

声子波动诊断：AV₃Sb₅ Kagome 金属中的电荷有序起源

Stefan Enzner,¹ Jan Berges,² Arne Schobert,^{3,4} Dongjin Oh,⁵ Mingyu Kang,⁶ Riccardo Comin,⁵ Ronny Thomale,¹ Tim Wehling,^{4,7} Domenico Di Sante,⁸ and Giorgio Sangiovanni^{1,*}

¹*Institut für Theoretische Physik und Astrophysik and Würzburg-Dresden Cluster of Excellence ct.qmat, Universität Würzburg, 97074 Würzburg, Germany*

²*U Bremen Excellence Chair, Bremen Center for Computational Materials Science, and MAPEX Center for Materials and Processes, University of Bremen, 28359 Bremen, Germany*

³*Institut für Theoretische Physik, Universität Bremen, 28359 Bremen, Germany*

⁴*I. Institute of Theoretical Physics, University of Hamburg, 22607 Hamburg, Germany*

⁵*Department of Physics, Massachusetts Institute of Technology, Cambridge, MA 02139, USA*

⁶*Department of Electrical and Computer Engineering, University of California at San Diego, La Jolla, CA 92037, USA*

⁷*The Hamburg Centre for Ultrafast Imaging, 22761 Hamburg, Germany*

⁸*Department of Physics and Astronomy, University of Bologna, 40127 Bologna, Italy*

(10Dated: 2025 年 4 月 14 日)

charge-density wave (CDW) 在 AV₃Sb₅ (A = K, Rb, Cs) 准晶金属中的微观起源仍然是一个长期存在的问题，通常围绕着电子-声子耦合和涉及范霍夫场景、嵌套以及亚晶格干扰的纯电子机制。为了揭示驱动 CDW 转变的过程，我们将从头算计算与声子自能分析相结合，并考虑 angle-resolved photoemission spectroscopy (ARPES)。我们基于 ARPES 数据的动量分辨研究表明，在 kagome 金属 V-135 族中，晶格不稳定似乎也由远离高对称点的电子态驱动，在这些状态下，它们与导致 CDW 失真的声子模式表现出最强的耦合。立足于基于声子涨落诊断的解释方案，我们的工作挑战并修正了迄今为止将 CDW 的形成完全归因于费米能级附近嵌套效应的理论。

介绍 – Kagome 金属已成为一种奇异电子物质状态的新领域 [1–3]。在 kagome 金属中的不稳定性被认为是源于简化的理论模型中拓扑结构、电子-电子相互作用以及由于费米能级 [4–10] 处的态增加复杂性所导致的错综复杂的相互作用 Van Hove singularity (VHS)。然而，Kagome 金属是实际材料，其复杂程度高于少数带紧束缚费米子模型中编码的内容，因此识别对各种不稳定性相关的电子自由度仍然是该领域的重大未解问题。在此，我们直接确定了 kagome 金属中晶格不稳定性的电子自由度。我们发现这些不稳定性涉及一系列化合物内部深处的电子态 Brillouin zone (BZ)，即远离高对称点。这一从头算基于的发现挑战了当前基于低能量 VHS 场景、嵌套和费米面不稳定性 [4–8] 的理解。能够充分追踪远离费米能级的电子自由度，我们的发现为理解最近的 angle-resolved photoemission spectroscopy (ARPES) 提供了新的视角。

AV₃Sb₅ (A = K, Rb, Cs) 林格网超导体家族由于其有趣的晶格、挫折、拓扑、量子几何、手性排序、时间反演对称性破缺、平坦带以及 charge-density wave (CDW) [11–13] 出现而受到了大量研究。特别是，电荷排序不稳定性及

其与超导性的联系目前正受到激烈的讨论 [14]。AV₃Sb₅ 组的成员在 78 K–103 K 以下显示出一个 CDW 过渡，其中结构经历了一个 2 × 2 × 2(4) 重建 [14–17]。在一个单层 (二维) 水平上，假定该化合物采取了 Star of David (SD) 或一个 inverse Star of David (ISD) 构型。实验上，基于 135 伏的 kagome 结构表现出不同的三维基态重构，其中 SD 和/或 ISD 可以有或没有 π 位移地堆叠 [18, 19]。这种重新排列可以直接与在 M 点和 L 点附近理论上观察到的声子不稳定性联系起来。我们将特别关注 $\mathbf{q} = \mathbf{L}$ ；这是因为我们发现它表现出最大的虚频声子频率 (Fig. 1(c))，尽管 M 和 L 的任意组合原则上都能贡献于 2 × 2 × 2 重构 (参见 Supplementary Information (SI) 中的 $\mathbf{q} = \mathbf{M}$ 分析)。

基于 V 的 135 型三角形晶格化合物的结构由一个钒三角形晶格 (红色 Fig. 1(a)) 构成，该晶格被上方、下方以及三角形晶格内部的 Sb 原子包围。这些 V₃Sb₅ 层由 A 原子分隔开，并决定了费米能级附近 V *d* 和 Sb *p* 主导的轨道贡献。正是这种多轨道行为复杂化了对低能量物理学的理解，使得简单的单轨道三角形晶格描述不足 [4, 20]。

与其构建具有特定轨道特征的玩具模型来研究晶格不稳定性，我们基于从 density-functional theory (DFT) 和 density-functional perturbation theory (DFPT) 导出的

