ -波近乎简并.

在镍基 327 超导体的理论研究中, 随机相位近似方法得到了广泛的应用. 姚道新等<sup>[8]</sup> 利用密度泛函理论率先给出了高压下镍基 327 超导体的双层

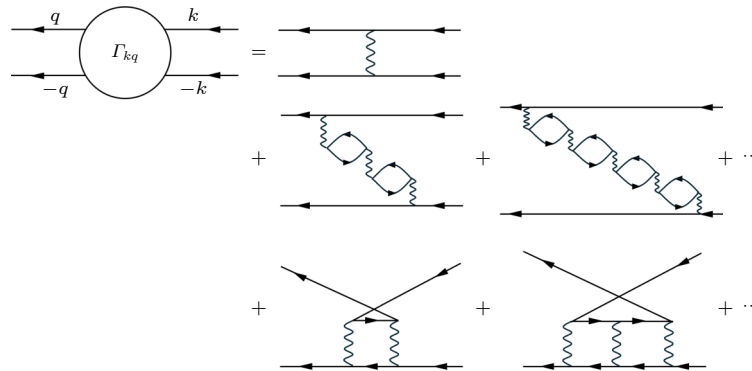


图 5 有效的配对相互作用  $\Gamma_{kq}$  在随机相位近似下的费曼图展开, 第二行是气泡图的贡献, 第三行是阶梯图的贡献

Fig. 5. The Feynmann diagram expansion of the effective pairing interaction  $\Gamma_{kq}$  in the RPA level, the second line contains contributions from bubbles, and the third line contains contributions from ladders.

两轨道模型及其紧束缚模型参数, 指出费米面包含两个电子口袋  $\alpha$  和  $\beta$ , 和一个空穴口袋  $\gamma$ , 见图 1, 并利用随机相位近似计算了自旋磁化率, 发现其主要贡献来自于  $d_{3z^2-r^2}$  轨道间的散射, 这反映了由  $d_{3z^2-r^2}$  构成的  $\gamma$  口袋的费米面具有嵌套结构, 后续的研究中也得到了类似的自旋磁化率<sup>[10]</sup>. 姚道新等<sup>[43]</sup> 还采用相同的理论框架进一步研究了常压下镍基 327 超导薄膜的配对机制. 杨帆和陈伟强等<sup>[18]</sup> 利用随机相位近似对高压下的镍基 327 超导体进行了更系统的研究. 通过计算双层两轨道模型在随机相位近似下的电极化率和磁化率, 发现自旋磁化率矩阵的最大本征值在布里渊区的分布中有三组不等价的峰, 分别用  $Q_1$ ,  $Q_2$  和  $Q_3$  表示, 见图 6. 其中  $Q_1$  峰值最大, 对应着  $\gamma$  口袋和  $\beta$  口袋之间的嵌套. 当相互作用强度在 1 eV 左右时, s-波和 d-波配对有比较明显的竞争, 但随着相互作用进一步增大, 最终 s-波居于主导地位. 通过分析能隙函数在费米面附近的分布, 可以看到 s-波能隙函数在  $\gamma$  和  $\alpha$  口袋上具有相同的符号, 与  $\beta$  口袋上具有相反的符号, 即  $s_{\pm}$ -波配对, 见图 7. 这一结果表明  $\gamma$  口袋对形成超导起了关键作用, 并且实空间配对由层间的  $d_{3z^2-r^2}$  轨道占主导, 考虑到  $\gamma$  口袋的构成主要来自于  $d_{3z^2-r^2}$  轨道, 进一步验证了  $\gamma$  口袋的重要性. 考虑到实际材料中易产生顶角氧缺陷, 他们还利用实空间随机相位近似研究了顶角氧缺陷对高压下镍基 327 超导体的影响, 发现其不但会降低平均的层间电子跃迁, 而且会在缺陷附近产生局域磁矩, 从而显著抑制超导. 他们还指出, 在富氧环境制备材料可以有效地提高超导临界温度  $T_c$ .

通过对随机相位近似下有效的配对相互作用的研究, 并求解能隙函数对应的本征值问题, Dagotto 等<sup>[44]</sup> 也发现镍基 327 超导体中占主导的配对对称性是  $s_{\pm}$ -波配对, 配对机制主要来自于以  $M = (\pi, \pi)$  为中心的口袋与以  $X = (\pi, 0)$  和  $Y = (0, \pi)$  为中心的费米面之间的嵌套结构, 这和杨帆和陈伟强等得到的  $\gamma$  口袋与  $\beta$  和  $\alpha$  口袋之间的嵌套引起的  $s_{\pm}$ -波配对机制是相符的. 后续的工作中, Dagotto 等<sup>[45]</sup> 在理论上系统研究了类镍基 327 超导体, 即将镧替换为其他稀土元素, 发现对于存在稳定的  $Fmmm$  相的类镍基 327 超导体, 占主导的配对对称性依旧是  $s_{\pm}$ -波配对, 其临界压力随着原子数增大而增大, 超导临界温度随着原子半径减小而减小. 考虑到镧系元素从镧到镨随着原子数增大, 原子半径逐渐减小, 得到的类镍基 327 超导体的晶格常数也逐渐减小, 从而增强了层内和层间跃迁, 相当于有效地减小  $U/W$ , 其中  $W$  是能带宽度, 从而表明适当地增强体系的电子关联能促进超导. 由于镍基 327 超导体中已经包含了第一个镧系元素, 故 Dagotto 等建议可通过在具有更大层内晶格常数的衬底上生长镍基 327 超导体来提高超导临界温度  $T_c$ .

陈航晖等<sup>[46]</sup> 研究了晶体场劈裂对高压下的镍基 327 超导体的影响, 发现其配对对称性对晶体场劈裂的大小十分敏感. 根据密度泛函理论和最大局域化 Wannier 函数得到的能带结构, 再利用随机相近似得到的超导配对对称性是  $d_{xy}$ -波配对, 但是稍微增大晶体场劈裂, 体系的配对对称性从  $d_{xy}$ -波转变到  $s_{\pm}$ -波配对. Bötzel 等<sup>[47]</sup> 研究了高压下的镍

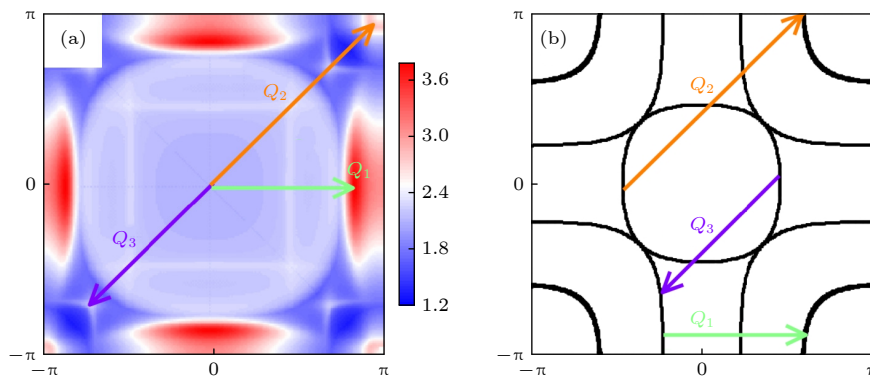


图 6 (a) 随机相位近似下自旋磁化率矩阵的最大本征值在布里渊区的分布, 分别用  $Q_1$ ,  $Q_2$  和  $Q_3$  标记三组不等价的峰值<sup>[18]</sup>; (b) 费米面上  $\alpha$ ,  $\beta$  和  $\gamma$  口袋之间的嵌套结构及其对应的用  $Q_1$ ,  $Q_2$  和  $Q_3$  标记的波矢<sup>[18]</sup>

Fig. 6. (a) The distribution of the largest eigenvalue  $\chi(q)$  of the RPA-renormalized spin susceptibility matrix in the Brillouin zone<sup>[18]</sup>. This distribution peaks at three unequivalent wavevectors, which are marked as  $Q_1$ ,  $Q_2$ , and  $Q_3$ , respectively; (b) the Fermi surface nesting of  $\alpha$ ,  $\beta$ , and  $\gamma$  pockets with the nesting wavevectors  $Q_1$ ,  $Q_2$ , and  $Q_3$  marked<sup>[18]</sup>.

