arXiv:2611.28747v1 [cond-mat.supr-con] 21 Nov 2026

$La_4Ni_3O_8$中的最小三能带模型与 d波超导性

Ao Zhang[1,2] *Chao Deng*,[2] *Wenfeng Wu*,[3] *Run Yang*,[1,4,*] *Zhixiang Shi*,[1,4,†] 和 *Liang Si*[2,5,6,‡]
[1] *School of Physics, Southeast University, Nanjing 211189, China*
[2] *School of Physics, Northwest University, Xi'an 710127, China*
[3] *Institute of Solid State Physics, TU Wien, 1040 Vienna, Austria*
[4] *Jiangsu Key Laboratory of New High Temperature Superconducting Materials for Controllable Nuclear Fusion, Southeast University, Nanjing 211189, China*
[5] *Shaanxi Key Laboratory for Theoretical Physics Frontiers, Xi'an 710127, China*
[6] *Fundamental Discipline Research Center for Quantum Science and technology of Shaanxi Province, Xi'an 710127, China*

受近期发现 Pr 和 Y 取代的 $La_4Ni_3O_8$, 在常压下具有超导性的启发，我们结合密度泛函理论（DFT）、动力学平均场理论（DMFT）、随机相位近似（RPA）和涨落交换近似（FLEX）方法，研究其电子结构和超导配对对称性。DFT 能带分析表明，低能态主要由三个镍-3$d_{x^2-y^2}$ 轨道构成，且与d-p 的杂化较弱。多轨道 DMFT 计算得到平均 $d_{x^2-y^2}$ 填充数约为 0.87，接近无限层镍酸盐的最佳值。通过比较仅含 $d_{x^2-y^2}$和包含完整镍-3d的模型的 DMFT 结果，我们发现两者的电子性质几乎完全一致，证明了简化 $d_{x^2-y^2}$ 模型的有效性。基于该模型的随机相位近似和 FLEX 计算一致表明，主要的 $d_{x^2-y^2}$波配对不稳定性占主导。这些结果表明，$La_4Ni_3O_8$ 的电子结构与空穴掺杂铜酸盐非常相似；这意味着无限层镍酸盐特有的 Γ点和 A点附近的电子口袋，可能并非超导性所必需。计算得到的超导转变温度（T_C）约为 10 K，与实验观测结果高度吻合。

引言——镍酸盐中超导性的发现，确立了铜酸盐之外一个新的非常规超导体家族 [1–5]。迄今为止，已在三类不同的镍酸盐中观测到超导性。第一类包括无限层镍酸盐 R NiO_2 （R=La、Pr、Nd），其中通过二价Ca或Sr取代进行空穴掺杂后会出现超导性 [1–3, 6–8]。在名义上未掺杂的 $NdNiO_2$ [9]中也有超导性的报道。在高压下，其超导转变温度 T_C 可显著提升，在 90 GPa 时超过 70 K [10]。光谱实验 [11–13]和多体计算 [4, 5, 14–18] 为理解无限层镍酸盐的轨道特征和电子关联效应提供了重要见解。超导电动力学测量提供的证据与节点型、类似铜酸盐的 d-波配对相符 [19–21], ; 理论研究也支持无限层镍酸盐中由自旋涨落介导的 $d_{x^2-y^2}$-波配对机制 [22–24]。第二类以 Ruddlesden-Popper（RP）相 $La_3Ni_2O_7$ [25–27]和 $La_2PrNi_2O_7$ [28], , 以及三层化合物 $La_4Ni_3O_{10}$ [29, 30]和 $Pr_4Ni_3O_{10}$[31, 32], 为代表；这些材料无需额外的载流子（空穴）掺杂，在压力下便会出现超导性。在这些 RP 相中，顶端 O使 Ni-3d_{z^2} 和顶端O-2p_z 轨道位于费米能级（E_f） [33–35], , 多数理论研究则指出其配对对称性为 $s^{\pm}$-波[34–40]。第三类由有限层结构组成，例如 $Nd(La)_6Ni_5O_{12}$ [41, 42] 和 $La_5Ni_4O_{10}$ [43]。随后的理论研究揭示了……之间的相似性五层结构和无限层镍酸盐的电子结构，以及更广泛的 R_{n+1}镍$_n$氧$_{2n+2}$ 体系中所支持的 $d_{x^2-y^2}$-波配对 [44–49]。

最近，有报道称，在常压下，Pr 和 Y 取代的镧$_4$镍$_3$氧$_8$ 单晶中出现了超导电性的迹象，其特征温度分别约为 7 K 和 15 K [50]。这一观察尤其引人关注，因为其T_C 与无限层镍酸盐的[1, 4, 8, 51], 相当，尽管其中存在由萤石状间隔层 [52–56]隔开的三层结构方平面镍氧$_2$ 片层。角分辨光电子能谱测量 [57] 和共振非弹性 X 射线散射（RIXS）[58] 揭示了 Pr_4镍$_3$氧$_8$中的类铜酸盐费米面特征和显著的电子重整化，并分别证实了镧$_4$镍$_3$氧$_8$, 中显著的反铁磁超交换作用。最重要的是，参考文献 [中的模拟和实验均未

57] 揭示了 $Pr_4Ni_3O_8$中的 Γ点和 A点电子口袋。这引出了两个根本问题：$(Pr,La)_4Ni_3O_8$ 与 $La(Nd)NiO_2$，有多大程度的相似性，以及这些电子口袋是否是超导性所必需的? 因此，$(Pr,La)_4Ni_3O_8$ 为解答这些问题提供了理想的平台。

在此前关于方平面三层镍酸盐中关联电子态与配对的研究基础上[59, 60], , 本研究结合密度泛函理论（DFT） [61, 62], 、动力学平均场理论（DMFT） [63, 64], 、随机相位近似（RPA） [65, 66], 和涨落交换（FLEX） [67], 对镧$_4$镍$_3$氧$_8$ 开展了全面的理论研究——

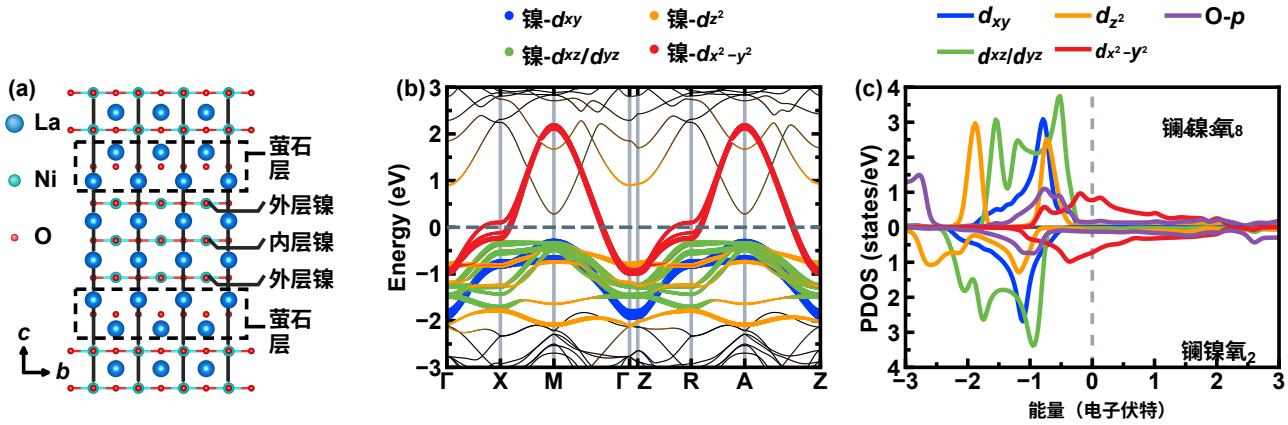

图 1. $La_4Ni_3O_8$, 的晶体结构和电子结构，并以 $LaNiO_2$ 作为参照。(a) 沿 a 轴观察的晶体结构，显示内侧和外侧镍位点。虚线框标出了萤石型 La_2O_2 间隔层。(b) $La_4Ni_3O_8$, 的轨道分辨非自旋极化 DFT 能带结构，颜色权重表示镍-3d 特征。(c) $La_4Ni_3O_8$ （上）和 $LaNiO_2$ （下）的投影态密度（DOS）。

