arXiv:2611.28879v1 [cond-mat.supr-con] 21 Nov 2026

$Ba_{1-x}K_xBiO_3$中的电荷涨落热线与超导性

万祥刚[1] 和谢尔盖·Y·萨夫拉索夫[1,2]南京大学固体微结构国家重点实验室、物理学院及先进微结构协同创新中心，中国南京 *210093*[2]加利福尼亚大学戴维斯分校物理系，美国加利福尼亚州戴维斯 *95616*（2026年11月24日）

$Ba_{0.6}K_{0.4}BiO_3$ 中约 30 K 超导性的起源长期以来一直是个谜。隧穿实验给出的电子-玻色子耦合为 $\lambda \approx 0.7$–1.2，而密度泛函计算给出的耦合为 $\lambda \approx 0.3$，且主要集中在约 50–70 毫电子伏的呼吸模上。我们提出，缺失的约 0.7 耦合来自序参量波矢 $\mathbf{Q} = (\pi, \pi, \pi)/a$处的动态电荷涨落；该波矢是电荷歧化母体化合物的序参量波矢。我们引入过阻尼玻色子模型来描述这些涨落。利用密度泛函计算在 $x = 0.4$处得到的导带紧束缚拟合，我们表明，这种玻色子仅在费米面的热点线上强烈散射电子；热点线是围绕 $\langle 111 \rangle$ 方向的小环，在这些位置，$\mathbf{k}$ 和$\mathbf{k}+\mathbf{Q}$ 均位于费米能级。我们推导出闭式自能、准粒子剩余量和能带重构，其中包括影子能带，以及长程关联下的热线赝能隙；并表明，求和规则决定的费米面平均耦合与玻色子频率和关联长度无关。将 LDA声子与频率为 $\omega_m \approx 25$ 毫电子伏、耦合为 $\lambda \approx 0.7$ 的过阻尼模结合后，各向异性伊莱亚什伯格计算在关联长度为两个至三个晶格间距时，再现了 $T_c \approx 25$–30 K 的超导转变温度，并预测热点环上的能隙增强 3–4 倍。关联长度更长时，s波态与局限于热点环、具有变号特征的 T_{2g} 态之间竞争激烈。在扩展 Hubbard 模型的随机相位近似中，玻色子自然出现在 R处的电荷不稳定性附近；但纯电子涨落过弱且作用范围过长。与呼吸模晶格畸变耦合，是增强这些涨落的一种可能途径。

I. 引言

铋酸盐钙钛矿是最早出现的氧化物超导体之一，其转变温度远高于传统金属间化合物。$BaPb_{1-x}Bi_xO_3$ 中的超导性于 1975 [1], 被报道；在立方 $Ba_{1-x}K_xBiO_3$（BKBO）中进行钾掺杂后，$BaBiO_3$ 的 T_c 升高至约 30 K，掺杂范围接近 $x = 0.4$ [2–4]。母体化合物 $BaBiO_3$ 是电荷有序绝缘体，其中 Bi^{3+}/Bi^{5+} 歧化使 BiO_6 八面体的呼吸畸变冻结，并伴随八面体倾斜 [5]。这种歧化促成了早期关于铋酸盐 [6]的负-U 图像和局域对图像。掺杂抑制了长程电荷有序，随之出现的立方金属没有磁矩，具有一个由 Bi-6s/O-2p 成分构成的导带，以及三维费米面。

隧穿谱学提供了首个有力证据，表明 BKBO 中的配对由声子能量范围内的玻色子介导。点接触结在能隙以上揭示了可重复的结构，而 McMillan–Rowell 反演得到了一个类似于声子态密度 [7]的 Eliashberg 函数 $\alpha^2F(\omega)$。这些特征的可重复性曾受到质疑 [8], ，但后来的强磁场测量分辨出三个稳定峰，并恢复了 15–65 毫电子伏范围内的谱权重，这与非弹性中子散射所观测到的声子能带相对应 [9, 10]。已有研究报告了显著的氧同位素效应 $\alpha \approx 0.4$ [11], ，这与早期测量发现的较小效应形成对比 [12]。最近，角分辨光电子能谱发现各向同性的能隙，其 $2\Delta/k_BT_c = 3.51$ ，以及接近 50 毫电子伏的色散反常；据此提取出电子-声子耦合 $\lambda \approx 1.3$ [13]。

隧穿谱是对理论最直接的约束。McMillan–Rowell 反演给出 $\lambda \approx 1.2$ [7]和 $\lambda = 0.7$–1.0，且 $\mu^* = 0$–0.07，重现了 $T_c \approx$31 K [9]。将这些数值代入 Allen–Dynes 公式 [14] ，得到对数平均频率 $\omega_{\log} \approx$ 30–40 毫电子伏，低于呼吸模能量；测得的谱显示权重分布在 10–70 毫电子伏范围内，而不是集中于最高频的氧模。因此，我们将 $\lambda \approx 1$ 作为目标。光学数据则更难协调：对红外电导率 [15] 的分析表明，正常态下 $\lambda \leq 0.2$ [16, 17]，而超导态反射率则要求 $\lambda \approx$0.7 [17]。

第一性原理计算尚未能重现这一谱。在局域密度近似（LDA）下，导带描述良好 [18], ，但电子-声子耦合较弱。早期估算范围从 LDA 中的 $\lambda \approx 0.4$ [19] ，到针对 $x < 0.3$ [20]的紧束缚模型中的 $\lambda > 1$；Meregalli 和 Savrasov 的完整线性响应计算则得出 $Ba_{0.6}K_{0.4}BiO_3$ [21] 的总 $\lambda = 0.34$ 。在该计算中，耦合集中在 65–75 毫电子伏的键伸缩支和呼吸支上；朝向布里渊区边界点 R 和 M时，该支仅软化约 10%，其模耦合在 $\lambda \approx 0.3$处达到峰值。因此，局域密度近似低估了实测耦合，约相差三倍，未能解释 $\lambda \approx 0.7$ 。在这些频率下，McMillan 公式给出的临界温度 T_c 仅为

几开尔文：$\mu^* = 0.1$ 时约为 1 开尔文，$\mu^* = 0.05$时约为 4 开尔文。

有两条研究思路试图弥合这一差距。第一条强调非局域关联。杂化泛函计算重现了 $BaBiO_3$ 的呼吸畸变和能隙，并预测掺杂时会出现极化子空穴俘获 [22]。Yin、Kutepov 和 Kotliar 指出，在金属-绝缘体转变附近，局域密度近似会系统性地低估电子-声子耦合，并发现呼吸模耦合显著增强 GW [23]。Li等人利用微扰理论将这一研究扩展至所有波矢 GW ，并重现了 T_c 及其对掺杂的依赖性 [24]。这些计算对现有声子分支的耦合进行重新标度，但基本保留了局域密度近似下的声子谱。因此，它们将增强的耦合集中在 50–75 毫电子伏范围内，而隧穿实验显示，耦合分布在较宽的低频范围内。第二条思路诉诸晶格极化子，认为它们会使能带变窄，并提高有效态密度和耦合强度 [25–28]。然而，光电子发射实验发现，能带宽度比局域密度近似预测的更宽，而非更窄 [13], ；隧穿和光电子发射实验均显示完整的 BCS 型能隙，没有预形成对的迹象。

这些方法都未能找出 LDA 数值之外缺失的约 0.7 的耦合。本文提出，缺失的因素是母体化合物序参量波矢处的动态电荷密度涨落，$\mathbf{Q} = (\pi, \pi, \pi)/a$。接近电荷不稳定性时，屏蔽相互作用会在$\mathbf{Q}$处形成强烈峰值，并因粒子-空穴对而过阻尼。这种情况已在非公度电荷序 [29, 30]以及自旋-费米子模型中的反铁磁涨落 [31, 32]研究中得到广泛探讨。在三维 BKBO 中，散射集中在费米面上的线段处，这些线段上的$\mathbf{k}$和$\mathbf{k} + \mathbf{Q}$均位于费米能级。在这些热点线上，低能耦合很强，而费米面平均则仍受简单求和规则的约束。

这些思想在铜氧化物领域有着悠久的历史。在近反铁磁费米液体图像中，Millis、Monien 和 Pines 引入了一种现象学的动力学易感性，其峰值位于 $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$，并受到粒子-空穴激发的过阻尼 [31]。Monthoux、Balatsky 和 Pines 将其用作配对相互作用，得到了 d 波超导性，其 T_c 处于观测范围内 [33, 34], ；这一工作建立在更早的发现之上：反铁磁涨落有利于 Hubbard 模型中的 d 波配对 [35]；自旋涨落机制综述见参考文献 [36]。Hlubina 和 Rice 指出，此类涨落引起的散射集中在热点处，此时 $\mathbf{k}$ 和 $\mathbf{k} + \mathbf{Q}$ 均位于费米面上，而冷区则为输运提供短路通道 [37]。在接近有序相时，热点处的前驱效应会打开赝能隙；当关联长度超过由费米速度和耦合所决定的某一尺度时，便会出现这种现象 [38, 39]。Abanov、Chubukov 和 Schmalian 将自旋-费米子模型发展成对量子临界正常态的定量理论 [32]，并描述了不稳定性附近的配对 [40],；Metlitski 和 Sachdev 通过重整化群证明，热点处的费米液体行为会发生崩溃 [41]。

Castellani、Di Castro 和 Grilli 提出了电荷通道的对应理论。他们指出，非公度电荷密度波不稳定性附近的有效相互作用具有奇异性且呈过阻尼，从而产生反常的准粒子散射 [29]和强配对 [30]。此后，共振X射线散射在铜氧化物中发现了动态电荷密度涨落，其特征能量为数毫电子伏，且在很宽的掺杂范围内均存在 [42], ；这些涨落也已用同一框架进行分析 [43]。动量选择性耦合也出现在其他情形中：关联效应可能促使铜氧化物中的电子-声子相互作用发生前向散射 [44], ，而连接嵌套费米面口袋的自旋涨落则构成铁基 pnictide 中 $s_\pm$ 配对情景的基础 [45]。上述理论都针对接近磁序或非公度电荷序的准二维材料。BKBO 提供了一个更简单的体系：三维单能带、满足 $2\mathbf{Q}a$ 为倒格矢的公度序参量波矢，以及一种有利于$\mathbf{k}$ 和$\mathbf{k} + \mathbf{Q}$上能隙同号的吸引性电荷通道相互作用。在三维中，热点会变为热点线。

本文针对这些动态电荷涨落引入了一种过阻尼玻色子模型，并利用从密度泛函计算得到的 BKBO 导带紧束缚拟合，建立了电子与其耦合的唯象理论。第二节介绍模型相互作用，并计算正常态自能、准粒子重整化和能带结构。第三节利用该玻色子以及较弱的背景声子耦合求解各向异性 Eliashberg 方程，并将结果与隧穿$\alpha^2F(\omega)$和 T_c进行比较。第四节利用扩展 Hubbard 模型的随机相位近似，探讨这种玻色子是否能够从微观机制产生，并讨论呼吸模电子-声子耦合作为一种可能的附加因素。第五节给出结论。

II. 正常态

A. 模型

我们用简单立方晶格上的单带 $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ 描述 BKBO 的导电电子，该能带采用紧束缚拟合得到；拟合包含 14 组跃迁参数，并以局域密度近似（LDA）下密度泛函计算得到的能带为基础（附录 A）。所有结果均针对每个铋位点含有 $n = 0.6$ 个电子的情况，对应于 $x = 0.4$；相对于半填充，化学势为 $\mu = -0.69$ 电子伏特，单位自旋态密度为 $N_\sigma(0) = 0.21$ 电子伏特 $^{-1}$。我们记作 $\xi_{\mathbf{k}} = \varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu$。图 1 显示了未掺杂化合物的 LDA 能带结构和费米面。在填充数为 $n = 0.6$ 时，费米面是一个单一的闭合口袋

围绕 Γ，且不与布里渊区边界相接；它显示于图 2 中。

电子与在母体化合物序参量波矢处达到峰值的电荷涨落耦合，$\mathbf{Q} = (\pi,\pi,\pi)/a$，即 R 点。我们采用弛豫形式的推迟有效相互作用，该形式定义了本文始终使用的过阻尼玻色子模型：

$$W(\mathbf{q},\omega) = -\frac{V(\mathbf{q})}{\omega_m - i\omega}, \qquad W(\mathbf{q},i\nu_l) = -\frac{V(\mathbf{q})}{\omega_m + |\nu_l|}, \tag{1}$$

其中 $V(\mathbf{q}) \geq 0$ 在 $\mathbf{Q}$ 处达到峰值，ω_m 是过阻尼模的特征频率。负号使该相互作用在电荷通道中呈吸引性，这对于下文单圈自能的因果性是必要的。相应的玻色子谱函数为

$$B(\mathbf{q},\omega) = -\frac{1}{\pi}\,\mathrm{Im}\,W(\mathbf{q},\omega) = \frac{V(\mathbf{q})}{\pi}\,\frac{\omega}{\omega^2+\omega_m^2}, \tag{2}$$

该谱函数较宽，在 $\omega = \omega_m$ 处达到峰值，并按 $1/\omega$ 衰减。方程 (1) 正是电荷不稳定性附近随机相位近似所得的形式；此时，$\mathbf{Q}$ 处裸易感性的实部几乎与频率无关，而其虚部因朗道阻尼而随 ω 线性变化（第四节）。这与 Millis、Monien 和 Pines 的唯象自旋易感性相似 [31]。

我们用其零频率处的布里渊区平均来表征相互作用强度，

$$\bar{U} = \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3}\,|W(\mathbf{q},0)| = \frac{1}{\omega_m}\int \frac{d^3q}{(2\pi)^3}\,V(\mathbf{q}), \tag{3}$$

其中，此处及下文均令晶格常数为 $a = 1$，因此积分遍历体积为 $(2\pi)^3$ 的布里渊区，而 $\bar{U}$ 是每个晶胞的静态相互作用的区平均值。到单圈阶，电子自能为

$$\Sigma(\mathbf{k},i\omega_n) = -\,T\sum_{n'}\int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \times W(\mathbf{q},i\omega_n - i\omega_{n'})\,G_0(\mathbf{k}+\mathbf{q},i\omega_{n'}), \tag{4}$$

其中 $G_0(\mathbf{k}\ i\omega_n) = 1/(i\omega_n - \xi_{\mathbf{k}})$。我们先令 $V(\mathbf{q})$ 在$\mathbf{Q}$处为一个 δ函数，由此得到闭式结果；随后再将其展宽为有限宽度 Δq。

B. Q 处尖锐峰的自能

对于 $V(\mathbf{q}) = (2\pi)^3\bar{U}\omega_m\delta(\mathbf{q}-\mathbf{Q})$，式（4）中的动量积分收缩为单点，$\mathbf{k}$ 处的电子只能散射到 $\mathbf{k}+\mathbf{Q}$。由于 $2\mathbf{Q}$ 是一个倒格矢，$\mathbf{k}$ 和 $\mathbf{k}$+$\mathbf{Q}$构成一个闭合对。进行频率求和并在 $T = 0$ 处延拓到实频率后，可得到闭合形式的推迟自能，

$$\mathrm{Re}\,\Sigma(\mathbf{k},\omega) = \bar{U}\omega_m\,\frac{\dfrac{u}{\pi}\ln\dfrac{|u|}{\omega_m} - \dfrac{\omega_m}{2}\,\mathrm{sgn}\,\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}}{u^2+\omega_m^2}, \tag{5}$$

$$\mathrm{Im}\,\Sigma(\mathbf{k},\omega) = -\bar{U}\omega_m\,\frac{|u|}{u^2+\omega_m^2}\,\theta(\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}\,u)\,, \tag{6}$$