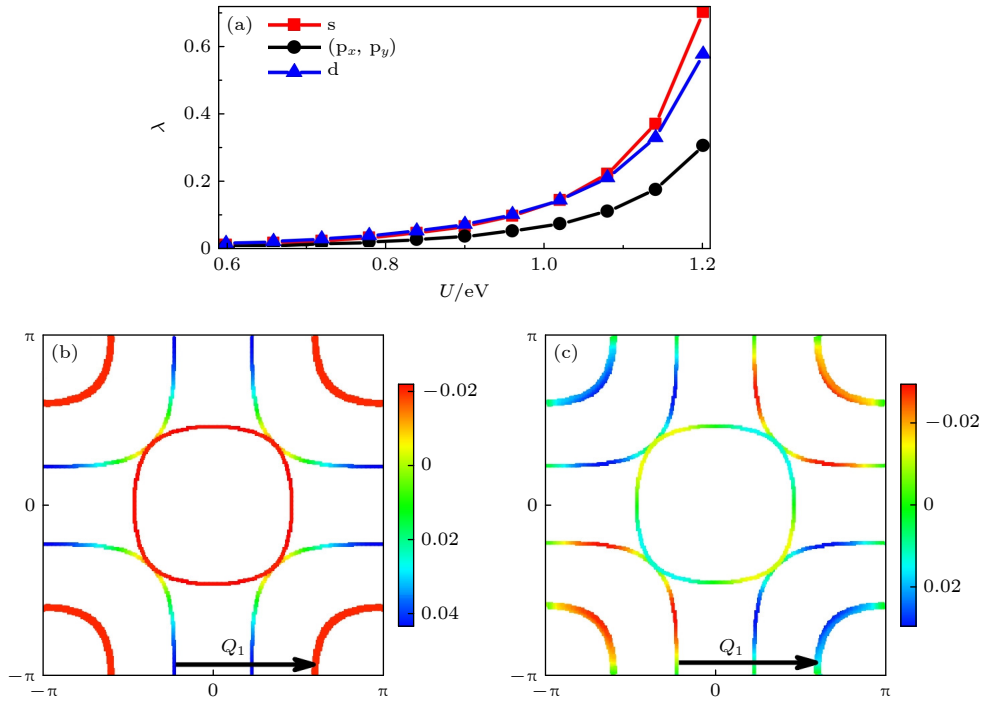


图 7 (a) 线性化能隙方程最大本征值  $\lambda$  随着相互作用强度  $U$  的变化<sup>[18]</sup>. 计算时固定  $J_H = U/6$ ; (b), (c)  $U = 1.16$  eV 时, s 波和 d-波配对能隙函数在费米面上的分布<sup>[18]</sup>

Fig. 7. (a) The largest eigenvalue  $\lambda$  of the linearized gap equation for various pairing symmetries as function of the interaction strength  $U$  with fixed  $J_H = U/6$ ; (b), (c) the distributions of the leading s and d-wave pairing gap functions on the Fermi surface for  $U = 1.16$  eV<sup>[18]</sup>.

基 327 超导体的磁激发, 发现可以通过双层结构的自旋响应来有效地判断体系的配对对称性. 对于层间驱动的  $s_{\pm}$ -波配对, 只有在奇通道中  $X$  点附近有一个很大的自旋共振峰; 而对于 d-波配对, 在奇偶通道中都有自旋共振.

常压下镍基 327 超导体薄膜的发现<sup>[48,49]</sup>, 使得更多的实验测量手段可以应用于镍基 327 超导体薄膜, 为进一步揭示超导机制和超导配对对称性打下了基础. 陈伟强和岳长明等<sup>[20]</sup> 结合密度泛函理论、团簇动力学平均场理论和受限随机相位近似得到了和实验上用角分辨光电子谱测量相一致的费米面, 并且和简单的密度泛函理论得到的费米面不同, 揭示了镍基 327 超导体中关联效应扮演了不可或缺的角色, 在此基础上利用随机相位近似计算发现占主导的配对不稳定性是  $s_{\pm}$ -波配对, 其源于费米面嵌套结构所导致的强自旋涨落, 并且费米面嵌套主要发生在由  $d_{3z^2-r^2}$  轨道构成的能带上<sup>[23]</sup>. 然而存在其他的 ARPES 实验却发现镍的  $3d_{z^2}$  成键能带低于费米能级, 使得常压下镍基 327 超导体薄膜的费米面没有  $\gamma$  口袋<sup>[21,22]</sup>, 杨帆和吴从军等<sup>[24]</sup> 基于 DFT 给出的无  $\gamma$  口袋的能带结构, 采用随机

相位近似计算得到由  $\alpha$  和  $\beta$  口袋嵌套导致的  $s_{\pm}$ -波配对, 其实空间对应的是层间  $d_{x^2-y^2}$  配对. 强耦合极限下, 通过对两轨道  $t$ - $J$  模型进行隶玻色子平均场计算发现, 由  $d_{z^2}$  轨道间的洪特耦合引起的层间超交换,  $d_{x^2-y^2}$  亦形成层间 s-波配对, 与弱耦合极限下的结论相一致.

## 4 涨落交换近似

涨落交换近似 (fluctuation-exchange approximation, FLEX) 最早是 Bickers 等<sup>[50,51]</sup> 在处理强关联电子体系时提出的量子多体方法. 涨落交换近似超越了简单的平均场理论, 如 Hartree-Fock 近似, 还可以处理带有很强频率和动量依赖的双粒子关联函数. 更为重要的是涨落交换近似在计算中满足微观守恒律和求和规则, 所以早期也被称为守恒近似 (conserving approximation), 其核心思路可以追溯到 Baym 和 Kadanoff 在处理输运问题时为了确保结果满足守恒律而发展的多粒子格林函数的近似求解方法<sup>[52,53]</sup>. 和随机相位近似中考虑电荷密度和自旋涨落类似<sup>[54]</sup>, 涨落交换近似中的自能

函数和有效配对相互作用的费曼图中也包含了气泡图和梯形图, 见图 8 和图 9<sup>[55]</sup>. 区别在于, 在随机相位近似中费曼图中带箭头的实线表示的是“裸”的单粒子格林函数, 可以直接对无穷阶几何级数求和, 而在涨落交换近似中, 费曼图中带箭头的实线表示的是“修饰”的单粒子格林函数, 对无穷阶级数的求解需要通过自洽方式进行. 用涨落交换近似求解格林函数和磁化率的自洽循环为: 首先计算无相互作用的单粒子格林函数  $G^{(0)}$ , 根据粒子数利用  $G^{(0)}$  确定化学势初值, 结合“裸”的相互作用  $V$  和  $G^{(0)}$  给出自能初值  $\Sigma^{(0)}$ , 然后根据 Dyson 方程得到“修饰”的单粒子格林函数  $G$ , 利用  $G$  得到磁化率  $\chi^{(0)}$ , 接着计算随机相位近似下“修饰”的磁化率

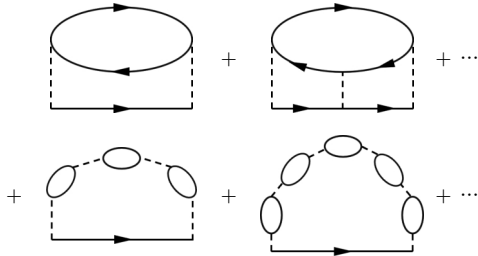


图 8 自能在涨落交换近似下的费曼图, 带箭头的实线表示“修饰”的单粒子格林函数, 虚线表示“裸”的相互作用  
Fig. 8. The Feynman diagram of the self-energy in the FLEX level, the solid lines with arrows represent the “dressed” single-particle Green’s function, and the dashed lines represent the “bare” interaction.