* e-mail: giorgio.sangiovanni@uni-wuerzburg.de

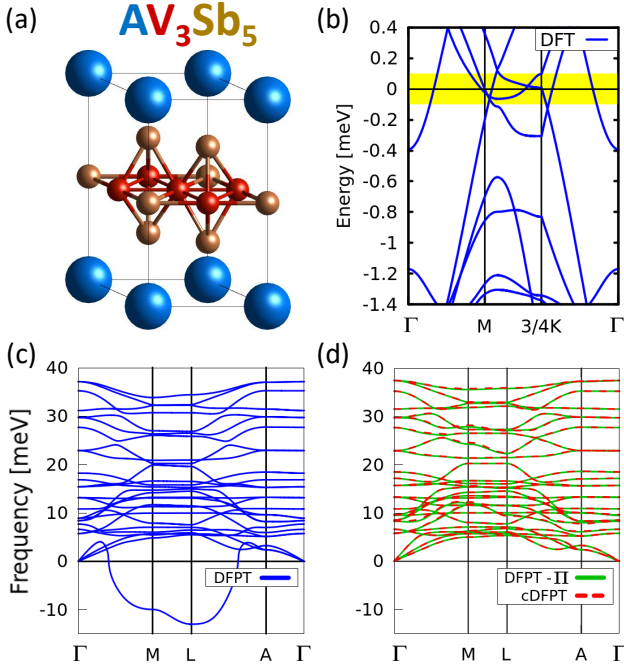


图 1. (a) AV_3Sb_5 的原始单元胞。(b) CsV_3Sb_5 沿着 Fig. 2 所示路径的能带结构。突出显示的区域表示用于 cDFPT 计算的活子空间 $\mathcal{A}$ 。(c) CsV_3Sb_5 的声子色散，从 DFPT 获得的不稳定模式在 $\mathbf{q} = M$ 和 $\mathbf{q} = L$ 处。(d) 来自 cDFPT 的声子色散以及使用近似的 $(g^{\mathcal{A}}g^* \rightarrow |g|^2)$ 声子自能“去除屏蔽”的 DFPT 结果。

从头算方法确定了电子过程和相关电子状态。此分析通过检查与 CDW 的微观起源直接相关的 $\mathbf{k}$ -动量分辨声子自能来进行，我们将其称为声子波动诊断 [21, 22]。我们将声子自能表示为电子磁化率和电子-声子耦合的乘积，在电子动量空间中进行解析。因此，声子波动诊断可以区分给定晶格不稳定性中的电子贡献与电子-声子贡献。此外，我们对比了波动诊断与 ARPES 测量的结果，这提供了对我们发现前所未有的确认。

迄今为止关于 CDW 机制起源的常见叙述集中在电子相互作用、声子模式和电子-声子耦合以及费米表面性质（如 VHS 的性质和费米能级距离、费米面嵌套和亚晶格干涉 [4–8]）等主题之间。一个首选的情景是从 M 点和 L 点附近费米能级处 VHS 的大态密度推导出电荷序不稳定性。声子不稳定向量 $\mathbf{q} = M$ 和 $\mathbf{q} = L$ 连接这些高对称点，暗示一种导致 2×2 不稳定的 Peierls 机制 [4]。这一解释暗示了电荷序与范霍夫奇点接近费米能级之间的相关性，但该观点被 Kagome $CsTi_3Bi_5$ 挑战。在那里，通过掺杂可以将 VHS 的能量调节到费米能级，然而并未观察到 CDW [23]。甚至更激进的是，最近的研究揭示了 CDW 序参量与 VHS 距离费米能级之间的反相关性。撇开电荷与

斜向序排列倾向的细微差别 [24] 及其在普通和高阶 VHS 之间的区别不谈，这表明在 VHS 处的电子态可能不是驱动 CDW [25] 的单一机制。另一个相关的情景围绕更一般的（费米面）嵌套，其中，不稳定向量 [5] 连接的是整个线而不是特定的高对称点在 BZ 中。尽管这一理性思想能够解释理想系统中完美嵌套的 CDW 的起源，但它难以解释在压力和应变下实际能带结构中的费米面嵌套显著恶化但电荷序不稳定依然基本不受影响的现象。虽然之前提到的情景暗示了电子关联效应的主导作用，并且最多只进行了粗粒化的电子-声子耦合建模，但电荷序不稳定性也可能由强烈的或 $\mathbf{k}$ 选择性的电子-声子耦合 [6] 决定。

在本文中，我们试图从从头算角度将建模推向新的层次，以此来阐明 AV_3Sb_5 中 CDW 不稳定性的起源。我们发现电子-声子耦合的性质构成驱动电荷有序机制的关键成分，并且理论建模与 ARPES 结果之间达到了暗示性的一致。不稳定性与声子自能—为了调查电荷密度波 (CDW) 的起源，我们首先建立了声子自能 Π 与晶格不稳定性的联系。原子间力常数，因此也包括声子，主要由电子密度对离子位移的响应所决定。在下文中，我们将展示最相关的贡献来自能量接近化学势的低能电子。我们将该活子空间的低能电子态表示为 $\mathcal{A}$ 。该子空间内过程对力常数的贡献为

$$\Pi_{\mathbf{q}\mu\nu}^{\mathcal{A}} = \frac{2}{N} \sum_{\mathbf{k}mn} g_{\mathbf{q}\mu\mathbf{k}mn}^{\mathcal{A}} \frac{f(\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}m}) - f(\varepsilon_{\mathbf{k}n})}{\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}m} - \varepsilon_{\mathbf{k}n}} g_{\nu\mathbf{k}mn}^*, \quad (1)$$