其中 $u = \omega - \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}$ 和 ω 均以 μ 为基准测量。$\mathbf{k}$ 处的自能只通过其配对态的能量 $\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}$ 依赖于$\mathbf{k}$，由此得到四个普遍性质。

首先，阻尼仅在 $\omega = \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}$ 处开始出现，即在费米能级的一侧，此时配对态对于粒子为空态，或对于空穴为满态。$\mathrm{Im}\,\Sigma$ 随后线性增大，在 $|u| = \omega_m$ 处达到 $-U/2$，并按 $1/|u|$ 衰减。其次，$\mathrm{Re}\,\Sigma$ 在相同能量处出现对数折点，这是因果性所要求的：根据克拉默斯–克罗尼希关系，$\mathrm{Im}\,\Sigma$ 的突变起始会在 $|\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}| \gg \omega_m$ 处开始出现，即在费米能级的一侧，此时配对态对于粒子为空态，或对于空穴为满态。$\mathrm{Im}\,\Sigma$ 随后线性增大，在 $|u| = \omega_m$ 处达到 $-U/2$，并按 $1/|u|$ 衰减。其次，$\mathrm{Re}\,\Sigma$ 在相同能量处出现对数折点，这是因果性所要求的：根据克拉默斯–克罗尼希关系，$\mathrm{Im}\,\Sigma$ 的突变起始会在 $\omega - \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} = 0$ 处开始出现，即在费米能级的一侧，此时配对态对于粒子为空态，或对于空穴为满态。$\mathrm{Im}\,\Sigma$ 随后线性增大，在 $|u| = \omega_m$ 处达到 $-U/2$，并按 $1/|u|$ 衰减。其次，$\mathrm{Re}\,\Sigma$ 在相同能量处出现对数折点，这是因果性所要求的：根据克拉默斯–克罗尼希关系，$\mathrm{Im}\,\Sigma$ 的突变起始会在 $\omega - \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} = 0$ 处开始出现，即在费米能级的一侧，此时配对态对于粒子为空态，或对于空穴为满态。$\mathrm{Im}\,\Sigma$ 随后线性增大，在 $|u| = \omega_m$ 处达到 $-U/2$，并按 $1/|u|$ 衰减。其次，$\mathrm{Re}\,\Sigma$ 在相同能量处出现对数折点，这是因果性所要求的：根据克拉默斯–克罗尼希关系，$\mathrm{Im}\,\Sigma$ 的突变起始会在 $\Delta_{\mathrm{eff}}^2/\omega - \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} = 0$ 处开始出现，即在费米能级的一侧，此时配对态对于粒子为空态，或对于空穴为满态。$\mathrm{Im}\,\Sigma$ 随后线性增大，在 $|u| = \omega_m$ 处达到 $-U/2$，并按 $1/|u|$ 衰减。其次，$\mathrm{Re}\,\Sigma$ 在相同能量处出现对数折点，这是因果性所要求的：根据克拉默斯–克罗尼希关系，$\mathrm{Im}\,\Sigma$ 的突变起始会在 $\Delta_{\mathrm{eff}}^2 = \bar{U}\omega_m/\pi$ 处开始出现，即在费米能级的一侧，此时配对态对于粒子为空态，或对于空穴为满态。$\mathrm{Im}\,\Sigma$ 随后线性增大，在 $|u| = \omega_m$ 处达到 $-U/2$，并按 $1/|u|$ 衰减。其次，$\mathrm{Re}\,\Sigma$ 在相同能量处出现对数折点，这是因果性所要求的：根据克拉默斯–克罗尼希关系，$\mathrm{Im}\,\Sigma$ 的突变起始会在 $\Sigma \approx u\ln|u|$ 中产生一个与 $u\ln|u|$ 成正比的项。第三，对于方程（）而言，它化为 Re（）与（）ln（），即能带与其经$\mathbf{Q}$平移的副本通过一个弱的、具有对数调制的能隙耦合时的自能；这会驱动第 II E 节中的能带重构。第四，费米能级处的准粒子质量重整化为

$$\frac{m^*_{\mathbf{k}}}{m} - 1 = -\left.\frac{\partial\,\mathrm{Re}\,\Sigma}{\partial\omega}\right|_{\omega=0} = \frac{\bar{U}}{\pi\omega_m}\,F\!\left(\frac{|\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}|}{\omega_m}\right), \qquad F(x) = \frac{(x^2-1)\ln x - (x^2+1) + \pi x}{(x^2+1)^2}. \tag{7}$$

函数 $F(x)$ 对所有 x 都为正，因此费米面上的质量处处增强。对于 $x \gg 1$,$F \approx (\ln x - 1)/x^2$，增强较弱。对于$x \ll 1$, $F \approx \ln(1/x) - 1$，当 $\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} \to 0$ 时会出现对数发散。

当 $\xi_{\mathbf{k}}$ 和 $\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}$ 同时为零时，这些点构成热点线。对于我们在 $n = 0.6$ 处的能带，它们是费米面上的八个小闭合环，每个环都距某个 $\langle 111\rangle$ 方向约12°；其中一条经过 $\mathbf{k} \approx (0.43, 0.43, 0.65)\pi/a$。每个环内 $\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} < 0$，而在费米面的其余部分 $\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} > 0$，沿着 $\langle 100\rangle$达到 2.9 电子伏特。图2显示了费米面上的热点环、连接一对伙伴环的矢量 $\mathbf{Q}$，以及沿环的费米速度。

C. 代表性自能

图3展示了 δ-函数结果，即方程（5）–（6），在三个费米面点处的结果；其中 $U = 0.5$ 电子伏特，ω_m 为25 毫电子伏，这是第三节中根据隧穿谱采用的玻色子频率。每条曲线形状相同，只是平移到了配对能量 $\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}$。在热点线附近，阻尼起始和 $\mathrm{Re}\,\Sigma$ 的折点都位于费米能级，因此该处的准粒子受到强烈重整化。远离热点线时，这两个特征都会移至有限能量处，而费米能级处的自能较弱且近乎恒定。对于远离热点线的点，例如 $\langle 100\rangle$

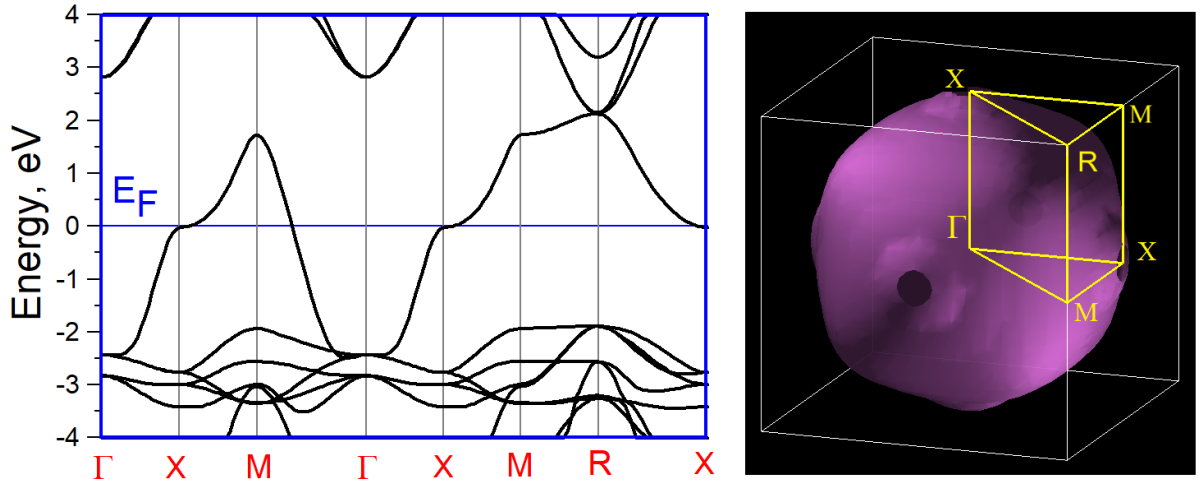

图 1. 左：立方 $BaBiO_3$ 沿 Γ–X–M–Γ–X–M–R–X方向的局域密度近似能带结构，能量以未掺杂化合物的费米能级 E_F 为参照（$n = 1$）。穿过 E_F的单带具有铋-6s/氧-2p 反键特征，是附录 A 中拟合的能带。右：未掺杂化合物在简单立方布里渊区内的费米面，高对称点 $\Gamma = (0, 0, 0)$、 $X = (\pi, 0, 0)$、 $M = (\pi, \pi, 0)$ 和 $R = (\pi, \pi, \pi)$ 的坐标单位为 $1/a$；路径的第二部分经过等价点 $X = (0, 0, \pi)$ 和 $M = (\pi, 0, \pi)$。布里渊区角点 R 是电荷有序母体化合物的序参量波矢 Q。

以及 $\langle 110 \rangle$ 方向，在这些方向上 $\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}$ 为 1.1–2.9 电子伏特，相关特征完全处于低能窗口之外。由于在这种近似下，每个**k** 都会散射至单个配对态，因此图3中阈值起始以及 $\mathrm{Im}\,\Sigma$ 的线性增长并不具有费米液体形式；我们将在下文说明，有限的动量宽度会使 $|\omega| \lesssim \omega_m$处的 $\mathrm{Im}\,\Sigma \propto \omega^2$ 恢复。

D. 有限动量宽度

真实的电荷涨落具有有限的关联长度ξ_c，因此 $V(\mathbf{q})$ 会在 **Q**附近展宽，宽度为 $\Delta q = 1/\xi_c$。有两种常用形式。奥恩斯坦–泽尼克形式 [46],$V(\mathbf{q}) \propto [\xi_c^{-2} + (\mathbf{q} - \mathbf{Q})^2]^{-1}$，是 Millis、Monien 和 Pines [31] 所采用的形式，也是随机相位近似在连续不稳定性附近所产生的形式（第四节）。在三维中，其尾部衰减缓慢，动量积分必须在布里渊区边界处截断。平方洛伦兹函数，

$$V(\mathbf{q}) = (2\pi)^3 \bar{U} \omega_m \frac{\Delta q}{\pi^2 \left[(\mathbf{q} - \mathbf{Q})^2 + \Delta q^2\right]^2}, \qquad (8)$$

是衰减为e^{-r/ξ_c}的关联函数的傅里叶变换。它在三维中经过归一化，并在 $\Delta q \to 0$时趋于上述 δ函数。我们还考虑将式 (8) 在 $|\mathbf{q} - \mathbf{Q}| = 5\Delta q$ 处截断，并重新归一化，使其具有相同的 $\bar{U}$，以检验尾部的作用。

将 $\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} \approx \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} + \mathbf{v}^{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} \cdot (\mathbf{q} - \mathbf{Q})$ 线性化，并沿垂直于配对态速度的两个方向对式 (8) 积分，恰好得到配对态能量的洛伦兹分布，其宽度为 $\Gamma_{\mathbf{k}} = |\mathbf{v}_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}| \Delta q$。对该分布取式 (7) 的平均值，可得热点线上且无需进一步近似，

$$\left.\frac{m^*}{m} - 1\right|_{\text{hot line}} = \frac{\bar{U}}{\pi \omega_m} \frac{x - 1 - \ln x}{(x-1)^2}, \qquad x = \frac{\Gamma}{\omega_m}. \quad (9)$$

对于 $\Gamma \ll \omega_m$，这化为 $(U/\pi\omega_m)\,[\ln(\omega_m/\Gamma) - 1]$，即 δ函数结果，只是将 $|\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}|$ 替换为 Γ：动量展宽截断了对数发散。对于 $\Gamma \gg \omega_m$，它变为 $U/(\pi\Gamma)$，与 ω_m无关。热点线上的费米速度为 $|\mathbf{v}_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}| \approx 1.8$ 电子伏特·a，因此除非 $\xi_c \gtrsim 70a$，Γ会超过 $\omega_m \approx 25$ 毫电子伏。因而，对于任何现实的关联长度，热点线增强均由 $U/(\pi v_F \Delta q)$ 决定。

动量展宽还恢复了阻尼的费米液体行为。在 δ函数极限下，式（6）给出：远离热点线时，在 $|\omega| = |\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}|$ 处存在阈值；而在热点线上，$\mathrm{Im}\,\Sigma \approx -U|\omega|/\omega_m$，且$\mathrm{Re}\,\Sigma \propto \omega \ln|\omega|$，呈现边缘费米液体形式。二者都反映了相空间的缺失：一个电子只能衰变为一种末态。对配对态能量的洛伦兹分布取式（6）的平均，在热点线上且对于 $|\omega| \ll \Gamma$，

$$\mathrm{Im}\,\Sigma_{\text{hot}}(\omega) \simeq -\frac{\lambda_{\text{hot}}\,\omega_m}{2} \ln\left(1 + \frac{\omega^2}{\omega_m^2}\right), \qquad (10)$$

，其中 $\lambda_{\text{hot}} = U/(\pi\Gamma)$。对于 $|\omega| \ll \omega_m$，这是费米液体形式，$\mathrm{Im}\,\Sigma \approx -\lambda_{\text{hot}}\omega^2/(2\omega_m)$；而对于 $\omega_m \ll |\omega| \ll \Gamma$阻尼仅呈对数增长。费米面平均具有相同的结构，因为 $\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}$ 在零附近的分布是平滑的。因此，热点区域表现为费米液体，其相干尺度较小，由 $\omega_m \approx 25$ 毫电子伏决定；这意味着电阻率中的 T^2 贡献仅在低于约 ω_m/k_B 时出现，而在此之上则交叉为较弱的温度依赖性。相干

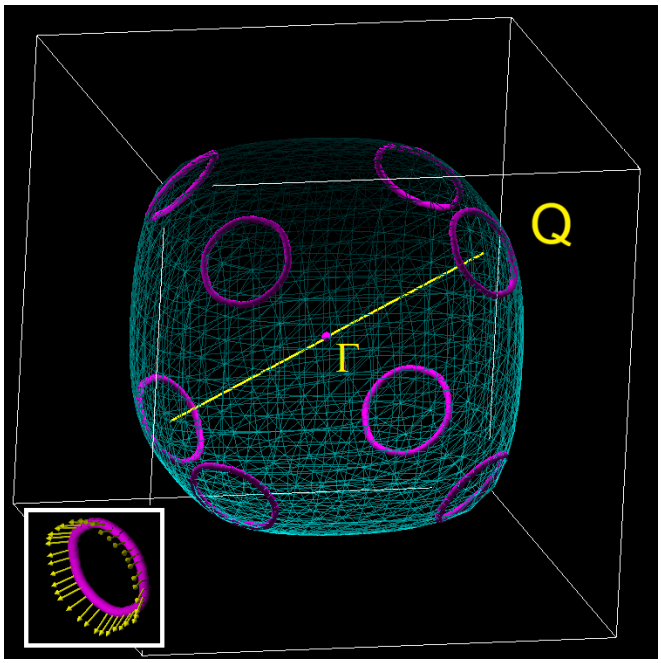

图 2. $Ba_{0.6}K_{0.4}BiO_3$ ($n = 0.6$)费米面上的热点线。青色网格：由密度泛函能带的紧束缚拟合得到的费米面，位于简单立方布里渊区（白色立方体）内。洋红色：热点线，即围绕 ⟨111⟩方向的八个小环；沿这些方向，费米面与其经过$\mathbf{Q}$平移后的自身副本相交，因此$\xi_{\mathbf{k}} = \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} = 0$。黄色：矢量$\mathbf{Q} = (\pi, \pi, \pi)/a$，穿过 Γ绘制；该矢量将每个环映射到围绕相反 ⟨111⟩ 方向的环上。插图：一个热点环，以及其上各点处的费米速度$\mathbf{v}_{\mathbf{k}}$（黄色箭头）。