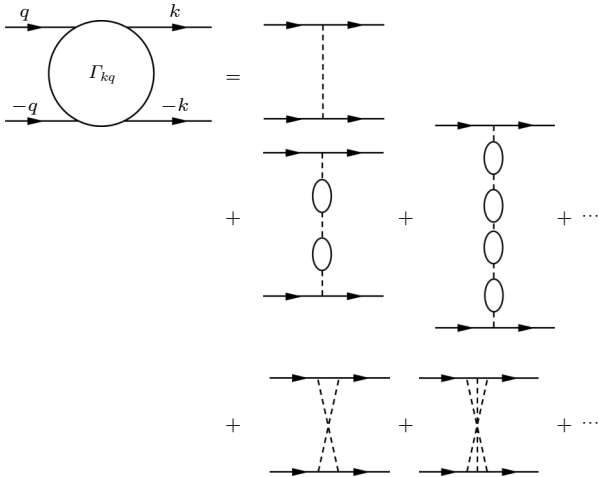


图 9 有效配对相互作用在涨落交换近似下的费曼图展开, 第二行是气泡图的贡献, 第三行是(扭曲的)阶梯图的贡献

Fig. 9. Feynman diagrams of the effective pairing interaction in the RPA level, the second line contains contributions of bubbles, and the third line contains contributions from (twist) ladders.

$\chi^{\text{RPA}}$ , 并利用  $\chi^{\text{RPA}}$  给出有效的相互作用  $V_{\text{eff}}$ , 结合  $V_{\text{eff}}$  和  $G$  算出新的自能  $\Sigma$ , 再次根据 Dyson 方程得到新的“修饰”的单粒子格林函数  $G$ , 至此一个循环已经完成. 通过循环迭代直至收敛, 即可得到涨落交换近似下的格林函数和磁化率, 自洽循环的流程见图 10<sup>[56]</sup>. 后续涨落交换近似的技术也在进一步发展, Esirgen 和 Bickers<sup>[57]</sup> 将其推广到多轨道格点模型, 使其适用于多轨道超导体的研究. 总的来说, 涨落交换近似的两个突出特点即是守恒和自洽, 相比于随机相位近似直截了当地计算, 涨落交换近似自洽求解的过程需要更多的算力.

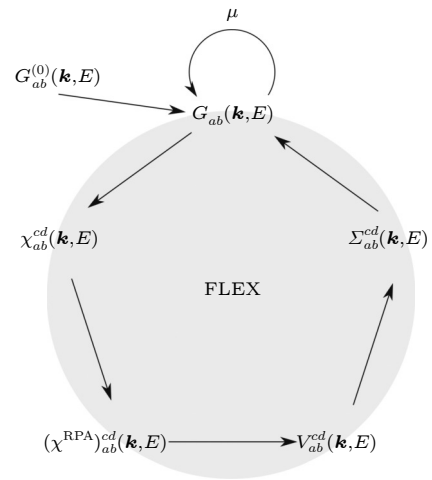


图 10 涨落交换近似下自洽计算格林函数和磁化率的流程图<sup>[56]</sup>

Fig. 10. Flowchart for the self-consistent calculation of the Green’s function and susceptibility in the FLEX loop<sup>[56]</sup>.

涨落交换近似最初提出的动机即是处理关联电子体系中的非常规超导体, 其在高温超导的研究中也有一定的影响力. Dahm 和 Tewordt<sup>[58]</sup> 利用涨落交换近似计算了二维 Hubbard 模型在半满附近的准粒子自能、能隙和自旋磁化率, 着重考虑了物理量的动量和频率依赖关系, 发现体系有自旋密度波的不稳定性, 并在其附近有自旋单态  $d_{x^2-y^2}$  波配对不稳定性. Kuroki 等<sup>[59]</sup> 利用涨落交换近似研究了铜氧化物高温超导中自旋涨落和费米面的联系, 通过对单带 Hubbard 模型的研究, 他们发现自旋涨落峰值的变化和费米面随着空穴掺杂的变化具有相关性. Ikeda 等<sup>[60]</sup> 研究了铁基超导体中自旋涨落和电子关联随掺杂的变化, 通过涨落交换近似对五带 Hubbard 模型的计算, 他们发现适当的空穴掺杂后, 低能自旋激发主要在布里渊区的 X 点附近, 并在低温下趋于临界. 另外, 过多的空穴

掺杂后, 低能自旋激发只有很弱的动量依赖, 而电子掺杂使得自旋激发谱出现能隙, 相应的核磁共振  $1/T_1$  弛豫率在空穴掺杂后会剧烈增强, 而在电子掺杂后则受到抑制. 汪子丹等<sup>[61]</sup> 利用涨落交换近似研究了铁基高温超导中的自旋涨落和非常规超导配对之间的联系. 当带间的反铁磁自旋涨落显著强于带内的反铁磁自旋涨落时, 体系倾向于形成自旋单态扩展的 s 波超导态, 而不是有节点的  $d_{xy}$  波, 反之亦然. 并且有效的带间耦合在带内配对中也发挥着重要作用. 于顺利和李建新<sup>[62]</sup> 系统研究了铁基超导体中不同特征的自旋涨落和超导能隙的对称性, 利用涨落交换近似对包含电子和空穴型的费米面, 以及只包含电子型的费米面的多轨道紧束缚模型进行了计算, 发现自旋涨落是铁基高温超导中超导电性的共同起源.

在镍基 327 超导体的理论研究中, 涨落交换近似是具有代表性的弱耦合理论之一. Sakakibara 等<sup>[63]</sup> 用涨落交换近似研究了高压下镍基 327 超导体的四轨道模型, 发现体系倾向于形成  $s_{\pm}$ -波配对, 类似于双层 Hubbard 模型<sup>[64]</sup>, 高温超导来自于镍的  $d_{3z^2-r^2}$  轨道, 而与  $d_{x^2-y^2}$  轨道的耦合反而削弱了超导电性. 考虑到涨落交换近似和随机相位近似的相似性, Heier 等<sup>[65]</sup> 利用涨落交换近似类型的随机相位近似计算具有动量频率分辨的自能, 并结合密度泛函理论来研究高压下镍基 327 超导体中自旋涨落诱导的配对, 该方法的特点是不需要通过紧束缚模型来拟合能带结构, 而是直接采用第一性原理得到的电子结构作为出发点, 通过对能隙函数的数值求解, 发现在自旋密度波不稳定性附近体系显现出  $s_{\pm}$ -波和  $d_{xy}$  波配对之间的相互竞争. 李建新等<sup>[66]</sup> 在常规的镍基 327 超导体双层两轨道模型的基础上, 还进一步研究了层间库仑相互作用的影响, 利用涨落交换近似计算发现层间相互作用很小时, 体系主要是  $d_{3z^2-r^2}$  轨道内的  $s_{\pm}$ -波配对, 随着层间相互作用增大,  $s_{\pm}$ -波配对受到抑制,  $d_{x^2-y^2}$ -波配对得到增强, 并且此时得到的  $d_{x^2-y^2}$ -波配对不是同轨道配对, 而是层间的  $d_{x^2-y^2}$  和  $d_{3z^2-r^2}$  轨道间的配对, 进一步的研究发现从  $s_{\pm}$ -波到  $d_{x^2-y^2}$ -波配对的相变主要受电荷密度涨落驱动. 针对新近发现的常压下镍基 327 超导体薄膜, Ushio 等<sup>[25]</sup> 通过在能带计算中考虑或不考虑  $+U$  修正, 分别得到了存在或不存在  $\gamma$ -口袋的电子结构, 但是通过涨落交换近似计算发现体系都是  $s_{\pm}$ -波配对.

