arXiv:2602.21438v1 [cond-mat.str-el] 24 Feb 2026

旋转声子驱动铜氧化物超导体中的低能拐点

Yanyong Wang,[1], * *Manuel Engel,*[2], * *Christopher Lane,*[3] *Henrique Miranda,*[2]*Lin Hou,*[1] *Bernardo Barbiellini,*[4,5,6] *Adrienn Ruzsinszky,*[1] *John P. Perdew,*[1]*Robert S. Markiewicz,*[5,6] *Arun Bansil,*[5]*,6,* † *Jianwei Sun,*[1], ‡ 和 *Ruiqi Zhang*[1], §

[1] *Department of Physics and Engineering Physics,Tulane University, New Orleans, LA 70118, USA* [2] *VASP Software GmbH Berggasse 21/14 1090 Vienna Austria , , , ,* [3] *Theoretical Division Los Alamos Los Alamos National Laboratory, , New Mexico 87545, USA*[4] *Department of Physics, School of Engineering Science,LUT University, FI-53850 Lappeenranta, Finland*

[5] *Department of Physics, Northeastern University, Boston, MA 02115, USA*

[6] *Quantum Materials and Sensing Institute, Northeastern University, Burlington, MA 01803, USA*

角分辨光电子能谱（角分辨光电子能谱）显示，铜氧化物超导体中普遍存在位于 ∼70 meV 和 ∼40 meV 附近的准粒子“拐点”，且常伴有峰–谷–隆起（PDH）结构。这些特征表明电子与低能玻色子激发之间存在强耦合，但由于传统密度泛函理论（DFT）的局限性以及超越密度泛函理论的方法计算成本高昂，其微观起源仍不明确。在此，我们采用强约束且适当归一化（SCAN）密度泛函，系统研究空穴掺杂无限层 $CaCuO_2$ 中的电子-声子耦合（EPC），并明确纳入磁效应。我们发现，在磁相中电子-声子耦合强度 λ 为∼0.5，能在 40–80 meV 能区产生拐点和峰–谷–隆起结构，与实验高度吻合。主要贡献来自旋转氧声子，而呼吸模的贡献很小。我们的结果证实了铜酸盐中存在强电子-声子耦合，凸显了旋转声子的关键作用，并为理解铜酸盐及其他体系中的谱异常提供了理论框架。

尽管近四十年来已有大量研究，但铜酸盐中高温超导（T_c）的配对机制仍未得到解决 [1–4]。铜酸盐被广泛视为典型的强关联材料：在莫特绝缘或电荷转移绝缘的反铁磁母体化合物中掺杂后，超导便会出现；由此形成的相图则包含丰富的关联驱动现象。这些现象包括以 d 波配对为主、在最佳掺杂附近电阻率随温度近乎线性变化的奇异金属输运，异常强的磁交换相互作用，以及多种相互交织的电子序 [5–15]。

尽管这一现象学传统上促使人们提出强调纯电子机制的理论，但越来越多的实验证据表明，晶格自由度在铜酸盐中发挥着至关重要的作用。动量分辨散射实验揭示了显著的声子反常，这些反常与条纹和电荷密度波等交织序相伴出现 [16], ，而光谱学探针则报告了广泛的玻色子特征以及可测量的氧同位素效应 [17]。角分辨光电子发射光谱（角分辨光电子能谱）提供了尤为直接的洞见，揭示了 Bi-2212（$Bi_2Sr_2CaCu_2O_{8+\delta}$）中超导性和电子-声子耦合（EPC）的快速演变 [18]。更广泛而言，大量角分辨光电子能谱研究已证实，费米能级附近的低能电子激发与玻色子模强烈耦合 [19–33], ，从而在整个铜酸盐家族中产生普遍存在的准粒子“拐点”。

这些拐点长期以来被归为两个特征性能量尺度：∼ 70 meV附近的节点折点 [19–30] ，以及 ∼ 40 meV附近的反节点折点 [24, 25, 28–33]。它们的微观起源仍是学界积极争论的话题。声子 [19, 22, 31] 和自旋涨落 [20, 34–36] 都被认为是相关的玻色子激发。尤其是，近期的超高分辨率角分辨光电子能谱测量报告称，在节点和反节点方向上， ∼ 70 和 ∼ 40 meV附近均存在拐点，且这些拐点对温度和掺杂基本不敏感 [37]。这种稳健性不支持纯粹的磁性起源，反而愈发表明电子-声子耦合是这些光电子发射特征背后的主导机制。综合来看，这些观测凸显了电子-声子耦合在铜酸盐中的核心作用，同时它也与强电子关联并存。从理论角度看，电子-声子耦合在铜酸盐中的作用长期存在争议。早期的密度泛函理论（DFT）计算认为，电子-声子耦合太弱，无法解释实验观测到的拐点 [38]。然而，这一结论受到了质疑 [39, 40],，因为传统的DFT近似——例如局域密度近似（LDA）和Perdew–Burke–Ernzerhof（PBE）广义梯度近似——

* 这些作者对本研究的贡献相同
† 通讯作者：ar.bansil@neu.edu
‡ 通讯作者：jsun@tulane.edu§ 这些作者对本研究的贡献相同；通讯作者：rzhang16@tulane.edu