其中 Kohn-Sham 能量为 ε ，对应的占据数为 f ，(部分) 屏蔽的电子-声子耦合为 $g^{(\mathcal{A})}$ ，电子和声子波矢分别为 $\mathbf{k}$ 和 $\mathbf{q}$ 以及带指数为 m, n 和 μ, ν ，以及求和的波矢数目为 N 。虽然求和被限制在活性状态 $\{|\mathbf{k}m\rangle, |\mathbf{k}+\mathbf{q}m\rangle\} \subset \mathcal{A}$ ，部分屏蔽耦合 $g^{\mathcal{A}}$ 排除屏蔽来自这些状态之间的散射。我们使用费米能级附近宽度为 0.1 eV 的活动窗口 $\mathcal{A}$ (如 Fig. 1(b) 所示)，并利用 DFT, DFPT [26] 和 cDFPT [27] 计算 ε , g 和 $g^{\mathcal{A}}$ 。

与在 Fig. 1(c) 中不稳定且与大量文献吻合的 DFPT 结果相比，部分屏蔽 $\mathcal{A}$ 内部的 cDFPT 方法稳定了结构 (见 Fig. 1(d)) [28, 29]。类似地，通过使用

$$\tilde{\omega}_{\mathbf{q}\mu\nu}^2 = \omega_{\mathbf{q}\nu}^2 \delta_{\mu\nu} + 2\sqrt{\omega_{\mathbf{q}\mu}\omega_{\mathbf{q}\nu}} \Pi_{\mathbf{q}\mu\nu}, \quad (2)$$

通过声子自能重正化 DFPT 频率，也可以避免声子不稳定并非常准确地重现 cDFPT 结果 [21]。这里， $\tilde{\omega}_{\mathbf{q}\mu\nu}$ 和 $\omega_{\mathbf{q}\nu}$ 是重正化和从头算声子频率。

稳定化强调了 CDW 不稳定性编码在声子自能或相应的屏蔽减少中。这些方法唯一显著改变的声子模式是不稳定的一种。这进一步强调了声子自能与 CDW 不稳定性之间的直接联系。由于 Fig. 1(d) 中的一致性，我们为了

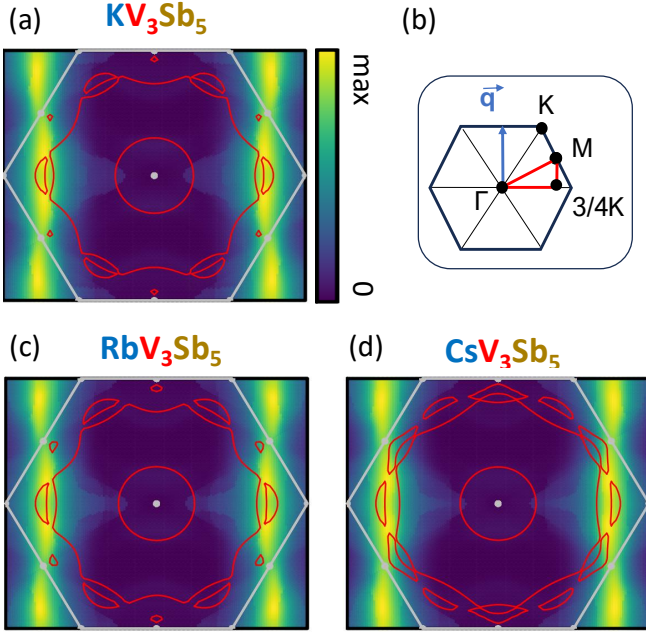


图 2. (a)、(b) 和 (c) AV_3Sb_5 的声子自能的 $\mathbf{k}$ 分辨电子贡献, 适用于 $A = (K, Rb, Cs)$ 的 $\mathbf{q} = L$, 在 $k_z = 0$ 平面上可视化。电子 BZ 内的费米轮廓以红色显示。钒-135 卡戈梅家族的所有成员都表现出相似的自能, 主要贡献发生在 M 点之间区域, 但并不直接在 M 点。(b) 显示了高对称点和所用 $\mathbf{q}$ 的平面内分量。

简单起见用两个屏蔽的 g 来近似 Eq. (1) (作为 $g^A \rightarrow g$ 对于 $A \rightarrow \emptyset$) [30, 31]。

在建立了声子自能对于 135-V Kagome 结构中 CDW 不稳定性关键作用之后, 对家族中的三个成员进行了比较。基于从头算的结果, 在不稳定性的波矢 $\mathbf{q} = L$ 处, $\mathbf{k}$ 解析的电子贡献到声子自能如 Fig. 2 所示 (在 $\mathbf{k}$ 求和之前为 Eq. (1))。为了清晰起见, 我们将分析限制在三个等价的 $\mathbf{q} = L$ 向量之一上, 这使得特征仅以 C_2 对称性出现。然而, 当涉及所有三个 $\mathbf{q} = L$ 向量时, 所调查的性质保留了结构完整的 C_6 对称性。值得注意的是, $\mathbf{k}$ 对声子自能的影响在所有三种材料中相似, 表明其起源相同且 CDW 的行为一致。最高的振幅出现在两个相邻的 M 点之间, 这些区域通过所研究的 $\mathbf{q}$ 向量的平面分量相连, 该向量与不稳定性相关联。然而, 重要的是要强调这一范围并未完全延伸到 M 点, 在那里只观察到了微小的声子自能贡献。这一观察结果认为 VHS 情景不太可能是电荷不稳定性主要驱动因素。在这种情况下, 预期在态密度发散的 M 点附近声子自能贡献最强。