## 5 泛函重整化群

和凝聚态物理相关的重整化群思想最早是 Kadanoff<sup>[67]</sup> 在处理伊辛模型时提出的“块自旋”重整化群, 而重整化群方法巨大威力的真正展现则来自 Wilson<sup>[68,69]</sup> 关于临界现象的里程碑工作, 并通过微扰重整化群得到了超越朗道二级相变理论且更接近于实验数据的临界指数<sup>[70]</sup>, 随后发展出数值重整化群方法并且结合计算机解决了凝聚态物理中的 Kondo 问题<sup>[71]</sup>, 并成为后续各种数值计算的重整化群方法的思想基石, 包括密度矩阵重整化群<sup>[72,73]</sup>、变分重整化群<sup>[74]</sup>、纠缠重整化群<sup>[75,76]</sup> 和张量重整化群<sup>[77-81]</sup> 等. 泛函重整化群 (functional renormalization group, FRG) 作为数值计算的重整化群方法之一, 其关键的方程来自对量子场论中的有效作用量的研究. 在 Polchinski<sup>[82]</sup> 利用严格的流方程证明四维  $\phi^4$  理论的可重整化性的基础上, Wetterich<sup>[83]</sup> 最早得到了有效相互作用严格的泛函流方程, 其特点是方便进行截断来处理量子场论中的红外发散问题, Morris<sup>[84]</sup> 在严格的 Polchinski 流方程和 Wetterich 泛函流方程的基础上提出了可靠的非微扰近似, 自此之后泛函重整化群方法在各个物理领域得到了广泛的应用和发展<sup>[85]</sup>.

在强关联电子体系的研究中<sup>[86]</sup>, 泛函重整化群被率先应用于和铜基高温超导相关的二维正方晶格上的 Hubbard 模型, 得到了金属态与反铁磁态或 BCS 超导态之间的相变<sup>[87-91]</sup>, 其中占主导的配对对称性是 d-波配对不稳定性, 并且还发现了 Pomeranchuk 不稳定性<sup>[90]</sup>、绝缘的自旋液体相<sup>[91]</sup>、非公度磁序和超导共存等新奇现象<sup>[92]</sup>. Wang 等<sup>[93]</sup> 用泛函重整化群研究了铁砷超导体的配对对称性和配对机制, 通过对五带模型进行掺杂和改变相互作用大小, 发现占主导的配对对称性是推广的 s-波配对, 即电子和空穴口袋上超导序参量具有相反的符号, 超导不稳定性主要由反铁磁关联导致的费米面间的 Josephson 散射所驱动. 通过比较铜基和铁基超导体的单圈泛函重整化群的结果, Wang 等<sup>[94]</sup> 发现两类材料中均是由反铁磁关联驱动的超导配对, 除此之外还有费米面畸变和轨道电流序与其竞争, 这些有序倾向和反铁磁关联是同一类强关联材料的特征<sup>[95]</sup>. Platt 等<sup>[96]</sup> 用泛函重整化群研究了铁砷超导体微观模型的相图, 建立了简化的两带

模型<sup>[97]</sup>和五带模型<sup>[93]</sup>之间的联系,其中最主要的配对不稳定性是推广的  $s$ -波配对,由电子和空口袋间的散射所驱动. Xiang 等<sup>[98]</sup>还用泛函重整化群研究了  $\text{SrTiO}_3$  衬底上的单层  $\text{FeSe}$  薄膜超导体的配对机制,发现  $\text{SrTiO}_3$  中的铁电声子对 Cooper 对的屏蔽效应能显著提高 Cooper 对的能量尺度,甚至能改变配对对称性. 由于铁硒超导体和铁砷超导体不同,费米面上只有电子口袋, Xiang 等<sup>[99]</sup>用泛函重整化群研究发现电子口袋上仍旧可以形成  $s$ -波超导配对,配对对称性是  $s^{++}$ -波,超导配对机制源于两类不同的自旋涨落间的竞争: 其一是共线自旋密度波附近的  $C$ -型自旋涨落,通过虚空口袋间的库伯子激发引起电子口袋间的吸引配对散射; 其二是棋盘式自旋密度波附近的  $G$ -型自旋涨落,该涨落引起排斥配对散射,但电子口袋间的杂化劈裂会减弱其效应.

相比于随机相位近似和涨落交换近似,泛函重整化群在镍基 327 超导体的理论研究中是最强大也是最有说服力的弱耦合理论. Yang 等<sup>[17]</sup>用泛函重整化群研究了高压下镍基 327 超导体的配对机制和配对对称性,通过对双层两轨道 Hubbard 模型的泛函重整化群计算,在弱耦合到中等耦合区间,主要的超导配对对称性是自旋涨落导致的  $s_{\pm}$ -波配对,即能隙函数在  $\gamma$  和  $\alpha$  口袋上具有相同的符号,与  $\beta$  口袋上具有相反的符号,见图 11,在实空间的配对主要是同一格点同一轨道上具有相反相位的配对. Jiang 等<sup>[100]</sup>研究了镍基 327 超导体的超导转变温度随压力增大而单调递减的物理机制. 通过密度泛函理论的计算发现,随着压力从 14 GPa 逐渐增大,费米口袋几乎不发生变化,但是带宽增大,层间  $d_{3z^2-r^2}$  轨道间的跃迁增强,进一步通过泛函重整化群的计算,发现随着压力增大,自旋涨落

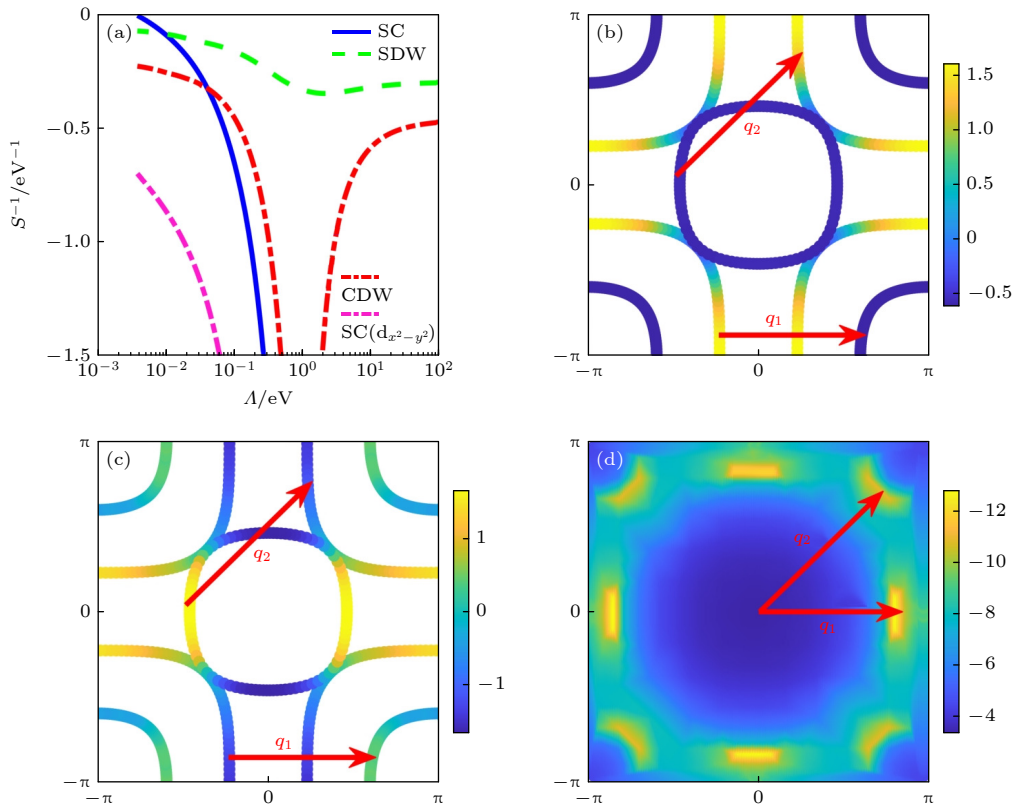


图 11 (a) 泛函重整化群中最主要的本征值  $S$  随着跑动能量尺度  $\Lambda$  的流<sup>[17]</sup>, 图中用不同颜色表示超导 (SC)、自旋密度波 (SDW) 和电荷密度波 (CDW) 通道, 计算参数为  $U = 3$  eV 和  $J_H = 0.3$  eV. (b), (c) 分别是占主导的  $s$ -波和次要的  $d_{x^2-y^2}$ -波在费米面上的能隙函数<sup>[17]</sup>. (d) 重整化的相互作用  $V_{\text{SDW}}(q)$  在接近超导通道发散前在布里渊区的分布, 两个箭头表示占主导的散射动量  $q_{1,2}$ <sup>[17]</sup>

Fig. 11. (a) FRG flow of the leading eigenvalues  $S$  versus the running energy scale  $\Lambda$ , different colors are used to represent superconducting (SC), spin density wave (SDW), and charge density wave (CDW) channels with parameters  $U = 3$  eV and  $J_H = 0.3$  eV<sup>[17]</sup>. (b), (c) Plot the gap functions for leading  $s$ -wave and subleading  $d_{x^2-y^2}$ -wave one the Fermi surface, respectively<sup>[17]</sup>. (d) The renormalized interaction  $V_{\text{SDW}}(q)$  when the SC diverges, with two arrows indicating the dominant scattering momenta  $q_{1,2}$ <sup>[17]</sup>.

