

扩展的 Hubbrack–Su-Schrieffer-Heeger 模型中剩余电子配对的光谱特征

Debshikha Banerjee^{1,2} Alberto Nocera^{3,4} George A.
Sawatzky^{3,4} Mona Berciu^{3,4} and Steven Johnston^{1,2}

¹*Department of Physics and Astronomy, The University of Tennessee, Knoxville, Tennessee 37996, USA*

²*Institute for Advanced Materials and Manufacturing, University of Tennessee, Knoxville, Tennessee 37996, USA*

³*Department of Physics Astronomy, University of British Columbia, Vancouver, British Columbia, Canada V6T 1Z1*

⁴*Stewart Blusson Quantum Matter Institute, University of British Columbia, Vancouver, British Columbia, Canada V6T 1Z4*

(10Dated: 2025 年 4 月 17 日)

我们研究了一维扩展的 Hubbard-Su-Schrieffer-Heeger (HSSH) 模型在稀释极限下的电子添加光谱，使用了密度矩阵重整化群方法。除了预期的对带结构进行重正化之外，我们发现当单态通道中添加电子时，电子-声子 ($e\text{-ph}$) 相互作用会产生异常的光谱特征，而在三态通道中则不存在这种特征。通过将这些结果与在反绝热极限下从微扰理论获得的结果进行比较，我们证明了这一异常特性是之前在两粒子极限下推导出的由 SSH 耦合介导的强大电子-电子相互作用的残留物。通过研究该特性随着掺杂的变化而演化的规律，我们追踪了这种吸引力向较高载流子浓度的发展，并提供了对光谱特征的预测以帮助指导未来寻找强大的 $e\text{-ph}$ 介导配对的工作。

介绍 理解声子介导的电子配对的基本限制是凝聚态物理中的一个长期问题。这个问题对于确定常规超导体的最大超导转变温度 T_c 具有重要影响，也是当前活跃研究的主题 [1–19]。Eliashberg 理论 [20] 预测，无量纲耦合 λ 的 electron-phonon ($e\text{-ph}$) 与 $T_c \propto \sqrt{\lambda}$ 在强耦合极限下， T_c 将无界增长 [21]，前提是避免竞争的 charge-density-wave (CDW) 或结构不稳定，或者形成重(双)极化子 [2, 4, 9]，最终会抑制超导性。确实，最近的若干 quantum Monte Carlo (QMC) 研究观察到了霍尔斯廷模型中(双)极化子的形成，这些极化子倾向于局部有序，最终抑制了超导性 [10, 12, 15, 16, 22]。

Su-Schrieffer-Heeger (SSH)- 或者 Peierls 类似相互作用 [23, 24] 在此背景下引起了相当大的兴趣。这些相互作用出现在原子运动调制电子跃迁积分而非在位能量的系统中 (与 Holstein [25, 26] 或 Fröhlich [27] 模型不同)。稀释极限下的理论研究表明，SSH 相互作用通过在场和最近邻单重态间的成对跳跃介导了强烈的吸引性 $e\text{-}e$ 相互作用 [28]。从物理上讲，这种吸引力出现在一个粒子通过发射声子跃迁时，另一个电子随之吸收该声子的情况下 [28, 29]。这个过程导致轻极化子 [30] 和稳定的、可移动的双极化子 [28] 的形成，它们可以凝聚成高温 c 超导体 [17]。成对跳跃过程也可以在没有库仑相互作用的情况下产生新颖的磁性形式，包括反铁磁性 [31–33] 和量子自旋液体行为 [34]。

最近的 determinant quantum Monte Carlo

(DQMC) 研究得出结论，极化子质量、声子介导的磁性和超导关联在 SSH 模型中取决于声子模式是放置在晶格的键上还是位置上 (所谓的键与光学/声学 SSH 模型) [35–37]。特别是，磁性和健壮的电子配对似乎在有限载流子浓度下因位置声子而减少 [36, 37]。DQMC 最近还在接近半填充和反绝热极限 [38] 的 bond-SSH 模型模拟中报告了增强的 T_c 's，但将其归因于不同的机制。鉴于这些差异，在不同的 SSH 模型中研究介导的有效相互作用是进一步检验这些理论的必要条件。

在这封信中，我们研究了 one-dimensional (1D) 扩展的哈伯德-SSH 链的电子添加光谱使用 density matrix renormalization group (DMRG)。我们的结果揭示了光谱中存在的一个强烈共振特征，我们认为这是由于电子之间剩余的声子介导吸引力引起的。跟踪这一特征作为载流子浓度的函数，我们进一步证明它在有限的载流子浓度下持续存在。我们的结果显示，强烈的声子介导吸引在光学 SSH 模型中超越了稀释极限，并确定了一个特定的光谱特征，该特征可以指导实验。