Fig. 2 显示了三种 AV_3Sb_5 材料的费米面, 以红色展示在电子 BZ 内部。这里显示了 $\mathbf{k}$ 解析的声子自能对于 $k_z = 0$ 的情况, 因为我们没有发现较强的 k_z 依赖性 (见 SI)。

M 点之间的区域的重要性通过比较能量有利的 $2 \times 2 \times 2$ 交错 ISD 超晶格中的展开 DFT 能带结构与 ARPES 图进一步强调。这是为 KV_3Sb_5 完成的, 如前所述, 它在低温下表现出理论上预期的 $2 \times 2 \times 2$ 重构 [18, 32]。实验和理论上, 当温度降低到 CDW 相变温度以下时, 可以在 Fig. 3 沿着指示的路径穿过相邻的 M 点观察到能带分裂。如 Fig. 3(b) 所示, 这些分裂不仅发生在 M 点之间, 而且也在它们之间发生, 这与之前的报道一致, 进一步反驳了主导的 VHS 场景 [5]。此外, 在 M 附近费米能级附近的强度显著下降中可以明显看出这种分裂。通过结合声子波动诊断和 ARPES, 我们实验证实了动量空间中的区域, 这是我们从分析声子自能的作用中理论识别出来的。

声子波动诊断 – 在下面的内容中, 将进一步研究声子自能。为了区分电子响应和矩阵元, 我们考虑动量分辨的声子自能 $\Pi_{\mathbf{q}\mu\nu\mathbf{k}mn}$ 为电子-声子耦合 $g_{\mathbf{q}\mu\nu\mathbf{k}mn}^2$ 和电子敏感度 $\chi_{\mathbf{q}\mathbf{k}mn}^0$ 的乘积。这使得我们可以区分电子密度响应对原子位移的不同贡献, 并使我们能够识别与 CDW 起源相关的声子软化的电子过程。我们代表性的讨论了 KV_3Sb_5 , 并参考其他化合物的 SI。相关公式如下:

$$\Pi_{\mathbf{q}\mu\nu\mathbf{k}mn} = g_{\mathbf{q}\mu\nu\mathbf{k}mn}^2 \times \chi_{\mathbf{q}\mathbf{k}mn}^0, \quad (3)$$

$$g_{\mathbf{q}\mu\nu\mathbf{k}mn}^2 = g_{\mathbf{q}\mu\mathbf{k}mn}^{(A)} g_{\mathbf{q}\nu\mathbf{k}mn}^*, \quad (4)$$

$$\chi_{\mathbf{q}\mathbf{k}mn}^0 = \frac{f(\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}m}) - f(\varepsilon_{\mathbf{k}n})}{\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}m} - \varepsilon_{\mathbf{k}n}}, \quad (5)$$

我们分析了在 $\mathbf{q} = L$ 处的声子模式, 这是最高虚频率出现的位置, 表明系统中存在不稳定性 (声子支指数 $\nu = \mu = \text{soft mode}$)。对应的 $\mathbf{k}$ 分解电子-声子耦合通过从头算计算获得, 并在 Fig. 4(a) 中对 $k_z = 0$ 进行了描绘 (计算详情请参见方法部分)。我们发现在所选 $\mathbf{q}$ 向量的平面分量连接的 M 点之间的区域存在最强的电子-声子耦合, 而不是在 M 点本身。为了说明与声子自能相关的电子-声子耦合系数, 在 Fig. 4(a) 中, 我们在费米能级附近对带指标 m 和 n 进行求和, 因为只有这些才对与 susceptibility 的乘积有贡献 (见 Eq. (3))。基于 Wannier 模型的 Eq. (5) 计算得出的电子 susceptibility 如图 Fig. 4(b) 所示, 同时还展示了用实线表示的 $k_z = 0$ 费米面。此外, 通过不稳定性波矢量 $\mathbf{q} = L$ 移位的费米面用虚线描绘出来以可视化可能的低能跃迁。如预期的那样, 在 M 点附近可以找到对电子磁化率最强的贡献 (请参见 SI 以获取带分辨磁化率)。