导致的  $s_{\pm}$ -波配对减弱, 从而导致超导转变温度随压力增大而单调递减, 这与强耦合的局域磁矩图像是截然相反的, 有力地论证了弱耦合下 d 电子的巡游图像. 胡江平和吴贤新等<sup>[13]</sup>用泛函重整化群研究了高压下的镍基 327 超导体, 得到了相同的配对对称性, 即  $s_{\pm}$ -波配对, 并指出  $d_{3z^2-r^2}$  轨道层间和层内交换耦合对高温超导至关重要. 胡江平和吴贤新等<sup>[101]</sup>还进一步研究了高压下镍基 327 超导体中的电声耦合对超导的影响, 通过泛函重整化群的计算发现仅仅靠电声耦合不足以产生超导, 并且发现不同声子模式耦合不同的镍  $d_{x^2-y^2}$  和  $d_{3z^2-r^2}$  轨道, 即轨道选择的电声耦合, 其中面间的电声耦合协同电子关联促进  $d_{3z^2-r^2}$  轨道的层间配对, 而面内的电声耦合只是略微地影响超导, 该理论还预言高压下镍基 327 超导体中氧的同位素效应. Cao 等<sup>[27]</sup>系统研究了常压下镍基 327 超导体薄膜受衬底应变的影响, 通过不同的平面内压缩来模拟衬底效应, 利用 DFT 构建了两轨道紧束缚模型, 通过泛函重整化群的计算发现薄膜中仍旧是  $s_{\pm}$ -波配对.

## 6 结论与讨论

镍基 327 高温超导双层系统的多轨道性质使其适合用双轨道 Hubbard 模型来描述, 这与铁基超导体类似, 尽管它们的详细电子结构有所不同. 这类模型已被多种技术广泛研究, 并由此产生了若干配对机制的提案. 这些提案大致可分为弱耦合和强耦合两类方法.

在弱耦合理论中, 配对源于费米面嵌套所增强的自旋和/或电荷涨落的交换. 具有多能带且展现出有利嵌套条件的费米面拓扑结构, 为应用这一理论框架提供了合理的依据. 诸如随机相位近似 (RPA)<sup>[18,23,44,45,102-105]</sup>、涨落交换近似 (FLEX)<sup>[25,63,65]</sup>和泛函重整化群 (FRG)<sup>[13,17,27,106]</sup>等技术, 主要在  $s^{\pm}$ -波对称性上达成一致, 其中  $3d_{z^2}$  轨道之间的层间耦合起着主导作用, 这凸显了  $\gamma$  口袋的重要性. 这种配对态对晶体场劈裂<sup>[46]</sup>和层间相互作用<sup>[66]</sup>的敏感性也已被研究, 并且 FRG 对  $T_c$  压力依赖性的研究显示与实验观测一致<sup>[100]</sup>. 常压下 RP 双层薄膜的超导电性也已被弱耦合方法研究<sup>[23]</sup>. 虽然大多数弱耦合研究集中在以  $3d_{z^2}$  轨道和  $s^{\pm}$  波态为中心的巡游图像上, 但也有一些工作提出了替代的配对对称性或机制<sup>[10,107-112]</sup>.

与巡游图像相对, 强耦合方法假定成键的  $3d_{z^2}$  轨道是近乎局域的. 这一图像的动机是实验上在正常态观测到了自旋密度波, 这是强电子关联的标志. 基于此前提, 已提出了多种模型, 包括几种不同版本的  $t$ - $J$  模型, 例如基于  $3d_{x^2-y^2}$  轨道的双层  $t$ - $J$  模型<sup>[113]</sup>、 $3d_{x^2-y^2}$  轨道的  $t$ - $t_{\perp}$ - $J$  模型<sup>[11]</sup>、反对称能带的  $t$ - $t'$ - $t''$ - $J$  模型<sup>[114]</sup>、空单粒子-双粒子  $t$ - $J$  模型<sup>[115]</sup>、混合维  $t$ - $J$  模型<sup>[116,117]</sup>. 其他提案还涉及由  $3d_{z^2}$  轨道间的层间反铁磁耦合、 $3d_{x^2-y^2}$  和  $3d_{z^2}$  轨道间的洪特耦合, 以及  $3d_{x^2-y^2}$  轨道的类  $t$ - $J$  或类 Hubbard 项或自掺杂分子 Mott 绝缘体组成的多轨道模型<sup>[19,118-120]</sup>. 这些模型已采用多种技术进行研究, 例如赝玻色子平均场理论<sup>[114,113,121-124]</sup>、重整化平均场理论 (RMFT)<sup>[11,17,19,125-127]</sup>、隶自旋方法<sup>[128,129]</sup>、大  $N$  展开<sup>[130]</sup>、密度矩阵重整化群 (DMRG)<sup>[118,124,131-137]</sup>、张量网络 (TN)<sup>[136,138]</sup>、静态辅助场蒙特卡罗<sup>[139]</sup>、行列式量子蒙特卡罗 (DQMC)<sup>[140]</sup>和变分量子蒙特卡罗 (VQMC)<sup>[141]</sup>. 根据模型和参数的不同, 预测的配对对称性范围从  $s$ -波到  $d$ -波, 乃至  $d + is$ -波.

研究镍基高温超导配对机制的一个关键问题是  $3d_{z^2}$  轨道的精确作用. 在许多理论中, 特别是从弱耦合视角出发的理论, 预测由  $3d_{z^2}$  主导的  $\gamma$  口袋的存在会增强超导电性, 且配对主要发生在  $3d_{z^2}$  轨道中. 相反, 其他理论, 尤其是在强耦合框架内提出的理论, 则认为  $\gamma$  口袋不太相关, 并且鉴于  $3d_{z^2}$  态几乎是局域的, 超导序参量应由  $3d_{x^2-y^2}$  轨道主导. 因此, 通过实验确定  $3d_{z^2}$  轨道的巡游性与局域性特征, 对于解决超导机制至关重要. 镍基高温超导电性的理论研究仍处于早期阶段, 需要更精确的实验指导. 弱耦合和强耦合理论的进一步发展对于推进理解这一现象都是必需的.