69] 计算。密度泛函理论能带结构表明，费米能级 E_f 附近的低能态主要由三个镍-3$d_{x^2-y^2}$ 轨道构成，只有较弱的 d-p 杂化，且不存在口袋能带。通过进行多轨道镍-3d动力学平均场理论计算，我们确定了$d_{x^2-y^2}$-轨道占据数：每个轨道为 0.87 个电子，接近此前理论研究发现的最佳填充数 $n\sim$0.85 [4, 5, 70]。对仅包含$d_{x^2-y^2}$ 的3带模型和镍-3d15带动力学平均场理论结果的详细分析表明，最简3带模型抓住了低能物理的本质。

我们使用基于$d_{x^2-y^2}$ 3带 Wannier 投影得到的紧束缚哈密顿量，进行随机相位近似和 FLEX 计算。随机相位近似结果表明，在所考虑的所有相互作用强度下， $d_{x^2-y^2}$ 配对通道均占主导。将 FLEX 配对本征值对数外推至 $\lambda_{\rm SC}=1$ ，得到的配对不稳定温度估计值分别约为 5.8 K 和 14.2 K，对应于 $U=$1.0 和 1.1 eV，与实验结果吻合良好。因此，我们的结果证实，$La_4Ni_3O_8$ 是一种具有 $d_{x^2-y^2}$波对称性配对的空穴掺杂 Hubbard 超导体，其最简电子结构由三个 $d_{x^2-y^2}$带构成，与无限层镍酸盐超导体十分相似。最重要的是，无限层镍酸盐中 Γ点和 A点附近的电子口袋并非超导性的必要条件。

方法—采用 Vasp [71, 72] 和 Wien2K [73–75] 代码计算 DFT 级电子结构。交换-关联泛函采用 Perdew-Burke-Ernzerhof 版本的广义梯度近似（GGA-PBE）[76]。计算采用 $La_4Ni_3O_8$,$a=b=$3.97 ˚A 和 $c=$26.09 ˚A 的实验晶格参数[52]。布里渊区采样在致密的 $16\times16\times4$ k网格上进行。将相应的 DFT能带投影到最大局域化瓦尼尔函数[77] 上，并使用 Wannier90 代码 [78] 和 Wien2Wannier 接口 [79]构建低能有效哈密顿量。针对 $La_4Ni_3O_8$构建了两个模型：(1) 十五带模型，包含一个晶胞中三个镍原子的全部镍-3d 轨道；(2) 三带模型，仅包含所有镍原子的镍-$d_{x^2-y^2}$ 轨道。

所得的紧束缚哈密顿量加入了局域电子相互作用，并采用完全局域极限进行双计数修正 [80, 81]。15带DMFT计算的相互作用参数（轨道内 $U=$4.4 eV、洪德交换 $J=$0.65 eV以及轨道间 $U'=$3.1 eV）取自文献 [70, 82]。对于三带模型，DMFT计算采用了 $U=$3.2 eV的局域Hubbard相互作用。RPA计算在$U=$0.6、0.8和1.0 eV下进行，而FLEX计算涵盖 $U=$0.6-1.4 eV。由于收敛困难，排除了更大的相互作用强度。在动力学平均场理论（DMFT）框架 [64],下，所得多体哈密顿量在室温 $T=$300 K的顺磁态中求解，使用W2dynamics代码 [84, 85]实现的杂化展开连续时间量子蒙特卡罗杂质求解器 [83], 。通过最大熵方法（MaxEnt）[86],进行解析延拓，获得实频谱函数，该方法由ana_cont代码 [87]实现。

为研究磁涨落和超导配对，我们考虑了一个由镍-$d_{x^2-y^2}$ Wannier轨道构建的 3带哈伯德模型，

$$H_{3b} = \sum_{\mathbf{k},\sigma} \sum_{\ell,\ell'=1}^{3} c^{\dagger}_{\mathbf{k}\ell\sigma} \left[h_{\ell\ell'}(\mathbf{k}) - \mu\delta_{\ell\ell'} \right] c_{\mathbf{k}\ell'\sigma} + U \sum_{i,\ell} n_{i\ell\uparrow} n_{i\ell\downarrow}. \quad (1)$$

这里， ℓ 表示晶胞内的三个镍位点，每个位点由一个 $d_{x^2-y^2}$ Wannier轨道表示，而 i表示晶胞。Wannier哈密顿量$h_{\ell\ell'}$(k)包含在位能以及层内和层间跃迁。相互作用 U 局域作用于每个镍轨道上，而化学势 μ经过调节以维持给定的总填充数。我们在随机相位近似（RPA） [39, 65, 66, 88]和自洽涨落交换近似（FLEX） [48, 68, 69]框架内处理该模型。根据 15带动力学平均场理论计算得到的镍-3$d_{x^2-y^2}$ 轨道占据数，RPA计算中的总电子填充数固定为 N=2每晶胞 .60。布里渊区积分采用 144^3 k-网格进行，而磁化率和配对计算采用48^3 网格。我们针对不同的配对对称性通道，计算了静态自旋磁化率和费米面配对强度 λ_{FS}。对于FLEX计算，自旋求和的平均填充数固定为 n=0每个轨道 .87 个电子，并使用 128×128×1 动量网格。电子自能和自旋磁化率通过自洽方式计算，并在一系列相互作用强度和温度下求解线性化 Eliashberg 方程，以确定 $d_{x^2-y^2}$-波通道中的主导配对本征值和本征函数。所有电子填充数均包含两个自旋分量。

密度泛函理论能带结构——$La_4Ni_3O_8$ 的晶体结构如图 1(a)所示。每个三层结构由一个内层和两个外层 NiO_2 平面组成。在一个晶胞中，有两个不等价镍位点：外层镍与界面处的 La_2O_2 萤石层相邻，而内层镍位于内部。它们不等价的局域环境可能导致不同的轨道在位势、占据数和关联效应。按轨道分辨的非自旋极化密度泛函理论能带结构 [图 1(b)]显示，穿过 E_f 的能带主要具有镍-3$d_{x^2-y^2}$ 特征，而其余的镍-3d和氧-2p轨道大多位于 E_f以下。与无限层镍酸盐相比 [4], ，最显著的差异是，在 Γ、M和 A点处，口袋状能带结构移至 E_f以上，使得 La-5d和 4f 轨道的电子占据数几乎为零。同时，沿 Γ–X–M–Γ 和Z–R–A–Z 方向几乎相同的能带色散表明，该体系具有准二维低能电子结构。然而， $d_{x^2-y^2}$ 轨道的层间杂化使三个 NiO_2 平面中的 $d_{x^2-y^2}$ 轨道产生低能能带（尤其是在 X和 R点处），这凸显了在简化的低能描述中保留层间耦合的重要性。