往往无法准确描述铜酸盐的电子结构、声子性质和关联磁性 [41–45]。近期，GW微扰理论（GWPT）计算揭示了关联增强的电子-声子耦合，其电子-声子耦合强度 λ（其中 λ 为无量纲电子-声子耦合常数）比标准DFT计算所得结果高出两到三倍 [40]。这些结果表明，原则上，仅凭声子介导相互作用就可能解释观测到的拐点。然而，值得注意的是，早期DFT [38] 和GWPT [40] 研究均采用非磁性（NM）参考态，并忽略了磁效应，尽管越来越多的证据表明，磁性和自旋涨落是铜氧化物物理的内在组成部分 [46]。

这些考量表明，有必要对铜酸盐中的电子-声子耦合进行不带偏见、针对具体材料的评估，并平等对待自旋、电荷、轨道和晶格自由度。这种方法对于识别导致角分辨光电子能谱拐点的声子模，以及揭示磁性是否会从定性上重塑电子-声子相互作用本身，至关重要。

为应对这一挑战，我们采用强约束且适当归一化（SCAN）密度泛函，研究空穴掺杂无限层 $CaCuO_2$ 中的电子-声子耦合，并在计算中明确纳入磁效应。我们发现，磁性会显著增强铜酸盐中的电子-声子耦合：总耦合强度λ 最高可达 0.5，几乎是非磁性构型的五倍。这种强耦合产生了明显的准粒子拐点和特征性的峰-谷-隆起（PDH）结构，出现在计算得到的谱函数中，与实验观测高度吻合。值得注意的是，我们发现与氧振动相关的旋转声子模是电子-声子耦合增强的主要来源，约占总耦合的 80%，并且在很大程度上形成了光电子谱线形中的高能谷和隆起。相比之下，传统上受到重视的氧呼吸模贡献很弱。我们的结果从模式分辨的角度提供了铜酸盐中电子-声子耦合的微观认识，并揭示磁性是晶格介导相互作用的关键放大因素，促使人们开展进一步的实验和理论探索。

结果–作为典型的关联材料，铜酸盐不仅有望应用于新一代量子技术，也为多体理论提供了严格的检验平台。我们先前的工作表明，与传统的局域密度近似和 PBE 泛函相比，先进的 SCAN 泛函能够为铜酸盐提供更可靠的电子结构和声子色散 [41–45]。此外，我们近期的工作凸显了 r^2SCAN/SCAN 密度泛函在广泛材料中准确且高效地预测电子-声子耦合的强大可迁移性——从巡游 s/p电子体系到强关联 d电子化合物 [47, 48]。为评估 SCAN 对铜酸盐中电子-声子耦合的预测表现，我们首先计算了本征 $CaCuO_2$ 在高能非磁性（NM）和低能 G-型反铁磁（G-AFM）构型。我们发现，非磁性构型中的耦合极弱（$\lambda \approx 0.1$），而 G-AFM 相则表现出显著更强的电子-声子耦合。非磁性相中的弱电子-声子耦合与早期的局域密度近似计算结果一致 [38], ，而预测 G-AFM 相中存在强电子-声子耦合的结果与近期一项 PBE+U 研究 [49]相符。这些结果表明，SCAN 无需引入任何 Hubbard-U参数，即可为铜酸盐提供更可靠的电子-声子耦合预测。未掺杂情形的详细讨论见补充材料（SM）。

在正文中，我们重点关注更有意思的空穴掺杂 G-反铁磁情形。我们选取 25% 的掺杂水平，这接近实验上相关的过掺杂区 [37]。我们此前的工作表明，在掺杂铜酸盐中，若干低能磁构型与 G-反铁磁构型之间存在激烈竞争 [43]。由于这些态具有相似的电子结构，我们以 G-反铁磁相作为参照，用于评估掺杂区的电子-声子耦合 [43]。掺杂相的电子结构如图 S3 所示。空穴掺杂后，我们的计算准确再现了金属-绝缘体转变：下哈伯德 $3d_{x^2-y^2}$ 带穿过费米能级，呈现出金属行为。

强耦合声子——计算得到的声子色散、声子态密度（PhDOS）和各向同性 Eliashberg 谱函数 α^2F（ω）分别显示在图 1(a) 的左、中、右面板中。声子色散图上的颜色刻度表示模分辨电子-声子耦合强度 $\lambda_{q\nu}$。我们的计算发现了若干强耦合分支，其中最显著的是高频氧伸缩模和圆周模，它们主导了 50–70 meV 范围内的 α^2F（ω）。涉及铜和钙原子运动的较低频率模也有贡献，在 α^2F（ω）中 42 和 38 meV 附近形成较弱的峰 [见图 1(a)]。对所有声子积分后，得到总耦合强度 λ 为∼0.5——约为非磁性构型的五倍，凸显了磁效应对电子-声子耦合的显著增强作用。估算的 $\omega_{\log}$ 约为 56.3 meV，由此预测超导转变温度 T_c 为 8–17 K，具体取决于库仑赝势 μ^* 的取值（0.10 至 0.04）。值得注意的是，在钙铜氧化物$_2$/锶钛氧化物$_3$ 界面观测到的最佳 T_c 约为 40 K [50]。这些结果表明，反铁磁态具有丰富多样的声子模，它们在铜氧化物物理中可发挥不同作用，也凸显了非磁性相与反铁磁相之间显著的定性差异。

图中展示了对电子-声子耦合贡献显著的代表性声子本征模。1 (e)–(h)面板给出了氧衍生分支上 50–70 meV 范围内的采样点 [见图1(a)左侧面板中标出的点]。在高对称点处，Γ_1 和 X_1模分别对应面内全呼吸振动和四极氧振动。更有趣的是，在偏离高对称线的位置，特征向量通常在 ab平面内呈旋转形式。对于