## 参考文献

- [1] Lee P A, Nagaosa N, Wen X G 2006 *Rev. Mod. Phys.* **78** 17
- [2] Zhang F C, Rice T M 1988 *Phys. Rev. B* **37** 3759
- [3] Monthoux P, Balatsky A V, Pines D 1992 *Phys. Rev. B* **46** 14803
- [4] Varma C M, Littlewood P B, Schmitt Rink S, Abrahams E, Ruckenstein A E 1989 *Phys. Rev. Lett.* **63** 1996
- [5] Yang K Y, Rice T M, Zhang F C 2006 *Phys. Rev. B* **73** 174501
- [6] Li D, Lee K, Wang B Y, Osada M, Crossley S, Lee H R, Cui Y, Hikita Y, Hwang H Y 2019 *Nature* **572** 624
- [7] Sun H, Huo M, Hu X, Li J, Liu Z, Han Y, Tang L, Mao Z, Yang P, Wang B, Cheng J, Yao D X, Zhang G M, Wang M

- 2023 *Nature* **621** 493
- [8] Luo Z, Hu X, Wang M, Wu W, Yao D X 2023 *Phys. Rev. Lett.* **131** 126001
- [9] Zhang Y, Lin L F, Moreo A, Dagotto E 2023 *Phys. Rev. B* **108** L180510
- [10] Lechermann F, Gondolf J, Bötzel S, Eremin I 2023 *Phys. Rev. B* **108** L201121
- [11] Fan Z, Zhang J F, Zhan B, Lv D, Jiang X Y, Normand B, Xiang T 2024 *Phys. Rev. B* **110** 24514
- [12] Cao Y, Yang Y F 2024 *Phys. Rev. B* **109** L081105
- [13] Gu Y H, Le C C, Yang Z S, Wu X X, Hu J P 2025 *Phys. Rev. B* **111** 174506
- [14] Yang J, Sun H, Hu X, Xie Y, Miao T, Luo H, Chen H, Liang B, Zhu W, Qu G, Chen C Q, Huo M, Huang Y, Zhang S, Zhang F, Yang F, Wang Z, Peng Q, Mao H, Liu G, Xu Z, Qian T, Yao D X, Wang M, Zhao L, Zhou X J 2024 *Nat. Commun.* **15** 4373
- [15] Li Y, Du X, Cao Y, Pei C, Zhang M, Zhao W, Zhai K, Xu R, Liu Z, Li Z, Zhao J, Li G, Qi Y, Guo H, Chen Y, Yang L 2024 *Chin. Phys. Lett.* **41** 087402
- [16] Wang Y, Jiang K, Wang Z, Zhang F C, Hu J P 2024 *Phys. Rev. B* **110** 205122
- [17] Yang Q G, Wang D, Wang Q H 2023 *Phys. Rev. B* **108** L140505
- [18] Liu Y B, Mei J W, Ye F, Chen W Q, Yang F 2023 *Phys. Rev. Lett.* **131** 236002
- [19] Yang Y F, Zhang G M, Zhang F C 2023 *Phys. Rev. B* **108** L201108
- [20] 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 Q, Huang Y, Chen Z H, Qian T, Lin J, He J, Sun Y J, Chen Z, Xue Q K 2025 *Natl. Sci. Rev.* **12** nwaf205
- [21] 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, Thampy 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]
- [22] Sun W, Jiang Z C, Hao B, Yan S J, Zhang H Y, Wang M S, Yang Y, Sun H Y, Liu Z T, Ji D X, Gu Z B, Zhou J, Shen D, Feng D L, Nie Y F 2025 arXiv: 2507.07409 [cond-mat.supr-con]
- [23] Yue C, Miao J J, Huang H, Hua Y, Li P, Li Y, Zhou G, Lv W, Yang Q, Yang F, Sun H, Sun Y J, Lin J, Xue Q K, Chen Z, Chen W Q 2025 *Natl. Sci. Rev.* **12** nwaf253
- [24] Shao Z Y, Lu C, Liu M, Liu Y B, Pan Z, Wu C, Yang F 2025 arXiv: 2507.20287 [cond-mat.supr-con]
- [25] Ushio K, Kamiyama S, Hoshi Y, Mizuno R, Ochi M, Kuroki K, Sakakibara H 2025 arXiv: 2506.20497 [cond-mat.supr-con]
- [26] Huang J, Zhou T 2025 *Phys. Rev. B* **112** 054506
- [27] Cao Y H, Jiang K Y, Lu H Y, Wang D, Wang Q H 2025 arXiv: 2507.13694 [cond-mat.supr-con]
- [28] Bohm D, Pines D 1953 *Phys. Rev.* **92** 609
- [29] Coleman P 2015 *Introduction to Many-Body Physics* (Cambridge: Cambridge University Press) p1
- [30] Berk N F, Schrieffer J R 1966 *Phys. Rev. Lett.* **17** 433
- [31] Anderson P W, Brinkman W F 1973 *Phys. Rev. Lett.* **30** 1108
- [32] Nakajima S 1973 *Prog. Theor. Phys.* **50** 1101
- [33] Hirsch J E 1985 *Phys. Rev. Lett.* **54** 1317
- [34] Miyake K, Schmitt Rink S, Varma C M 1986 *Phys. Rev. B* **34** 6554
- [35] Emery V J 1986 *Synth. Met.* **13** 21
- [36] Scalapino D J 2012 *Rev. Mod. Phys.* **84** 1383
- [37] Wollman D A, Van Harlingen D J, Lee W C, Ginsberg D M, Leggett A J 1993 *Phys. Rev. Lett.* **71** 2134
- [38] Tsuei C C, Kirtley J R, Chi C C, Yu Jahnke L S, Gupta A, Shaw T, Sun J Z, Ketchen M B 1994 *Phys. Rev. Lett.* **73** 593
- [39] Monthoux P, Balatsky A V, Pines D 1991 *Phys. Rev. Lett.* **67** 3448
- [40] Scalapino D J, Loh Jr E, Hirsch J E 1986 *Phys. Rev. B* **34** 8190
- [41] Kuroki K, Onari S, Arita R, Usui H, Tanaka Y, Kontani H, Aoki H 2008 *Phys. Rev. Lett.* **101** 087004
- [42] Graser S, Maier T A, Hirschfeld P J, Scalapino D J 2009 *New J. Phys.* **11** 025016
- [43] Hu X, Qiu W, Chen C Q, Luo Z, Yao D X 2025 *Commun. Phys.* **8** 506
- [44] Zhang Y, Lin L F, Moreo A, Maier T A, Dagotto E 2024 *Nat. Commun.* **15** 2470
- [45] Zhang Y, Lin L F, Moreo A, Dagotto E 2023 *Phys. Rev. B* **108** 165141
- [46] Xia C, Liu H, Zhou S, Chen H 2025 *Nat. Commun.* **16** 1054
- [47] Bötzel S, Lechermann F, Gondolf J, Eremin I M 2024 *Phys. Rev. B* **109** L180502
- [48] Ko E K, Yu Y, Liu Y, Bhatt L, Li J, Thampy V, Kuo C T, Wang B Y, Lee Y, Lee K, Lee J S, Goodge B H, Muller D A, Hwang H Y 2024 *Nature* **638** 935
- [49] Zhou G, Lv W, Wang H, Nie Z, Chen Y, Li Y, Huang H, Chen W Q, Sun Y J, Xue Q K, Chen Z 2025 *Nature* **640** 641
- [50] Bickers N E, Scalapino D J, White S R 1989 *Phys. Rev. Lett.* **62** 961
- [51] Bickers N E, Scalapino D J 1989 *Ann. Phys.* **193** 206
- [52] Baym G, Kadanoff L P 1961 *Phys. Rev.* **124** 287
- [53] Baym G 1962 *Phys. Rev.* **127** 1391
- [54] Bickers N E, Scalapino D J, Scalettar R T 1987 *Int. J. Mod. Phys. B* **1** 687
- [55] Yanase Y, Jujo T, Nomura T, Ikeda H, Hotta T, Yamada K 2003 *Phys. Rep.* **387** 1
- [56] Björnson K, Kreisel A, Rømer A T, Andersen B M 2021 *Phys. Rev. B* **103** 024508
- [57] Esirgen G, Bickers N E 1997 *Phys. Rev. B* **55** 2122
- [58] Dahm T, Tewordt L 1995 *Phys. Rev. B* **52** 1297
- [59] Kuroki K, Arita R, Aoki H 1999 *Phys. Rev. B* **60** 9850
- [60] Ikeda H, Arita R, Kuneš J 2010 *Phys. Rev. B* **82** 024508
- [61] Yao Z J, Li J X, Wang Z D 2009 *New J. Phys.* **11** 025009
- [62] Yu S L, Li J X 2013 *Chin. Phys. B* **22** 087411
- [63] Sakakibara H, Kitamine N, Ochi M, Kuroki K 2024 *Phys. Rev. Lett.* **132** 106002
- [64] Nakata M, Ogura D, Usui H, Kuroki K 2017 *Phys. Rev. B* **95** 214509
- [65] Heier G, Park K, Savrasov S Y 2024 *Phys. Rev. B* **109** 104508
- [66] Xi W, Yu S L, Li J X 2025 *Phys. Rev. B* **111** 104505
- [67] Kadanoff L P 1966 *Phys. Phys. Fiz.* **2** 263
- [68] Wilson K G 1971 *Phys. Rev. B* **4** 3174
- [69] Wilson K G 1971 *Phys. Rev. B* **4** 3184
- [70] Wilson K G, Fisher M E 1972 *Phys. Rev. Lett.* **28** 240
- [71] Wilson K G 1975 *Rev. Mod. Phys.* **47** 773
- [72] White S R 1992 *Phys. Rev. Lett.* **69** 2863
- [73] White S R 1993 *Phys. Rev. B* **48** 10345
- [74] Verstraete F, Murg V, Cirac J I 2008 *Adv. Phys.* **57** 143
- [75] Vidal G 2007 *Phys. Rev. Lett.* **99** 220405
- [76] Evenbly G, Vidal G 2009 *Phys. Rev. B* **79** 144108
- [77] Levin M, Nave C P 2007 *Phys. Rev. Lett.* **99** 120601
- [78] Gu Z C, Wen X G 2009 *Phys. Rev. B* **80** 155131
- [79] Xie Z Y, Jiang H C, Chen Q N, Weng Z Y, Xiang T 2009 *Phys. Rev. Lett.* **103** 160601
- [80] Xie Z Y, Chen J, Qin M P, Zhu J W, Yang L P, Xiang T