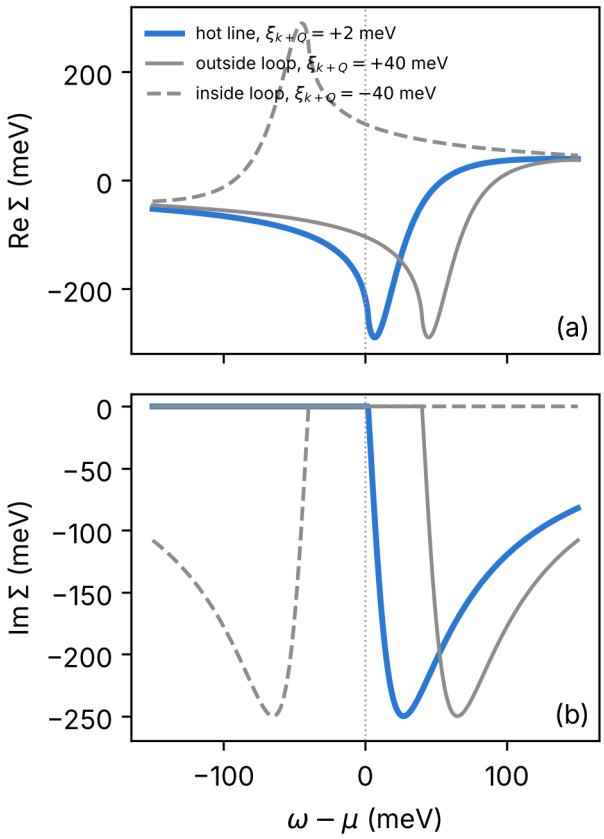

图 3. 在 δ函数近似下，根据方程 (5)–(6)，$\bar{U} = 0.5$ 电子伏特和 $\omega_m = 25$ 毫电子伏时三个费米面点处的推迟自能：靠近热点线处（$\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} = +2$ 毫电子伏）、热点环外部（+40 毫电子伏）和热点环内部（−40 毫电子伏）。(a) 实部；(b) 虚部。虚线表示费米能级。在此近似下，每个$\mathbf{k}$都会散射到一个单个伴随态，因此阈值起始和 $\mathrm{Im}\,\Sigma$ 的线性上升不具有费米液体形式；玻色子的有限动量宽度会恢复 $\mathrm{Im}\,\Sigma \propto \omega^2$，见方程 (10)。

尺度会随着电荷不稳定性的临近而缩小；在临界点本身，玻色子是一个朗道阻尼模，其动力学指数为 $z = 2$，这意味着其特征频率随关联长度按 $\omega_m \propto \xi_c^{-2}$ 标度（第四节 C），而在三维中，它在热点线上给出赫兹–米利斯形式 [47, 48] $\mathrm{Im}\,\Sigma \propto |\omega|^{3/2}$。

费米面平均的表现则截然不同。将式（7）中的核视为 $\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}$的函数时，其积分 $\int d\xi\,(m^*/m - 1)/\bar{U} = 1$为固定值，与$\omega_m$无关。对费米面进行平均，相当于按照配对态能量的分布对这个峰进行采样，由此得到求和规则

$$\left\langle \frac{m^*}{m} - 1 \right\rangle_{\mathrm{FS}} \simeq \bar{U}\, P_{\mathbf{Q}}(0), \qquad P_{\mathbf{Q}}(0) = \frac{\sum_{\mathbf{k}} \delta(\xi_{\mathbf{k}})\, \delta(\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}})}{\sum_{\mathbf{k}} \delta(\xi_{\mathbf{k}})}. \tag{11}$$

嵌套密度 $P_{\mathbf{Q}}(0)$表示费米面中每单位能量所占的比例，其中配对态也位于费米能级。对于 $n = 0.6$处的能带，蒙特卡洛采样得到 $P_{\mathbf{Q}}(0) \approx 0.22$ 电子伏特$^{-1}$，与第四节中的$J_{\mathbf{Q}}(0,0)/N_\sigma(0)$一致。只要 ω_m 和 Γ 相对于以下尺度足够小，方程（11）就成立：

$\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}$ 的分布变化尺度。由于核衰减仅与 $\ln|\xi|/\xi^2$ 成正比，它会采样能量相差数个十分之一电子伏特的配对态；在这些能量处，其分布略大于 $\xi = 0$处的分布。因此，下面给出的完整数值平均值¯约比 $UP_{\mathbf{Q}}(0)$大 25%。

我们通过对式（4）在整个费米面上进行数值积分，并采用式（8）的截断形式且不对能带进行线性化，验证了这些结果（表 I）。对于 U 的每电子伏特，$m^*/m - 1$ 的费米面平均值仅从 0.27 降至 0.20，而 Δq 从 0.001 增加到 0.05（$2\pi/a$），这与式（11）接近。在相同范围内，热点线值从 12.8 降至 0.69，而费米面上的中位数从 0.018 升至 0.09。截断尾部使平均值的变化小于¯20%。因此，总耦合由 U 和能带决定，而 Δq 只控制其分布方式：窄峰将其集中在强而狭窄的热带中，宽峰则使其较弱地分散在整个费米面上。

表 I. 对于 $\omega_m = 25$ 毫电子伏和 $\bar{U} = 1$ 电子伏，利用式 (8) 的截断形式，从完整费米面积分得到的 R 点玻色子的准粒子剩余量。Z 在热点线 $= 1/(1+\lambda_{\rm hot})$ 处；Z 在费米面上取平均 $= \langle m^*/m\rangle^{-1}$。$\Gamma = v_F\Delta q$ 在热点线上。当满足式 (14) 时，热点线上会打开赝能隙；对于 $\bar{U} = 0.3$ 电子伏（$\Delta_{\rm eff} \approx 54$ 毫电子伏），这要求 $\Gamma \lesssim 54$ 毫电子伏。

峰宽 Δq $(2\pi/a)$	关联长度 ξ_c/a	展宽 Γ（毫电子伏）	Z at 热点线	Z 平均 在费米面上	赝能隙位于 $\bar{U}=0.3$ 电子伏特
0（δ函数）	∞	0	$\to 0$（对数）	0.78	yes
0.001	160	11	0.07	0.79	yes
0.003	53	34	0.13	0.81	yes
0.01	16	115	0.28	0.82	no
0.03	5.3	344	0.49	0.83	no
0.05	3.2	573	0.59	0.84	no

表 I 区分了峰宽的两种影响。随着 Δq 增大，热点线增强按式（9）下降了一个数量级以上，而第 II E 节的赝能隙仅限于前几行，此时关联长度超过约 35 个晶格间距。在相同范围内，费米面平均值仅变化约 30%，且平均剩余权重 Z 保持在 0.78 到 0.84 之间，适用于 $U = 1$ 电子伏特。这种微弱的依赖性正是求和规则（11）发挥作用的体现：峰变窄会使热点线的权重更大但范围更窄，峰变宽则使更宽的区域具有中等权重，而二者的乘积由 U 和 $P_{\mathbf{Q}}(0)$ 固定。Δq 较大时的剩余下降，源于展宽后的峰对零点以外的 $\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}$ 分布进行采样，此处 $P_{\mathbf{Q}}$ 较小。因此，对整个费米面进行平均的量，如比热系数，可以约束 U 但不能约束ξ_c；而对热点线进行动量分辨探测则是确定 ξ_c所必需的。

E. 能带结构：影子能带与赝能隙

忽略阻尼后，准粒子能带是相互作用格林函数的极点，

$$E = \xi_{\mathbf{k}} + \mathrm{Re}\,\Sigma(\mathbf{k}, E), \qquad Z_{\mathbf{k}} = [1 - \partial_E \,\mathrm{Re}\,\Sigma(\mathbf{k}, E)]^{-1}. \tag{12}$$

由于 $\mathrm{Re}\,\Sigma \approx \Delta_{\rm eff}^2/(E - \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}})$ 远离粒子能量，能带仅在接近自身平移$\mathbf{Q}$后的副本时受到影响，也就是在布里渊区的表面$\xi_{\mathbf{k}} = \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}$ 附近。远离该处时，能带移动约 $\Delta_{\rm eff}^2/(\xi_{\mathbf{k}} - \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}})$，对于实际的 U而言小于 1 毫电子伏，且 $Z \approx 1$。交叉附近的行为取决于耦合。对于 δ函数峰，方程（12）在低于阈值$U_c \approx 52\,\omega_m$时，仅在交叉处有一个解，导致折点和权重降低。该阈值由要求交叉处存在三个解得出：$\bar{U}_c/\omega_m = \pi \min_y y(y^2+1)/(y\ln y - \pi/2) \approx 51.8$；方程（5）中的静态项使其远高于不含该项时得到的值$\pi \min_y (y^2+1)/\ln y \approx 22.6$。低于阈值时，在 $U = 0.5$ 电子伏特和 $\omega_m = 15$ 毫电子伏下，$Z \approx 0.65$ 位于 Γ–R 线上交叉处。高于 U_c 时，能带分裂为两条具有反交叉的分支；当 $U = 1$ 电子伏特时，反交叉宽约0.18 电子伏特；此外还有第三个解，其负残数在恢复 $\mathrm{Im}\,\Sigma$ 后会受到强烈阻尼。每个交叉附近都会出现一道微弱的$\mathbf{Q}$平移能带影子。在 $\omega_m \to 0$ 的极限下，该模式变为静态，结果趋近于完全折叠且具有实能隙的能带，如公度电荷密度波态中那样。

图 4 展示了 $U = 2$ 电子伏特和 $\omega_m = 25$ 毫电子伏（高于阈值 $U_c \approx 52\,\omega_m \approx 1.3$ 电子伏特）时的情况。沿着高对称线 [（a）图], , 除靠近与经 $\mathbf{Q}$ 位移的能带 $\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}$ 交叉处外，极点均沿着裸能带 $\xi_{\mathbf{k}}$ 分布；这些交叉发生在 X–M、M–Γ、Γ–R和R–X 线上。在每个交叉处，能带都会分裂，并出现一条较弱的影子分支，在 $\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}$ 附近短距离延伸；内插图展示了 Γ–R 交叉处的情况，该处位于 μ下方 0.25 eV。（b）图显示了穿过一条热点线的径向切线，交叉点位于费米能级处，并形成约 0.35 eV 的能隙。远离交叉处时，极点也会发生约 $+0.1$ 至$+0.2$ eV 的位移；当电子数固定时，这一静态位移会被吸收到 μ 中（第 II F 节）。

在热点线上，交叉发生在费米能级处。对于一个 δ-函数峰，静态自能随后会在热点线上发生跃变，

$$\mathrm{Re}\,\Sigma(\mathbf{k}, 0) \to -\frac{\bar{U}}{2}\,\mathrm{sgn}\,\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}, \qquad |\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}| \ll \omega_m, \tag{13}$$

这反映了单个伴随态 $\mathbf{k}+\mathbf{Q}$ 的占据数从已占据变为空的跃变，因为$\mathbf{k}$穿过热点线。因此，准粒子极点在 k_F 处跃过费米能级，而非穿过费米能级，并沿热点线打开一个赝能隙。当 $U = 0.1$ 电子伏特时，对于 $\omega_m = 25$ 毫电子伏，极点在 k_F 两侧分别位于 -25 和 $+25$ 毫电子伏；当 $U = 0.3$ 电子伏特时，极点位于 ± 54 毫电子伏；能隙 在 $U \ll \omega_m$ 时按 $U/2$ 标度，在 $U \gg \omega_m$时按 $\Delta_{\rm eff}$ 标度。

该赝能隙是长程关联的性质。在具有有限宽度 Δq 时，每个$\mathbf{k}$ 都会与一组连续的伙伴耦合，其能量分布范围为 $\Gamma = v_F\Delta q$，从而使公式（13）中的占据数阶跃被平均化，并且 $\mathrm{Re}\,\Sigma(\mathbf{k},0)$ 在 Δq的尺度上平滑变化。平滑的动量依赖性会重整化费米速度，但不会打开能隙。只有在以下条件成立时，赝能隙才会保留下来：

$$\Delta_{\rm eff} \gtrsim v_F\,\Delta q \quad \Longleftrightarrow \quad \xi_c \gtrsim \frac{v_F}{\Delta_{\rm eff}}, \tag{14}$$

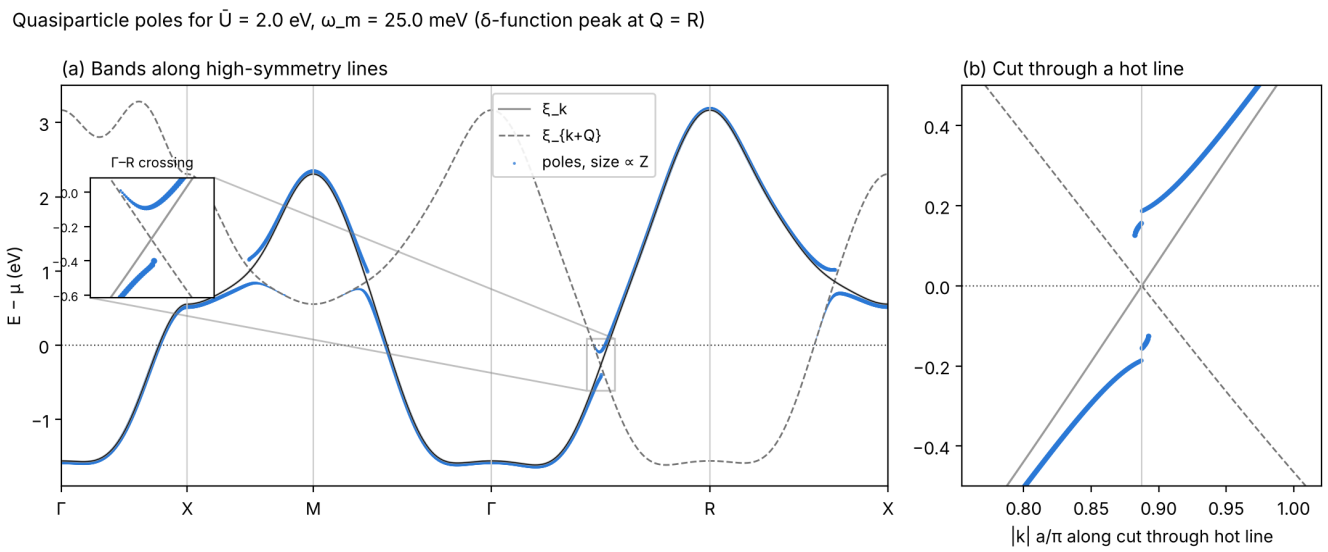

图 4. 当 δ 函数峰位于 $\mathbf{Q} = R$, $\bar{U} = 2$ 电子伏特、 $\omega_m = 25$ 毫电子伏时，方程 (12) 的准粒子极点。灰色实线：裸能带 $\xi_{\mathbf{k}}$；灰色虚线：经 $\mathbf{Q}$ 平移的能带 $\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}$；蓝点：极点，点的大小与 $Z_{\mathbf{k}}$ 成正比（省略了残数为负的极点）。(a) 高对称线，插图显示 Γ–R 交点附近的情况。(b) 穿过一条热点线、位于 $\phi = 45°$, $\theta = 42.7°$ 处的径向切线；竖线标示裸 k_F。

反铁磁热点附近前驱赝能隙判据的三维对应物 [38,39]。对于 $U = 0.3$ 电子伏特和 $\omega_m = 25$ 毫电子伏，这要求 $\xi_c \gtrsim 35a$。对于我们在第三节中推断出的仅几个晶格间距的关联长度，热点线承载的是重准粒子，而不是赝能隙。