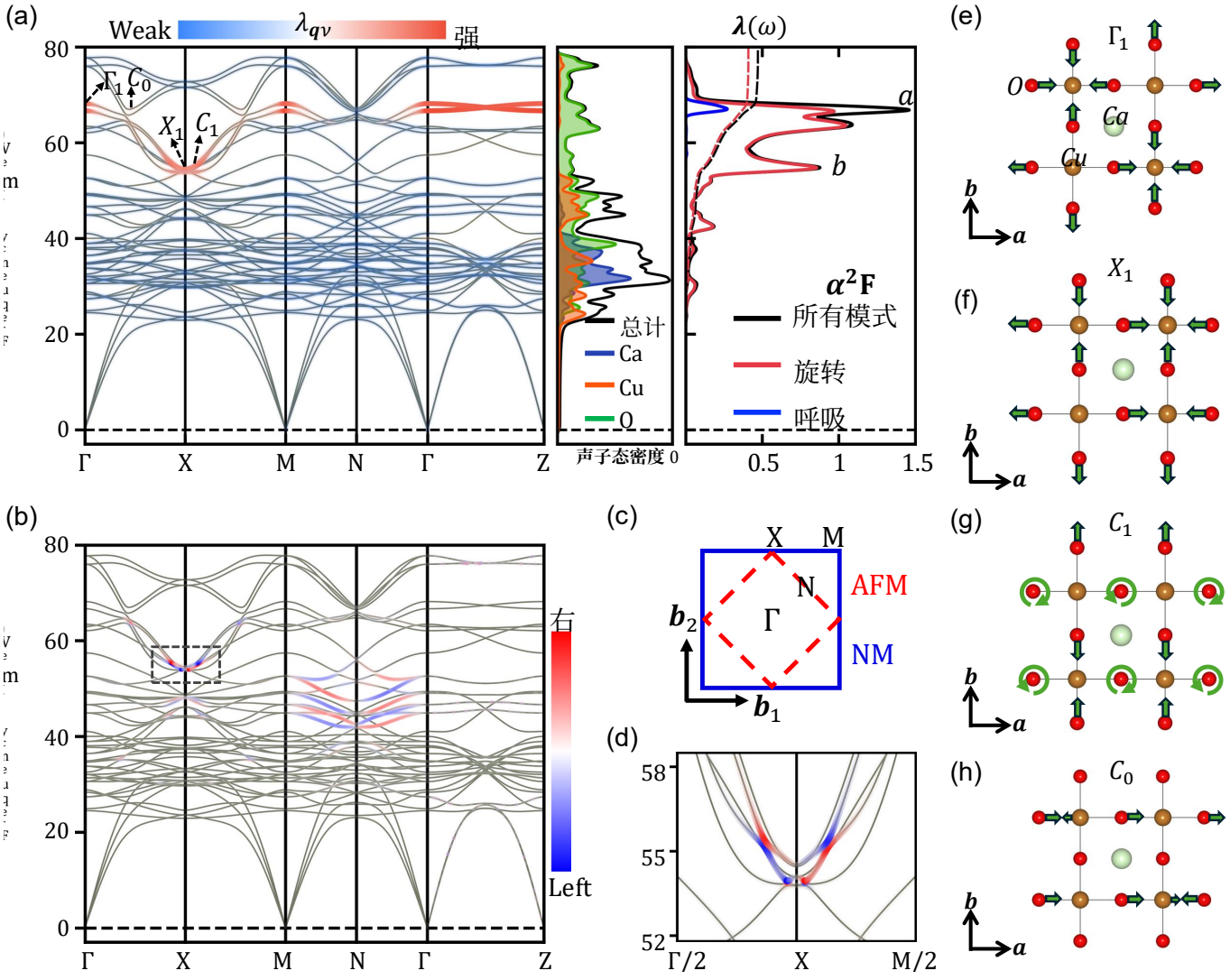


图 1. **计算得到的 G相钙铜氧的声子色散和电子-声子耦合$_2$ （空穴掺杂浓度为 25%）**。(a) 左图：掺杂相沿第一布里渊区高对称线的计算折叠声子色散；标记的颜色强度表示电子-声子耦合强度 $\lambda_{\mathbf{q}\nu}$ 的数值；中图：位点投影声子态密度（PhDOS）。右图：计算得到的 Eliashberg 谱函数 $\alpha^2F(\omega)$（红色实线）和累积电子-声子耦合强度 λ （蓝色虚线）。整个布里渊区采样采用了 $60\times60\times60$ 的 Ak 网格和 $30\times30\times30$ 的 q 网格。(b) 声子色散按四个代表性氧位点沿同一方向振动时圆偏振的 z 分量着色。红色、蓝色和灰色分别表示右旋 $s^{\alpha}_{\mathbf{q},\sigma}>0$、左旋（$s^{\alpha}_{\mathbf{q},\sigma}<0$）和非偏振（$s^{\alpha}_{\mathbf{q},\sigma}=0$）声子模。(c) $k_z=0$ 平面内 NM 和 AFM 布里渊区示意图，并标出了高对称点。(d) (b) 中黑色虚线矩形标记区域的局部放大图，以突出旋转声子模。(e)-(h) (b) 中标记的选定声子模的侧视图，绿色箭头表示原子振动方向。棕色、浅绿色和红色球分别表示铜、钙和氧原子。

