



北京大学量子材料科学中心

International Center for Quantum Materials, PKU

Weekly Seminar

新型镍基高温超导体的理论模型和超导特性

姚道新

中山大学物理学院

广东省磁电物性基础学科研究中心

广东省磁电物性分析与器件重点实验室



Time: 3:00 pm, Sep.17, 2025 (Wednesday)

时间: 2025年9月17日 (周三) 下午3:00

Venue: Room w563, Physics building, Peking University

地点: 北京大学物理楼, 西563会议室

摘要

新发现的双层镍氧超导体 $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_7$ 在高压下具有超过液氮沸点温度的约为80K的超导转变温度, 最近又发现在薄膜样品中实现了常压下的超导电性。通过密度泛函理论对电子能带进行分析, 我们发现影响镍基高温超导体的主要是Ni的 $3d_{x^2-y^2}$ 和 $3d_{z^2}$ 两个轨道, 以及O的p轨道。为了理论和实验研究的方便, 我们提出 $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_7$ 在高压相下的双层两轨道模型, 主要是基于Ni的 $3d_{x^2-y^2}$ 轨道和 $3d_{z^2}$ 两个轨道。如果进一步考虑O的p轨道, 我们提出了高能下的11轨道模型, 并给出了相应的电子跳跃和格点能等参数。我们发现层间Ni的 d_{z^2} 轨道的强耦合对于超导转变十分重要。在此基础上, 我们提出了双层两轨道t-J模型, 并研究了其电荷转移。通过重整化平均场理论 (RMFT), 我们发现双层镍氧化物 $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_7$ 块体的超导转变温度 T_c 可以接近实验上的80K, 同时 $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_7$ 的高压母体相具有显著的s±波对称性。另一方面, 我们发现 $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_7$ 超导转变发生的位置恰好发生在最佳掺杂区域附近, 一定程度上解释了为何 $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_7$ 具有如此高的转变温度。我们还对三层镍基超导体 $\text{La}_4\text{Ni}_3\text{O}_{10}$ 进行了理论研究。通过第一性原理计算和分析, 我们发现Ni-dz2轨道在费米面附近形成成键态、非键态与反键态, 其中, 成键态对应的能带在压力的作用下可以穿过费米面, 而非键态对超导的产生起着一定的扰动作用。利用Wannier轨道投影, 我们提出了 $\text{La}_4\text{Ni}_3\text{O}_{10}$ 的三层两轨道模型 (6轨道模型) 和高能量的16轨道模型 (含O-p轨道)。我们最新研究了 $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_7$ 和 $(\text{La}, \text{Pr})_3\text{Ni}_2\text{O}_7$ 薄膜的电子能带和费米面, 提出了0.5UC和1UC的双层两轨道模型 (Ni的 $3d_{x^2-y^2}$ 和 $3d_{z^2}$ 轨道), 以及考虑O的p轨道的高能模型。通过双层两轨道t-J模型的RMFT理论研究, 我们发现双层镍基超导体薄膜的s±波对称性能够完好解释ARPES实验上发现的超导能隙结果, 层间反铁磁相互作用对其超导转变温度有显著的影响。

参考文献: Nature 621, 493 (2023); Phys. Rev. Lett. 131, 126001 (2023); Nature Communications 15, 4373 (2024); NPJ Quantum Materials 9, 61 (2024); Phys. Rev. B 110, 014503 (2024); SCPMA 67, 117403 (2024); SCPMA 67, 117402 (2024); PRB 110, 014503 (2024); PRB 110, 134520 (2024); PRB 110, 235155 (2024); Chin. Phys. Lett. 41, 077402 (2024); SCPMA 68, 237411 (2025); PRB 111, 075140 (2025); arXiv:2411.13554; arXiv:2502.04255; arXiv:2505.15906; arXiv:2503.17223; arXiv:2506.20727.

报告人简介

姚道新, 中山大学物理学院教授、博士生导师、理论物理学科负责人, 宝钢优秀教师奖, 南粤优秀教师, 教育部新世纪优秀人才, 广东特支计划领军人才, 广东省物理学会秘书长, 广东省磁电物性分析与器件重点实验室副主任, 广东省本科高校物理学类专业教学指导委员会副主任, 中国物理学会低温物理专业委员会委员。1994年于浙江大学物理系获学士学位, 1998年于浙江大学物理系获理论物理硕士学位。2007年于美国波士顿大学物理系获博士学位。之后于美国普渡大学、田纳西大学和橡树岭国家实验室做博士后研究。2009年12月全职回到中山大学物理学院担任教授, 同时为光电材料与技术国家重点实验室固定研究人员。主要研究领域为关联电子体系, 包括超导体、量子磁性、拓扑物理、计算物理等。在国际著名物理学刊物上发表学术论文200多篇, 包括Nature, Nature Physics, Physical Review Letters等。有关成果被Nature、Science等刊物作为热点专题报告与评述, 部分成果入选ESI高被引论文。

<https://icqm.pku.edu.cn/>

Host: 王健<jianwangphysics@pku.edu.cn>