F. 费米面、热点线与质量增强

费米面上的准粒子剩余量 $Z_{\mathbf{k}} = (m^*_{\mathbf{k}}/m)^{-1}$ （由方程 (7) 或方程 (9) 得出）可直接描绘热点线。图 5 显示了按 $Z_{\mathbf{k}} = 1/[1 + \lambda_R(\mathbf{k})]$ 着色的 $n = 0.6$ 费米面，分别对应窄峰（$\xi_c \approx 5a$）和较宽峰（$\xi_c \approx 2.3a$），并标出了热点线。对于窄峰，重整化仅局限于八条热点环周围的窄带，这些热点环位于 $\langle 111 \rangle$ 附近，此处口袋向布里渊区的 R 角鼓出。在每个环内，沿 $\langle 111 \rangle$ 方向本身的 $\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} \approx -0.5$ 电子伏特处，增强已经弱得多；而在口袋朝向 X 的平坦面上，沿着 $\langle 100 \rangle$ 和 $\langle 110 \rangle$， $Z_{\mathbf{k}} \approx 1$。由于方程 (7) 中的 $F(x) > 0$，质量在各处都得到增强，但离热点线越远，增强越按 $\omega_m^2 \ln(|\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}|/\omega_m)/\xi^2_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}$ 衰减。

随着 Δq 增大，热带变宽、强度减弱。将耦合归一化，使其费米面平均值为 0.70（第三节采用的数值），局域耦合 $\lambda_R(\mathbf{k}) = m^*_{\mathbf{k}}/m - 1$ 在冷面上为 0.12，在热点环上为 2.4，对于 $\Delta q = 0.05\ (2\pi/a)$；而对于 $\Delta q = 0.1\ (2\pi/a)$，则介于 0.24 和 1.4 之间。最大值总是位于距 $\langle 111 \rangle$ 约 $10°$ 之内，最小值则沿着 $\langle 100 \rangle$分布。求和规则 (11) 固定了平均值，而各向异性由 ξ_c控制，因此窄峰会产生少数极重的准粒子，而宽峰则会在费米面的大部分区域产生中等偏重的准粒子。

Σ的动量依赖性也会使费米速度发生重整化。由于 Σ 仅通过 $\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}$依赖于$\mathbf{k}$， $\nabla_{\mathbf{k}}\Sigma = -(\partial\Sigma/\partial\omega)\mathbf{v}^{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}$，而重整化后的速度为$\mathbf{v}^*_{\mathbf{k}} = (\mathbf{v}_{\mathbf{k}} - \Sigma'\mathbf{v}^{\mathbf{k}+\mathbf{Q}})/(1 - \Sigma')$，其中 $\Sigma' = \partial_\omega$ 在$\omega = 0$处为 $\mathrm{Re}\,\Sigma$。该项取决于$\mathbf{v}_{\mathbf{k}}$ 与$\mathbf{v}^{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}$ 的相对取向，且仅在热点线附近显著。

最后， Σ 的静态部分使能带几乎均匀地移动约每电子伏特 U 对应 -18 毫电子伏（当 $\omega_m = 25$ 为 $\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} > 0$ 时），因为在费米面的大部分区域 $\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} > 0$。在 $n = 0.6$ 处施加卢廷格计数会使 μ 移动相同的幅度，因此费米面、热点线以及上述平均值在计算精度范围内均保持不变。

III. 超导性

A. 耦合谱

我们将电子-玻色子耦合建模为两个通道之和。第一个是采用局域密度近似计算的传统电子-声子耦合，主要由键伸缩和呼吸支构成 [21]。我们用一个各向同性高斯峰表示它，该峰以 $\Omega_b = 50$ 毫电子伏为中心，标准差为 $\sigma = 4$ 毫电子伏（半高全宽为 9.4 毫电子伏），与此频率范围内测得的峰宽相当，其权重为 $\lambda_b = 0.3$。第二个是第二节中的过阻尼 R 点玻色子。

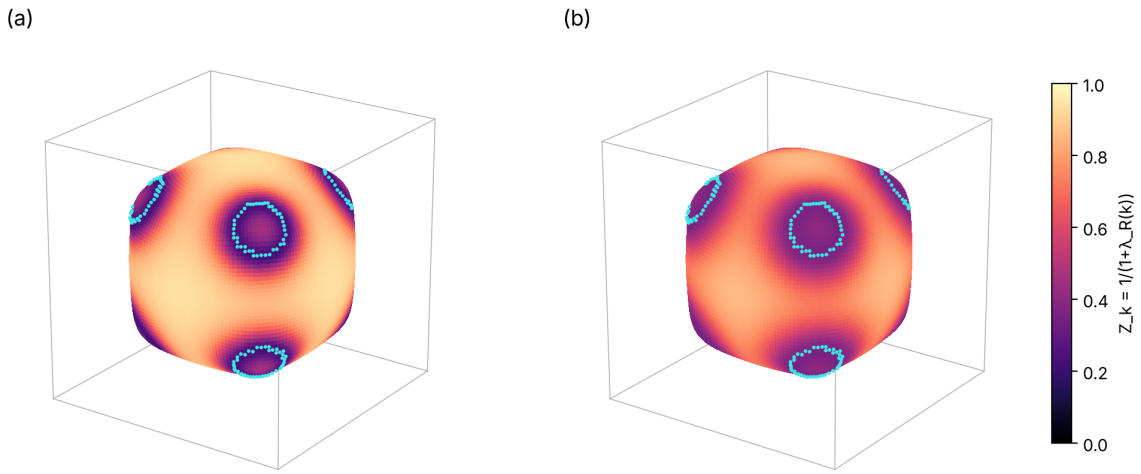

图 5. 平方洛伦兹型相互作用 (8) 的费米面，按 $n = 0.6$ 处的 $Z_{\mathbf{k}} = 1/[1 + \lambda_R(\mathbf{k})]$ 着色，耦合归一化为 $\langle \lambda_R \rangle = 0.70$。(a) $\Delta q = 0.03\,(2\pi/a)$，$\xi_c \approx 5a$；(b) $\Delta q = 0.07\,(2\pi/a)$，$\xi_c \approx 2.3a$。在 (a) 中，$Z_{\mathbf{k}}$ 范围为 0.21 至 0.94；在 (b) 中范围为 0.35 至 0.86。青色：可见侧的热点线 $\xi_{\mathbf{k}} = \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} = 0$。立方体为 $\pm\pi/a$处的布里渊区边界；视角接近 [111] 方向。

其 Eliashberg 函数由公式（2）给出，

$$\alpha^2 F_R(\omega) = \frac{\lambda_R}{\pi} \frac{\omega\,\omega_m}{\omega^2 + \omega_m^2}\,\theta(\omega_c - \omega) \Big/ \left[\frac{2}{\pi}\arctan\frac{\omega_c}{\omega_m}\right], \tag{15}$$

归一化使得 $2\int \alpha^2 F_R/\omega\, d\omega = \lambda_R$。我们在 $\omega_c = 60$ 毫电子伏处截断谱，这里是测得谱的上限，因为弛豫形式缓慢的 $1/\omega$ 尾部若不截断，会在高频处产生不符合物理的权重。要确定电荷涨落谱在高频处的实际衰减情况，需要进行完整的微观计算，这超出了当前唯象模型的范围；尖锐截断是与测得谱相符的最简单选择。结果对这一选择只有很弱的依赖：在固定 λ_R时，将 ω_c 在 45 至 90 毫电子伏之间改变，会使T_c 改变约 $\pm 15\%$（对于 $\Delta q = 0.07(2\pi/a)$，从 23 K 变到 30 K；对于均匀耦合，从 18 K 变到 23 K），这只会略微改变 Δq 的一致范围，不会影响我们的结论。这种敏感性较弱，是因为耦合由逆频率矩 $\lambda = 2\int \alpha^2 F(\omega)\; d\omega/\omega$决定，而我们将其保持固定：改变 ω_c 只会重新分配耦合在频率上的分布。正如 Eliashberg 方程的 Allen–Dynes 分析所示， [14], 在固定 λ 下进行这种重新分配，主要通过前因子中的对数平均 $\omega_{\log}$ 影响 T_c，而不是通过指数项；这与我们在完整 Eliashberg 方程求解中发现的弱依赖性一致。

隧穿反演给出的总耦合为 $\lambda \approx 0.7$–1.2 [7, 9]，我们取 $\lambda \approx 1$。扣除 LDA声子后，剩余部分$\lambda_R \approx 0.7$归于 R 玻色子。对于其频率，我们取$\omega_m = 25$ 毫电子伏，这使玻色子权重落在 10–50 毫电子伏范围内；在该范围内，实测谱具有大部分谱权重，并且这与 $\omega_{\log} \approx 30$–40 毫电子伏相符这是基于对已报道的 λ、 μ^* 和T_c进行 Allen–Dynes 分析得到的；模型谱本身具有 $\omega_{\log} \approx 20$毫电子伏，这是因为弛豫形式会将权重延伸至低频。图 6 将这一分解与文献 [7] 的谱进行了比较。这种比较是定性的：不同研究组和结得到的反演谱存在差异，并且其低频部分无法由数据确定（见下文）。它还揭示了高能处的差异。实测谱在 45 毫电子伏以上携带 $\lambda \approx 0.10$，而分解在该处给出 $\lambda \approx 0.32$，其中几乎全部来自 LDA 峰；因此，在 50 毫电子伏处，该峰的高度几乎是实测 $\alpha^2 F$ 的三倍。LDA 要么高估了这种耦合的频率和强度，要么部分高能权重在隧穿反演中损失了。我们保留 $\lambda_b = 0.3$，将其作为常规贡献的上限估计。应将这两个通道视为一种现象学参数化，而不是彼此独立的微观模式： R 通道代表第四节讨论的过阻尼杂化电荷-晶格模的低能谱权重，而 50 毫电子伏通道则代表剩余的高频声子谱权重。由于两者经过归一化，使其总和重现实测的总$\lambda \approx 1$，这种杂化不会导致重复计数。

测得谱的低频部分值得特别评论，因为它承载了 λ 的很大一部分。在 McMillan–Rowell 方法中，通过迭代 Eliashberg 方程，获得 [49]， $\alpha^2 F(\omega)$，直到计算得到的隧穿态密度在能隙边缘以上重现测得的电导。数据在刚超过能隙处最不准确，此时电导变化陡峭，并且取决于 Δ_0的精确值，因此反演对低于几倍 Δ_0的频率处的 $\alpha^2 F$ 基本不敏感。实际上，所提取的谱

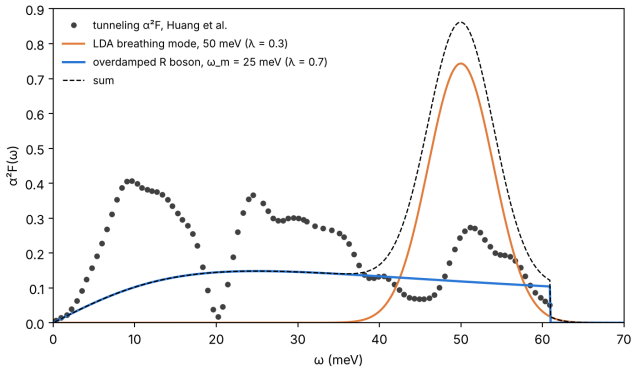

图 6. Ref. [7] 的隧穿 $\alpha^2F(\omega)$（圆点）分解为局域密度近似的呼吸模耦合（用一个位于 50 毫电子伏、标准差为 $\sigma = 4$ meV（半高全宽 9.4 meV）的高斯表示）和 $\lambda_b = 0.3$（橙色），以及式 (15) 中的过阻尼 R 玻色子，其中 $\omega_m = 25$ meV、$\lambda_R = 0.7$（蓝色）。虚线：两者之和。

在该频段受到约束，通常通过在一个由数据无法确定的截断以下施加二次的、德拜型形式 $\alpha^2F \propto \omega^2$ 来实现；对于 BKBO，Samuely*et al.* 假定在 8 毫电子伏以下采用这种形式 [9]；仅这一频段的选择，即使在元素超导体中，也会使 λ 改变 10–20% [50]。对于 BKBO，由于 $\Delta_0 \approx 4$–5 毫电子伏，约低于 5 毫电子伏的谱因此是外推得到的。发表的曲线在 3 毫电子伏以下大致线性上升，并在 7 毫电子伏之前上升得更加陡峭。相比之下，我们的过阻尼玻色子在 $\omega \ll \omega_m$处预测 $\alpha^2F_R \propto \omega/\omega_m$，这是由朗道阻尼导致的线性起始，而不是声学声子的 ω^2。由于 λ按照$1/\omega$对谱加权，这一差异很重要：低于 5 毫电子伏时，线性起始给出 $\lambda \approx 0.35$，而二次起始给出 0.17。隧穿数据无法区分这两种情况，而线性起始与这些数据完全一致。

B. Eliashberg 方程

我们在 Matsubara 轴上、温度为 $T = T_c$ 时求解线性化 Eliashberg 方程。对于同时依赖两个动量的耦合，方程为

$$Z(\mathbf{k}, i\omega_n) = 1 + \frac{\pi T}{\omega_n} \sum_{n'} \sum_{\mathbf{k}'} w_{\mathbf{k}'}\, \lambda(\mathbf{k}, \mathbf{k}', i\omega_n - i\omega_{n'}) \times \operatorname{sgn} \omega_{n'},$$

$$\Phi(\mathbf{k}, i\omega_n) = \pi T \sum_{n'} \sum_{\mathbf{k}'} w_{\mathbf{k}'} \Big[\lambda(\mathbf{k}, \mathbf{k}', i\omega_n - i\omega_{n'}) - \mu^* \theta(\omega_c - |\omega_{n'}|)\Big] \frac{\Phi(\mathbf{k}', i\omega_{n'})}{|\omega_{n'}|\, Z(\mathbf{k}', i\omega_{n'})}, \quad (16)$$

其中，$w_{\mathbf{k}'}$ 是费米面（$\sum w_{\mathbf{k}'} = 1$）上的态密度权重，T_c 是能隙方程具有非平凡解的最高温度。

能隙为 $\Delta(\mathbf{k}) = \Phi(\mathbf{k}\ i\pi T_c)/Z(\mathbf{k}\ i\pi T_c)$。耦合为

$$\lambda(\mathbf{k}, \mathbf{k}', i\nu) = \lambda_R(\mathbf{k}, \mathbf{k}')\, \frac{\lambda_R(i\nu)}{\lambda_R} + \lambda_b\, \frac{\Omega_b^2}{\Omega_b^2 + \nu^2}, \quad (17)$$

其中，$\lambda_R(i\nu) = 2\int d\omega\, \alpha^2F_R(\omega)\, \omega/(\omega^2 + \nu^2)$包含式 (15) 的频率依赖性，而 $\lambda_R(\mathbf{k},\mathbf{k}')$ $\propto V(\mathbf{k}' - \mathbf{k})$包含式 (8) 的动量结构，其归一化后费米面平均值为 $\lambda_R = 0.70$。由于相互作用在电荷通道中具有吸引性，能隙在 $\mathbf{k}$ 和 $\mathbf{k}$ $+\mathbf{Q}$处符号相同。我们用 800 个点离散费米面，并使用$\mu^* = 0.1$，除非另有说明，Matsubara 截断取 0.25 电子伏特。顶角修正受 Migdal 定理控制：玻色子频率 $\omega_m \approx 25$ meV 和 $\Omega_b \approx 50$ meV 相对于从能带底部算起的费米能（约 1.6 电子伏特）较小，因此 $\omega/E_F \approx 0.02$–0.03。动量高度集中的相互作用可增强热点附近的顶角修正，但这只有在关联长度很长时才会变得重要，即处于赝能隙判据 (14) 的 $\xi_c \gtrsim 35a$ 范围内，远离本文相关的 $\xi_c \approx 2$–3a。