为进一步理解 $La_4Ni_3O_8$，的电子结构，尤其是其与无限层镍酸盐 $LaNiO_2$ [89, 90]， 的差异，我们计算了轨道分辨的态密度 [图 1(c)]。对于 $La_4Ni_3O_8$，，我们选取内层镍作为代表。可以看出，这两种材料具有非常相似的电子结构： E_f 附近的电子结构几乎完全由 Ni-3$d_{x^2-y^2}$贡献。一个显著差异是，在 $La_4Ni_3O_8$，中，包括其他 Ni-3d 和 O-2p 轨道在内的其他电子态更接近 E_f。这是因为 $La_4Ni_3O_8$ 的面内晶格常数大于 $LaNiO_2$ （∼3.95 °A） [91], ，从而导致带宽减小。与 $CaCuO_2$ [89], 等铜酸盐相比，在 $La_4Ni_3O_8$ 和 $LaNiO_2$ 中，面内 O-2p_x/p_y 轨道对 E_f 附近电子态的贡献都可以忽略。因此，可以将 O-2p 轨道排除在最小模型之外；该模型是一个 $d_{x^2-y^2}$ 哈伯德模型，而不是包含面内 O-2p_x/p_y 的 Emery模型 [92] 。然而，这种以 Ni-$d_{x^2-y^2}$ 为主的特征并不意味着在 RIXS[93] 等光谱学研究中可以完全排除 Ni-O杂化：结合团簇计算的 O K-边 RIXS 测量已在 $La_4Ni_3O_8$ [94] 中发现了显著的配体空穴特征。Ni L_2- 边 RIXS 进一步揭示，$La_4Ni_3O_8$ 中的电荷序主要涉及 Ni-$d_{x^2-y^2}$ 和 O-2p_σ 态，而 Ni-$d_{3z^2-r^2}$ [95] 的贡献较小。

*DMFT*修正——强电子关联效应会显著重整化能带结构，尤其是在 E_f附近。因此，我们采用DMFT方法计算镧$_4$镍$_3$氧$_8$的谱函数。在图2(a)中，采用所有镍-3d 轨道进行的15带DMFT计算显示，在镧$_4$镍$_3$氧$_8$ 中，费米面贡献主要来自 $d_{x^2-y^2}$。然而，与DFT能带 [图2(b)], 相比，DMFT中的其他镍-3d能带显著上移并接近E_f。这是因为强关联效应使电子从其他镍-3d 轨道略微转移至镍-3$d_{x^2-y^2}$。

具体来说，见表I。在15带密度泛函理论计算中，镍-3$d_{x^2-y^2}$ 内层镍和外层镍的占据数分别为0.72和0.67，显著低于计算得到的最佳超导值0.85以及无限层镍酸盐超导体中的最低占据数0.79 [4]。然而，在15带动力学平均场理论计算中，由于强关联效应，约有0.1–0.2个电子从其他镍-3d 轨道转移到 $d_{x^2-y^2}$，使得 $d_{x^2-y^2}$ 占据数达到0.88（外层镍）和0.86（内层镍）。这些数值非常接近无限层镍酸盐中的最佳值0.85 [4, 70]。因此，强关联效应导致的电子转移使镧$_4$镍$_3$氧$_8$ 即使没有额外的空穴掺杂也能表现出超导性。通过15带动力学平均场理论计算，我们发现，三个 $d_{x^2-y^2}$ 轨道

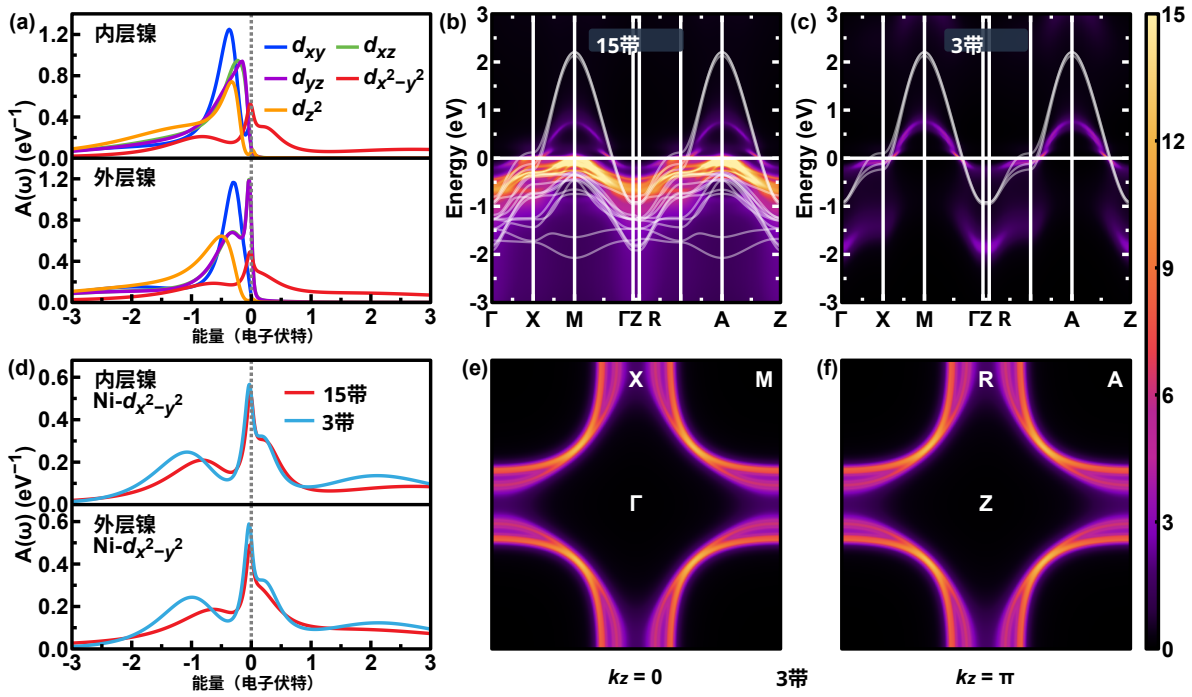

图 2. 15 带和 3 带模型的动力学平均场理论谱函数。(a) 15 带模型中内层（上）和外层（下）镍位点的轨道分辨局域谱函数。(b,c) 15 带模型 (b) 和 3 带模型 (c) 的总动量分辨谱函数。白色曲线表示相应的非相互作用参考能带。(d) 比较 15 带（红色）和 3 带（蓝色）模型中内层（上）和外层（下）镍位点的局域镍-$d_{x^2-y^2}$ 谱函数。(e,f) 3 带模型在 k_z=0 (e) 和 k_z=π (f) 平面内的零能谱权重。

镍位点（两个外层镍和一个内层镍）总共约占据2.6个电子。图2（c）显示了三带模型的动量分辨谱函数 A（k ω），而图2（d）将其局域 $d_{x^2-y^2}$谱与十五带模型的谱进行了比较。两种模型都保留了低能 $d_{x^2-y^2}$ 峰和更宽的已占据态谱特征，尽管它们的峰强度、谱权重分布以及内层与外层之间的层间差异仍然不同。这些相似性支持将三带模型作为低能 $d_{x^2-y^2}$ 扇区的有效描述。此外，我们进一步估算了轨道分辨质量增强

$$Z_\alpha^{-1} = 1 - \left.\frac{\partial\,\mathrm{Im}\Sigma_\alpha(i\omega)}{\partial\omega}\right|_{\omega\to 0^+},$$

其中 α 表示轨道。利用上述公式，我们得到 Z_α^{-1}十五带模型中内层和外层镍轨道的轨道重整化估计值分别为 3.77 和 3.88，$3d_{x^2-y^2}$ 而三带模型中分别为 3.75 和 3.43。两种不同模型得到的有效质量几乎相同，这表明 $d_{x^2-y^2}$ 轨道可以视为独立轨道，且它与其他镍 [14, 16, 96] 轨道之间不会$3d$产生洪特金属型多轨道效应。在图2(e,f)中，我们绘出了三带动力学平均场理论计算得到的费米面（在 k_z=0 和 π）。可以看出，费米面呈现出明显的空穴掺杂二维特征。这是因为沿z方向，在 Wannier 投影中，由界面萤石型镧$_2$氧$_2$ 层隔开的两个 $d_{x^2-y^2}$ 轨道之间的跃迁，在三带模型（十五带模型）中仅为 0.67 毫电子伏（0.35 毫电子伏）。因此，根据三带模型和十五带模型的动力学平均场理论计算，即使存在强关联效应，$La_4Ni_3O_8$ 的最小模型仍可由具有准二维特征的三个 $d_{x^2-y^2}$轨道表示。事实上，正是强关联效应引起的电子转移行为，使 $d_{x^2-y^2}$ 轨道占据数进入最佳（超导）区域，从而使 $La_4Ni_3O_8$, 产生与 $Nd_6Ni_5O_{12}$ [45]类似的超导性。最后，从十五带动力学平均场理论计算中提取了三个 $d_{x^2-y^2}$ 轨道的占据数，得到总填充数为 N=2.60，即平均每个 $d_{x^2-y^2}$含有n=0.87 个电子。随后在随机相位近似和 FLEX 计算中采用了这一填充数。