例如，(g)面板中的模结合了沿 z 方向的旋转声子与沿 y 方向的半呼吸模。有趣的是，我们还观察到 C_0 分支在 $\mathbf{q}=(0.22,\ 0,\ 0)$处约$\sim$ 65 meV的软化特征，这与实验报道的电荷密度波（电荷密度波）波矢$\mathbf{q}_{\mathrm{CDW}}=(0.25,\ 0,\ 0)$接近。$C_0$ 模主要表现为半呼吸特征，涉及氧和铜的运动，如图1(h)所示。我们在补充材料中讨论其与实验电荷密度波现象学的联系。

为了量化声子模的手性，我们按照早期工作 [51, 52] 提出的形式体系评估声子圆偏振（角动量）。具体而言，我们计算

$$s^{\alpha}_{\mathbf{q},\sigma}=\sum_{i=1}^{N}\mathbf{e}^{\dagger}_{i,\mathbf{q},\sigma}\,S^{\alpha}\,\mathbf{e}_{i,\mathbf{q},\sigma},\qquad(1)$$

其中，$\mathbf{e}_{i,\mathbf{q},\sigma}$ 是波矢$\mathbf{q}$、分支索引 σ 和原子索引 i 对应的声子本征矢，而 $S^{\alpha}(\alpha=x,y,z)$

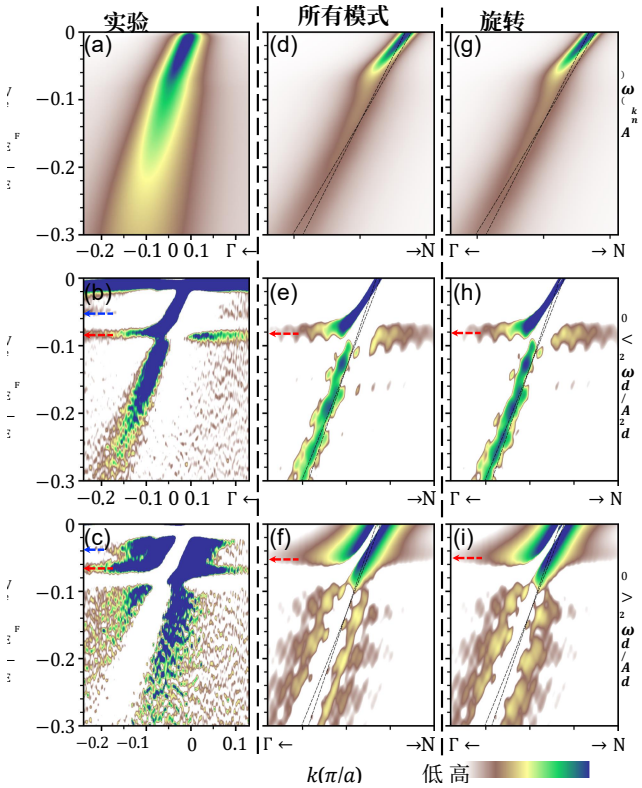


图 2. **实验与计算所得谱函数的比较** (a)-(c) 在 $T = 20K$ 处测得的 Bi2201 角分辨光电子能谱，其空穴掺杂水平相近，约为 20%，取自文献 [37]。红色箭头标示高能隆起和谷，蓝色箭头标示低能隆起和谷。(d) 沿 Γ–N 方向计算得到的谱函数。(e) 展示谱函数对能量的二阶导数，其中显示负值的绝对值；(c) 则展示对应的正值分量。红色箭头标示高能隆起和峰。(g)-(i) 与 (d)-(f) 相同，但仅考虑转动声子贡献。注意，二阶导数中的峰对应于声子谱中的谷，反之亦然。

是笛卡尔基中的自旋-1矩阵。

$s^{\alpha}_{\mathbf{q}\,\sigma}$ $s^{\alpha}_{\mathbf{q}\,\sigma} < 0$ $>$,的符号表

0

示该模式的手性：,( )表示相对于轴 α 的右手（左手）圆偏振声子。

图1（b）展示了氧主导声子模的 z分量圆偏振。我们在高对称线方向识别出三组转动支：两支氧光学模——一支位于∼ 55 meV，沿着 $\Gamma - X - M$；另一支位于 ∼ 45 meV，沿着 $M - N - \Gamma$ [（见图1（c））],；还有一支与涉及钙原子运动的声学模相关的低能支（类似于图 S4 中的掺杂非磁性模）。最重要的几支是非手性的：尽管单个氧原子会顺时针（CW）或逆时针（CCW）旋转，但两种旋转方向的氧原子数量相同，因此净手性为零，如图1（g）所示。在（b）和（d）图中，我们绘制了如下定义的集体手性

它是四个代表性氧位点（O_1、O_3、O_6 和 O_8）的圆偏振投影之和，这四个位点来自反铁磁原胞中的八个氧原子。图 S5 展示了每个氧原子的位点分辨手性，清楚表明这四个氧原子以相同方向旋转，而另外四个则都以相反方向旋转，因此净极化为零。

重要的是，这些强耦合转动模仅在掺杂反铁磁构型中出现。原因在于，在非磁性相中，许多光学支是简并的，其正交归一特征矢量呈线偏振。在反铁磁态中，时间反演对称性被破坏，从而解除这些简并并选出圆偏振本征态，使手性直接体现在计算得到的声子模中。此外，反铁磁相和非磁性相的两个简并横向声学模沿 $\Gamma - Z$方向都具有转动特征，这是由钙原子的振动引起的（见图 S4 和 S5）。然而，这些声学转动支与电子的耦合较弱。

