

London-, Ginzburg-Landau- und Bardeen-Cooper-Schrieffer-Theorie für konventionelle Supraleiter

Untersuchung von Phasengrenzen, Vortexgittern und Energielücken

Bachelorarbeit

Karim Zantout

7. August 2014

Goethe Universität Frankfurt am Main
Institut für Theoretische Physik

Betreuerin und Erstprüferin:

Prof. Maria-Roser Valentí

Zweitprüfer:

Prof. Eberhard Engel

Erklärung nach § 28 (12) Ordnung für den Bachelor- und dem Masterstudiengang

Hiermit erkläre ich, dass ich die Arbeit selbstständig und ohne Benutzung anderer als der angegebenen Quellen und Hilfsmittel verfasst habe. Alle Stellen der Arbeit, die wörtlich oder sinngemäß aus Veröffentlichungen oder aus anderen fremden Texten entnommen wurden, sind von mir als solche kenntlich gemacht worden. Ferner erkläre ich, dass die Arbeit nicht - auch nicht auszugsweise - für eine andere Prüfung verwendet wurde.

Frankfurt, den

Inhaltsverzeichnis

1. Einleitung	1
2. Grundlagen zur Supraleitung	2
2.1. Phänomenologie der Supraleitung	2
2.1.1. Verschwindender Widerstand	2
2.1.2. Meissner-Ochsenfeld-Effekt	3
2.2. Klassen von Supraleitern	3
2.2.1. Typ-I-Supraleiter	4
2.2.2. Typ-II-Supraleiter	4
2.3. Supraleitung als Phase	4
3. Phänomenologische Theorien für konventionelle Supraleiter	7
3.1. London-Theorie	7
3.1.1. Einleitung	7
3.1.2. Herleitung der London-Gleichungen	8
3.1.3. Meissner-Ochsenfeld-Effekt	9
3.1.4. Oberflächenenergie zwischen supraleitender und normalleitender Phase	10
3.1.5. Flussquantisierung	12
3.1.6. Typ-II-Supraleiter bei $H \gtrsim H_{c1}$	16
3.1.7. Typ-II-Supraleiter bei $H_{c1} \ll H \ll H_{c2}$	18
3.2. Ginzburg-Landau-Theorie	22
3.2.1. Einleitung	22
3.2.2. Herleitung der Ginzburg-Landau-Gleichungen	22
3.2.3. Eichinvarianz und Oberflächeneffekte	25
3.2.4. Oberes kritisches Feld im Typ-II-Supraleiter	31
3.2.5. Typ-II-Supraleiter im Bereich $H \lesssim H_{c2}$	33
3.2.6. Exkurs: Josephson-Effekt	38
4. Mikroskopische Theorie für konventionelle Supraleiter	47
4.1. Einleitung	47
4.2. Herleitung des Fröhlich-Hamiltonians	48
4.3. Das Cooper-Problem	54
4.4. BCS-Grundzustand	56
4.5. Anregungen des Grundzustands: Bogoliubov-Valatin-Transformation	64
4.6. Thermodynamische Eigenschaften von Supraleitern	67
5. Ausblick	73
A. Herleitung der zweiten Londongleichung mittels Variationsansatz	74
B. Numerische Berechnung des Abrikosov-Parameters für Dreiecks- und Quadratgitter	76
C. Numerische Berechnung der Energielücke und der kritischen Temperatur im Supraleiter	85

1. Einleitung

In der vorliegenden Arbeit sollen die drei gängigsten Theorien zur konventionellen Supraleitung vorgestellt werden. Hierbei sollen ihre theoretischen Vorhersagen explizit analytisch und numerisch berechnet werden, um sie an geeigneter Stelle mit experimentellen Befunden zu vergleichen.

Mit dem ersten Kapitel wird zunächst ein kleiner Überblick zum Thema Supraleitung gegeben. Im nächsten Kapitel werden dann die Ginzburg-Landau-Theorie (GL-Theorie) und die London-Theorie vorgestellt. Sie sind phänomenologischer Natur und stellen eine wichtige Grundlage zur Ableitung der mikroskopischen Bardeen-Cooper-Schrieffer-Theorie (BCS-Theorie) im dritten Kapitel dar. Zuletzt soll ein kurzer Ausblick auf weitere Problemstellungen in diesem Gebiet stattfinden.