来自随机相位近似计算的竞争配对通道——我们首先采用随机相近似方法考察不同配对对称性之间的竞争。图3(a) 展示了静态费米面配对本征值 λ_{FS} 随相互作用强度 U 变化的情况，其中总填充数固定为 N=2。60，采用3带 $d_{x^2-y^2}$ 模型，温度为 T=69。6 K（对应于 $k_{\mathrm{B}}T$=0。006 eV）。在所研究的三个相互作用取值下， $d_{x^2-y^2}$ 配对通道的配对本征值均为最大。其（静态）

表 I. 基于密度泛函理论和动力学平均场理论计算得到的镧$_4$镍$_3$氧$_8$，中 15 带和 3 带模型的内侧和外侧镍位点的自旋求和轨道占据数。3 带模型仅保留镍-$d_{x^2-y^2}$ 轨道。

模型	Site	方法	d_{xy}	$d_{xz/yz}$	$d_{x^2-y^2}$	d_{z^2}
15带	内层镍	DFT	2.00	2.00	0.72	1.98
		DMFT	1.98	1.97	0.86	1.98
	外层镍	DFT	2.00	2.00	0.67	1.99
		DMFT	1.98	1.89	0.88	1.99
3带	内层镍	DFT	–	–	0.90	–
		DMFT	–	–	0.89	–
	外层镍	DFT	–	–	0.85	–
		DMFT	–	–	0.86	–

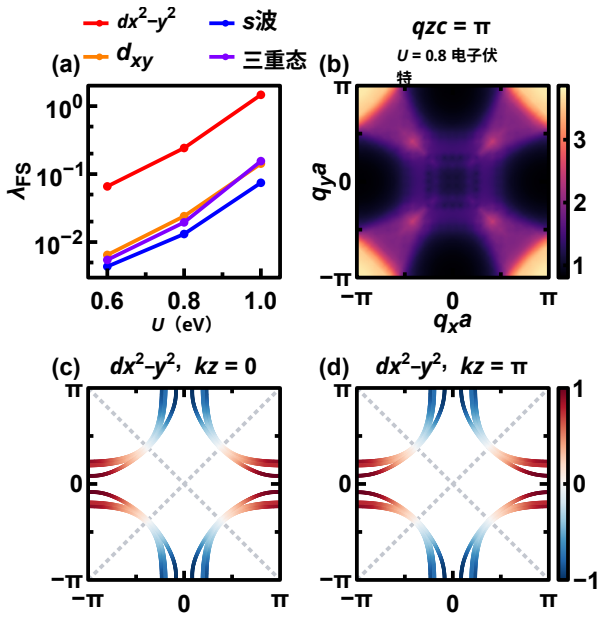

图3。随机相位近似下获得的3带$d_{x^2-y^2}$模型的配对通道和自旋响应。计算在固定总填充数 N=2.60和温度T=69.6 K（对应于 k_BT=0.006 eV）下进行。(a) 静态费米面配对强度 λ_{FS}随 U 变化的关系，其中展示了不同的配对通道。(b) 在 $q_zc=\pi$ 平面中、 U=0.8 eV处静态自旋磁化率矩阵的最大本征值。(c、d) 在相同相互作用强度下，k_z=0 (c)和 $k_z=\pi$ (d)处费米面截面上的归一化配对本征函数，显示出 $d_{x^2-y^2}$ 配对所具有的特征性变号和节点。

费米面配对强度从 U=0。6 eV时约0.066增至 U=1。0 eV时的1.466；而在其他相互竞争的通道中，最大强度仅达到 ∼0。155，这表明 $d_{x^2-y^2}$ 配对是所考察通道中的主导通道。这种配对对称性也在早期针对掺杂方平面三层镍酸盐的 t–J模型计算中受到青睐 [59]。随着 U增加，镧$_4$镍$_3$氧$_8$中的自旋涨落增强，且 $d_{x^2-y^2}$ 通道中的配对强度迅速增加。在 U=1 eV 时，斯托纳因子约为 0.944，开始接近随机相位近似（RPA）的磁不稳定性；因此，在随机相位近似计算中，我们只考虑了 U至 1 eV。图 λ_{FS}中所示的3用于比较不同通道的配对强度，不能直接用于确定超导转变温度。下文中，我们采用涨落交换近似方法，并求解 Eliashberg 方程以获得 T_C 。

自旋响应的动量依赖性为主导配对对称性提供了物理解释。在 U=0.8 eV 时，静态自旋磁化率矩阵的最大本征值在面内波矢（π/a，π/a）附近增强，位于 $q_zc=\pi$ 平面 [，见图3(b)]。排斥性的自旋涨落介导的配对相互作用，会使由主导散射波矢连接的费米面区域具有相反的能隙符号 [88]。$d_{x^2-y^2}$ 形状因子 cos(k_xa)-cos(k_ya) 满足这一面内符号变化条件。与此一致，计算得到的配对本征函数沿两个相互正交的面内方向呈现相反符号，并在$k_x=\pm k_y$ 附近出现节点，分别位于 k_z=0 和 $k_z=\pi$ 截面中 [，见图3(c) 和 (d)]。这些结果将主导的 $d_{x^2-y^2}$ 配对通道与增强的反铁磁自旋响应联系起来。

$d_{x^2-y^2}$波配对与 FLEX 中的自旋涨落——通过自洽地更新电子自能、格林函数以及由涨落介导的相互作用，FLEX近似能够自洽地处理自能和频率依赖的配对相互作用；二者均由同一组自旋与电荷涨落传播子一致地构造而成 [22, 48, 68, 97–99]。因此，为考察关联效应和动态涨落对超导配对倾向的影响，我们接下来对 $d_{x^2-y^2}$3带模型进行（自洽）FLEX计算，并在 $d_{x^2-y^2}$波道中求解线性化 Eliashberg 方程，其中自旋求和填充数为每个 $d_{x^2-y^2}$ 轨道 n=0.87 个电子。该通道中的配对本征值 λ_{SC}随U 增大、温度 [降低而上升（图 4(a)]）。斯托纳因子 α_S 也随 U增大而上升，但其温度依赖性弱得多（图 4(b)]）。例如，在 U=1.4 eV 时，温度从 81.2 K（对应于 k_BT=0.007 eV）降至 46.4 K（0.004 eV），使 λ_{SC}从约 0.80 增至 1.02，从而达到超导态；而 α_S 仅从 0.918 变为 0.924。因此，降温显著增强了配对，而斯托纳因子则几乎保持不变。

配对本征值 λ （上升至 1 以上）与近乎恒定的斯托纳因子 α_S 之间的脱节，应结合 FLEX [100] 固有的局限性来理解。FLEX 是一种基于自旋涨落的RPA型理论，不考虑顶角修正 [101]；这些修正对自旋通道的影响往往较小，但对电荷和轨道通道可能影响显著，因此