比较图 1(a) 和 (b) 可知，旋转声子也是与电子耦合最强的声子模。按模分解的 $\alpha^2F(\omega$（见图1(a) 右图）表明，氧的旋转振动贡献了总电子-声子耦合的 $\sim 80\%$，对应于 $\lambda_{\text{rotational}} \approx 0.4$，并主导了 a 和 b 处的峰。在 $\alpha^2F(\omega$中，除此之外，若干非转动模也显示出显著的电子-声子耦合，例如氧的全呼吸模和半呼吸模 [（见图 1(a) 右图中的蓝线）]。然而，呼吸模的贡献极小：$\lambda_{\text{breathing}} \approx 0.01$，仅占总电子-声子耦合的 $\sim 2\%$。这对呼吸模在铜酸盐中起主导作用的传统观点提出了挑战。

低能拐点——图 2(d)-(f) 展示了空穴掺杂 $CaCuO_2$ 沿节点方向的计算谱函数。我们发现，在 40–80 meV 能窗 [中（见图 2(d)], ），能带重整化和准粒子展宽十分显著，这与角分辨光电子能谱对铜酸盐节点色散拐点的观测结果高度吻合 [（见图 2(a)] [37]）。对谱函数进行二阶导数分析后，可见近∼ 80 meV 处的高能峰 [（图 2(e)] ）以及近∼ 50meV 处的高能谷特征 [（图 2(f)], ）；这与实验值 ∼ 86 和 ∼ 67 meV 分别接近 [（分别见图 2(b) 和图 2(c)）] [37]。这些结果表明，我们的计算捕捉到了铜酸盐中著名的“峰-谷-峰”结构。

图中模分解谱函数 2(g)– (i) 表明，在我们的计算中，旋转氧声子主导着关键谱特征，这说明实验观测到的 ∼ 40 meV 折点最自然地与旋转支（例如 C_1）相关，而非此前提出的氧键弯曲模 [31]。隆起特征同样主要由旋转模支配，呼吸类模仅有少量贡献 [见图 2(e) 和 (h)]。总体而言，这些结果表明，普遍存在的∼ 70 meV 折点受到旋转

氧模的显著影响，而并非如通常所假设的那样，仅由区中心呼吸模主导。

请注意，我们的预测与实验结果仍存在一些差异。例如，我们的计算显示两侧各有一个峰和一个谷 [见图 2(e) 和图 2(f)], 而铋基铜氧化物的角分辨光电子能谱则报告了双峰和双谷特征 [见图 2(b) 和图 2(c)]。这些差异可能反映了：（i）所研究的系统不同——我们的理论研究无限层 $CaCuO_2$，而测量针对的是铋基铜氧化物；以及（ii）掺杂铜氧化物中存在多种相互竞争的序 [43, 53], , 例如条纹相和电荷密度波（CDW）相，这些都未纳入我们的单相计算。我们还注意到，实验中的第二个峰和谷特征相对较弱，在早期分辨率较低的角分辨光电子能谱研究中并未观察到。

讨论–我们的结果表明，电子与晶格振动之间的相互作用在铜氧化物超导体中起着核心作用。具体而言，我们的计算再现了广为人知的实验特征，例如电子谱中典型的拐点以及峰–谷–峰线形。更重要的是，结果揭示，主导耦合并非来自通常认为的氧呼吸模，而是由 旋转氧声子驱动。这一发现具有更广泛的意义，因为在铜酸盐中观测到的热霍尔效应出现在赝能隙区间，并在赝能隙闭合时消失；有人提出，该效应源于携带角动量的声子 [54]。我们的结果为理解这些声子的性质提供了微观见解：与电子耦合最强的旋转模仅在掺杂磁相中出现，在非磁相中则不存在（见补充材料图 S4(e)）。因此，若将这些旋转声子确认为热霍尔效应的起源 [55, 56]，将有力支持这样一种观点：赝能隙对应于某种短程反铁磁序 [57]。

长期以来，人们一直认为，强电子-声子耦合与强电子关联和/或反铁磁涨落相结合时，可以促进具有 d波配对对称性的高温超导 [58, 59]。尽管近期关于单独的各向同性电子-声子耦合是否能导致 d波配对 [60, 61],仍有争论，文献 [58] 的一项重要结果是，对于高度各向异性的电子-声子耦合，其效应最强；尤其是对于以前向散射为主的耦合——在电子态密度峰值附近可能正是如此。值得注意的是，在这一背景下，近期的密度泛函理论（DFT）+U 计算报告称，在考虑局域磁性时，母体化合物 La_2CuO_4 中存在强电子-声子耦合 [49], 但这并非由旋转声子引起（另见补充材料第 S-III 节）。此外，一项玩具模型研究表明，要解释在铜酸盐中观察到的低能拐点，可能需要电子-声子耦合与电子关联共同发挥交织作用 [62]。

值得注意的是，近期研究表明，键型 Su–Schrieffer–Heeger (SSH) 声子——即调制电子跃迁振幅 t 的声子——能够与强关联协同作用，在以强反铁磁涨落 [57, 59] 为特征的相中产生 d-波超导性。我们的结果为这一新兴图景增添了一个新要素：在铜酸盐以及我们在文献 [48, 63]，中研究的镍酸盐里，强（且不断涨落的）反铁磁序本身会产生增强的电子-声子耦合。值得注意的是，尽管两种材料中主导耦合的声子不同，这一现象仍会发生。在镍酸盐中，主导的电子-声子耦合来自低能 La/Ni 模，它们与具有 d_{z^2} 特征的平坦电子能带 [48, 63]，强烈耦合；而在铜酸盐中，主导耦合的则是旋转氧声子。这表明，尽管不同非常规超导体家族的晶格动力学和电子结构存在显著差异，磁性增强的电子-声子耦合仍可能是一种统一机制。尽管我们重点关注了旋转声子的核心作用，我们的计算也揭示了电荷密度波不稳定性，详见补充材料第 S-VII 节。