然而, 电子声子耦合仅选择介于 $\mathbf{k}$ 区域的磁化率 M 点之间的部分对最终的声子自能在 Fig. 4(c) 中的贡献。

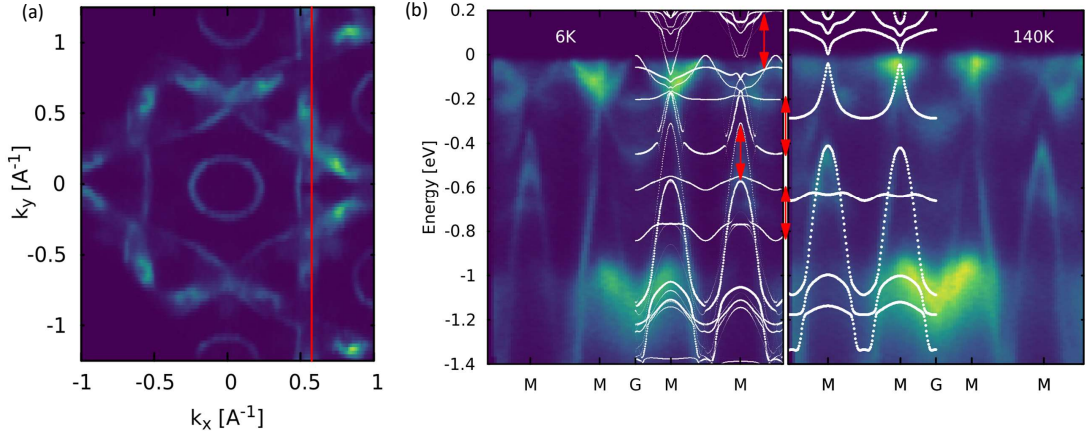


图 3. (a) KV_3Sb_5 在低温相中的费米面，红色路径通过相邻的 M 点。(b) 在 CDW 温度转变点以下和以上的 ARPES 能带结构，叠加了 DFT 能带以及交错 ISD $2 \times 2 \times 2$ 相的展平 DFT 能带结构和原胞的能带。在 CDW 过渡温度以下，能带沿着 M 点之间的识别路径分裂，如红色箭头所示。

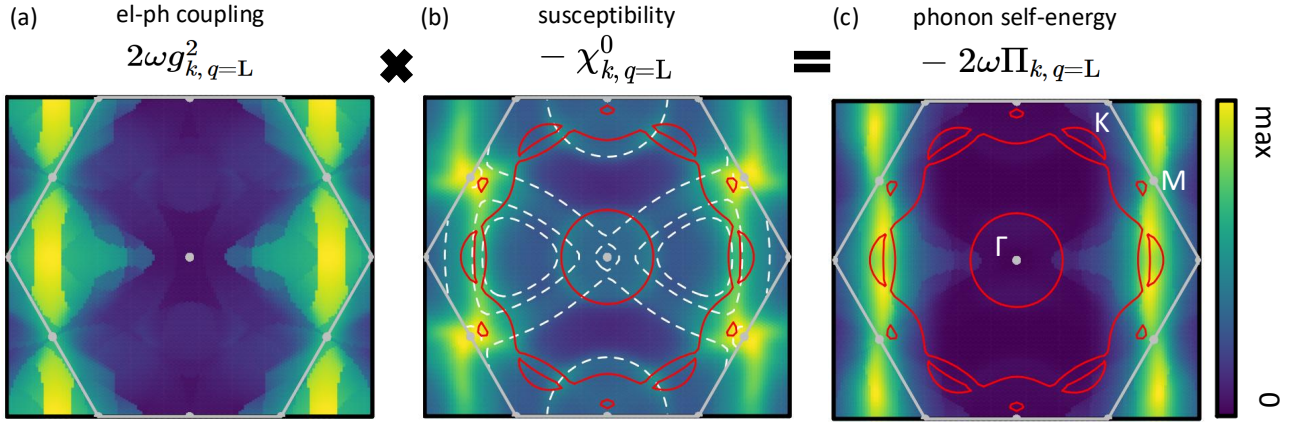


图 4. k -动量分辨的声子涨落诊断不稳定模式在 $q = L$ 下的 $k_z = 0$ 。(a) 电子敏感度 χ^0 ，(b) 耦合矩阵元 $2\omega g^2$ (电声)，和 (c) 声子自能 $2\omega\Pi$ 被展示。实线表示费米面，虚线表示向内移动了 $q = L$ 的费米面，位于电子 BZ 区域内。在 M 点之间的强声子-电子耦合主导了声子自能。

这突出了电子声子矩阵元在决定声子自能时对电子嵌套或范霍夫效应的优势。这样的行为是电子声子耦合成为 CDW 不稳定性驱动因素的强烈指示。

在完整 VHS 或一般嵌套场景的情况下，人们会期望磁化率决定声子自能，从而在 M 点附近观察到主要贡献，因为在那里发生了显著的嵌套。这种不稳定的来源与我们在 Fig. 4(c) 中所示的结果相矛盾，在那里电子-声子耦合抑制了 M 点附近的磁化率。

类似的行为也可以在各种 k_z 切割和 RbV_3Sb_5 以及 CsV_3Sb_5 化合物中观察到 (见 SI)。这表明 V-135 准晶群的 CDW 具有共同的起源，尽管在这些化合物中观察到了不同的 $2 \times 2 \times 2$ 重建，这取决于温度和压力。

我们的发现可能对解决关于 CDW 起源的争议至关重要，因为已经提出了不同的机制。通过拆分电子和电子-

声子耦合效应以及 k 解析分析，我们能够区分解 CDW 的不同情景。在这里，我们的研究表明，在 AV_3Sb_5 [6, 33–37] 中，电子-声子耦合是 CDW 起源的主要贡献因素，其中电子驱动的电荷有序倾向可能会表现出协同效应。我们将远离高对称点的特定 k 区域识别为晶格电荷有序不稳定的主要表现区域，并通过 ARPES 结果得到了实验确认。这一结果为其他多体效应如电荷-键序、环电流序、配对密度波和超导性等留出了空间，这些效应可能源自 VHS 或 M 点散射且没有显著的声子贡献。在 Kagome 金属中的电荷有序最终完整图像可能会涉及所有微观来源的各个方面来形成电荷有序，这在电子关联效应被认为突出的 135 家族中尤为正确。我们将远离低能量态密度 BZ 位置的声子介导电荷形成识别为所有 Kagome 金属的一般主题。最近，在 ScV_6Sn_6 Kagome 金属中观察到了声子的重要性，暗示了声子在 Kagome 系统 [38–40] 中的一般重要性。结论 – 得益于从头算计算和 ARPES 测量的结合，我们很大程度上解决了关于 AV_3Sb_5 ($A = K, Rb, Cs$) 中 CDW 的起源的长期争论。我们利用涨落诊断的思想来