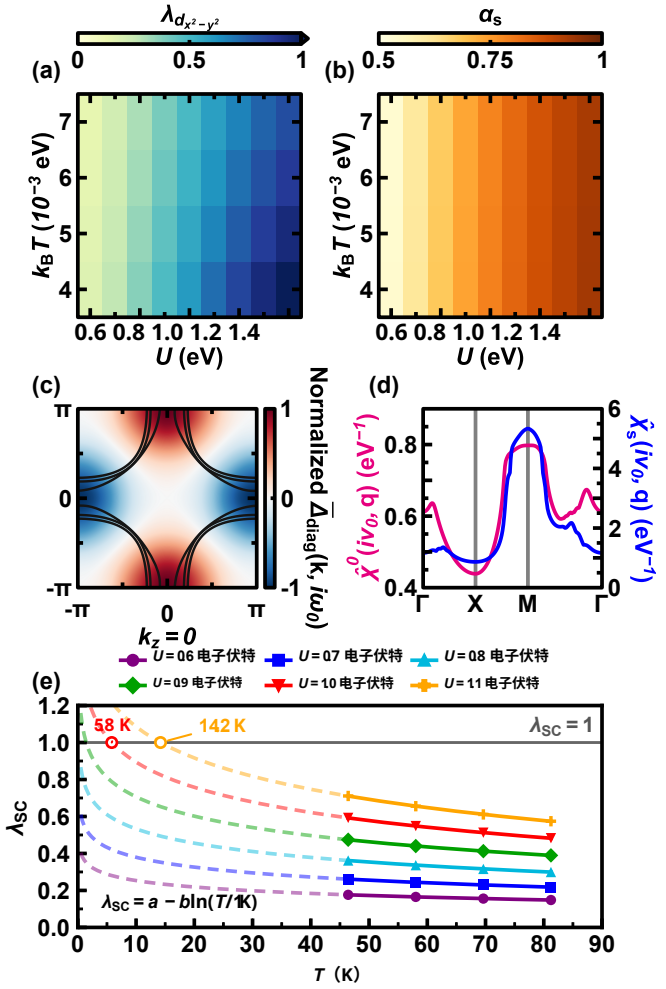

图 4。 $d_{x^2-y^2}$ 3能带模型的 FLEX 结果。(a)$d_{x^2-y^2}$ 配对本征值 λ_{SC} 和 (b) 斯托纳因子 α_S 随相互作用 U 和 k_BT的变化。(c) 归一化 $d_{x^2-y^2}$ 配对本征函数的动量依赖性。黑线表示通过 FLEX 获得的费米面轮廓。(d) 沿 Γ–X–M–Γ 路径的静态磁化率 χ_0（左轴）和 χ_s（右轴）。(e) 超导本征值 λ_{SC} 随温度 T的变化。超导转变温度 T_C 对应于 $\lambda_{SC}\to1$。

电荷磁化率可能会被低估。因此， α_S 主要衡量自旋通道接近静态磁不稳定性的程度，并未涵盖所有与配对相关的涨落。如果部分配对胶水来自电荷、轨道极化或轨道选择性涨落，那么即使 α_S 几乎保持不变，有效配对相互作用也可能随温度降低而增强 T，使 λ 超过 1。因此， α_S 保持恒定并不能排除磁性贡献，而是表明 α_S 并非配对增强的唯一或充分指标，至少对于 $La_4Ni_3O_8$ 而言是如此。为检验这一点，还应计算电荷磁化率 $\chi_c(q,\omega)$、轨道分辨磁化率以及顶角修正，并与密度泛函理论+动力学平均场理论或其他先进方法，例如多能带 DΓA [102, 103], 并分析配对能隙的轨道和动量结构 $\Delta(k)$，以开展进一步研究。

对于 U=1.2 eV 和 T=69.6 K，配对本征函数的动量结构和自旋响应如图 4(c,d) 所示。图 4(c) 展示了配对函数的动量依赖性，并叠加了费米面轮廓。配对函数在 $k_x \leftrightarrow k_y$ 下发生变号，并沿布里渊区对角线出现节点，呈现出 RPA 中同样发现的 $d_{x^2-y^2}$ 结构。图 4(d) 展示了沿 Γ–X–M–Γ方向的静态不可约磁化率 χ_0(q, 0) 和自旋磁化率 χ_s(q, 0) 的动量依赖性。在每个动量 q 处，我们绘制相应磁化率矩阵的最大本征值。自旋响应在 M=(π/a,π/a) 附近呈现显著峰值，表明该波矢处增强的反铁磁自旋涨落，这与图 4(c) 中变号的 $d_{x^2-y^2}$ 配对结构一致。

最后，为估算超导临界温度 T_C，图 4(e) 展示了 U=0 为 0.6 eV−1.1 eV 时的 $\lambda_{SC}(T)$。本征值 λ_{SC} 随着 T 减小和 U 增大而增加。我们使用 $\lambda_{SC}(T)=a-b\ln(T/\mathrm{K})$ 拟合 λ_{SC} 的温度依赖关系，其中针对每个 U 分别拟合 a 和 b，并将结果外推至 λ_{SC}=1。对于 U=1.0 eV 和 1.1 eV，所得配对不稳定温度估计值分别约为 5.8 K 和 14.2 K。这些估计值与 Pr 和 Y 替代的 $La_4Ni_3O_8$ [50] 中约 7 K 和 15 K 附近报道的超导起始温度处于同一温度尺度。

结论与展望——我们利用密度泛函理论、动力学平均场理论、随机相位近似和 FLEX，研究了 $La_4Ni_3O_8$ 的关联电子结构和超导配对倾向。与无限层镍酸盐不同，$La_4Ni_3O_8$ 在 Γ 点和 A 点附近没有电子口袋。其费米能附近的低能态主要由三个镍-3$d_{x^2-y^2}$ 轨道贡献，而较弱的 d-p杂化使得采用最小三能带模型具有合理性，该模型为每个镍原子设置一个镍-3$d_{x^2-y^2}$ Wannier轨道。15带和3带动力学平均场理论计算得到的有效质量、费米面和谱函数几乎完全相同。关联效应使 $d_{x^2-y^2}$ 占据数从密度泛函理论中的 0.67–0.72 增至动力学平均场理论中的每轨道约 0.87 个电子，接近无限层镍酸盐的最佳填充数。在此填充数下，随机相位近似计算指出，$d_{x^2-y^2}$波通道是主导配对通道；FLEX 结果表明，随着相互作用 U 增大（温度 T降低），该通道中的配对增强。FLEX 配对本征函数在费米面上变号，这与 (π,π) 附近增强的反铁磁自旋响应相符。对 FLEX 本征值进行外推可得，当 U=1为 0 eV 和 1.1 eV 时，配对不稳定温度分别约为 5.8 K 和 14.2 K，与实验测得的 7 K–15 K 相当。由于 FLEX 忽略顶角修正，且往往会高估配对强度

，且 T_C，RPA/FLEX 结果主要用于确定本征配对通道并估算T_C 尺度；若要获得准确的定量预测，则需采用其他方法，例如 DΓA [70, 103, 104] 或 DCA [105–107]。最后，我们的结果表明，无限层镍酸盐中的 Γ口袋和 A口袋并非镍酸盐超导性所必需。$La_4Ni_3O_8$ 是一种非常规超导体，其配对机制由反铁磁自旋涨落驱动，并呈现出与空穴掺杂铜酸盐相关的特征。