当假设能隙仅在热点线上非零，且配对态能量像上文的 $\Gamma = v_F\Delta q$ 一样被展宽时，可以得到一种更简单的热点形式。此时动量求和可以解析完成，结果为

$$\Phi_n = \bar{U}\omega_m T \sum_{n'} \frac{\Phi_{n'}\, [\omega_m + |\omega_n - \omega_{n'}|]^{-1}}{|\omega_{n'}|Z_{n'}\, (|\omega_{n'}|Z_{n'} + \Gamma)}, \quad (18)$$

以及关于 Z_n的类似方程。对于 $\Gamma \gg |\omega_n Z_n|$，这是标准的各向同性形式，在零频率下具有有效耦合$\lambda_{\rm hot} = U/(\pi\Gamma)$，即方程（9）中的热点线质量增强。对于 $\Gamma \to 0$，它描述的是一对孤立态，即$\mathbf{k}$ 和$\mathbf{k}$ $+\mathbf{Q}$。

C. 由尖锐峰导致的配对：热点环上的超导性

与正常态一样，δ-函数极限给出了最清晰的图像。当 $V(\mathbf{q}) = (2\pi)^3\bar{U}\omega_m\delta(\mathbf{q} - \mathbf{Q})$时，方程（1）中态$\mathbf{k}$ 与$\mathbf{k}'$之间的配对相互作用变为

$$W(\mathbf{k}' - \mathbf{k}, i\nu_l) = -\frac{(2\pi)^3\, \bar{U}\omega_m\, \delta(\mathbf{k}' - \mathbf{k} - \mathbf{Q})}{\omega_m + |\nu_l|}: \quad (19)$$

它在动量空间中是局域的，仅将$\mathbf{k}$与$\mathbf{k}+\mathbf{Q}$连接起来，但保留了过阻尼玻色子的完整频率依赖性。于是，方程（16）中的动量求和塌缩，线性化能隙方程解耦为彼此独立的态对$\mathbf{k}$ 和$\mathbf{k}$ $+\mathbf{Q}$：

$$\Phi_n(\mathbf{k}) = \bar{U}\omega_m T \sum_{n'} \frac{\Phi_{n'}(\mathbf{k}+\mathbf{Q})\, [\omega_m + |\omega_n - \omega_{n'}|]^{-1}}{\omega_{n'}^2 Z_{n'}^2(\mathbf{k}+\mathbf{Q}) + \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^2}, \quad (20)$$

以及将 $\mathbf{k}$ 和$\mathbf{k}$ $+\mathbf{Q}$ 互换后的相同方程，以及针对 Z的类似方程。不存在

对配对态能量的积分，因此也没有费米海的对数项：每一对都有其自身的转变温度 $T_c(\mathbf{k})$，由两个能量 $\xi_{\mathbf{k}}$ 和 $\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}$决定。当二者都为零时，也就是在热点线上，该温度最高；此时公式（20）化为带有 $\Gamma = 0$的公式（18）。

因此，解首先在热点环上形成。就在最高的 T_c 以下，能隙仅在热点线上非零；只有温度进一步降低时，能隙才会向外扩展。局部 T_c 缓慢下降：对于 $U = 0.3$ 电子伏特和 $\omega_m = 25$ 毫电子伏，它在费米面上距离热点线 $|\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}| \lesssim 40$ 毫电子伏的范围内仍高于热点线值的 90%，并在 $|\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}| \approx 130$ 毫电子伏处减半。因此，能隙局限在热点线周围的管状区域内，其能量宽度是 πT_c 的数倍。

热点线 T_c 具有简单的非指数形式。在含有 $\xi_{\mathbf{k}} = \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} = 0$ 的式（20）中，含 $n' = n$ 的项描述静态热激发玻色子的交换，其作用于电子的方式类似于冻结势引起的弹性散射。对于在$\mathbf{k}$ 和$\mathbf{k} + \mathbf{Q}$ 上具有相同符号的能隙，这种散射不会造成对破坏：它对 Φ 和 Z 的贡献恰好抵消。这与安德森定理所依据的抵消机制相同；安德森定理适用于非磁性杂质 [51]，而伊莱亚什伯格理论中 T_c 对热激发声子也不敏感 [52]。剩余的含 $|\omega_n - \omega_{n'}| \geq 2\pi T$ 项给出的核为 $\bar{U}\omega_m/(2\pi^3 T^2)$ 量级，因此非平凡解的条件为

$$k_B T_c \simeq c\sqrt{\bar{U}\omega_m}, \qquad c \approx 0.07\text{–}0.10, \tag{21}$$

其中，$c \leq (2\pi^3)^{-1/2} \approx 0.13$因质量重整化而减小。图7中的数值解表明，对于从 5 到 30 毫电子伏的 ω_m，以及从 0.1 到 2 电子伏的 U，结果符合公式（21）；随着 U/ω_m 增大，c 从 0.10 缓慢下降至 0.07。公式（21）有三个推论。第一，T_c 由与第 II E 节赝能隙 Δ_{eff}相同的能量尺度 $\sqrt{\bar{U}\omega_m}$决定，因此在此极限下，配对与前驱能带折叠处于势均力敌的竞争地位。第二，对耦合的依赖呈平方根关系，而非像 Eliash-berg 理论的强耦合极限那样呈指数关系：即使 $U \approx 0.03$ 只有 1 电子伏，在 $\omega_m = 25$ 为毫电子伏时也已能得到 30 K 的；而隧穿耦合所暗示的 $U \approx 3$ 电子伏则会产生超过 200 K 的结果。第三，不同$\mathbf{k}$处彼此独立的配对没有锁定相位的机制。因此，δ函数模型描述的是热点环上的局域配对，而非真正的体相转变；有限宽度 Δq 会耦合相邻的$\mathbf{k}$，恢复单一的 T_c，并在 $\Gamma \gg \omega_m$ 时回到具有 $\lambda_{\text{hot}} = U/(\pi\Gamma)$的传统 McMillan 形式。测得的 T_c 与隧穿耦合强度表明，BKBO 确实处于这一宽峰区间，下面将对此进行说明。

D. 仅 R 玻色子

我们首先关闭声子通道。表II 给出了由热点方程 (18) 得到的T_c 随

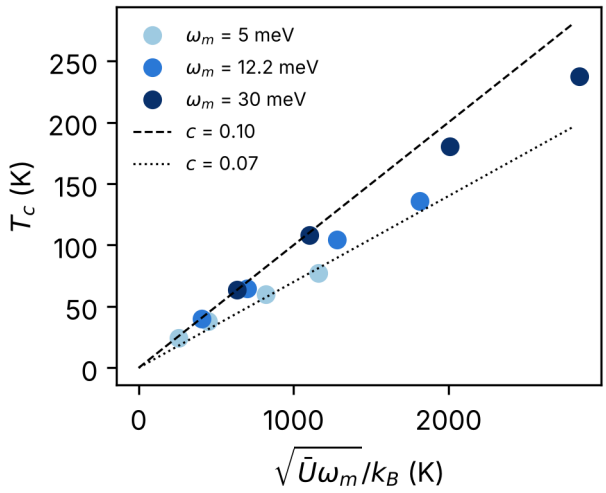

图7。 δ-函数在$\mathbf{Q}$处峰值导致的配对。来自公式（18）的热线 T_c，其中 $\Gamma = 0$ 对应 $\omega_m = 5$、12.2和30毫电子伏，且 $\bar{U}$ =0.1–2电子伏；相对于 $\sqrt{\bar{U}\omega_m}$作图；虚线和点线为公式（21），其中 $c = 0.10$ 和 0.07。

表II。公式（18）中的 T_c (K)，仅 R 玻色子，ω_m = 25 毫电子伏，$\mu^* = 0$。$\Gamma = v_F\Delta q$，$v_F = 1.8$ eV·Å，. 其中电子伏 .

Δq ($2\pi/a$)	Γ (毫电子伏)	T_c (K) $\bar{U} = 0.3$ 电子伏特	0.5 电子伏特	1 eV	2 eV
0	0	98	122	163	213
0.003	34	72	100	144	198
0.01	115	28	56	105	166
0.03	344	1.8	9.3	37	92
0.05	573	0.2	1.8	14	51
0.1	1150	0	< 0.1	1.8	14

耦合强度 U 和峰宽 Δq的变化情况，其中 ω_m =为 25 毫电子伏，且 $\mu^* = 0$。

对于实际的宽度，$\Delta q \gtrsim 0.01$ ($2\pi/a$)、T_c 主要取决于单一组合 $\lambda_{\text{hot}} = U/(\pi v_F \Delta q)$，并遵循带有前因子 $\omega_m/1.2$ 的McMillan形式。对于更窄的峰，T_c 会变大且对U不敏感：每个$\mathbf{k}$ 都几乎只与一个配对态配对，这正是第IIE节也预测存在赝能隙的情形。在那里，赝能隙与超导性相互竞争，因此不应将上面几行中的数值视为严格准确。

式（16）的完整各向异性解消除了热点假设。我们将费米面平均固定为 $\lambda_R = 0.70$，即局域密度近似中缺失的耦合；根据求和规则（11），这对应于 $U \approx 3$ 电子伏特，且几乎不依赖于 Δq（从尖锐峰情况下的 2.5 电子伏特到 $\Delta q = 0.05$情况下的 3.5 电子伏特）。结果汇总于表III，并与双通道情况一并列出。仅考虑 R 玻色子，且耦合在整个费米面上均匀分布时，$T_c = 6$ K。将相同的平均耦合集中在热点线附近，会使 T_c 在 $\Delta q = 0.2$、0.1、0.05 和 0.03（$2\pi/a$）时分别升至 7、12、28 和 45 K。这是在平均耦合固定时，能隙各向异性对 T_c 的普遍增强效应——

平均耦合。

能隙随耦合变化 [图 8(a,b)]。当 Δq =0.03 时，能隙集中在热点环上，其大小比费米面的冷面上高出 100 多倍。当 $\Delta q = 0.1$ 时，能隙在环上仍达到最大值，$\Delta_{\min}/\Delta_{\max} = 0.14$ 沿着 $\langle 100\rangle$。对于窄峰，四对热点环中，每个环都通过 **Q** 与绕相反 $\langle 111\rangle$ 方向的环配对，这些环之间的耦合很弱。此时，库仑赝势倾向于使环对之间的能隙变号；对于 $\Delta q \le 0.05$ 且$\mu^* = 0.1$ 的情况，这种解与能隙符号均匀的解几乎简并，在 T_c 时仅比 $\mu^* = 0$低 1 K。我们在第三节 F 中通过对称性分析这种竞争。

E. R 玻色子加呼吸模声子

加入各向同性声子通道（$\lambda_b = 0.3$ 图 6 中 50 毫电子伏的高斯函数）后，均匀耦合T_c 从 6 K 提高到 20 K，并使能隙更加均匀，这是因为声子与费米面的所有部分耦合相同。表III比较了这两种情况。将高斯函数替换为 50 毫电子伏的爱因斯坦模后，表中每个T_c 的变化都不到 0.2 K，因此结果不受声子峰宽度的影响。

由此得出两个结论。首先，在总耦合固定为 $\lambda \approx 1$时，要达到 $T_c \approx$ 25–30 K，需满足 $\Delta q \approx 0.05$– 0.07（$2\pi/a$），对应于 $\xi_c \approx$ 2–3 个晶格间距。峰越尖锐，耦合就越集中于热点线，得到的 $T_c \approx 40$ K；峰越宽，得到的温度至多为 23 K。其次，在此范围内，能隙具有很强的各向异性 [，如图 8(c)]所示：能隙在 $\langle 111\rangle$ 附近的热点环上及其周围最大，而沿 $\langle 100\rangle$最小，且 $\Delta_{\langle 111\rangle}/\Delta_{\langle 100\rangle} \approx$ 3–4。准粒子质量遵循相同的规律：热点环附近为 $Z^{-1} \approx 3.1$ ，而沿 $\langle 100\rangle$ 为 1.5（ $\Delta q = 0.07$）。这种各向异性强到足以通过角分辨光电子能谱检测，但前提是对 $\langle 111\rangle$ 附近的热点区域进行取样；沿$\langle 100\rangle$ 方向的切线则会观测到近乎各向同性且较小的能隙。参考文献 [13], 中的 ARPES 研究发现能隙是各向同性的，该研究是在 $Ba_{0.51}K_{0.49}BiO_3$上进行的。除了可能未在合适的 k_z对热点区域进行取样外，该组分距离电荷有序相也比$x = 0.4$更远，这应会减弱 R点涨落并降低各向异性。

均匀两通道的 T_c 为 20 K，低于观测到的 30 K；耦合集中在热点环上，提供了其余的增强。由于 50 毫电子伏处的$\lambda_b = 0.3$ 在高频处的权重高于隧穿谱所显示的权重，将声子权重降低至实测值，会使与 Δq 相符的范围略微向更窄的峰移动。相符的参数区间也远未满足赝能隙判据 (14)，因此正常态仍是费米液体，热带上存在中等重的准粒子，正如假设的那样。

F. 热点环上的竞争性能隙对称性

八个热点环分布在四条体对角线周围，而 **Q** 将每个环与相反方向周围的环连接起来。对于窄峰， R 玻色子使每一对这样的环内的电子配对，但不同环对之间的耦合很弱。集中在热点环上的单态能隙在反演下为偶，因此由四个振幅确定，每条体对角线对应一个。在立方群下，这些振幅张成两个表示： A_{1g}，四对环上的符号相同；以及 T_{2g}，其三个伙伴的符号结构分别对应于在对角线上取值的 k_xk_y、 k_yk_z 和 k_zk_x 。在 T_{2g} 态中，能隙在不同环对之间变号，而变号位置位于费米面的冷区，此处耦合较弱。

这两种态对相互作用的各向同性部分响应相反。由于 T_{2g} 能隙在整个费米面上的平均值为零，它不受库仑赝势影响，也不会从各向同性声子通道中获得配对，仅发生质量重整化。 A_{1g} 能隙从声子中获益，却会因μ^*而受损。为比较二者，我们在每个对称性扇区中分别求解了方程（16），使用由不可约楔形区生成的、包含 1056个点的费米面网格，从而使立方群能够严格作用，并将核投影到各个表示上。

仅考虑 R 玻色子且峰较窄时，这两种态的临界温度相差仅几开尔文；当 μ^* 超过约0.02 [时，变号的 T_{2g} 态获胜。表IV和图9(c)]。其 T_c 与 μ^*无关，这符合预期。将峰展宽至 $\Delta q = 0.1$ 后， $V(\mathbf{q})$的尾部会耦合各对热点环，并使 A_{1g} 占优2 K。加入各向同性声子通道后， A_{1g} 明显占优：对于 $\Delta q = 0.03$高出6 K，对于 $\Delta q = 0.05$ 高出10 K，对于 $\Delta q = 0.1$高出17 K；在与 T_c 和隧穿相符的参数范围内，优势约为10 K。对于没有声子的窄峰情形， A_{1g} 能隙本身会在费米面最冷的部分获得一个较弱的相反符号（从 $\Delta_{\min}/\Delta_{\max} \approx -0.01$ 到 -0.06），并在热点环与冷面之间形成由 μ^*驱动的轻微 $s_\pm$ 结构。