模型与方法 我们研究了 1D 扩展的 Hubbard-SSH (HSSH) 哈密顿量 ($\hbar = 1$) [35, 39] 的光学变体。

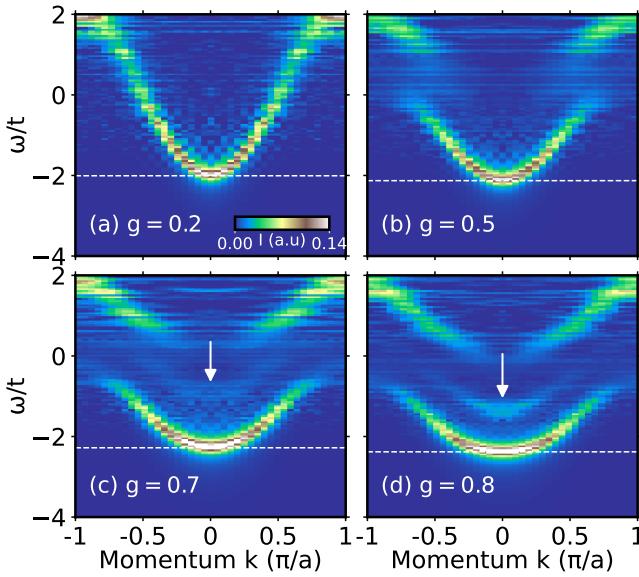


图 1. 电子添加谱函数 $A^+(k, \omega)$ 通过 DMRG 方法得到, 该方法用于在一个由一个自旋- \uparrow 电子占据的 $L = 40$ 站点 1D 链上添加一个自旋- \downarrow 的电子。如各面板所示, 结果展示了不同值的 g , 同时固定了 $U = 6t$ 、 $V = 0$ 和 $\Omega = 2t$ 的情况。每张图中的白色虚线显示了单极化子基态能量 $E_{1,gs}$ 。c 和 d 面板中的箭头指出了本工作关注的共振。

$$H = -t \sum_{i,\sigma} \left[c_{i,\sigma}^\dagger c_{i+1,\sigma} + \text{H.c.} \right] + U \sum_i \hat{n}_{i,\uparrow} \hat{n}_{i,\downarrow} + V \sum_i \hat{n}_i \hat{n}_{i+1} + \Omega \sum_i (b_i^\dagger b_i + \frac{1}{2}) + g \sum_{i,\sigma} \left[c_{i,\sigma}^\dagger c_{i+1,\sigma} (\hat{x}_i - \hat{x}_{i+1}) + \text{H.c.} \right]. \quad (1)$$

这里 $c_{i,\sigma}^\dagger (c_{i,\sigma})$ 在晶格位点 i 上产生 (湮灭) 一个自旋 σ 电子, $b_i^\dagger (b_i)$ 在位点 i 处产生 (湮灭) 一个能量为 Ω 的声子模式, $\hat{x}_i = (b_i^\dagger + b_i) = \sqrt{2M\Omega} \hat{X}_i$ 与 i^{th} 原子的位移算符 \hat{X}_i 成比例, $\hat{n}_i = \sum_\sigma \hat{n}_{i,\sigma}$ 是局部电子密度算符, t 是最近邻跳跃, U 和 V 分别是局域和最近邻哈伯德排斥, g 是 e - ph 耦合强度。在整个研究过程中, 我们设定 $M = t = 1$ 并固定 $\Omega = 2t$, 同时改变 g 、 U 和 V 。我们也明确确认了所有展示的结果都是在 SSH 模型的物理范围内获得的, 在该范围内有效跃迁的符号没有被反转 [40]。

我们使用 DMRG 方法 [41] 求解了方程 (1), 该方法在 DMRG++ 代码 [42] 中实现。特别是, 我们关注电子添加谱 $A^+(k, \omega)$ [43, 44], 我们使用修正矢量算法结合 Krylov 空间分解以及两站点 DMRG 更新 [45] 直

接在实频轴上进行计算。算法首先计算实空间电子添加光谱

$$A_{cj}^+(\omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \langle \psi_{\text{gs}} | \hat{c}_{j,\sigma} \frac{1}{\omega - \hat{H} + E_{\text{gs}} + i\eta} \hat{c}_{c,\sigma}^\dagger | \psi_{\text{gs}} \rangle, \quad (2)$$

其中 $|\psi_{\text{gs}}\rangle$ 和 E_{gs} 分别是基态波函数和能量, 而 c 表示链的中心位置。动量分辨的电子添加光谱 $A^+(k, \omega)$ 通过傅里叶变换获得。

在整个过程中, 我们将展宽系数固定为 $\eta = 0.1t$, 并保持 $m = 500$ DMRG 状态, 同时限制每个站点的局部声子希尔伯特空间最多有 $N_p = 7$ 个声子模式, 以确保截断误差低于 10^{-7} 。