Im Folgenden werden durchgehend cgs-Einheiten verwendet.

Bei der Erstellung dieser Arbeit habe ich die Lehrbücher von Ketterson und Song [1], James F. Annett [2], Wolfgang Nolting [3] und Mermin und Ashcroft [4] als Grundlage verwendet. Darüber hinaus basiert das Kapitel 4.2 auf den Vorlesungsaufzeichnungen zu Dr. Marcus Kasners Vorlesung "Fortgeschrittene Themen der Theorie der Supraleitung" aus dem Sommersemester 2014.

Danksagung

An dieser Stelle möchte ich Prof. Valentí herzlich dafür danken, dass sie mich in ihre Arbeitsgruppe aufgenommen und während der ganzen Zeit persönlich betreut hat. Sie vermochte es, meine Aufmerksamkeit auf die wichtigen Zusammenhänge zu lenken und gewährte mir die Freiheit an denjenigen Themen zu arbeiten, die mich besonders interessierten.

Außerdem danke ich Prof. Engel, der sich kurzfristig als Zweitprüfer bereit stellte. Innerhalb der Arbeitsgruppe, die mich als Ganze sehr freundlich bei sich aufgenommen hat, will ich besonders Steffen Backes, Kira Riedl und Michaela Altmeyer hervorheben, die mir sowohl bei physikalischen Fragestellungen halfen als auch den Umgang mit LaTeX, Mathematica und Gnuplot näher brachten. Sie haben zu einem ausgezeichneten Arbeitsklima beigetragen.

Zudem möchte ich meine Dankbarkeit gegenüber meiner Familie und meinen Freunden ausdrücken, darunter vor allem meiner Freundin Eva Katernberg, die mir viel Geduld und Unterstützung entgegenbrachte, meinem Bruder Amer Zantout und meinen Freunden Rajbir-Singh Nirwan, Ivan Schneider und Michelle Weber.

2. Grundlagen zur Supraleitung

2.1. Phänomenologie der Supraleitung

2.1.1. Verschwindender Widerstand

In der Theorie der Metalle ist der lineare Zusammenhang zwischen spezifischem Widerstand ρ und Temperatur T bei tiefen Temperaturen lange bekannt. Demzufolge könnte man beim stetigen Abkühlen in Richtung des absoluten Nullpunkts mit diesem linearen oder einem anderen Potenzgesetz-Verlauf rechnen, sodass man letztlich bei $T = 0K$ einen Restwiderstand oder $\rho(T = 0) = 0$ erwarten könnte.

Im Jahre 1911 untersuchte Kammerlingh Onnes diesbezüglich das Verhalten von Quecksilber [5] und entdeckte, dass bei etwa 4.2K der Widerstand um mindestens vier Größenordnung abrupt abfiel (Abb. 2.1).

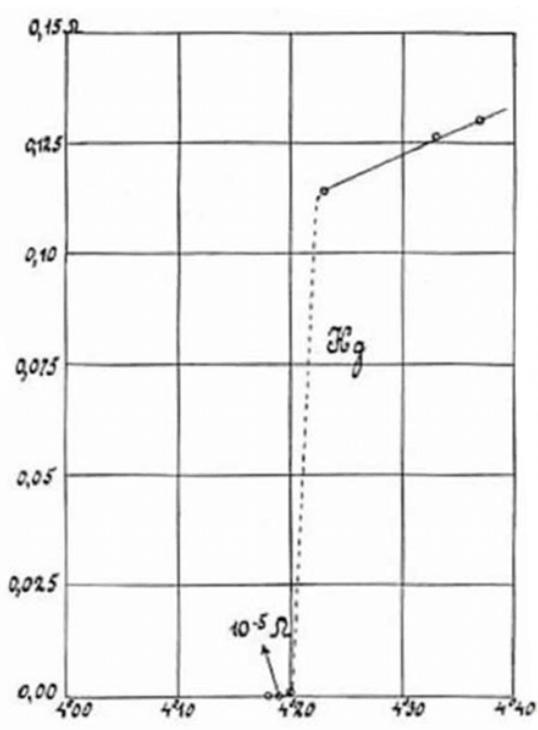


Abbildung 2.1: Messung der ρ - T -Abhängigkeit bei tiefen Temperaturen von Kammerlingh Onnes. Bei etwa 4.2K bricht der spezifische Widerstand plötzlich zusammen (aus [5]).