因此，究竟实现哪一种态，取决于仅凭隧穿谱无法确定的三个量：关联长度 ξ_c、各向同性声子耦合的强度（隧穿数据表明，它可能小于局域密度近似给出的数值），以及热环上的 μ^* 。由于两种态的能隙几乎全部集中在热点环上，因此它们在此处的能隙大小几乎相同；测量$|\Delta(\mathbf{k})|$ 在 $\langle 111\rangle$ 附近的光电子发射无法区分二者。若干实验则可以做到这一点。(i)相位敏感测试。 T_{2g} 能隙绕立方轴旋转 90° 后会改变符号，这一点可通过在立方 BKBO 上进行转角结或三晶约瑟夫森实验来检验，类似于铜氧化物中对 d波配对的测试。(ii)无序。BKBO 本质上是一种无序合金。对于在费米面上平均为零的能隙（例如T_{2g}），非磁性杂质散射会破坏配对，并根据阿布里科索夫–关系抑制 T_c

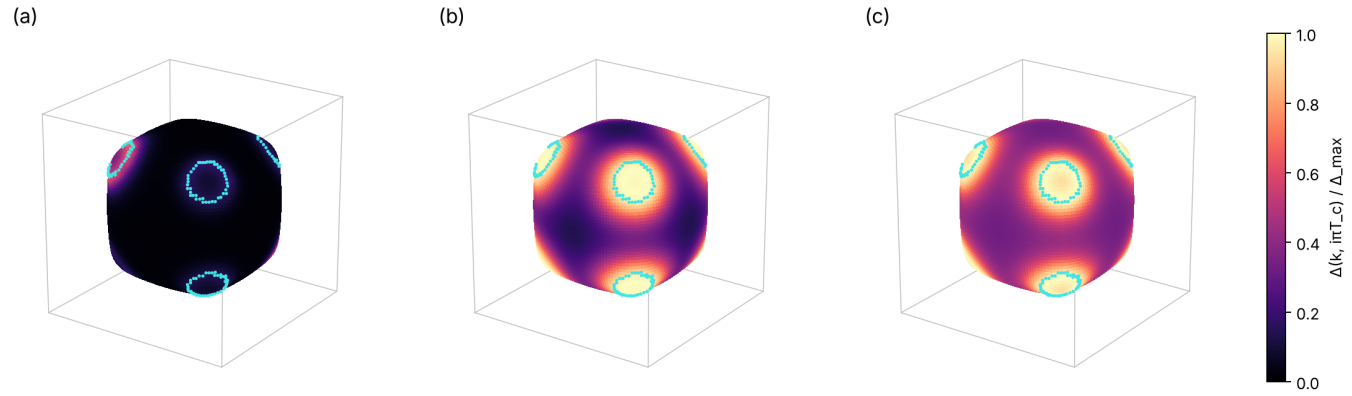

图 8. 根据式 (16) 得出的 $n = 0.6$ 费米面上的能隙 $\Delta(\mathbf{k}, i\pi T_c)$，以其最大值归一化，其中 $\langle\lambda_R\rangle = 0.70$ 且 $\omega_m = 25$ 毫电子伏。(a) 仅有 R 玻色子，$\Delta q = 0.03\,(2\pi/a)$，$\mu^* = 0$；$T_c = 45.7$ K，$\Delta_{\min}/\Delta_{\max} = 0.008$。(b) 仅有 R 玻色子，$\Delta q = 0.1\,(2\pi/a)$，$\mu^* = 0.1$；$T_c = 11.7$ K，$\Delta_{\min}/\Delta_{\max} = 0.14$。(c) R 玻色子与 50 毫电子伏声子，$\Delta q = 0.07\,(2\pi/a)$，$\mu^* = 0.1$；$T_c = 26.6$ K，$\Delta_{\min}/\Delta_{\max} = 0.33$。青色：可见侧的热点线。

表III. $\langle\lambda_R\rangle = 0.70$、$\omega_m = 25$ 毫电子伏和 $\mu^* = 0.1$条件下，方程 (16) 的各向异性Eliashberg解。$\Delta_{\min}/\Delta_{\max}$ 是在 T_c处费米面上的能隙比；负值表示热环对之间发生了符号变化。

峰宽 Δq $(2\pi/a)$	关联长度 ξ_c/a	范围 λ_R (k) 位于费米面上	T_c (K)，仅玻色子	$\Delta_{\min}/\Delta_{\max}$，仅玻色子	T_c (K)，玻色子 + 声子	$\Delta_{\min}/\Delta_{\max}$，玻色子 + 声子
均匀	–	0.70	6.1	1	20.3	1
0.2	0.8	0.45–0.96	6.8	0.52	20.7	0.75
0.1	1.6	0.24–1.42	11.7	0.14	23.1	0.46
0.07	2.3	0.17–1.84	–	–	26.6	0.33
0.05	3.2	0.12–2.41	28.2	< 0	31.5	0.23
0.03	5.3	0.07–4.42	44.9	< 0	42.0	0.08

表 IV. T_c (K) 的领先 A_{1g} 和 T_{2g} 解，$\langle\lambda_R\rangle = 0.70$，$\omega_m = 25$ 毫电子伏。粗体：具有较高 T_c 的状态。

Δq $(2\pi/a)$	声子 λ_b	库仑相互作用 μ^*	T_c (K) A_{1g} 态	T_c (K) T_{2g} 态
0.03	0	0	**47.6**	46.9
0.03	0	0.1	43.9	**46.9**
0.03	0	0.2	41.6	**46.9**
0.05	0	0.1	27.6	**29.5**
0.1	0	0.1	**12.1**	10.3
0.03	0.3	0.1	**43.9**	37.9
0.05	0.3	0.1	**32.4**	22.6
0.1	0.3	0.1	**23.5**	6.8

戈尔科夫形式 $\ln(T_{c0}/T_c) = \psi\left(\frac{1}{2} + \hbar/4\pi k_B T_c \tau\right) - \psi\left(\frac{1}{2}\right)$，其中 τ 为弹性散射时间，ψ 为双伽马函数 [53, 54]；当 $\hbar/\tau$超过约 $1.8\,k_B T_{c0}$时，超导性便会消失。相反，同号的 A_{1g} 能隙受到安德森定理 [51]的保护。系统研究 T_c 随剩余电阻率或受控辐照的变化，可区分这两种情况。(iii) 低能激发。 T_{2g} 态在费米面的冷区有能隙节点线，因此会对比热、穿透深度和热导率。由于两种态的冷区能隙都很小，这些特征会在远低于 T_c的温度下出现。已有的隧穿谱显示出充分发展的能隙和较低的零偏压电导 [7, 9], , 这支持 A_{1g}；但冷区的权重较小，因此这一检验不如在铜氧化物中那样明确。(iv) 动量分辨相位。扫描隧道谱中的相位参照准粒子干涉，或在低于T_c时电荷响应中的**Q** 处是否存在类共振特征，也能区分其符号结构。

根据目前的证据， A_{1g} 态更受支持：在与 T_c 和隧穿谱一致的参数范围内，它占据优势；同时，它与完整能隙相容，也与超导性在强合金无序下仍能保持相容。如果各向同性声子耦合较弱，或电荷关联的长程性比我们的估计更强， T_{2g} 态仍是有力竞争者；只有能够探测热点环上能隙符号的测量，才能解决这一问题。

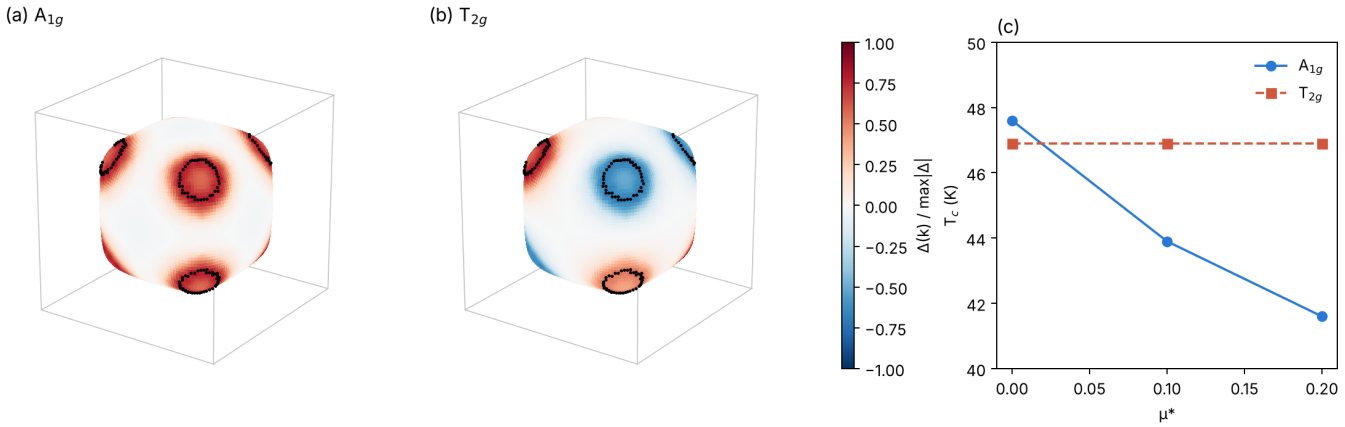

图 9. 仅有 R 玻色子时，两个对称性扇区中的主导能隙函数， $\Delta q = 0.03\,(2\pi/a)$， $\mu^* = 0.1$，归一化至 $\max|\Delta|$。(a) A_{1g}：所有热点环上的符号相同， $T_c = 43.9$ K。(b) T_{2g}：三重态的一个伙伴，其能隙在不同体对角线周围的环对之间变号， $T_c = 46.9$ K。黑色：热点线。(c) 两种态的 T_c 随 μ^* 的变化，适用于 $\Delta q = 0.03\,(2\pi/a)$； T_{2g} T_c 与 μ^* 无关。

IV. 迈向微观图像：随机相位近似

第二节和第三节的唯象结果并不取决于玻色子的微观起源。这些结果建立在第二节的过阻尼玻色子模型之上，即位于$\mathbf{Q} = R$ 处、具有三个物理参数的电荷模：(1) 其强度U，通过求和规则由耦合 $\lambda_R \approx 0.7$确定，该耦合在局域密度近似中缺失，对应于 $U \approx 3$ 电子伏特；(2) 其频率为 $\omega_m \approx 25$ 毫电子伏，这使耦合处于实测的10–50毫电子伏范围内；(3) 其动量宽度为 $\Delta q = 1/\xi_c$，这是为 T_c而调节的唯一参数，所得结果为 $\xi_c \approx 2$–$3a$。序参量波矢$\mathbf{Q}$ 并非自由参数，因为它由母体化合物的电荷序决定； $V(\mathbf{q})$的函数形式以及高频截断则属于建模选择，结果对它们仅表现出较弱的敏感性。微观理论应当解释这三个数值。在本节中，我们考察一个最小模型——扩展 Hubbard 模型的随机相位近似——在多大程度上能够实现这一目标。

A. 扩展 Hubbard 模型与静态不稳定性

对于单带，电荷响应可直接在随机相位近似中计算。我们采用附录 A 中描述的紧束缚模型，并加入在位排斥 U_0 和最近邻排斥 V_0，

$$\begin{aligned} U(\mathbf{q}) &= U_0 + V(\mathbf{q}), \\ V(\mathbf{q}) &= 2V_0\left(\cos q_x + \cos q_y + \cos q_z\right), \end{aligned} \tag{22}$$

与 $U_0 = 0.6$ 电子伏特。由于 U_0 仅作用于自旋相反的粒子，而 $V(\mathbf{q})$作用于所有粒子对，因此用每自旋林哈德函数 χ_0^σ表示的电荷磁化率 is

$$\chi_c(\mathbf{q},\omega) = \frac{2\chi_0^\sigma(\mathbf{q},\omega)}{1 + K(\mathbf{q})\,\chi_0^\sigma(\mathbf{q},\omega)}, \qquad K(\mathbf{q}) = U_0 + 2V(\mathbf{q}), \tag{23}$$

with

$$\chi_0^\sigma(\mathbf{q},\omega) = \frac{1}{N}\sum_{\mathbf{k}} \frac{f(\xi_{\mathbf{k}}) - f(\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})}{\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \xi_{\mathbf{k}} - \omega - i0^+}. \tag{24}$$

图 10(a) 中的静态 $\chi_0^\sigma(\mathbf{q})$ 在 $n = 0.6$ [等于 $N_\sigma(0)$ =0.22 电子伏特$^{-1}$ ，在 Γ升至 0.26 电子伏特$^{-1}$ ，并在 X 达到最大值 0.34 电子伏特$^{-1}$；在 M时为 0.32 电子伏特 R 。尽管 χ_0^σ 在 M 处最大，但核 $K(\mathbf{q})$ 在 R 处最负，此时 $V(R) = -6V_0$。因此，不稳定性 $1 + K(\mathbf{q})\chi_0^\sigma(\mathbf{q}) = 0$首先出现在 $\mathbf{Q} = R$处，

$$V_0^c = \frac{U_0 + 1/\chi_0^\sigma(\mathbf{R})}{12} \approx 0.31 \text{ eV}. \tag{25}$$

相邻波矢只有在更高的V_0下才会变得不稳定；对于从 R 沿一个或两个轴偏移 $\pi/8a$ 的$\mathbf{q}$ ，不稳定性增强了 3–7%。阈值对温度（ $k_BT = 2.5$–20 毫电子伏时为 0.311–0.313 电子伏）和积分方法的依赖都很小；四面体计算得到 0.295 电子伏。在 R附近， χ_0^σ 在 $0.3/a$范围内的变化小于 1%，因此这种不稳定性是由 R 处的吸引核驱动的，而非嵌套。这是母体化合物中的公度呼吸型电荷序，此处是在金属侧达到的。

B. 动力学：随机相位近似产生过阻尼玻色子

在序参量波矢处，裸易感性的频率依赖性尤其简单。在 0–150 毫电子伏范围内，

$$\chi_0^\sigma(\mathbf{R},\omega) \simeq \chi_0' + i\gamma\omega, \tag{26}$$

对于 $\chi_0' = 0.316$ 电子伏$^{-1}$ 和 $\gamma = \pi J_{\mathbf{Q}}(0,\ 0) = 0.141$ 电子伏$^{-2}$，实部的变化不到 0.3%，而 χ_0''/ω 变化仅为几个百分点。这里，$J_{\mathbf{Q}}(0,\ 0) = N^{-1}\sum_{\mathbf{k}}\delta(\xi_{\mathbf{k}})\delta(\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}})$是热点线上的联合态密度：$R$ 模的朗道阻尼完全来自同一热点线上的粒子-空穴对，而这些热点线也产生了第 II 节所述的质量增强。其计算需要格外谨慎，因为与$\mathbf{Q}$ 相容的$\mathbf{k}$网格会系统性地漏掉热点线；我们采用了含有 8×10^6 个随机点的蒙特卡洛采样，并通过克拉默斯-克罗尼希变换得到实部。

将公式（26）代入公式（23），作用于电子的电荷通道相互作用 $W_c = (K/2)/(1+K\chi_0^{\sigma})$ 变为

$$W_c(\mathbf{R},\omega) = -\frac{1/2\gamma}{\omega_m - i\omega}, \qquad \omega_m = \frac{\delta}{|K(\mathbf{R})|\,\gamma}, \tag{27}$$

其中 $\delta = 1 + K(\mathbf{R})\chi_0'$。这恰好是弛豫形式（1），其前因子与 V_0 无关，特征频率则与距不稳定性的距离 δ 成正比。因此，第二节和第三节中的唯象玻色子就是 R 点处的 RPA 电荷涨落，并受到热点线的过阻尼。当 V_0 趋近于 V_0^c 时，$-$ 的峰值处的 $\mathrm{Im}\,W$ 会线性下降，如图 10(b) 所示：当 V_0 3 分别比 V_0^c 低 6、12、26、48 毫电子伏时，对应的数值依次为 6、12、26、48 毫电子伏。第三节采用的 $\omega_m \approx 25$ 毫电子伏频率要求 $\delta \approx 0.011$，也就是说，系统距离阈值约在 1% 以内，且电荷响应的静态增强因子约为 90。由于 ω_m 仅取决于 δ，这一结论与计算 V_0^c 所用的方法无关。