结果 我们首先考察了稀释的 HSSH 链在 $U = 6t$ 和 $V = 0$ 下的电子添加光谱。图 1 绘制了为已经有一个自旋向上极化子的链添加一个自旋向下的电子时, 不同值的 g 对应的 $A^+(k, \omega)$ 。在这种情况下, 方程 (2) 中的 $E_{\text{gs}} \equiv E_{1,gs}$ 指的是单个极化子基态能量。这个能量 $E_{1,gs}$ 用虚线白线表示, 并且等于这种情况下费米能 E_F 。确实, 根据方程 (2), 在能量 $\omega = E_{2,\alpha} - E_{1,gs}$ 处预计会有谱权重, 其中 $E_{2,\alpha}$ 是两电子希尔伯特空间中 \hat{H} 的本征能。因此, 在没有束缚的情况下, 最低能量特征必须出现在 $\omega = E_{1,gs}$ 处, 对应于 $E_{2,gs} = 2E_{1,gs}$ 。

对于弱耦合 ($g = 0.2$, 图 1a), $A^+(k, \omega)$ 确实类似于非相互作用的余弦带, 在 $E_{1,gs} + \Omega$ [46, 47] 处出现了预期的声子拐点。增加 e - ph 相互作用与 $g = 0.5$ (图 1b) 产生更强的重正化, 并将能谱分解为低能量准粒子(极化子)离散态和高能量极化子+一个声子连续区。进一步增加 g 会产生更重的极化子 [48, 49], 从而减少极化子带的带宽, 如图 1c 和 1d 所示。(对于这些耦合强度, 较大的 U 阻止了两个极化子结合在一起 [28, 50, 51], 因此没有双极化子状态的特征。) 对于更强的耦合, 我们观察到在极化子带内出现了意想不到的异常光谱特征, 用白色箭头标记, 并且较大的 e - ph 耦合将其光谱权重推向极化子带的底部。如我们将接下来展示的, 这一特征是由残余的 e - e 吸引通过 SSH 耦合 [28] 引发的共振。

为了进一步探索这种异常谱权重的性质, 图 2 显示了在单重态和三重态通道中的 $A^+(k, \omega)$, 这是通过向一个已经被单一自旋向上极化子占据的系统中添加一个自旋向下 (单重态部分) 或自旋向上 (三重态部

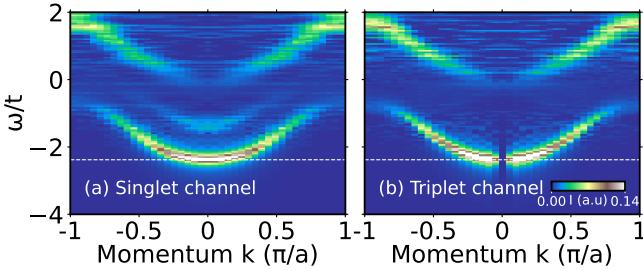


图 2. 电子添加光谱函数 $A^+(k, \omega)$ 的比较, 分别为: a) 添加一个自旋- \downarrow 电子或 b) 添加一个自旋- \uparrow 电子到已存在一个自旋- \uparrow 电子的 $L = 40$ 站点 1D 链中。结果是在固定 $U = 6t, V = 0, \Omega = 2t$ 和 $g = 0.8$ 的情况下获得的。每个图中的白色虚线显示了单极化子基态能量 $E_{1,gs}$ 。

分) 电子获得的。在这里, 我们将参数设置为图 1 中的值, 并固定 $g = 0.8$ 。值得注意的是, 异常谱权重仅出现在自旋单重态通道中, 这可以通过记住 SSH 耦合导致声子介导的电子吸引(排斥)在自旋单重态(三重态)通道中的现象来解释 [28, 51]。因此, 这些结果表明声子介导配对在这种特征机制中扮演着重要角色。

进一步的见解可以通过考察添加谱如何作为 Hubbard 相互作用参数的函数演化而获得, 如图 3 所示, 在固定 $g = 0.8$ 的情况下。图 3a 显示了 $U = V = 0$ 的加合光谱, 这用作参考点, 而图 3b 绘制了 $k = 0$ 光谱随 U 变化的演化情况, 同时固定 $V = 0$ 并归一化到峰值 $\omega \approx -2.5t$ 。如前所述, 图 3a 中的虚线表示初始单极化子状态的能量。