结论–我们采用显式考虑磁性的先进密度泛函理论方法，研究了无限层铜酸盐 $CaCuO_2$中的电子-声子耦合（电子-声子耦合）。我们发现，磁性会显著增强铜酸盐中的电子-声子耦合：掺杂后，耦合强度 λ达到约 0.5，几乎是非磁相中的五倍。在铜磁矩存在时得到的 kink 幅度和特征性的峰–谷–峰线形，与实验结果在定量上高度吻合。关键的是，我们表明，这种增强的耦合并非由传统的氧呼吸模主导，而主要源自旋转氧声子，从而修正了关于铜酸盐中电子-声子耦合的传统认识。这些由磁性促成的旋转模将电子结构反常与晶格动力学自然联系起来，并为理解与赝能隙和电荷密度波倾向相关的实验特征提供了微观框架。综上，我们的结果指出，磁性诱导的电子-声子耦合由旋转氧声子介导，是连接铜酸盐中赝能隙、反常热输运和超导的关键且此前未被认识到的因素，并提出了一种可能推广至其他强关联材料的统一机制。

[1] Damascelli, A., Hussain, Z. & Shen, Z.-X. 铜氧化物超导体的角分辨光电子发射研究。 *Rev. Mod. Phys.* **75**，473–541（2003）.

[2] Sobota, J. A.、He, Y. 和 Shen, Z.-X. 量子材料的角分辨光电子发射研究。

Rev. Mod. , ( )。

Phys. **93** 025006 2021

[3] Varma, C. M. 专题综述：温度线性电阻率及相关谜题，包括高温超导。 *Rev. Mod. Phys.* **92**, 031001 (2020)。[4] Norman, M. R. 非常规超导的挑战。 *Science* **332**, 196–200 (2011)。[5] Kivelson, S. A. *et al.* 如何探测高温超导体中的涨落条纹。

Rev. Mod. Phys. , – ( )。

75 1201 1241 2003

[6] Fradkin, E.、Kivelson, S. A. 和 Tranquada, J. M. 专题综述：高温超导体中交织序的理论。 *Rev. Mod. Phys.* **87**, 457–482 (2015)。[7] Dagotto, E. 强关联电子系统中的复杂性。 *Science* **309**, 257–262 (2005)。[8] Emery, V. J. 、 Kivelson, S. A. 和 Tranquada, J. M. 高温超导体中的条纹相。

Proc. Natl. , – ( )。

Acad. Sci. **96** 8814 8817 1999

[9] Hanaguri, T. *et al.* 轻度空穴掺杂 Ca

$^{2-x}$ ^{x} $_{2}$ $_{2}$ *Nature* Na

430 1001 1005 2004

CuO Cl 中的“棋盘格”电子晶体态。 , – ( )。[10] Kohsaka, Y. *et al.* 欠掺杂铜酸盐中具有单向畴的本征键中心电子玻璃。 *Science* **315**, 1380–1385 (2007)。[11] Pan, S. H. *et al.* 高温超导体 Bi

$_{2}$ $_{2}$ $_{2}$ $_{8+x}$ *Nature* Sr

413 282 285 2001

CaCu O 中的微观电子非均匀性。 , – ( )。[12] Jiang, H.-C. 和 Kivelson, S. A. Hubbard模型中的条纹序增强超导。

Proc. Natl. , – ( )。

Acad. Sci. **119** 32 34 2022

[13] Tranquada, J. M.、Sternlieb, B. J.、Axe, J. D.、Nakamura, Y. 和 Uchida, S. 铜氧化物超导体中自旋和空穴条纹关联的证据。 *Nature* **375**, 561 563 1995– ( )。[14] Zheng, B.-X. *et al.* 二维Hubbard模型欠掺杂区域中的条纹序。 *Science* **358**, 1155 1160 2017– ( )。[15] Huang, E. W. *et al.* 铜酸盐高温超导体正常态中涨落条纹的数值证据。 *Science* **358**, 1161–1164 (2017)。[16] Li, J. *et al.* $Bi_2Sr_2LaCuO_{6+\delta}$中多轨道电荷密度波激发及伴随的声子反常。

Proceedings of the National Academy of Sciences **117**, 16219 16225 2020– ( )。[17] Lee, J. *et al.* $Bi_2Sr_2CaCu_2O_{8+\delta}$中电子-晶格相互作用与超导的相互影响。*Nature* **442**, 546 550 2006– ( )。[18] He, Y. *et al.* Bi-2212 中超导性和电子-声子耦合随临界掺杂的快速变化。 *Science* **362**, 62–65 (2018)。[19] Bogdanov, P. V. *et al.* Bi

$_{2}$ $_{2}$ $_{2}$ $_{8}$ *Phys. Rev.* Sr

Lett. **85** 2581 2584 2000

CaCu O 中准粒子色散能量尺度的证据。 , – ( )。[20] Johnson, P. D. *et al.* 铜酸盐 $Bi_2Sr_2CaCu_2O_{8+\delta}$中观测到的质量增强对掺杂和温度的依赖。 *Phys. Rev. Lett.* **87**, 177007 (2001)。[21] Kaminski, A. *et al.* Bi_c $Sr_2CaCu_2O_2$中 $T_{8+\delta}$以下谱线形状和色散的重整化。*Phys. Rev. Lett.* **86**, 1070–1073 (2001)。[22] Lanzara, A. *et al.* 高温超导体中普遍存在强电子-声子耦合的证据。 *Nature* **412**