鉴于 $La_4Ni_3O_8$ 与 $LaNiO_2$，在电子结构和主导超导配对倾向方面的相似性，以及 $La_4Ni_3O_8$ 的面内晶格常数（3.97 ˚A） [108, 109], 相较于 $LaNiO_2$ （3.95 ˚A） [91] 和生长于 $SrTiO_3$ 衬底上的 $LaNiO_2$ 薄膜（3.905 ˚A）较大，这为应变工程提供了契机。近期实验报告称，外压 [10, 110–112]下无限层镍酸盐的 T_C 有所增强。理论研究表明，这种增强与（压力诱导的）带宽 $d_{x^2-y^2}$ 增大及有效关联强度 [113], 减弱有关，其特征是比值 [70] U/t 降低。因此，我们提出，在面内晶格常数较小的衬底上外延生长 $La_4Ni_3O_8$ ，例如 LSAT（3.868 ˚A） [114] 或 $LaAlO_3$（3.78 ˚A） [115],，可能改变镍-3$d_{x^2-y^2}$ 带宽和磁涨落，从而有望增强超导配对不稳定性，同时保留足够强的反铁磁自旋涨落。值得进一步研究这一可能性，尤其是考虑到 $La_4Ni_3O_8$ [52, 54] 中超导性与条纹序绝缘态之间可能存在竞争。

致谢——R. Y. 和 Z. X. S. 感谢国家重点研发计划（项目编号：2024YFA1408400）和国家自然科学基金（项目编号：12374135 和 12474152）的资助。L. S. 感谢国家自然科学基金（项目编号：12422407 和 12674309）以及陕西省重点研发计划（2024QY2-GJHX-42）的资助。计算工作在西北大学（西安）国家超级计算中心完成。

数据可用性——支持本文研究结果的数据未公开。经合理请求，可向作者获取这些数据。

*ryang@seu.edu.cn †
zxshi@seu.edu.cn
‡ siliang@nwu.edu.cn

[1] D. Li、K. Lee、B. Y. Wang、M. Osada、S. Crossley、H. R. Lee、Y. Cui、Y. Hikita 和 H. Y. Hwang, 《自然》**572**, 624 2019年( )。[2] D. Li、B. Y. Wang、K. Lee、S. P. Harvey、M. Osada, B. H. Goodge, L. F. Kourkoutis, and H. Y. Hwang, 《物理评论快报》125, 027001 (2020年)。[3] S. Zeng, C. S. Tang, X. Yin, C. Li, M. Li, Z. Huang, J. Hu, W. Liu, G. J. Omar, H. Jani, Z. S. Lim, K. Han, D. Wan, P. Yang, S. J. Pennycook, A. T. S. Wee, and A. Ariando, 《物理评论快报》125, 147003 (2020年)。[4] M. Kitatani, L. Si, O. Janson, R. Arita, Z. Zhong, and K. Held, npj《量子材料》5, 59 (2020年)。[5] K. Held, L. Si, P. Worm, O. Janson, R. Arita, Z. Zhong, J. M. Tomczak, and M. Kitatani, 《物理学前沿》9, 810394 (2022年)。[6] M. Osada, B. Y. Wang, K. Lee, D. Li, and H. Y. Hwang, 《物理评论材料》4, 121801(R) (2020年)。[7] M. Osada, B. Y. Wang, B. H. Goodge, S. P. Harvey, K. Lee, D. Li, L. F. Kourkoutis, and H. Y. Hwang, 《先进材料》33, 2104083 (2021年)。[8] S. Zeng, C. Li, L. E. Chow, Y. Cao, Z. Zhang, C. S. Tang, X. Yin, Z. S. Lim, J. Hu, P. Yang, *et al.*, 《科学进展》8, eabl9927 (2022年)。[9] C. T. Parzyck, Y. Wu, L. Bhatt, M. Kang, Z. Arthur, T. M. Pedersen, R. Sutarto, S. Fan, J. Pelliciari, V. Bisogni, G. Herranz, A. B. Georgescu, D. G. Hawthorn, L. F. Kourkoutis, D. A. Muller, D. G. Schlom, and K. M. Shen, 《物理评论X》15, 021048 (2025年)。[10] Y. Lee, M. Wang, X. Wei, Y. Yu, W. L. Mao, Y. Lin, and H. Y. Hwang, arXiv:2604.09525 (2026年)。[11] M. Hepting, D. Li, C. Jia, H. Lu, E. Paris, Y. Tseng, X. Feng, M. Osada, E. Been, Y. Hikita, *et al.*, 《自然·材料》19, 381 (2020年)。[12] B. H. Goodge, D. Li, K. Lee, M. Osada, B. Y. Wang, G. A. Sawatzky, H. Y. Hwang, and L. F. Kourkoutis, 《美国国家科学院院刊》118, e2007683118 (2021年)。[13] X. Ding, Y. Fan, X. Wang, C. Li, Z. An, J. Ye, S. Tang, M. Lei, X. Sun, N. Guo, *et al.*, 《国家科学评论》11, nwae194 (2024年)。[14] C.-J. Kang and G. Kotliar, 《物理评论快报》126, 127401 (2021年)。[15] G.-M. Zhang, Y.-f. Yang, and F.-C. Zhang, 《物理评论B》101, 020501 (2020年)。[16] P. Werner and S. Hoshino, 《物理评论B》101, 041104 (2020年)。[17] J. Karp, A. S. Botana, M. R. Norman, H. Park, M. Zingl, and A. Millis, 《物理评论X》10, 021061 (2020年)。[18] F. Lechermann, 《物理评论X》10, 041002 (2020年)。[19] B. Cheng, D. Cheng, K. Lee, L. Luo, Z. Chen, Y. Lee, B. Y. Wang, M. Mootz, I. E. Perakis, Z.-X. Shen, *et al.*, 《自然·材料》23, 775 (2024年)。[20] B. Cheng, D. Cheng, K. Lee, M. Mootz, C. Huang, L. Luo, Z. Chen, Y. Lee, B. Y. Wang, I. E. Perakis, Z.-X. Shen, H. Y. Hwang, and J. Wang, 《物理评论B》111, 014519 (2025年)。[21] Q. Huang, X. Fu, J. Wu, L. Li, L. Qiao, and Y. Yang, 《物理评论快报》137, 216003 (2026年)。[22] H. Sakakibara, H. Usui, K. Suzuki, T. Kotani, H. Aoki, and K. Kuroki, 《物理评论快报》125, 077003 (2020年)。[23] T. Y. Xie, Z. Liu, C. Cao, Z. F. Wang, J. L. Yang, and W. Zhu, 《物理评论B》106, 035111 (2022年)。[24] P. Worm, Q. Wang, M. Kitatani, I. Bia-lo, Q. Gao, X. Ren, J. Choi, D. Csontosov´a, K.-J. Zhou, X. Zhou, Z. Zhu, L. Si, J. Chang, J. M. Tomczak, and K. Held, 《物理评论B》109, 235126 (2024年)。[25] H. Sun, M. Huo, X. Hu, J. Li, Z. Liu, Y. Han, L. Tang,