对于 $U = 0$, SSH 耦合足够强以将两个电子束缚成一个束缚双极子, 这表现为在图 3a 中虚线标记的 $E_{1,gs}$ 以下观察到的尖锐光谱特征。增加 U 减小了双极子的结合能, 并将其权重转移到更高的能量 [50]。对于 $U = 2t$, 我们发现双极子峰已经与极化子带的底部合并, 如图 3b 中的不对称线形所示。因此, 对于 $U \geq 2t$, 双极子变得不稳定并分解成两个自由极化子, 因为其能量大于 $2E_{1,gs}$ 。然而, 由于载流子之间的残余强吸引力, 高能有限寿命共振可以在光谱中持续存在。我们将极化子带底部以上的尖锐光谱特征解释为这种共振, 并且随着 U 的增加, 该共振向更高能量移动。两个电子基态的特性变化也反映在图 3c 中计算出的两个电子基态的平均密度上, 我们观察到从单峰(束缚双极化子)到双模分布(两个非束缚极化子)的变化, 对于 $U > 2t$ [52]。

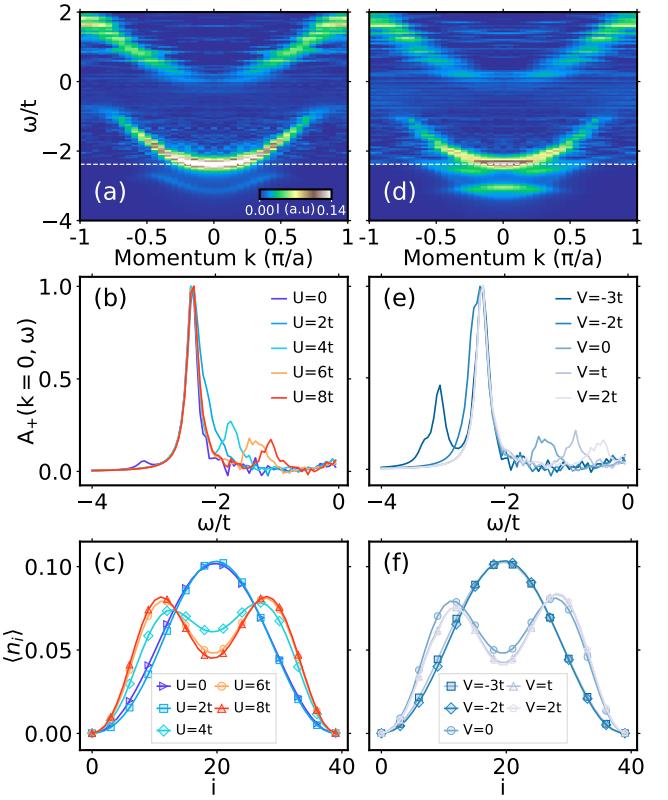


图 3. 添加自旋为 \downarrow 的电子到已经由单个自旋为 \uparrow 的电子占据的 $L = 40$ 站链的加合谱线 $A^+(k, \omega)$ 。我们获得了所有固定 $g = 0.8$ 和 $\Omega = 2t$ 的结果。图板 (a) 和 (d) 分别显示了 $(U, V) = (0, 0)$ 和 $(6t, -3t)$ 的动量分辨光谱。图板 (b) 绘制了固定 $V = 0$ 时 $A^+(k = 0, \omega)$ 随 U 的变化。类似地, 图 (e) 绘制了在固定 $U = 6t$ 的情况下, $A^+(k = 0, \omega)$ 作为 V 的函数。图 (c) 和 (f) 分别显示了使用与图 (b) 和 (e) 相同的参数获得的双粒子基态的平均电子密度 $\langle n_i \rangle$ 。

图 3(d)-(f) 描述了两个电子状态随最近邻相互作用 V 的变化。图 3d 显示了在固定 $U = 6t, g = 0.8$ 和 $V = -3t$ 条件下的 $A^+(k, \omega)$ 。类似于图 3a, 基态是一个束缚双极化子, 在虚线以下形成了一个尖锐的光谱特征。从吸引到排斥值变化 V 会减少双极化子结合能, 效果类似于增加 U 。对于 $V > 0$, 双极化子不稳定而解离, 但剩余的声子介导吸引力产生了一个共振, 类似于图 3b。从双极化子到两个未束缚极化子基态的变化也可以通过电子平均密度随 V 的变化行为来清晰地看出, 如图 3f 所示。

为了确认我们对数值结果的解释, 我们在反绝热极限 ($\Omega > t, g$), 如在 supplementary materials (SM) [29] 中所述) 下对我们模型进行了微扰分析。具