研究晶格不稳定与电子过程和电声耦合之间的相互作用。通过将声子自能直接连接到晶格不稳定上,我们能够解开费米学和电声矩阵元效应。这里,我们将电子-声子耦合识别为所有三种 V-135 材料中 CDW 的驱动效应。通过我们对原子位移引起的电子密度响应的动量解析分析,我们发现远离高对称点的主要贡献,特别是在 M 点,那里有 VHS。我们实验确认了在远离高对称点的 M 点之间出现了 CDW 光谱特征。虽然这并不能完全排除 VHS 和理想的嵌套场景作为预测和实验观察到的 $2 \times 2 \times 2$ 晶格不稳定的原因,但它强调了声子在最终形成高温电荷序中的不可避免的相关性。将我们的方法转移到其他系统以理解现有的或不存在的晶格不稳定性将会很有趣。具有 135 化学计量比的三角形网格化合物为未来的研究提供了一个有吸引力的平台。这特别适用于 CsTi₃Bi₅ 不表现出一个 CDW [23, 41] 以及 CsCr₃Sb₅, 其中不稳定性的不同来源目前正在讨论中 [42]。

致谢 – 我们衷心感谢高斯超级计算中心协会

(<https://www.gauss-centre.eu>) 为此项目提供资助, 通过在莱布尼茨超级计算中心 (<https://www.lrz.de>) 的 GCS 超级计算机 SuperMUC-NG 上分配计算时间。我们感谢德国研究基金会 (DFG, Deutsche Forschungsgemeinschaft) 的资金支持, 该支持是根据德国卓越战略提供的, 包括维尔茨堡-德累斯顿量子物质中的复杂性和拓扑学集群卓越中心 ct.qmat(EXC 2147, 项目 ID 390858490), 不来梅大学的大学拨款 (EXC 2077, 项目 ID 390741603), FOR 5249(QUAST, 项目 ID 449872909 (子项目 P5)), 以及卓越集群 “CUI: 物质的先进成像” (EXC 2056, 项目编号 390715994)。此外还通过跨学科研究联盟 SFB 1170 ToCoTronics(项目 ID 258499086) 提供支持。

-
- [1] T. Neupert, M. M. Denner, J.-X. Yin, R. Thomale, and M. Z. Hasan, *Nature Physics* **18**, 137 (2022).
 - [2] S. D. Wilson and B. R. Ortiz, *Nature Reviews Materials* **9**, 420 (2024).
 - [3] Y. Wang, H. Wu, G. T. McCandless, J. Y. Chan, and M. N. Ali, *Nature Reviews Physics* **5**, 635 (2023).
 - [4] M. M. Denner, R. Thomale, and T. Neupert, *Phys. Rev. Lett.* **127**, 217601 (2021).
 - [5] M. Kang, S. Fang, J.-K. Kim, B. R. Ortiz, S. H. Ryu, J. Kim, J. Yoo, G. Sangiovanni, D. Di Sante, B.-G. Park, C. Jozwiak, A. Bostwick, E. Rotenberg, E. Kaxiras, S. D. Wilson, J.-H. Park, and R. Comin, *Nature Physics* **18**, 301 (2022).
 - [6] H. Luo, Q. Gao, H. Liu, Y. Gu, D. Wu, C. Yi, J. Jia, S. Wu, X. Luo, Y. Xu, L. Zhao, Q. Wang, H. Mao, G. Liu, Z. Zhu, Y. Shi, K. Jiang, J. Hu, Z. Xu, and X. J. Zhou, *Nature Communications* **13**, 273 (2022).
 - [7] M. L. Kiesel, C. Platt, and R. Thomale, *Phys. Rev. Lett.* **110**, 126405 (2013).
 - [8] M. L. Kiesel and R. Thomale, *Phys. Rev. B* **86**, 121105 (2012).
 - [9] H. D. Scammell, J. Ingham, T. Li, and O. P. Sushkov, *Nature Communications* **14**, 605 (2023).
 - [10] J. Ingham, R. Thomale, and H. D. Scammell, *Vestigial order from an excitonic mother state in kagome superconductors av₃sb₅* (2025), [arXiv:2503.02929 \[cond-mat.str-el\]](https://arxiv.org/abs/2503.02929).
 - [11] B. R. Ortiz, P. M. Sarte, E. M. Kenney, M. J. Graf, S. M. L. Teicher, R. Seshadri, and S. D. Wilson, *Phys. Rev. Mater.* **5**, 034801 (2021).
 - [12] B. R. Ortiz, S. M. L. Teicher, Y. Hu, J. L. Zuo, P. M. Sarte, E. C. Schueller, A. M. M. Abeykoon, M. J. Krogstad, S. Rosenkranz, R. Osborn, R. Seshadri, L. Balents, J. He, and S. D. Wilson, *Phys. Rev. Lett.* **125**, 247002 (2020).
 - [13] Y.-X. Jiang, J.-X. Yin, M. M. Denner, N. Shumiya, B. R. Ortiz, G. Xu, Z. Guguchia, J. He, M. S. Hossain, X. Liu, J. Ruff, L. Kautzsch, S. S. Zhang, G. Chang, I. Belopolski, Q. Zhang, T. A. Cochran, D. Multer, M. Litskevich, Z.-J. Cheng, X. P. Yang, Z. Wang, R. Thomale, T. Neupert, S. D. Wilson, and M. Z. Hasan, *Nature Materials* **20**, 1353 (2021).
 - [14] H. Li, T. T. Zhang, T. Yilmaz, Y. Y. Pai, C. E. Marvinney, A. Said, Q. W. Yin, C. S. Gong, Z. J. Tu, E. Vescovo, C. S. Nelson, R. G. Moore, S. Murakami, H. C. Lei, H. N. Lee, B. J. Lawrie, and H. Miao, *Phys. Rev. X* **11**, 031050 (2021).
 - [15] E. Uykur, B. R. Ortiz, S. D. Wilson, M. Dressel, and A. A. Tsirlin, *npj Quantum Materials* **7**, 16 (2022).
 - [16] B. R. Ortiz, L. C. Gomes, J. R. Morey, M. Winiarski, M. Bordelon, J. S. Mangum, I. W. H. Oswald, J. A. Rodriguez-Rivera, J. R. Neilson, S. D. Wilson, E. Ertekin, T. M. McQueen, and E. S. Toberer, *Phys. Rev. Mater.* **3**, 094407 (2019).
 - [17] M. Wenzel, B. R. Ortiz, S. D. Wilson, M. Dressel, A. A. Tsirlin, and E. Uykur, *Phys. Rev. B* **105**, 245123 (2022).
 - [18] M. Kang, S. Fang, J. Yoo, B. R. Ortiz, Y. M. Oey, J. Choi, S. H. Ryu, J. Kim, C. Jozwiak, A. Bostwick, E. Rotenberg, E. Kaxiras, J. G. Checkelsky, S. D. Wilson, J.-H. Park, and R. Comin, *Nature Materials* **22**, 186 (2023).
 - [19] B. R. Ortiz, S. M. L. Teicher, L. Kautzsch, P. M. Sarte, N. Ratcliff, J. Harter, J. P. C. Ruff, R. Seshadri, and S. D. Wilson, *Phys. Rev. X* **11**, 041030 (2021).