Z. Mao, P. Yang, B. Wang, *et al.*, 《自然》（伦敦）621, 493 2023( )。[26] J. Hou, P.-T. Yang, Z.-Y. Liu, J.-Y. Li, P.-F. Shan, L. Ma, G. Wang, N.-N. Wang, H.-Z. Guo, J.-P. Sun, Y. Uwatoko, M. Wang, G.-M. Zhang, B.-S. Wang, and J.-G. Cheng, 《中国物理快报》40, 117302 (2023年)。[27] Y. Zhang, D. Su, Y. Huang, Z. Shan, H. Sun, M. Huo, K. Ye, J. Zhang, Z. Yang, Y. Xu, Y. Su, R. Li, M. Smid- man, M. Wang, L. Jiao, and H. Yuan, 《自然·物理》20, 1269 (2024年)。[28] N. Wang, G. Wang, X. Shen, J. Hou, J. Luo, X. Ma, H. Yang, L. Shi, J. Dou, J. Feng, *et al.*, 《自然》（伦敦）634, 579 (2024年)。[29] Y. Zhu, D. Peng, E. Zhang, B. Pan, X. Chen, L. Chen, H. Ren, F. Liu, Y. Hao, N. Li, *et al.*, 《自然》（伦敦）631, 531 (2024年)。[30] Q. Li, Y.-J. Zhang, Z.-N. Xiang, Y. Zhang, X. Zhu, and H.-H. Wen, 《中国物理快报》41, 017401 (2024年)。[31] C. Pei, M. Zhang, D. Peng, Y. S hen, S. Huangfu, S. Zhu, Q. Wang, J. Wu, J. Wang, Z. Xing, L. Zhang, H. Kadobayashi, S. I. Kawaguchi, Y. Chen, J. Zhao, W. Yang, H. Suo, H. Guo, Q. Zeng, G.-M. Zhang, and Y. Qi, 《中国科学：物理学 力学 天文学》69, 237011 (2026年)。[32] E. Zhang, D. Peng, Y. Zhu, L. Chen, B. Cui, X. Wang, W. Wang, Q. Zeng, and J. Zhao, 《物理评论X》15, 021008 2025( )。[33] I. V. Leonov, 《物理评论B》109, 235123 (2024年)。[34] Q.-G. Yang, D. Wang, and Q.-H. Wang, 《物理评论B》108, L140505 (2023年)。[35] Y.-B. Liu, J.-W. Mei, F. Ye, W.-Q. Chen, and F. Yang, 《物理评论快报》131, 236002 (2023年)。[36] Q.-G. Yang, K.-Y. Jiang, D. Wang, H.-Y. Lu, and Q.-H. Wang, 《物理评论B》109, L220506 (2024年)。[37] Y. Zhang, L.-F. Lin, A. Moreo, T. A. Maier, and E. Dagotto, 《物理评论B》108, 165141 (2023年)。[38] M. Zhang, H. Sun, Y.-B. Liu, Q. Liu, W.-Q. Chen, and F. Yang, 《物理评论B》110, L180501 (2024年)。[39] Y. Zhang, L.-F. Lin, A. Moreo, T. A. Maier, and E. Dagotto, 《物理评论快报》133, 136001 (2024年)。[40] Y. Zhang, L.-F. Lin, A. Moreo, T. A. Maier, and E. Dagotto, 《自然·通讯》15, 2470 (2024年)。[41] G. A. Pan, D. Ferenc Segedin, H. LaBollita, Q. Song, E. M. Nica, B. H. Goodge, A. T. Pierce, S. Doyle, S. No- vakov, D. C´ordova Carrizales, *et al.*, 《自然·材料》21, 160 (2022年)。[42] M. Shi, M. Du, H. Li, Z. Wang, Z. Wang, Z. Xiang, T. Wu, and X. Chen, arXiv:2610.20249 (2026年)。[43] R. Zhang, P. Reiss, A. Krajewska, M. Isobe, H. Takagi, and P. Puphal, arXiv:2611.12788 (2026年)。[44] A. Hausoel, S. Di Cataldo, M. Kitatani, O. Janson, and K. Held, npj《量子材料》10, 69 (2025年)。[45] P. Worm, L. Si, M. Kitatani, R. Arita, J. M. Tomczak, and K. Held, 《物理评论材料》6, L091801 (2022年)。[46] Z. Wang, Y. Wang, H.-K. Jin, K. Jiang, and J. Hu, arXiv:2610.22212 (2026年)。[47] J.-H. She, R.-Q. He, and Z.-Y. Lu, arXiv:2607.08474 (2026年)。[48] C. Deng, M. Kitatani, G. Jiang, S. Guo, N. Witt, A. Zhang, W. Wu, M. Jiang, K. Held, and L. Si, 《物理评论快报》137, 086004 (2026年)。[49] Y. Gao, W. Wu, Z. Liu, K. Held, and L. Si, 《物理评论快报》135, 026002 (2025年)。[50] H.-B. Ahn, X. Chen, H. Zheng, Y. Zhang, R. Chapai, Y. Li, A. S. Thind, R. F. Klie, M. R. Norman, U. Welp, J. F. Mitchell, 和 D. Phelan, arXiv:2609.19686（2026年）。[51] W. Wei, W. Sun, Y. Sun, Y. Pan, G. Jin, F. Yang, Y. Li, Z. Zhu, Y. Nie, 和 Z. Shi, 《物理评论B》107, L220503（2023年）。[52] J. Zhang, Y.-S. Chen, D. Phelan, H. Zheng, M. R. Norman, 和 J. F. Mitchell, 《美国国家科学院院刊》113, 8945（2016年）。[53] J. Zhang, A. S. Botana, J. W. Freeland, D. Phelan, H. Zheng, V. Pardo, M. R. Norman, 和 J. F. Mitchell, 《自然·物理》13, 864（2017年）。[54] J. Zhang, D. M. Pajerowski, A. S. Botana, H. Zheng, L. Harriger, J. Rodriguez-Rivera, J. P. C. Ruff, N. J. Schreiber, B. Wang, Y.-S. Chen, W. C. Chen, M. R. Norman, S. Rosenkranz, J. F. Mitchell, 和 D. Phelan, 《物理评论快报》122, 247201（2019年）。[55] V. Pardo 和 W. E. Pickett, 《物理评论快报》105, 266402 2010( )。[56] V. Pardo 和 W. E. Pickett, 《物理评论B》85, 045111（2012年）。[57] H. Li, P. Hao, J. Zhang, K. Gordon, A. G. Linn, X. Chen, H. Zheng, X. Zhou, J. F. Mitchell, 和 D. S. Dessau, 《科学进展》9, eade4418（2023年）。[58] J. Q. Lin, P. Villar Arribi, G. Fabbris, A. S. Botana, D. Meyers, H. Miao, Y. Shen, D. G. Mazzone, J. Feng, S. G. Chiuzb˘aian, A. Nag, A. C. Walters, M. Garc´ıa- Fern´andez, K.-J. Zhou, J. Pelliciari, I. Jarrige, J. W. Freeland, J. Zhang, J. F. Mitchell, V. Bisogni, X. Liu, M. R. Norman, 和 M. P. M. Dean, 《物理评论快报》126, 087001（2021年）。[59] E. M. Nica, J. Krishna, R. Yu, Q. Si, A. S. Botana, 和 O. Erten, 《物理评论B》102, 020504（2020年）。[60] J. Karp, A. Hampel, M. Zingl, A. S. Botana, H. Park, M. R. Norman, 和 A. J. Millis, 《物理评论B》102, 245130 2020( )。[61] P. Hohenberg 和 W. Kohn, 《物理评论》136, B864（1964年）。[62] W. Kohn 和 L. J. Sham, 《物理评论》140, A1133（1965年）。[63] W. Metzner 和 D. Vollhardt, 《物理评论快报》62, 324（1989年）。[64] A. Georges, G. Kotliar, W. Krauth, 和 M. J. Rozen- berg, 《现代物理评论》68, 13（1996年）。[65] Z.-Y. Shao, C. Lu, M. Liu, Y.-B. Liu, Z. Pan, C. Wu, 和 F. Yang, 《通信物理》（2026年）。[66] F. Liu, C.-C. Liu, K. Wu, F. Yang, 和 Y. Yao, 《物理评论快报》111, 066804（2013年）。[67] K. Kubo, 《物理评论B》75, 224509（2007年）。[68] N. E. Bickers, D. J. Scalapino, 和 S. R. White, 《物理评论快报》62, 961（1989年）。[69] M. Kitatani, R. Arita, T. Sch¨afer, 和 K. Held, 《物理学杂志：材料》5, 034005（2022年）。[70] M. Kitatani, L. Si, P. Worm, J. M. Tomczak, R. Arita, 和 K. Held, 《物理评论快报》130, 166002（2023年）。[71] G. Kresse 和 J. Furthm¨uller, 《物理评论B》54, 11169（1996年）。[72] G. Kresse 和 J. Furthm¨uller, **6**, 15 1996 《计算材料科学》（）。[73] P. Blaha, K. Schwarz, G. K. H. Madsen, D. Kvasnicka, 和 J. Luitz, 维也纳工业大学（2001年）。[74] K. Schwarz, P. Blaha, 和 G. K. H. Madsen, 《计算物理通信》147, 71（2002年）。[75] P. Blaha, K. Schwarz, F. Tran, R. Laskowski, G. K. H. Madsen, 和 L. D. Marks, 《化学物理学杂志》152, 074101