体来说，我们使用 M. Takahashi 的方法 [53] 来投影出具有一个或多个声子的高能希尔伯特子空间，以获得 H_{eff} 的有效两体哈密顿量，用于 HSSH 模型。在单重态部分， H_{eff} 包含描述重整化的单一准粒子（极化子）色散的项以及描述它们相互作用的项；后者包括原始的现场排斥力 U 和声子介导的吸引力。后者由现场和最近邻单重态的最近邻对跳跃组成 [28, 29]。在动量空间中，这些声子介导的相互作用描述了单态 $|k, q\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[c_{\frac{k}{2}+q,\uparrow}^\dagger c_{\frac{k}{2}-q,\downarrow}^\dagger - c_{\frac{k}{2}-q,\uparrow}^\dagger c_{\frac{k}{2}+q,\downarrow}^\dagger]|0\rangle$ 散射到任何其他单态 $|k, q'\rangle$ 的过程，在原位 $u_0(k)$ 、最近邻 $u_1(k) \cos(qa) \cos(q'a)$ 和次近邻 $u_2(k)[\cos(2qa) + \cos(2q'a)]$ 有效相互作用的框架下，这些相互作用不仅依赖于转移动量 $q' - q$ ，还依赖于该对的总动量 k ，详情见 SM[29]。

然后我们通过计算具有动量 k 的粒子与零动量粒子之间的单态对应的双粒子传播子 $G(k, z, \frac{k}{2}, \frac{k}{2}) = \langle k, \frac{k}{2}|[z - H_{\text{eff}}]^{-1}|k, \frac{k}{2}\rangle$ 来模仿方程 (2)（直到被 $E_{1,\text{gs}}$ 移位）的谱权重。如图 SM [29] 所示，这个谱权重在定性上与 DMRG 模拟中的 $A^+(k, \omega)$ 行为相似。特别是，它在适当的 g, U 值下表现出类似的共振。分析近似表明，在反绝热极限中，双极子是稳定的，如图 3 (a) 所示，当总 onsite 有效能量 $U + u_0(k) = U - \frac{8g^2}{\Omega} \cos(ka) < 0$ 、即。时，库仑排斥弱于 onsite 声子介导的吸引（后者依赖于对的动量 k ，因为它源自配对跳跃项）。然而，对于 $U > 2t$ 和 $g = 0.8$ ， $u_0(k)$ 变得排斥并且没有稳定的双极子 [参见图 3b]。尽管如此，在接近 $k = 0$ 时，最近邻和次近邻的 $u_1(k)$ 和 $u_2(k)$ 仍然是吸引性的。虽然它们不足以形成稳定的双极子，但确实介导了有限寿命共振的出现，如图 3b 所示，并且也在 SM [29] 中展示。

上述讨论的异常光谱特征提供了由 SSH 相互作用介导的非局域吸引相互作用存在的明确光谱标志，即使这种相互作用不足以束缚一个双极子，这一点在 Ref. [28] 中首次预测。鉴于此，自然会问这个特征是否超出了极度稀疏极限，并且可以在大多数量子材料相关的载流子浓度下被观察到。图 4 通过绘制 $U = 6t$ 、 $V = 0$ 和 $g = 0.8$ 的电子添加光谱回答了这个问题，这些光谱涵盖的载流子浓度范围为 $\langle n \rangle \in [0.1, 0.35]$ 。共振在所有情况下均可见，其光谱权重随 $\langle n \rangle$ 单调增加。这种增加是可以预期的，因为添加的电子可以与系统中已存在的任意一个自旋相反的电子形成共振。对于 $\langle n \rangle \geq 0.2$ ，这一特征发展出额外的结构，并呈现出类似

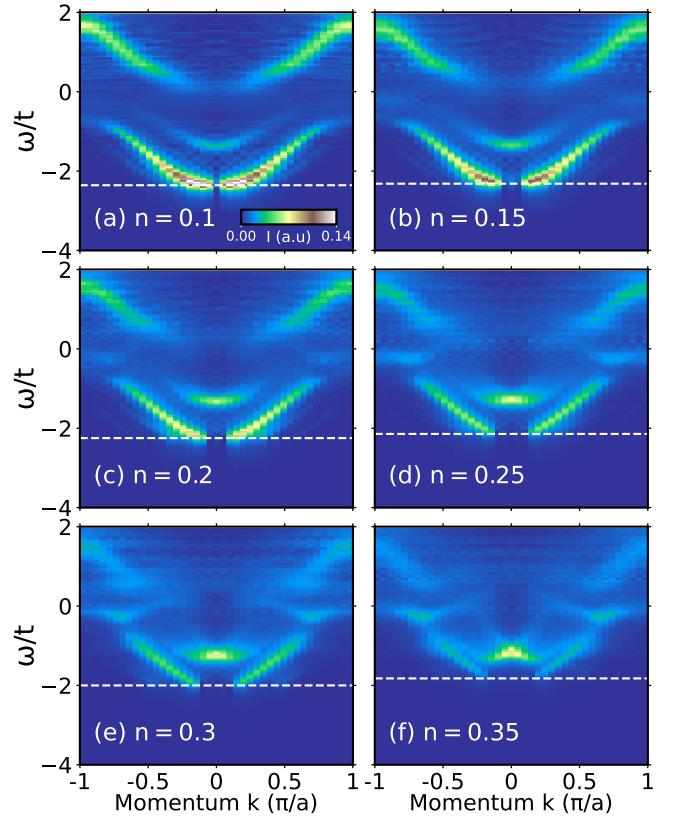


图 4. 电子添加光谱函数 $A^+(k, \omega)$ 使用 DMRG 计算，适用于 $L = 40$ 站链，并固定了 $U = 6t, V = 0, g = 0.8$ 和 $\Omega = 2t$ 。平均电子密度 $\langle n \rangle$ 在每个面板中所示的 0.1 和 0.35 之间变化。在这里，我们发现共振特征远远超出了稀释极限。