- [20] X. Wu, T. Schwemmer, T. Müller, A. Consiglio, G. Sangiovanni, D. Di Sante, Y. Iqbal, W. Hanke, A. P. Schnyder, M. M. Denner, M. H. Fischer, T. Neupert, and R. Thomale, *Phys. Rev. Lett.* **127**, 177001 (2021).
- [21] J. Berges, E. G. C. P. van Loon, A. Schobert, M. Rösner, and T. O. Wehling, *Phys. Rev. B* **101**, 155107 (2020).
- [22] O. Gunnarsson, T. Schäfer, J. P. F. LeBlanc, E. Gull, J. Merino, G. Sangiovanni, G. Rohringer, and A. Toschi, *Phys. Rev. Lett.* **114**, 236402 (2015).
- [23] B. Liu, M.-Q. Kuang, Y. Luo, Y. Li, C. Hu, J. Liu, Q. Xiao, X. Zheng, L. Huai, S. Peng, Z. Wei, J. Shen, B. Wang, Y. Miao, X. Sun, Z. Ou, S. Cui, Z. Sun, M. Hashimoto, D. Lu, C. Jozwiak, A. Bostwick, E. Rotenberg, L. Moreschini, A. Lanzara, Y. Wang, Y. Peng, Y. Yao, Z. Wang, and J. He, *Phys. Rev. Lett.* **131**, 026701 (2023).
- [24] F. Grandi, M. A. Sentef, D. M. Kennes, and R. Thomale, *Phys. Rev. B* **110**, 245138 (2024).
- [25] C. Lin, A. Consiglio, O. K. Forslund, J. Küspert, M. M. Denner, H. Lei, A. Louat, M. D. Watson, T. K. Kim, C. Cacho, D. Carbone, M. Leandersson, C. Polley, T. Balasubramanian, D. D. Sante, R. Thomale, Z. Guguchia, G. Sangiovanni, T. Neupert, and J. Chang, *Nature Communications* **15**, 10466 (2024).
- [26] S. Baroni, S. de Gironcoli, A. Dal Corso, and P. Gianozzi, *Rev. Mod. Phys.* **73**, 515 (2001).
- [27] Y. Nomura and R. Arita, *Phys. Rev. B* **92**, 245108 (2015).
- [28] H. Tan, Y. Liu, Z. Wang, and B. Yan, *Phys. Rev. Lett.* **127**, 046401 (2021).
- [29] A. Consiglio, T. Schwemmer, X. Wu, W. Hanke, T. Neupert, R. Thomale, G. Sangiovanni, and D. Di Sante, *Phys. Rev. B* **105**, 165146 (2022).
- [30] M. Calandra, G. Profeta, and F. Mauri, *Phys. Rev. B* **82**, 165111 (2010).
- [31] J. Berges, N. Giroto, T. Wehling, N. Marzari, and S. Poncé, *Phys. Rev. X* **13**, 041009 (2023).
- [32] Y. Hu, X. Wu, B. R. Ortiz, X. Han, N. C. Plumb, S. D. Wilson, A. P. Schnyder, and M. Shi, *Phys. Rev. B* **106**, L241106 (2022).
- [33] F. Ferrari, F. Becca, and R. Valentí, *Physical Review B* **106**, 10.1103/physrevb.106.1081107 (2022).
- [34] G. He, L. Peis, E. F. Cuddy, Z. Zhao, D. Li, Y. Zhang, R. Stumberger, B. Moritz, H. Yang, H. Gao, T. P. Devereaux, and R. Hackl, *Nature Communications* **15**, 1895 (2024).
- [35] Y. Xie, Y. Li, P. Bourges, A. Ivanov, Z. Ye, J.-X. Yin, M. Z. Hasan, A. Luo, Y. Yao, Z. Wang, G. Xu, and P. Dai, *Phys. Rev. B* **105**, L140501 (2022).
- [36] D. Subires, A. Korshunov, A. H. Said, L. Sánchez, B. R. Ortiz, S. D. Wilson, A. Bosak, and S. Blanco-Canosa, *Nature Communications* **14**, 1015 (2023).
- [37] M. Gutierrez-Amigo, D. Dangic, C. Guo, C. Felser, P. J. W. Moll, M. G. Vergniory, and I. Errea, *Communications Materials* **5**, 234 (2024).