- 2012 *Phys. Rev. B* **86** 045139
- [81] Evenbly G, Vidal G 2015 *Phys. Rev. Lett.* **115** 180405
- [82] Polchinski J 1984 *Nucl. Phys. B* **231** 269
- [83] Wetterich C 1993 *Phys. Lett. B* **301** 90
- [84] Morris T R 1994 *Int. J. Mod. Phys. A* **9** 2411
- [85] Berges J, Tetradis N, Wetterich C 2002 *Phys. Rep.* **363** 223
- [86] Metzner W, Salmhofer M, Honerkamp C, Meden V, Schönhammer K 2012 *Rev. Mod. Phys.* **84** 299
- [87] Zanchi D, Schulz H J 1998 *Eur. Phys. Lett. B* **44** 235
- [88] Zanchi D, Schulz H J 2000 *Phys. Rev. B* **61** 13609
- [89] Halboth C J, Metzner W 2000 *Phys. Rev. B* **61** 7364
- [90] Halboth C J, Metzner W 2000 *Phys. Rev. Lett.* **85** 5162
- [91] Honerkamp C, Salmhofer M, Furukawa N, Rice T M 2001 *Phys. Rev. B* **63** 035109
- [92] Yamase H, Eberlein A, Metzner W 2016 *Phys. Rev. Lett.* **116** 096402
- [93] Wang F, Zhai H, Ran Y, Vishwanath A, Lee D H 2009 *Phys. Rev. Lett.* **102** 047005
- [94] Wang F, Zhai H, Lee D H 2009 *Eur. Phys. Lett. B* **85** 37005
- [95] Zhai H, Wang F, Lee D H 2009 *Phys. Rev. B* **80** 064517
- [96] Platt C, Honerkamp C, Hanke W 2009 *New J. Phys.* **11** 055058
- [97] Chubukov A V, Efremov D V, Eremin I 2008 *Phys. Rev. B* **78** 134512
- [98] Xiang Y Y, Wang F, Wang D, Wang Q H, Lee D H 2012 *Phys. Rev. B* **86** 134508
- [99] Xiang Y Y, Yang Y, Wang W S, Li Z Z, Wang Q H 2013 *Phys. Rev. B* **88** 104516
- [100] Jiang K Y, Cao Y H, Yang Q G, Lu H Y, Wang Q H 2025 *Phys. Rev. Lett.* **134** 76001
- [101] Zhan J, Gu Y H, Wu X X, Hu J P 2025 *Phys. Rev. Lett.* **134** 136002
- [102] Braz L B, Martins G B, da L G G V D 2025 *Phys. Rev. Res.* **7** 144514
- [103] Zhang Y, Lin L F, Moreo A, Okamoto S, Maier T A, Dagotto E 2025 *Phys. Rev. B* **112** 094517
- [104] Lin L F, Zhang Y, Kaushal N, Alvarez G, Maier T A, Moreo A, Dagotto E 2024 *Phys. Rev. B* **110** 195135
- [105] Le C C, Zhan J, Wu X X, Hu J P 2025 arXiv: 2501.14665 [cond-mat.supr-con]
- [106] Singh D K, Goyal G, Bang Y 2025 *New J. Phys.* **27** 053503
- [107] Xu H X, Guterding D 2025 *Phys. Rev. B* **112** 174519
- [108] Lu D C, Li M, Zeng Z Y, Hou W, Wang J, Yang F, You Y Z 2023 arXiv: 2308.11195 [cond-mat.supr-con]
- [109] Zhang Y, Lin L F, Moreo A, Maier T A, Dagotto E 2024 *Phys. Rev. B* **110** L060510
- [110] Tian Y H, Chen Y, Wang J M, He R Q, Lu Z Y 2024 *Phys. Rev. B* **109** 165154
- [111] Yin Y C, Zhan J, Liu B Y, Han X L 2025 arXiv: 2502.21016 [cond-mat.supr-con]
- [112] Lu C, Pan Z, Yang F, Wu C 2024 *Phys. Rev. Lett.* **132** 146002
- [113] Jiang K, Wang Z, Zhang F C 2024 *Chin. Phys. Lett.* **41** 017402
- [114] Yang H, Oh H, Zhang Y H 2024 *Phys. Rev. B* **110** 104517
- [115] Zhan J, Le C C, Wu X X, Hu J P 2025 arXiv: 2503.18877 [cond-mat.supr-con]
- [116] Lange H, Homeier L, Demler E, Schollwöck U, Bohrdt A, Grusdt F 2024 *Phys. Rev. B* **110** L081113
- [117] Lange H, Homeier L, Demler E, Schollwöck U, Grusdt F, Bohrdt A 2024 *Phys. Rev. B* **109** 045127
- [118] Shen Y, Qin M, Zhang G M 2023 *Chin. Phys. Lett.* **40** 127401
- [119] Jiang R, Hou J, Fan Z, Lang Z J, Ku W 2024 *Phys. Rev. Lett.* **132** 126503
- [120] Wang Z, Zhang H J, Jiang K, Zhang F C 2025 *Nat. Sci. Rev.* **12** nwf353
- [121] Oh H, Zhang Y H 2023 *Phys. Rev. B* **108** 174511
- [122] Lu C, Pan Z, Yang F, Wu C 2024 *Phys. Rev. B* **110** 94509
- [123] Lu C, Zhang M, Pan Z, Wu C, Yang F 2025 *Comm. Phys.* **8** 354
- [124] Ji J H, Lu C, Shao Z Y, Pan Z, Yang F, Wu C 2025 *Phys. Rev. B* **112** 214515
- [125] Xue J R, Wang F 2024 *Chin. Phys. Lett.* **41** 057403
- [126] Luo Z H, Lv B, Wang M, Wu W, Yao D X 2024 *npj Quantum Mater.* **9** 61
- [127] Tian Y, Chen Y 2024 arXiv: 2412.17453 [cond-mat.supr-con]
- [128] Liao Z, Chen L, Duan G, Wang Y, Liu C, Yu R, Si Q 2023 *Phys. Rev. B* **108** 214522
- [129] Duan G, Liao Z, Chen L, Wang Y, Yu R, Si Q 2025 arXiv: 2502.09195 [cond-mat.supr-con]
- [130] Bejas M, Wu X, Chakraborty D, Schnyder A P, Greco A 2025 *Phys. Rev. B* **111** 144514
- [131] Kakoi M, Kaneko T, Sakakibara H, Ochi M, Kuroki K 2024 *Phys. Rev. B* **109** L201124
- [132] Zhang J X, Zhang H K, You Y Z, Weng Z Y 2024 *Phys. Rev. Lett.* **133** 126501
- [133] Schlömer H, Schollwöck U, Grusdt F, Bohrdt A 2024 *Commun. Phys.* **7** 366
- [134] Oh H, Zhou B, Zhang Y H 2025 *Phys. Rev. B* **111** L020504
- [135] Zhu X, Qin W, Cui P, Zhang Z 2025 arXiv: 2507.11169 [cond-mat.supr-con]
- [136] Qu X Z, Qu D W, Chen J, Wu C, Yang F, Li W, Su G 2024 *Phys. Rev. Lett.* **132** 36502
- [137] Oh H, Yang H, Zhang Y H 2024 arXiv: 2411.07292 [cond-mat.supr-con]
- [138] Chen J, Yang F, Li W 2024 *Phys. Rev. B* **110** L041111
- [139] Qin Q, Yang Y F 2023 *Phys. Rev. B* **108** L140504
- [140] Ma R, Ma T, Wu C 2024 arXiv: 2408.02031 [cond-mat.supr-con]
- [141] Liu Y Q, Wang D, Wang Q H 2025 arXiv: 2505.07341 [cond-mat.supr-con]