W 的形状，将极小值置于远离 Γ 点的位置。对于最大的载流子浓度 [参见图 4f]，该特征变得非常类似于轻掺杂 1DHubbard 模型的谱函数，在该模型中发生自旋电荷分离，具有明显的孤子和自旋子准粒子激发。

总结与讨论 我们已经计算了扩展的 HSSH 模型在载流子浓度为 $\langle n \rangle \leq 0.35$ 时的电子添加光谱，并识别出一个异常的光谱特征，该特征位于两个极化子连续区之间。通过仔细分析，我们证明这个特征是一个共振态，在这种状态下，注入的电子形成了一种亚稳单重束缚态一段时间后才衰减。（这一解释完全符合在反绝热极限下对该问题的解析处理 [29]。）该特征的确切形状和位置取决于现场以及次近邻 Hubbard 相互作用及 $e\text{-}ph$ 耦合强度，并编码了关于残留声子介导吸引的信息，在 HSSH 模型中也是如此。掺杂的 HSSH 链在 $\langle n \rangle = 0.75$ 和 $\Omega = 2t$ 下没有观察到任何共振特征；相反，报告的 $A(k, \omega)$ 展现了自旋-电荷分离的经典特征 [40]。结合我

们的结果，这一观测表明，在更高的载流子浓度下，极化子之间的有效吸引力最终会被抑制。

如前所述，早期的理论工作表明，在稀疏极限下，SSH 耦合介导了载流子之间强烈的吸引力相互作用，形成了轻但稳定的双极子 [28]。我们的 DMRG 结果表明，这种相互作用在稀疏极限之外仍然存在，并且为这种可被探测到的相互作用提供了直接的光谱特征，这些探测可以访问未占用电子状态。扫描隧道显微镜和逆向光电发射实验非常适合此目的；然而，确定 resonant inelastic x-ray scattering (RIXS) 是否能够访问这些状态也十分有趣。在此背景下，我们注意到掺杂的 1D 铜酸盐自旋变化最近已被合成并表征 [54]，

估计的掺杂水平低至 $\rho = 1 - \langle n \rangle = 0.59$ 孔/Cu。需要达到更高的掺杂水平来验证我们的预测。在更高维度中的类似计算也将有助于识别合适的材料。

致谢 此项工作得到了国家科学基金会的资助，拨款号为 DMR-2401388。A. N. 感谢加拿大第一研究卓越基金的支持。本研究使用了橡树岭领导计算设施的资源，该设施是美国能源部科学办公室用户设施的一部分，合同号为 DE-AC05-00OR22725。