- [38] M. Tuniz, A. Consiglio, D. Puntel, C. Bigi, S. Enzner, G. Pokharel, P. Orgiani, W. Bronsch, F. Parmigiani, V. Polewczyk, P. D. C. King, J. W. Wells, I. Zeljkovic, P. Carrara, G. Rossi, J. Fujii, I. Vobornik, S. D. Wilson, R. Thomale, T. Wehling, G. Sangiovanni, G. Panaccione, F. Cilento, D. Di Sante, and F. Mazzola, *Communications Materials* **4**, 103 (2023).
- [39] M. Tuniz, A. Consiglio, G. Pokharel, F. Parmigiani, T. Neupert, R. Thomale, S. K. Chaluvadi, P. Orgiani, G. Sangiovanni, S. D. Wilson, I. Vobornik, F. Salvador, F. Cilento, D. Di Sante, and F. Mazzola, *Phys. Rev. Lett.* **134**, 066501 (2025).
- [40] A. Korshunov, H. Hu, D. Subires, Y. Jiang, D. Călugăru, X. Feng, A. Rajapitamahuni, C. Yi, S. Roychowdhury, M. G. Vergniory, J. Strempler, C. Shekhar, E. Vescovo, D. Chernyshov, A. H. Said, A. Bosak, C. Felser, B. A. Bernevig, and S. Blanco-Canosa, *Nature Communications* **14**, 6646 (2023).
- [41] J. Yang, X. Yi, Z. Zhao, Y. Xie, T. Miao, H. Luo, H. Chen, B. Liang, W. Zhu, Y. Ye, J.-Y. You, B. Gu, S. Zhang, F. Zhang, F. Yang, Z. Wang, Q. Peng, H. Mao, G. Liu, Z. Xu, H. Chen, H. Yang, G. Su, H. Gao, L. Zhao, and X. J. Zhou, *Nature Communications* **14**, 4089 (2023).
- [42] Y. Liu, Z.-Y. Liu, J.-K. Bao, P.-T. Yang, L.-W. Ji, J.-Y. Liu, C.-C. Xu, W.-Z. Yang, W.-L. Chai, J.-Y. Lu, C.-C. Liu, B.-S. Wang, H. Jiang, Q. Tao, Z. Ren, X.-F. Xu, C. Cao, Z.-A. Xu, J.-G. Cheng, and G.-H. Cao, Superconductivity emerged from density-wave order in a kagome bad metal (2023), [arXiv:2309.13514 \[cond-mat.supr-con\]](https://arxiv.org/abs/2309.13514).
- [43] P. G. et al., *Journal of Physics: Condensed Matter* **21**, 395502 (2009).
- [44] P. G. et al., *Journal of Physics Condensed Matter* **29**, 10.1088/1361-648X/aa8f79 (2017).
- [45] A. A. Mostofi, J. R. Yates, Y.-S. Lee, I. Souza, D. Vanderbilt, and N. Marzari, *Computer Physics Communications* **178**, 685 (2008).
- [46] S. Ponce, E. Margine, C. Verdi, and F. Giustino, *Computer Physics Communications* **209**, 116 (2016).
- [47] F. Giustino, M. L. Cohen, and S. G. Louie, *Phys. Rev. B* **76**, 165108 (2007).
- [48] J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 3865 (1996).
- [49] D. R. Hamann, *Phys. Rev. B* **88**, 085117 (2013).
- [50] Q. Yin, Z. Tu, C. Gong, Y. Fu, S. Yan, and H. Lei, *Chi-*

- nese Physics Letters **38** (2021).
- [51] Z. Zhang, Z. Chen, Y. Zhou, Y. Yuan, S. Wang, J. Wang, H. Yang, C. An, L. Zhang, X. Zhu, Y. Zhou, X. Chen, J. Zhou, and Z. Yang, *Phys. Rev. B* **103**, 224513 (2021).
 - [52] J. Berges, A. Schobert, E. G. C. P. van Loon, M. Rösner, and T. O. Wehling, *elphmod: Python modules for electron-phonon models* (2024).
 - [53] G. Kresse and J. Furthmüller, *Phys. Rev. B* **54**, 11169 (1996).
 - [54] V. Wang, N. Xu, J.-C. Liu, G. Tang, and W.-T. Geng, *Computer Physics Communications* **267**, 108033 (2021).
 - [55] S. Enzner and G. Sangiovanni, NOMAD database [10.17172/NOMAD/2025.04.09-1](https://nomad.database.gforge.inr.cn/10.17172/NOMAD/2025.04.09-1) (2025).
 - [56] S. Enzner, Zenodo [10.5281/zenodo.15188195](https://zenodo.org/record/15188195) (2025).