，510–514（2001年）。

[23] Zhou, X. J. *et al.* 普适节点费米速度。 *Nature* **423** 398 2003 , ()。

[24] Gromko, A. D. *et al.* 超导态下 $Bi_2Sr_2CaCu_2O_{8+\delta}$ 在 $(\pi, 0)$ 处的质量重整化电子激发。 *Phys. Rev. B* **68**, 174520（2003年）。[25] Sato, T. *et al.* 空穴掺杂高温超导体中能带重整化效应的观测。, ()。[26] Kordyuk, A. A. *et al.* 高温铜酸盐沿节点方向的准粒子谱组成。*Phys. Rev. Lett.* **97**, 017002（2006年）。[27] Zhang, W. *et al.* 通过激光角分辨光电子能谱，在 $Bi_2Sr_2CaCu_2O_8$ 超导体中识别出一种新型电子耦合。

Phys. , ()。

Rev. Lett. **100** 107002 2008

[28] He, J. *et al.* 通过激光角分辨光电子发射揭示 $Bi_2Sr_2CaCu_2O_{8+\delta}$ 超导态中两种尖锐模耦合共存及其异常的动量依赖性。

Phys. Rev. Lett. , ()。

111 107005 2013

[29] Kondo, T. *et al.* 通过激光角分辨光电子能谱揭示超导态 $(Bi,Pb)_2(Sr,La)_2CuO_{6+\delta}$ 晶体节点低能特征的反常掺杂变化。

Phys. Rev. , ()。

Lett. **110** 217006 2013

[30] Anzai, H. *et al.* 高温铜酸盐超导体中多个色散拐点的新图景。, ()。[31] Cuk, T. *et al.* Bi B_{1g} $Sr_2Ca_{0.92}Y_{0.08}Cu_2O_{8+\delta}$中 *et al.* 声子与反节点电子态的耦合。*Phys. Rev. Lett.* **93**, 117003（2004年）。[32] Kim, T. K. *et al.* 超导态和正常态下反节点处 $(Pb,Bi)_2Sr_2CaCu_2O_8$ 的质量增强对掺杂的依赖。

Phys. , ()。

Rev. Lett. **91** 167002 2003

[33] Cuk, T. *et al.* Bi B_{1g} $Sr_2Ca_{0.92}Y_{0.08}Cu_2O_{8+\delta}$中 *et al.* 声子与反节点电子态的耦合。*Phys. Rev. Lett.* **93**, 117003（2004年）。[34] Byczuk, K. *et al.* 强关联电子色散中的拐点。 *Nature Physics* **3**, 168–171（2007年）。[35] Dahm, T. *et al.* 高温超导体中自旋涨落介导的配对相互作用强度。 *Nature Physics* **5**, 217–221（2009年）。[36] Eschrig, M. & Norman, M. R. 双层铜酸盐中的色散反常及磁共振的奇对称性。 *Phys. Rev. Lett.* **89**, 277005（2002年）。[37] Yan, H. *et al.* 高温铜氧化物超导体中普遍共存的电子-模耦合。

Proceedings of the National Academy of Sciences **120**, e2219491120（2023年）。[38] Giustino, F., Cohen, M. L. & Louie, S. G. 铜氧化物超导体中光电子发射拐点的声子贡献较小。 *Nature* **452**, 975–978（2008年）。[39] Reznik, D., Sangiovanni, G., Gunnarsson, O. & De- vereaux, T. P. 铜酸盐中的光电子发射拐点与声子。 *Nature* **455**, E6–E7（2008年）。[40] Li, Z., Wu, M., Chan, Y.-H. & Louie, S. G. 揭示铜氧化物超导体光电子发射谱中拐点的起源。 *Phys. Rev. Lett.* **126**, 146401（2021年）。[41] Furness, J. W. *et al.* 对高温铜氧化物超导体掺杂依赖电子结构进行精确的第一性原理处理。 *Communications Physics* **1**

，11（2018）。

[42] Lane, C. *et al.* La
$_2$ $_4$ *ab−initio* *Phys-* CuO的
ical Review B **98**, 125140 2018
反铁磁基态：一种无参数描述。, ( )。[43] Zhang, Y. *et al.* 基于第一性原理研究铜酸盐中的竞争性条纹相与磁性相。 *Proceedings of the National Academy of Sciences* **117** 68 72 2020 , – ( )。

[44] Ning, J. *et al.* 磁矩在$YBa_2Cu_3O_6$晶格动力学中的关键作用。 *Phys. Rev. B* **107**, 045126 2023( )。[45] Ning, J. *et al.* 比较第一性原理密度泛函及其修正项对$YBa_2Cu_3O_6$晶格动力学的描述。 *The Journal of Chemical Physics* **160**, 064106 2024( )。[46] Tranquada, J. M. *et al.* 铜氧化物超导体中条纹产生的量子磁激发。 **429** 534 538 2004 *Nature* , – ( )。[47] Wang, Y. *et al.* 基于先进密度泛函理论的精确电子-声子相互作用。 *PRX Energy* **5** 013002 2026 , ( )。