C. 电子RPA 能否解释这种唯象学?

随机相位近似再现了玻色子的形式，但无法再现其动量宽度或耦合强度。

宽度。接近不稳定性时，静态相互作用呈奥恩斯坦–泽尼克形式 [46]，$W_c(\mathbf{R}+\mathbf{p},0) \propto 1/(\delta + cp^2)$，其半宽度按 $\sqrt{\delta}$ 标度变化。在$\delta = 0.011$处，$\omega_m \approx 25$ 毫电子伏时，半宽度沿 [001] 方向约为$0.20/a$ [0.032 $(2\pi/a)$]，沿 [111],方向约为 $0.12/a$，因此约为 $\xi_c \approx$ 5–9 个晶格间距。在随机相位近似中，频率与宽度由动力学指数 $z = 2$,$\omega_m \propto \Delta q^2$ 联系起来。第三节中，为了再现 T_c 所需的较宽峰，$\Delta q \approx 0.05$–0.07 ($2\pi/a$)，对应于 $\delta \approx 0.03$–0.05 和 $\omega_m \approx$ 60–120 毫电子伏，达到玻色子能标的数倍。电子RPA 无法产生兼具软模特性和短程特征的玻色子。

强度。费米面平均耦合可由求和规则（11）得到；这里将该规则应用于 RPA相互作用的动态屏蔽部分，即 $\Delta W_c = W_c(\mathbf{q},\ 0) - K(\mathbf{q})/2$:

$$\lambda_R^{\mathrm{RPA}} \simeq \frac{J_{\mathbf{Q}}}{N_\sigma}\int \frac{d^3q}{(2\pi)^3}\,|\Delta W_c(\mathbf{q},0)|, \qquad \frac{J_{\mathbf{Q}}}{N_\sigma} \approx 0.22\ \mathrm{eV}^{-1}. \tag{28}$$

在 $\delta = 0.011$ 处，R 附近的峰贡献了 $\lambda_R^{\mathrm{RPA}} \approx 0.04$，而布里渊区的其余部分最多约为 0.08。因此，有效U 约为 0.2 电子伏特，而 $\lambda_R = 0.7$所暗示的数值为 ≈ 3 电子伏特。接近不稳定性并无帮助：在三维中，Ornstein–Zernike 积分 $\int d^3p/(\delta + cp^2)$ 在 $\delta \to 0$时仍保持有限，因此该峰变得更高、更窄，而其在公式（28）中的权重趋于饱和。更接近阈值时，只有 ω_m 会减小。

本小节的结果可以结合本节开头列出的过阻尼玻色子模型的三个参数来概括。电子RPA能够解释玻色子的结构，但只能确定其三个参数中的一个:

- 序参量波矢和形式。随机相位近似对两者都能再现：不稳定性首先出现在$\mathbf{Q} = R$处，其附近的屏蔽相互作用恰好具有式（1）所示的过阻尼形式，其中朗道阻尼 γ 来自热点线。
- （2）频率 ω_m。随机相位近似可以得到 $\omega_m \approx$ 25毫电子伏，但前提是将 V_0 调到距不稳定性仅约 1%的范围内，因为 ω_m 正比于与其的距离 δ 。
- （3）关联长度 ξ_c。随机相位近似无法独立产生关联长度。动力学指数 $z = 2$ 将其与频率 $\omega_m \propto \Delta q^2$联系起来：在 $\omega_m \approx 25$ 毫电子伏时，它给出 $\xi_c \approx$ 5–9a；而T_c 所要求的 $\xi_c \approx$ 2–3a 则对应于 $\omega_m \approx$ 60–120毫电子伏。
- （1）强度 U。随机相位近似大约低了一个数量级：$U \approx 0.2$ 电子伏特和 $\lambda_R \approx 0.04$–0.1,，而 $U \approx 3$ 电子伏特和 $\lambda_R \approx 0.7$相比，在三维情况下，进一步接近不稳定性也无济于事。

因此，需要引入额外因素来增强电子与 R点电荷涨落之间的顶角，以解决（1）的问题；同时使其频率与关联长度解耦，以解决（3）的问题。

D. 包括呼吸模电子-声子耦合

一个自然的候选因素是晶格。在 $BaBiO_3$ 中，R点电荷序是氧八面体的呼吸畸变，因此电荷涨落与键伸缩模式强烈混合。我们从 Meregalli 和 Savrasov 的按模式分辨的LDA耦合 [21]中提取电子-声子顶角。对于其 $6\times6\times6$ 网格上的每个波矢，呼吸支的费米面平均顶角为

$$g^2(\mathbf{q}) = \frac{\lambda_{\mathbf{q}\nu}\,\omega_{\mathbf{q}\nu}\,N_\sigma}{2J(\mathbf{q})}, \qquad W_{\mathrm{ph}}(\mathbf{q},0) = -\frac{2g^2(\mathbf{q})}{\omega_{\mathbf{q}\nu}}, \tag{29}$$

其中 $J(\mathbf{q})$ 是我们能带的嵌套函数。结果呈现键伸缩形式 $g^2(\mathbf{q}) \approx g_0^2\sum_i \sin^2(\pi q_i)$,

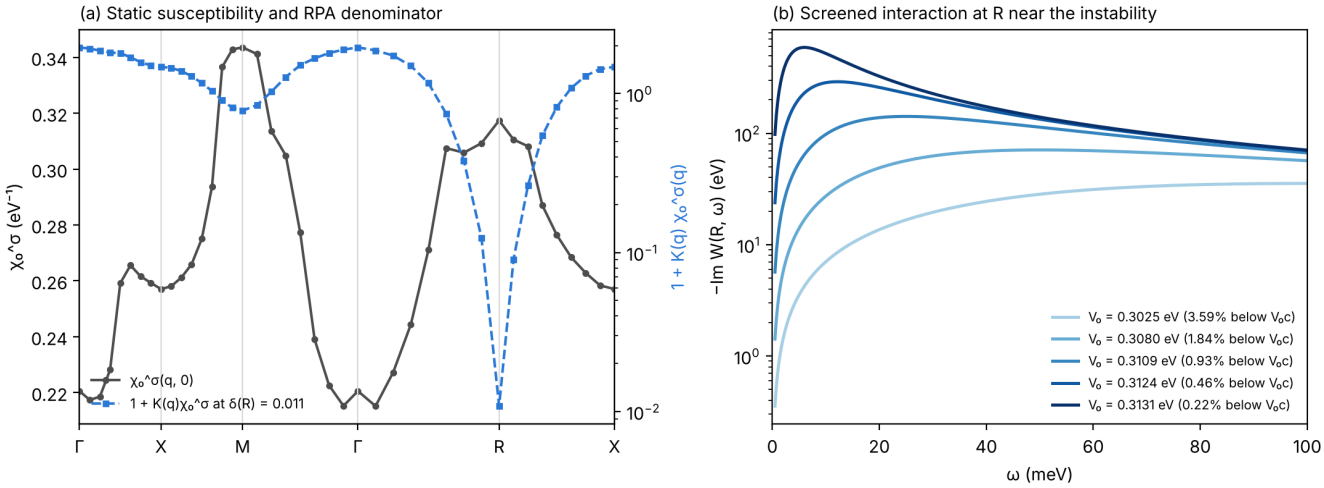

图 10。（a）沿高对称线的每自旋静态林哈德函数 $\chi_0^\sigma(\mathbf{q})$（灰色，左轴），以及当 V_0 调至 $\delta(R)$ 时的 RPA 分母 $1+K(\mathbf{q})\chi_0^\sigma(\mathbf{q})$（蓝色，右轴，对数刻度）。易感性在 M 处达到峰值，但不稳定性出现在 R 处。（b）当 V_0 趋近于 $V_0^c = 0.314$ 电子伏特时，R 处的谱函数 $-\mathrm{Im}[K/(1+K\chi_0^\sigma)] = -2\,\mathrm{Im}\ W_c$，使用公式（26）计算；峰值位于 $\omega_m = \delta/(|K|\gamma)$。

在 $g_0^2 \approx 0.02$ 电子伏特^2, 处，误差约在 30% 以内，但沿R–X方向除外，该处数值约为其一半。在 R处，g^2 =0.054 电子伏特^2，静态声子介导吸引为$W_{\mathrm{ph}} \approx -1.7$ 电子伏特，与阈值附近的电子电荷通道核 $K(\mathbf{R}\text{ 点})/2 \approx -1.6$ 电子伏特相当。因此，晶格在 R处并非微小修正。

形式上，声子会引入一种延迟的、由声子介导的相互作用 $V_{\mathrm{ph}}(\mathbf{q}\ \omega) = g^2(\mathbf{q})D(\mathbf{q}\ \omega)$，其声子传播子为 $D(\mathbf{q}\ \omega) = 2\Omega_{\mathbf{q}}/(\omega^2 - \Omega_{\mathbf{q}}^2)$；这种相互作用作用于所有电子之间，形式类似于 $V(\mathbf{q})$。于是，RPA电荷核和公式（23）中的屏蔽相互作用变为

$$K(\mathbf{q},\omega) = U_0 + 2V(\mathbf{q}) + 2g^2(\mathbf{q})\,\frac{2\Omega_{\mathbf{q}}}{\omega^2 - \Omega_{\mathbf{q}}^2},$$
$$W_c(\mathbf{q},\omega) = \frac{K(\mathbf{q},\omega)/2}{1 + K(\mathbf{q},\omega)\,\chi_0^\sigma(\mathbf{q},\omega)}. \tag{30}$$

W_c 的极点描述耦合电荷-晶格模；在 $\omega = 0$ 处，声子项化简为 $-2g^2/\Omega_{\mathbf{q}}$，即 $2W_{\mathrm{ph}}$。公式（30）适用于裸声子和裸顶角，而局域密度近似并未提供这两者。

局域密度近似频率和耦合已由LDA核 $K_{\mathrm{LDA}}(\mathbf{q})$屏蔽，因此不能将它们与裸随机相位近似相互作用相加，否则会造成双重计数。以局域密度近似声子为参照，只有超出局域密度近似的相互作用 $\Delta K(\mathbf{q}) = K(\mathbf{q}) - K_{\mathrm{LDA}}(\mathbf{q})$会使其重整化：

$$\Omega_{\mathrm{eff}}^2(\mathbf{q}) = \Omega_{\mathrm{LDA}}^2 + \frac{4\,\Omega_{\mathrm{LDA}}\,g^2\,\Delta K\,(\chi_0^\sigma)^2}{1 + \Delta K\,\chi_0^\sigma},$$
$$\frac{\lambda_{\mathrm{eff}}}{\lambda_{\mathrm{LDA}}} = \frac{\Omega_{\mathrm{LDA}}}{\Omega_{\mathrm{eff}}}\,\frac{1}{(1+\Delta K\,\chi_0^\sigma)^2}. \tag{31}$$

在 R 处，当 $\Omega_{\mathrm{LDA}} = 65$毫电子伏时，吸引性的 $\Delta K(R) = -0.5$ 电子伏会使呼吸模软化 10%，降至 58 毫电子伏并使其耦合从 0.32 增至 0.51；$\Delta K = -1$ 电子伏对应 47 毫电子伏和 0.96。耦合的晶格–电荷不稳定性出现在 $\Delta K \approx -1.55$ 电子伏，只有纯电子阈值 $|K| = 1/\chi_0^\sigma \approx 3.2$ 电子伏的一半。如果 $K_{\mathrm{LDA}}(R) \approx 0$，则对应于 $V_0 \approx 0.18$ 电子伏，而非 0.31 电子伏。因此，适度的超越LDA的关联效应可以修正LDA高估的呼吸频率，同时增强耦合；这正是文献 [23, 24]中关联增强的电子-声子耦合的 RPA对应机制。

在接近耦合不稳定性时，软模从声子继承了强顶角，其频率部分由晶格而非仅由 δ 决定。这或许能补上纯电子随机相位近似所缺少的要素：它可能将耦合增强到隧穿实验所要求的水平，使其分布在10–30毫电子伏的范围内（氧和铋模位于该范围），从而解释测得的 $\alpha^2F(\omega)$ 峰，并放宽ω_m 与 ξ_c之间的 $z = 2$ 关系。定量处理需要知道 $K_{\mathrm{LDA}}(\mathbf{q})$的动量依赖性，但对于这条能带我们尚无相关信息；此外，还需要在整个布里渊区内进行完整的耦合模计算。我们将此留待未来研究，并指出这是从第一性原理确定第二节和第三节中两个¯唯象参数 U 和ξ_c的最直接途径。

V. 结论

我们提出，$Ba_{1-x}K_xBiO_3$ 的密度泛函计算中缺失的电子–玻色子耦合，源于$\mathbf{Q} = (\pi,\pi,\pi)/a$处的动力学电荷涨落；这些涨落是母体化合物的呼吸型电荷序在金属态中的残余。我们用

一个包含三个物理参数的过阻尼玻色子模型来描述它们：相互作用强度、特征频率 ω_m 和关联长度 ξ_c。这种玻色子几乎只作用于费米面上的热点线，即 $\langle 111\rangle$ 周围的小环路，在这些位置，$\mathbf{k}$ 和$\mathbf{k}+\mathbf{Q}$ 都位于费米能级处。在这些位置，它会产生重准粒子；当关联长度较长时，还会产生影子能带和赝能隙。与此同时，求和规则将费米面-平均耦合固定为 U 倍的嵌套密度，且与玻色子频率和关联长度无关。

若将隧穿测得的总耦合取为 $\lambda \approx 1$，LDA 呼吸模贡献约 0.3，过阻尼玻色子则补足剩余的 0.7；其频率为 $\omega_m \approx 25$毫电子伏，与 $\omega_{\log} \approx 30$–40 毫电子伏相符，且低频处呈线性起始，这一点隧穿反演无法排除。随后，考虑各向异性的 Eliashberg 计算在关联长度为两个到三个晶格间距时，得到 $T_c \approx 25$–30 K。在此状态下，能隙呈 s 波，但在 $\langle 111\rangle$ 附近增强了 3–4 倍；该处的准粒子质量约为沿 $\langle 100\rangle$方向的两倍。对于尖锐峰，问题可简化为热点环上相互独立的配对，满足 $T_c \propto \sqrt{\bar{U}\omega_m}$；而变号的 T_{2g} 态与 s 波配对的竞争势均力敌。

在扩展 Hubbard 模型的随机相位近似中，过阻尼玻色子模型会在 R附近的电荷不稳定性处自然出现，其形式恰好与假设一致，并且阻尼由热点线产生。然而，只有将参数调节到非常接近该不稳定性时，其频率才能匹配；纯电子涨落的强度小了一个数量级，作用范围也过长，无法解释另外两个参数。它们与呼吸模晶格畸变的耦合可能是缺失强度的一个合理来源：这种耦合会使该模软化并增强顶角，但仍需通过完整的耦合模计算加以确认。该理论给出了可直接检验的实验预测：能隙和质量增强集中在 $\langle 111\rangle$ 方向附近，可通过在适当 k_z下进行角分辨光电子能谱观测；在非弹性 X 射线或中子散射中，R 点处会出现柔软而宽广的电荷响应；此外，如果 T_{2g} 态得以实现，还将在相位敏感实验和无序实验中显现相位变号的迹象。

附录 A：导带的紧束缚拟合

导带由简单立方晶格上的傅里叶级数表示，

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{R}} t(\mathbf{R})\, e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} = \sum_{s} t_s \sum_{\mathbf{R}\in s} \cos(\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}), \qquad \text{(A1)}$$