数据可用性 支持本研究的数据将在论文被接受后存放在公共在线仓库中。在此之前，数据将根据请求提供。

-
- [1] N. W. Ashcroft, Metallic hydrogen: A high-temperature superconductor?, *Phys. Rev. Lett.* **21**, 1748 (1968).
 - [2] M. L. Cohen and P. W. Anderson, Comments on the maximum superconducting transition temperature, *AIP Conference Proceedings* **4**, 17 (1972).
 - [3] P. B. Allen and B. Mitrović, Theory of superconducting T_c (Academic Press, 1983) pp. 1–92.
 - [4] B. K. Chakraverty, J. Ranninger, and D. Feinberg, Experimental and theoretical constraints of bipolaronic superconductivity in high T_c materials: An impossibility, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 433 (1998).
 - [5] M. L. Kulić and R. Zeyher, Influence of strong electron correlations on the electron-phonon coupling in high- T_c oxides, *Phys. Rev. B* **49**, 4395 (1994).
 - [6] M. L. Kulić, Interplay of electron-phonon interaction and strong correlations: the possible way to high-temperature superconductivity, *Physics Reports* **338**, 1 (2000).
 - [7] J. E. Moussa and M. L. Cohen, Two bounds on the maximum phonon-mediated superconducting transition temperature, *Phys. Rev. B* **74**, 094520 (2006).
 - [8] L. P. Gor'kov and V. Z. Kresin, Colloquium: High pressure and road to room temperature superconductivity, *Rev. Mod. Phys.* **90**, 011001 (2018).
 - [9] I. Esterlis, S. A. Kivelson, and D. J. Scalapino, A bound on the superconducting transition temperature, *npj Quantum Materials* **3**, 59 (2018).
 - [10] I. Esterlis, B. Nosarzewski, E. W. Huang, B. Moritz, T. P. Devereaux, D. J. Scalapino, and S. A. Kivelson, Breakdown of the Migdal-Eliashberg theory: A determinant quantum Monte Carlo study, *Phys. Rev. B* **97**, 140501 (2018).
 - [11] T. Hazra, N. Verma, and M. Randeria, Bounds on the superconducting transition temperature: Applications to twisted bilayer graphene and cold atoms, *Phys. Rev. X* **9**, 031049 (2019).
 - [12] I. Esterlis, S. A. Kivelson, and D. J. Scalapino, Pseudo-gap crossover in the electron-phonon system, *Phys. Rev. B* **99**, 174516 (2019).
 - [13] J. S. Hofmann, D. Chowdhury, S. A. Kivelson, and E. Berg, Heuristic bounds on superconductivity and how to exceed them, *npj Quantum Materials* **7**, 83 (2022).
 - [14] W. E. Pickett, Colloquium: Room temperature superconductivity: The roles of theory and materials design, *Rev. Mod. Phys.* **95**, 021001 (2023).
 - [15] B. Nosarzewski, E. W. Huang, P. M. Dee, I. Esterlis, B. Moritz, S. A. Kivelson, S. Johnston, and T. P. Devereaux, Superconductivity, charge density waves, and bipolarons in the Holstein model, *Phys. Rev. B* **103**, 235156 (2021).
 - [16] O. Bradley, G. G. Batrouni, and R. T. Scalettar, Superconductivity and charge density wave order in the two-dimensional Holstein model, *Phys. Rev. B* **103**, 235104 (2021).
 - [17] C. Zhang, J. Sous, D. R. Reichman, M. Berciu, A. J. Millis, N. V. Prokof'ev, and B. V. Svistunov, Bipolaronic high-temperature superconductivity, *Phys. Rev. X* **13**, 011010 (2023).
 - [18] D. V. Semenok, B. L. Altshuler, and E. A. Yuzbashyan, Fundamental limits on the electron-phonon coupling and superconducting T_c , *arXiv:2407.12922* (2024).
 - [19] K. Trachenko, B. Monserrat, M. Hutzfeld, and C. J.