[48] Zhang, R. *et al.* 无限层镍酸盐中磁性增强的强电子-声子耦合。 *Phys. Rev.* , L ( )。 *B* **112** 241115 2025
[49] Chang, B. K. *et al.* 母体铜酸盐La_2CuO_4中的第一性原理电子-声子相互作用与极化子。*Phys. Rev. Res.* **7**, L012073（2025）。[50] Di Castro, D. *et al.* CaCuOT_c 与$SrTiO_2$ 绝缘氧化物界面处的高温$_3$ 超导。 *Phys. Rev. Lett.* **115**, 147001（2015）。[51] Zhang, L. & Niu, Q. 单层六方晶格高对称点处的手性声子。 *Phys. Rev. Lett.* , ( )。 **115** 115502 2015
[52] Pols, M., Brocks, G., Calero, S. & Tao, S. 二维卤化物钙钛矿中的手性声子。 *Nano Letters* **25**, 10003–10009（2025）。[53] Markiewicz, R. S. & Bansil, A. 将铜酸盐赝能隙解释为带电畴壁构成的反铁磁序的理论。 *Phys. Rev. B* **109**, 045116（2024）。[54] Grissonnanche, G. *et al.* 铜酸盐赝能隙相中的手性声子。 *Nature Physics* **16**, 1108–1111（2020）。[55] Lizaire, M. *et al.* 铜酸盐超导体$Bi_2Sr_{2-x}La_xCuO_{6+\delta}$中赝能隙临界点的输运特征。 *Phys. Rev. B* **104**, 014515（2021）。[56] Sapkota, A. *et al.* 重新考察la_2cuo_4中的晶体对称性与涨落。 *Phys. Rev. B* **104**, 014304（2021）。[57] Cai, X., Li, Z.-X. & Yao, H. 键Su-Schrieffer-Heeger电子-声子耦合诱导的反铁磁性：一项量子蒙特卡罗研究。 *Phys. Rev. Lett.* **127**, 247203（2021）。[58] Kuli´c, M. L. 电子-声子相互作用与强关联的相互作用：实现高温超导的可能途径。 *Physics Reports* **338**, 1–264（2000）。[59] Wang, H.-X., Jiang, Y.-F. & Yao, H. Su-Schrieffer-Heeger-Hubbard模型产生的稳健d波超导：实现高温超导的可能途径。 *Science Bulletin* **70**, 2260–2265（2025）。[60] Schrodi, F., Oppeneer, P. M. & Aperis, A. 仅由各向同性电子-声子相互作用介导的非常规超导。 *Phys. Rev. B* **104**, L140506（2021）。[61] Dee, P. M., Cohen-Stead, B., Johnston, S. & Hirschfeld, P. J. 电荷关联抑制Holstein模型中的非常规配对。 *Phys. Rev. B* **107**, 104503（2023）。

[62]Huang, E. W. *et al.* 从动量分辨电子能量损失谱中提取关联效应：$Bi_{2.1}Sr_{1.9}CaCu_2O_{8+x}$中色散拐点的协同起源。 *Phys. Rev. B* **103**, 035121（2021年）。[63] Zhang, R. *et al.* 未掺杂无限层镍酸盐中竞争性条纹相的出现。 *Phys. Rev. Lett.* **133**, 066401（2024年）。

致谢–我们感谢 Hongtao Yan 博士和 X.J. Zhou 教授就铜酸盐开展的有益讨论。Y.W.、R.Z.、J.P.P. 和 J. S. 感谢美国国家科学基金会 CHE-2533416 号资助的支持。A.R. 感谢美国国家科学基金会 CHE-2533416 号资助对元广义梯度近似工作的支持。对于电子-声子相互作用超导体方面的工作，A.R. 感谢美国能源部科学办公室基础能源科学办公室 DE-SC0026293 号奖项的支持。R.Z. 和 J.S. 还感谢美国化学会石油研究基金的支持，资助编号：PRF#69244-ND10。杜兰大学的工作还得到了美国国家科学基金会资助的高级网络基础设施协调生态系统，以及国家能源研究科学计算中心（NERSC）的支持，使用了 NERSC 的 BES-ERCAP0020494 号和 BESER-CAP0028709 号奖项。东北大学的工作得到美国国家科学基金会 Expand-QISE 奖项 NSF-OMA-2329067 的支持，并受益于东北大学先进科学计算中心、Discovery 集群以及马萨诸塞州技术合作组织 MTC-22032 奖项提供的资源。洛斯阿拉莫斯国家实验室的工作是在美国能源部（DOE）国家核安全管理局的主持下，根据 89233218CNA000001 号合同开展的。该工作得到洛斯阿拉莫斯国家实验室实验室指导研发计划、量子科学中心（美国能源部科学办公室国家量子信息科学研究中心）的支持，部分计算资源由综合纳米技术中心（美国能源部基础能源科学办公室用户设施）与洛斯阿拉莫斯国家实验室机构计算计划合作提供。其他计算在位于劳伦斯伯克利国家实验室、由其运营的美国能源部科学办公室用户设施国家能源研究科学计算中心（NERSC）完成，依据 DE-AC02-05CH11231 号合同，使用 NERSC ERCAP0020494 号奖项。B. B. 感谢 COST行动CA16218 的支持。

作者贡献–R.Z.、J.S. 和 A.B. 设计了本研究。Y.W、M.E. 和 R.Z. 执行了第一性原理计算，并在 C.L.、H.M.、B.B、R.S.M.、J.Z、G. K.、A.B. 和 J.S. 的协助下分析了数据。A.B. 和 J.S. 提供了计算基础设施。R.Z.、Y.W、M.E.、H.M.、C.L.、B.B、R.S.M.、A.B.、G.K. 和 J.S. 在全体作者的意见基础上撰写了稿件。所有作者均参与了稿件的编辑。

补充信息–作者声明不存在竞争性经济利益。