（2020年）。[76] J. P. Perdew, K. Burke, 和 M. Ernzerhof, 《物理评论快报》77，3865（1996年）。[77] N. Marzari, A. A. Mostofi, J. R. Yates, I. Souza, 和 D. Vanderbilt, 《现代物理评论》84，1419（2012年）。[78] A. A. Mostofi, J. R. Yates, Y.-S. Lee, I. Souza, D. Van- derbilt, 和 N. Marzari, 《计算物理通信》178，685 2008( )。[79] J. Kuneˇs, R. Arita, P. Wissgott, A. Toschi, H. Ikeda, 和 K. Held, 《计算物理通信》181，1888（2010年）。[80] A. I. Liechtenstein, V. I. Anisimov, 和 J. Zaanen, 《物理评论B》52，R5467（1995年）。[81] V. I. Anisimov, I. V. Solovyev, M. A. Korotin, M. T. Czy˙zyk, 和 G. A. Sawatzky, 《物理评论B》48，16929（1993年）。[82] L. Si, W. Xiao, J. Kaufmann, J. M. Tomczak, Y. Lu, Z. Zhong, 和 K. Held, 《物理评论快报》124，166402（2020年）。[83] E. Gull, A. J. Millis, A. I. Lichtenstein, A. N. Rubtsov, M. Troyer, 和 P. Werner, 《现代物理评论》83，349（2011年）。[84] N. Parragh, A. Toschi, K. Held, 和 G. Sangiovanni, 《物理评论B》86，155158（2012年）。[85] M. Wallerberger, A. Hausoel, P. Gunacker, A. Kowalski, N. Parragh, F. Goth, K. Held, 和 G. Sangiovanni, 《计算物理通信》235，388（2019年）。[86] J. E. Gubernatis, M. Jarrell, R. N. Silver, 和 D. S. Sivia, 《物理评论B》44，6011（1991年）。[87] J. Kaufmann 和 K. Held, 《计算物理通信》282，108519（2023年）。[88] S. Graser, T. A. Maier, P. J. Hirschfeld, 和 D. J. Scalapino, 《新物理学杂志》11，025016（2009年）。[89] A. S. Botana 和 M. R. Norman, 《物理评论X》10，011024 2020( )。[90] P. Jiang, L. Si, Z. Liao, 和 Z. Zhong, 《物理评论B》100，201106（2019年）。[91] P. Puphal, B. Wehinger, J. Nuss, K. K¨uster, U. Starke, G. Garbarino, B. Keimer, M. Isobe, 和 M. Hepting, 《物理评论材料》7，014804（2023年）。[92] V. J. Emery, 《物理评论快报》58，2794（1987年）。[93] F. M. F. de Groot, M. W. Haverkort, H. Elnaggar, A. Juhin, K.-J. Zhou, 和 P. Glatzel, 《自然·方法：入门》4，45（2024年）。[94] Y. Shen, J. Sears, G. Fabbris, J. Li, J. Pelliciari, I. Jar- rige, X. He, I. Bozovic, M. Mitrano, J. Zhang, J. F. Mitchell, A. S. Botana, V. Bisogni, M. R. Norman, S. Johnston, 和 M. P. M. Dean, 《物理评论X》12，011055 2022( )。[95] Y. Shen, J. Sears, G. Fabbris, J. Li, J. Pelliciari, M. Mi- trano, W. He, J. Zhang, J. F. Mitchell, V. Bisogni, M. R. Norman, S. Johnston, 和 M. P. M. Dean, 《物理评论X》13，011021（2023年）。

[96] Y. Wang, C.-J. Kang, H. Miao, and G. Kotliar, 《物理评论B》102, 161118 (2020). [97] P. Monthoux and D. J. Scalapino, 《物理评论快报》72, 1874 1994( ). [98] T. Takimoto, T. Hotta, and K. Ueda, 《物理评论B》69, 104504 2004( ). [99] N. Witt, E. G. C. P. van Loon, T. Nomoto, R. Arita, and T. O. Wehling, 《物理评论B》103, 205148 (2021). [100] H. Kontani, R. Tazai, Y. Yamakawa, and S. Onari, 《物理学进展》70, 355 (2021). [101] S. Onari and H. Kontani, 《物理评论快报》109, 137001 (2012). [102] A. Galler, P. Thunstr¨om, P. Gunacker, J. M. Tomczak, and K. Held, 《物理评论B》95, 115107 (2017). [103] G. Rohringer, H. Hafermann, A. Toschi, A. A. Katanin, A. E. Antipov, M. I. Katsnelson, A. I. Lichtenstein, A. N. Rubtsov, and K. Held, 《现代物理评论》90, 025003 2018( ). [104] W. Wu, E. Jacob, V. Christiansson, Y. Gao, Z. Zeng, K. Held, and L. Si, npj《量子材料》11, 8 (2026年). [105] T. Maier, M. Jarrell, T. Pruschke, and M. H. Hettler, 《现代物理评论》77, 1027 (2005). [106] P. Staar, T. Maier, and T. C. Schulthess, 《物理评论B》88, 115101 (2013). [107] M. H. Hettler, M. Mukherjee, M. Jarrell, and H. R. Krishna murthy, 《物理评论B》61, 12739 (2000). [108] V. V. Poltavets, K. A. Lokshin, M. Croft, T. K. Mandal, T. Egami, and M. Greenblatt, 《无机化学》46, 10887 (2007). [109] V. V. Poltavets, K. A. Lokshin, A. H. Nevidomskyy, M. Croft, T. A. Tyson, J. Hadermann, G. Van Tende- loo, T. Egami, G. Kotliar, N. ApRoberts-Warren, A. P. Dioguardi, N. J. Curro, and M. Greenblatt, 《物理评论快报》104, 206403 (2010). [110] N. N. Wang, M. W. Yang, Z. Yang, K. Y. Chen, H. Zhang, Q. H. Zhang, Z. H. Zhu, Y. Uwatoko, L. Gu, X. L. Dong, J. P. Sun, K. J. Jin, and J.-G. Cheng, 《自然·通讯》13, 4367 (2022年). [111] S. Cai, Y. Tian, S. Yan, J. Zhao, B. Hao, J. Zhang, S. Sun, Y. Ding, Q. Wu, H.-k. Mao, I. Bozovic, Y. Nie, and L. Sun, arXiv:2608.02042 (2026年). [112] J. Sun, W. Sun, W. Wu, Q. Dong, T. Shi, L. Zhu, Y. Yu, K. Held, B. Wang, L. Si, Y. Nie, and J. Cheng, 《物理评论B》114, 194509 (2026年). [113] S. Di Cataldo, P. Worm, J. M. Tomczak, L. Si, and K. Held, 《自然·通讯》15, 3952 (2024年). [114] S. C. Tidrow, A. Tauber, W. D. Wilber, R. T. Lareau, C. D. Brandle, G. W. Berkstresser, A. J. Ven Graitis, D. M. Potrepka, J. I. Budnick, and J. Z. Wu, 《IEEE应用超导学报》7, 1766 (1997). [115] M. Rizwan, S. Gul, T. Iqbal, U. Mushtaq, M. H. Farooq, M. Farman, R. Bibi, and M. Ijaz, 《材料研究快报》6, 112001 (2019年).