其中 s 遍历表 V 中列出的 14 组对称等价晶格矢量 $\mathbf{R} = (l, m, n)a$，包括格点内项。这些参数拟合自立方 Ba铋O_3 的导带，该导带通过局域密度近似（LDA）下的密度泛函计算得到，如图 1 所示；掺

表 V. 式 (A1) 的紧束缚参数。

壳层 $(l\,m\,n)$	壳层中的矢量	t (Ry)
0 0 0	1	−0.004276
1 0 0	6	−0.033732
1 1 0	12	−0.004074
1 1 1	8	0.001826
2 0 0	6	0.010065
2 1 0	24	0.001172
2 1 1	24	−0.000648
2 2 0	12	−0.000801
2 2 1	24	0.000808
3 0 0	6	−0.002495
3 1 0	24	0.001248
3 1 1	24	−0.000405
2 2 2	8	−0.000448
3 2 0	24	−0.000366

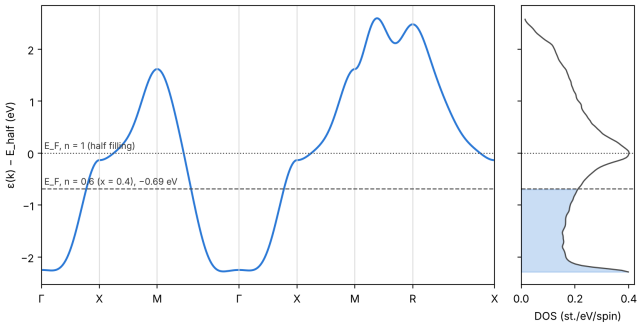

图 A1. 式 (A1) 的紧束缚导带沿与图 1 的 LDA能带相同的路径 Γ–X–M–Γ–X–M–R–X （左）及其每自旋态密度（右），能量以半填充能量为基准。点线： $n = 1$ （半填充，母体 $BaBiO_3$）的费米能级，位于 X 处的范霍夫鞍点之上 0.14 电子伏特。虚线： $n = 0.6$ （$x = 0.4$）的费米能级， $\mu = -0.69$ 电子伏特，全文均采用此值；阴影区域为能带的占据部分。

通过固定电子数，在刚性能带近似下处理掺杂。能量以半填充能量为基准。

能带速度为 $\mathbf{v}(\mathbf{k}) = -\sum_{\mathbf{R}} t(\mathbf{R})\, \mathbf{R}\sin(\mathbf{k}\cdot\mathbf{R})$。该能带范围为 -0.169至 $+0.190$ Ry（带宽为 4.89 电子伏特），在 Γ 处为 $\varepsilon = -0.165$ Ry，在 X处为 -0.010 Ry，在 M 处为 $+0.119$ Ry，在 R 处为 $+0.182$ Ry。由于 $(2, 0, 0)$ 跃迁为正，能带最低点略微偏离 Γ，位于 Γ–R 方向上；最高点位于 M–R 路径的中途。 X 处的鞍点比半填充能量低 0.14 电子伏特，使得半填充时的态密度为 5.5 states/(Ry·spin·cell)。

本文所有计算均采用每个格点 $n = 0.6$ 个电子（$x = 0.4$），其相对于半填充的能量为 $\mu = -0.0506$ Ry（-0.69 电子伏特），态密度为 $N_\sigma(0) = 2.9$ 态/(Ry·自旋·晶胞)$= 0.21$ 电子伏特$^{-1}$。能带及其态密度如图 A1 所示。

[1] A. W. Sleight、J. L. Gillson 和 P. E. Bierstedt，《BaPb$_{1-x}$Bi$_x$O$_3$ 体系中的高温超导性》，《固体状态通讯》17，27（1975年）。[2] R. J. Cava、B. Batlogg、J. J. Krajewski、R. C. Farrow、L. W. Rupp, Jr.、A. E. White、K. T. Short、W. F. Peck, Jr. 和 T. V. Kometani，《无需铜的近 30 K 超导性：Ba$_{0.6}$K$_{0.4}$BiO$_3$ 钙钛矿》，《自然》（伦敦）332，814（1988年）。[3] L. F. Mattheiss、E. M. Gyorgy 和 D. W. Johnson, Jr.，《Ba-K-Bi-O体系中高于 20 K 的超导性》，《物理评论B》37，3745（1988年）。[4] D. G. Hinks、B. Dabrowski、J. D. Jorgensen、A. W. Mitchell、D. R. Richards、S. Pei 和 D. Shi，《Ba$_{1-x}$K$_x$BiO^{3-y} 体系的合成、结构与超导性》，《自然》（伦敦）333，836（1988年）。[5] D. E. Cox 和 A. W. Sleight，《混合价态 Ba$_2$Bi^{3+}Bi^{5+}O$_6$：结构和性质随温度的变化》，《晶体学报B辑》35，1（1979年）。[6] T. M. Rice 和 L. Sneddon，《BaPb$_{1-x}$Bi$_x$O$_3$, 中的实空间与 k 空间电子配对》，《物理评论快报》47，689（1981年）。[7] Q. Huang、J. F. Zasadzinski、N. Tralshawala、K. E. Gray、D. G. Hinks、J. L. Peng 和 R. L. Greene，《隧穿实验为超导 Ba$_{1-x}$K$_x$BiO$_3$ 和 Nd$_{2-x}$Ce$_x$CuO^{4-y}中以电子-声子耦合为主提供证据》，《自然》（伦敦）347，369（1990年）。[8] F. Sharifi、A. Pargellis、R. C. Dynes、B. Miller、E. S. Hellman、J. Rosamilia 和 E. H. Hartford, Jr.，《高T_c 铋酸盐超导体中的电子隧穿》，《物理评论B》44，12521（1991年）。[9] P. Samuely、N. L. Bobrov、A. G. M. Jansen、P. Wyder、S. N. Barilo 和 S. V. Shiryaev，《Ba$_{1-x}$K$_x$BiO$_3$, 中电子-声子相互作用的隧穿测量》，《物理评论B》48，13904（1993年）。[10] C.-K. Loong、P. Vashishta、R. K. Kalia、W. Jin、M. H. Degani、D. G. Hinks、D. L. Price、J. D. Jorgensen、B. Dabrowski、A. W. Mitchell、D. R. Richards 和 Y. Zheng，《Ba$_{1-x}$K$_x$BiO$_3$, 中的声子态密度与氧同位素效应》，《物理评论B》45，8052（1992年）。[11] C.-K. Loong、D. G. Hinks、P. Vashishta、W. Jin、R. K. Kalia、M. H. Degani、D. L. Price、J. D. Jorgensen、B. Dabrowski、A. W. Mitchell、D. R. Richards 和 Y. Zheng，《由声子态密度揭示的超导 Ba$_{1-x}$K$_x$BiO$_3$ 中的氧同位素效应》，《物理评论快报》66，3217（1991年）。[12] B. Batlogg、R. J. Cava、L. W. Rupp, Jr.、A. M. Mujsce、J. J. Krajewski、J. P. Remeika、W. F. Peck, Jr.、A. S. Cooper 和 G. P. Espinosa，《BiO超导体中的态密度与同位素效应：非声子机制的证据》，《物理评论快报》61，1670（1988年）。[13] C. H. P. Wen、H. C. Xu、Q. Yao、R. Peng、X. H. Niu、Q. Y. Chen、Z. T. Liu、D. W. Shen、Q. Song、X. Lou、Y. F. Fang、X. S. Liu、Y. H. Song、Y. J. Jiao、T. F. Duan、H. H. Wen、P. Dudin、G. Kotliar、Z. P. Yin 和 D. L. Feng，《揭示 Ba$_{0.51}$K$_{0.49}$BiO$_3$, 的超导机制》，《物理评论快报》121，117002（2018年）。[14] P. B. Allen 和 R. C. Dynes，《重新分析强耦合超导体的转变温度》，《物理评论B》12，905（1975年）。[15] A. V. Puchkov、T. Timusk、W. D. Mosley 和 R. N. Shelton，《Ba$_{0.6}$K$_{0.4}$BiO$_3$ 单晶的光学研究：正常态与超导性质，《物理评论B》50, 4144 (1994)。[16] F. Marsiglio、J. P. Carbotte、A. Puchkov 和 T. Timusk，Ba$_{1-x}$K$_x$BiO$_3$, 光学电导率的虚部，《物理评论B》53, 9433 (1996)。[17] H. J. Kaufmann、O. V. Dolgov 和 E. K. H. Salje，Ba$_{1-x}$K$_x$BiO$_3$的光学响应：超导性存在异常耦合机制的证据？arXiv:cond-mat/9807314 (1998)。[18] L. F. Mattheiss 和 D. R. Hamann，高T_c 超导体 Ba$_{1-x}$K$_x$BiO$_3$, 的电子结构，《物理评论快报》60, 2681 (1988)。[19] N. Hamada、S. Massidda、A. J. Freeman 和 J. Redinger，超导 Ba$_{1-x}$K$_x$BiO$_3$, 的电子结构、光电子发射、逆光电子发射和 X 射线发射光谱，《物理评论B》40, 4442 (1989)。[20] M. Shirai、N. Suzuki 和 K. Motizuki，BaPb$_{1-x}$Bi$_x$O$_3$ 及 Ba$_x$K$_{1-x}$BiO$_3$, 中的电子-晶格相互作用与超导性，《凝聚态物理杂志》2, 3553 (1990)。[21] V. Meregalli 和 S. Y. Savrasov，掺杂 BaBiO3 中的电子-声子耦合及其性质，57, 14453 1998 《物理评论B》（）。[22] C. Franchini、G. Kresse 和 R. Podloucky，掺杂 BaBiO3 中的极化子空穴俘获，102, 256402 2009 《物理评论快报》（）。[23] Z. P. Yin、A. Kutepov 和 G. Kotliar，关联增强的电子-声子耦合：GW及屏蔽杂化泛函在铋酸盐、氯氮化物和其他高T_c 超导体中的应用，《物理评论X》3, 021011 (2013)。[24] Z. Li、G. Antonius、M. Wu、F. H. da Jornada 和 S. G. Louie，基于 GW 方法的从头算线性响应理论得到的电子-声子耦合：Ba$_{1-x}$K$_x$BiO$_3$, 中的关联增强相互作用与超导性，《物理评论快报》122, 186402 (2019)。[25] A. S. Alexandrov 和 V. V. Kabanov，[标题待核实], ，《物理评论B》54, 3655 (1996)。[26] I. B. Bischofs、V. N. Kostur 和 P. B. Allen，电荷密度波中的极化子和双极化子缺陷：轻度掺杂 BaBiO$_3$, 的模型，《物理评论B》65, 115112 (2002)。[27] R. Nourafkan、F. Marsiglio 和 G. Kotliar，Ba$_{1-x}$K$_x$BiO$_3$, **109**, K017001 (2012)。[28] N. Derimow、J. Labry、A. Khodagulyan、J. Wang 和 G.-M. Zhao，最优掺杂铋酸盐 Ba$_{0.63}$K$_{0.37}$BiO$_3$, 中的极化子高温超导，arXiv:1410.4100 (2014)。[29] C. Castellani、C. Di Castro 和 M. Grilli，电荷不稳定性附近的奇异准粒子散射，《物理评论快报》75, 4650 (1995)。[30] A. Perali、C. Castellani、C. Di Castro 和 M. Grilli，电荷不稳定性附近的 d-波超导性，《物理评论B》54, 16216 (1996)。[31] A. J. Millis、H. Monien 和 D. Pines，YBa$_2$Cu$_3$O$_7$, 正常态核弛豫的唯象模型，《物理评论B》42, 167 (1990)。[32] Ar. Abanov、A. V. Chubukov 和 J. Schmalian，自旋-费米子模型的量子临界理论及其在铜氧化物中的应用：正常态分析，Adv.

Phys. **52**, 119 (2003)。[33] P. Monthoux、A. V. Balatsky 和 D. Pines，走向反铁磁关联铜氧化物中高温超导理论，《物理评论快报》**67**, 3448 (1991)。[34] P. Monthoux 和 D. Pines，$YBa_2Cu_3O_7$：一种近反铁磁费米液体，《物理评论B》**47**, 6069 (1993)。[35] D. J. Scalapino、E. Loh, Jr. 和 J. E. Hirsch，自旋密度波不稳定性附近的 d-波配对，《物理评论B》**34**, 8190 (1986)。[36] D. J. Scalapino，共同主线：非常规超导体的配对相互作用，《现代物理评论》**84**, 1383 (2012)。[37] R. Hlubina 和 T. M. Rice，具有费米面热点的模型中电阻率随温度的变化，《物理评论B》**51**, 9253 (1995)。[38] Y. M. Vilk 和 A.-M. S. Tremblay，Hubbard模型与单粒子赝能隙的非微扰多体方法，《法国物理学杂志 I》**7**, 1309 (1997)。[39] J. Schmalian、D. Pines 和 B. Stojković，欠掺杂铜氧化物超导体中的弱赝能隙行为，《物理评论快报》**80**, 3839 (1998)。[40] Ar. Abanov、A. V. Chubukov 和 A. M. Finkel'stein，磁不稳定性附近二维系统中的相干配对与非相干配对，《欧洲物理快报》**54**, 488 (2001)。[41] M. A. Metlitski 和 S. Sachdev，二维金属的量子相变。II. 自旋密度波序，《物理评论B》**82**, 075128 (2010)。[42] R. Arpaia、S. Caprara、R. Fumagalli、G. De Vecchi、Y. Y. Peng、E. Andersson、D. Betto、G. M. De Luca、N. B. Brookes、F. Lombardi、M. Salluzzo、L. Braicovich、C. Di Castro、M. Grilli 和 G. Ghiringhelli，贯穿铜基高T_c超导体相图的动态电荷密度涨落，《科学》**365**, 906 (2019)。[43] S. Caprara、C. Di Castro、G. Seibold 和 M. Grilli，动态电荷密度波主导相图

铜氧化物，《物理评论B》**95**, 224511 (2017). [44] M. L. Kulić，电子-声子相互作用与强关联的相互影响：通向高温超导的可能途径，《物理报告》**338**, 1 (2000). [45] I. I. Mazin, D. J. Singh，M. D. Johannes 和 M. H. Du，$LaFeAsO_{1-x}F_x$中序参量发生符号反转的非常规超导，《物理评论快报》**101**, 057003 (2008). [46] L. S. Ornstein 和 F. Zernike，单一物质临界点处密度和乳光的偶然偏差，阿姆斯特丹科学院院刊**17**, 793 (1914). [47] J. A. Hertz，量子临界现象，《物理评论B》**14**, 1165 (1976). [48] A. J. Millis，非零温度对巡游费米子系统中量子临界点的影响，《物理评论B》**48**, 7183 (1993). [49] W. L. McMillan 和 J. M. Rowell，根据超导态密度计算的铅声子谱，《物理评论快报》**14**, 108 (1965). [50] S. P. Rudin，R. Bauer，A. Y. Liu 和 J. K. Freer- icks，重新评估电子-声子耦合强度：以铟为案例检验第一性原理 和多体理论方法，《物理评论B》**58**, 14511 (1998). [51] P. W. Anderson，脏超导体理论，固体物理化学杂志**11**, 26 (1959). [52] A. J. Millis，S. Sachdev 和 C. M. Varma，非弹性散射以及各向异性和各向同性超导体中的对破坏，《物理评论B》**37**, 4975 (1988). [53] A. A. Abrikosov 和 L. P. Gor'kov，顺磁杂质对超导合金理论的贡献，实验与理论物理杂志**39**, 1781 (1960) [苏联物理学—实验与理论物理杂志**12**, 1243 (1961)]. [54] A. V. Balatsky，I. Vekhter 和 J.-X. Zhu，杂质在常规和非常规超导体中诱导的态，《现代物理评论》**78**, 373 (2006).