SPECIAL TOPIC—Research progress on nickelate superconductors

# Weak coupling theory of nickel-based 327 superconductors<sup>\*</sup>

MIAO Jianjian<sup>1)</sup> CHEN Weiqiang<sup>1)2)†</sup>

1) (*Quantum Science Center of Guangdong-Hong Kong-Macao Greater Bay Area, Shenzhen 518045, China*)

2) (*Department of Physics, Southern University of Science and Technology, Shenzhen 518055, China*)

( Received 9 October 2025; revised manuscript received 29 January 2026 )

## Abstract

This review provides a comprehensive survey of weak-coupling theoretical approaches applied to understand the emergent superconductivity in the pressurized nickelate bilayer system  $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_7$ . Following the landmark discovery of its high- $T_c$  superconductivity under pressure, this material has rapidly become a new paradigmatic platform in the field of unconventional superconductivity, joining cuprates and iron-based systems. We focus on three pivotal theoretical frameworks: the random phase approximation (RPA), the fluctuation-exchange approximation (FLEX), and the functional renormalization group (FRG). These methods are deployed to analyze the effective pairing interactions and emergent instabilities arising from the low-energy electronic structure, which is commonly modeled by a bilayer two-orbital Hubbard Hamiltonian incorporating the Ni  $d_{x^2-y^2}$  and  $d_{3z^2-r^2}$  orbitals.

A central theme consolidating the weak-coupling perspective is the crucial role of Fermi surface topology and nesting. Theoretical studies consistently identify a multi-pocket Fermi surface under pressure, featuring an electron-like  $\alpha$  pocket and two hole-like  $\beta$  and  $\gamma$  pockets. The  $\gamma$  pocket, predominantly derived from the  $d_{3z^2-r^2}$  orbital, exhibits strong nesting with the other pockets. This nesting significantly enhances antiferromagnetic spin fluctuations, which in turn mediate attractive pairing interactions. Consequently, a dominant  $s_{\pm}$ -wave pairing symmetry is widely predicted across different methodologies. In this state, the superconducting gap function maintains the same sign on the  $\gamma$  and  $\alpha$  pockets but reverses sign on the  $\beta$  pocket, a structure intimately linked to the interlayer pairing channel dominated by the  $d_{3z^2-r^2}$  orbital.

We further elaborate on the methodological distinctions and complementary strengths of the three weak-coupling approaches surveyed. The random phase approximation (RPA) provides an efficient description of spin and charge susceptibilities by summing an infinite series of bubble and ladder diagrams, offering a transparent link between Fermi surface nesting and the emergence of leading pairing instabilities. The fluctuation-exchange approximation (FLEX) improves upon RPA by incorporating self-consistency, thereby capturing the mutual renormalization between quasiparticle properties and collective spin fluctuations, which is essential for a more accurate determination of the pairing interaction in the intermediate coupling regime. The functional renormalization group (FRG) goes beyond static susceptibility calculations by integrating out high-energy degrees of freedom progressively, allowing for an unbiased treatment of competing instabilities—such as superconductivity, spin-density wave, and charge-density wave orders—within a unified framework. These complementary techniques collectively reinforce the conclusion that spin-fluctuation-mediated pairing, driven by the interlayer nesting between the  $d_{3z^2-r^2}$ -dominated  $\gamma$  pocket and other Fermi surface sheets, is the primary

<sup>\*</sup> Project supported by the National Basic Research Program of China (Grant No. 2024YFA1408101), the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 12334002, 12404171), the Project of Guangdong Province, China (Grant No. 2024QN11X176), the Quantum Science Strategic Special Project of Guangdong Province, China (Grant No. SZZX2401001), the Science Technology and Innovation Commission of Shenzhen Municipality, China (Grant No. ZDSYS20190902092905285), and the Center for Computational Science and Engineering at Southern University of Science and Technology, China.

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail: [chenwq@sustech.edu.cn](mailto:chenwq@sustech.edu.cn)

mechanism underlying superconductivity in the bilayer nickelate system.

The review systematically compares predictions from these approaches regarding the pairing strength, competition between different symmetries (e.g., s-wave vs. d-wave), and the influence of key material parameters such as interaction strength  $U$ , Hund's coupling  $J_H$ , crystal field splitting, and interlayer hybridization. Notably, the theoretical understanding is extended to ambient-pressure thin films, exploring the effects of substrate strain and the ongoing debate concerning the presence of the  $\gamma$  pocket. We also discuss how the pressure dependence of  $T_c$  and the material's response to disorder are addressed within the weak-coupling paradigm.

By synthesizing results from these advanced many-body techniques, this review highlights the success of weak-coupling, itinerant-based theories in capturing the essential physics of  $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_7$ , particularly in linking its high- $T_c$  superconductivity to spin-fluctuation-mediated pairing driven by specific Fermi surface geometries. Finally, we outline outstanding challenges and future directions, emphasizing the need for closer integration with strong-coupling pictures, more precise *ab initio*-derived model parameters, and definitive experimental tests to distinguish between competing theoretical scenarios and fully elucidate the superconducting mechanism in this fascinating nickelate system.

**Keywords:** nickel-based high-temperature superconductivity, random phase approximation, fluctuation exchange approximation, functional renormalization group

**DOI:** [10.7498/aps.75.20251361](https://doi.org/10.7498/aps.75.20251361)

**CSTR:** [32037.14.aps.75.20251361](https://cstr.net/urn:csdn:CSTR:32037.14.aps.75.20251361)

## 镍基327超导体的弱耦合理论

苗舰舰 陈伟强

### Weak coupling theory of nickel-based 327 superconductors

MIAO Jianjian CHEN Weiqiang

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 75, 070701 (2026) DOI: 10.7498/aps.75.20251361

CSTR: 32037.14.aps.75.20251361

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.75.20251361>

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

---

## 您可能感兴趣的其他文章

### Articles you may be interested in

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

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

物理学报. 2025, 74(17): 177401 <https://doi.org/10.7498/aps.74.20250696>

Ruddlesden–Popper相层状镍基超导配对机理及相关物性的弱耦合理论研究

Weak coupling studies on pairing mechanism and related properties of Ruddlesden–Popper phase layered nickelate based superconductors

物理学报. 2025, 74(22): 227401 <https://doi.org/10.7498/aps.74.20251179>

层状镍基超导体的电子结构和超快动力学

Electronic structure and ultrafast dynamics of nickel-based high-temperature superconductors

物理学报. 2025, 74(17): 177402 <https://doi.org/10.7498/aps.74.20250856>

高温超导材料 $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_7$ 的零电阻和奇异金属行为

Zero resistance and strange metal behavior of high-temperature superconducting material  $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_7$

物理学报. 2026, 75(1): <https://doi.org/10.7498/aps.75.20251207>

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>

三层镍氧化物高温超导研究进展

Research progress of high-temperature superconductivity in trilayer nickelate

物理学报. 2025, 74(22): 227402 <https://doi.org/10.7498/aps.74.20251258>