- Pickard, Upper bounds on the highest phonon frequency and superconducting temperature from fundamental physical constants, [arXiv:2406.08129](#) (2025).
- [20] G. M. Eliashberg, Interactions between electrons and lattice vibrations in a superconductor, *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **38**, 966 (1960).
- [21] P. B. Allen and R. C. Dynes, Transition temperature of strong-coupled superconductors reanalyzed, *Phys. Rev. B* **12**, 905 (1975).
- [22] G. Issa, O. Bradley, E. Khatami, and R. Scalettar, Learning by confusion: The phase diagram of the Holstein model, [arXiv:2501.04681](#) (2025).
- [23] S. Barišić, J. Labbé, and J. Friedel, Tight binding and transition-metal superconductivity, *Phys. Rev. Lett.* **25**, 919 (1970).
- [24] W. P. Su, J. R. Schrieffer, and A. J. Heeger, Solitons in polyacetylene, *Phys. Rev. Lett.* **42**, 1698 (1979).
- [25] T. Holstein, Studies of polaron motion: Part I. the molecular-crystal model, *Annals of Physics* **8**, 325 (1959).
- [26] T. Holstein, Studies of polaron motion: Part II. the “small” polaron, *Annals of Physics* **8**, 343 (1959).
- [27] H. Fröhlich, Interaction of electrons with lattice vibrations, *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences* **215**, 291 (1952).
- [28] J. Sous, M. Chakraborty, R. V. Krems, and M. Berciu, Light bipolarons stabilized by Peierls electron-phonon coupling, *Physical Review Letters* **121**, 247001 (2018).
- [29] See online supplementary materials for additional details on our DMRG and perturbation results, available at link to be supplied by the publisher.
- [30] D. J. J. Marchand, G. De Filippis, V. Cataudella, M. Berciu, N. Nagaosa, N. V. Prokof'ev, A. S. Mishchenko, and P. C. E. Stamp, Sharp transition for single polarons in the one-dimensional Su-Schrieffer-Heeger model, *Phys. Rev. Lett.* **105**, 266605 (2010).
- [31] A. Götz, M. Hohenadler, and F. F. Assaad, Phases and exotic phase transitions of a two-dimensional Su-Schrieffer-Heeger model, *Phys. Rev. B* **109**, 195154 (2024).
- [32] X. Cai, Z.-X. Li, and H. Yao, Antiferromagnetism Induced by bond Su-Schrieffer-Heeger electron-phonon coupling: A quantum Monte Carlo study, *Phys. Rev. Lett.* **127**, 247203 (2021).
- [33] M. Casebolt, C. Feng, R. T. Scalettar, S. Johnston, and G. G. Batrouni, Magnetic, charge, and bond order in the two-dimensional Su-Schrieffer-Heeger-Holstein model, *Phys. Rev. B* **110**, 045112 (2024).
- [34] X. Cai, Z. Han, Z.-X. Li, S. A. Kivelson, and H. Yao, Quantum spin liquid from electron-phonon coupling, [arXiv:2408.04002](#) (2024).
- [35] S. Malkaruge Costa, B. Cohen-Stead, A. Tanjaroon Ly, J. Neuhaus, and S. Johnston, Comparative determinant quantum Monte Carlo study of the acoustic and optical variants of the Su-Schrieffer-Heeger model, *Phys. Rev. B* **108**, 165138 (2023).
- [36] A. Tanjaroon Ly, B. Cohen-Stead, S. Malkaruge Costa, and S. Johnston, Comparative study of the superconductivity in the Holstein and optical Su-Schrieffer-Heeger models, *Phys. Rev. B* **108**, 184501 (2023).
- [37] A. Tanjaroon Ly, B. Cohen-Stead, and S. Johnston, Antiferromagnetic and bond-order-wave phases in the half-filled two-dimensional optical Su-Schrieffer-Heeger-Hubbard model, [arXiv:2502.14196](#) (2025).
- [38] X. Cai, Z.-X. Li, and H. Yao, High-temperature superconductivity induced by the Su-Schrieffer-Heeger electron-phonon coupling, [arXiv:2308.06222](#) (2023).
- [39] M. Capone, W. Stephan, and M. Grilli, Small-polaron formation and optical absorption in Su-Schrieffer-Heeger and Holstein models, *Phys. Rev. B* **56**, 4484 (1997).
- [40] D. Banerjee, J. Thomas, A. Nocera, and S. Johnston, Ground-state and spectral properties of the doped one-dimensional optical Hubbard-Su-Schrieffer-Heeger model, *Phys. Rev. B* **107**, 235113 (2023).
- [41] S. R. White, Density matrix formulation for quantum renormalization groups, *Phys. Rev. Lett.* **69**, 2863 (1992).
- [42] G. Alvarez, The density matrix renormalization group for strongly correlated electron systems: A generic implementation, *Computer Physics Communications* **180**, 1572 (2009).
- [43] A. Damascelli, Z. Hussain, and Z.-X. Shen, Angle-resolved photoemission studies of the cuprate superconductors, *Reviews of modern physics* **75**, 473 (2003).
- [44] J. A. Sobota, Y. He, and Z.-X. Shen, Angle-resolved photoemission studies of quantum materials, *Reviews of Modern Physics* **93**, 025006 (2021).
- [45] A. Nocera and G. Alvarez, Spectral functions with the density matrix renormalization group: Krylov-space approach for correction vectors, *Phys. Rev. E* **94**, 053308 (2016).
- [46] S. Engelsberg and J. R. Schrieffer, Coupled electron-phonon system, *Phys. Rev.* **131**, 993 (1963).
- [47] J. Bonča, S. A. Trugman, and M. Berciu, Spectral function of the Holstein polaron at finite temperature, *Phys.*

- Rev. B* **100**, 094307 (2019).
- [48] J. P. Hague, P. E. Kornilovitch, A. S. Alexandrov, and J. H. Samson, Effects of lattice geometry and interaction range on polaron dynamics, *Phys. Rev. B* **73**, 054303 (2006).
- [49] G. L. Goodvin, M. Berciu, and G. A. Sawatzky, Green's function of the Holstein polaron, *Phys. Rev. B* **74**, 245104 (2006).
- [50] J. Bonča, T. Katrašnik, and S. A. Trugman, Mobile bipolaron, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 3153 (2000).
- [51] J. Sous, M. Chakraborty, C. P. J. Adolphs, R. Krems, and M. Berciu, Phonon-mediated repulsion, sharp transitions and (quasi) self-trapping in the extended Peierls-Hubbard model, *Scientific reports* **7**, 1169 (2017).
- [52] A. Nocera, J. Sous, A. E. Feiguin, and M. Berciu, Bipolaron liquids at strong Peierls electron-phonon couplings, *Phys. Rev. B* **104**, L201109 (2021).
- [53] M. Takahashi, Half-filled Hubbard model at low temperature, *Journal of Physics C: Solid State Physics* **10**, 1289 (1977).
- [54] Z. Chen, Y. Wang, S. N. Rebec, T. Jia, M. Hashimoto, D. Lu, B. Moritz, R. G. Moore, T. P. Devereaux, and Z.-X. Shen, Anomalously strong near-neighbor attraction in doped 1D cuprate chains, *Science* **373**, 1235 (2021).