Heutzutage ist man aufgrund von Dauerstromexperimenten überzeugt, dass der Widerstand tatsächlich auf exakt Null abfällt [2].

Die Bezeichnung Supraleiter leitet sich daraus ab, dass derartige Stoffe unterhalb einer kritischen Temperatur T_c diese Eigenschaft aufweisen.

Jedoch besteht ein wichtiger Unterschied zum idealen Leiter, der elektrischen Strom ebenfalls verlustfrei transportiert. Die Unterscheidung wird durch den Meissner-Ochsenfeld-Effekt getroffen und betrifft das Verhalten in einem magnetischen Feld.

2.1.2. Meissner-Ochsenfeld-Effekt

Es sollen nun zwei Experimente mit einem Supra- und einem Idealleiter vorgestellt werden, die eine Unterscheidung hinsichtlich der Magnetisierung erlauben.

Experiment a)

Seien ein Supraleiter und ein Normalleiter bei $T > T_c$ in einem schwachen äußeren Magnetfeld H . Dieses wird beide Stoffe durchdringen und beim Abschalten werden Induktionsströme in beiden Proben auftreten, die das Feld im Inneren nach der Lenzschen Regel aufrecht erhalten (Abb. 2.2).

Experiment b)

Ändert man in Experiment a) nur den Temperaturparameter nach $T < T_c$ so wird man feststellen, dass das Magnetfeld vollständig aus dem Inneren des Supraleiters verdrängt wird, während beim idealen Leiter dasselbe Verhalten wie im ersten Experiment beobachtet werden kann [6]. Dies wird als Meissner-Ochsenfeld-Effekt bezeichnet.

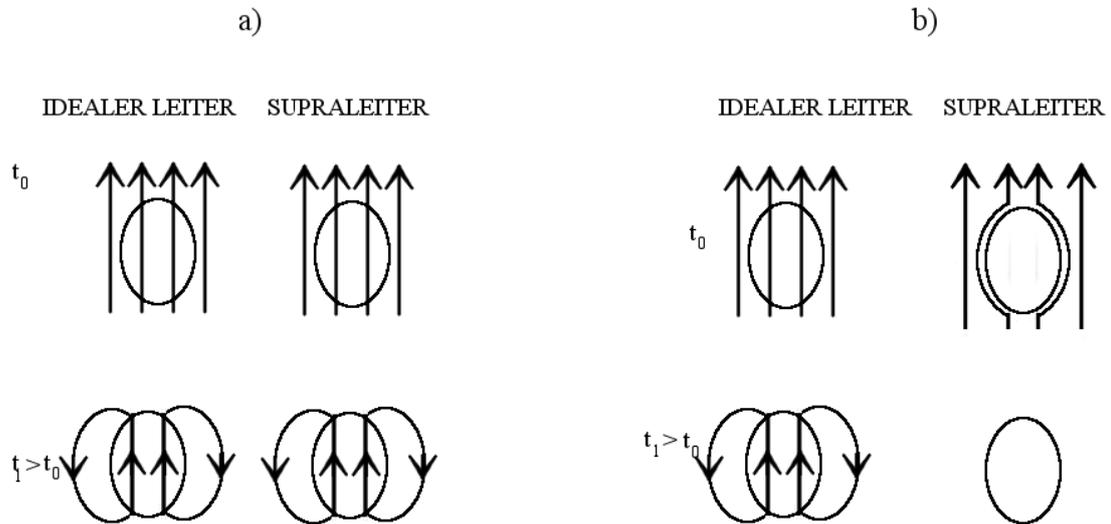


Abbildung 2.2: Unterschiedliches Verhalten von Supraleitern und idealen Leitern bei $T < T_c$. Der Supraleiter ist zusätzlich ein idealer Diamagnet.

Supraleiter kennzeichnen sich also dadurch, dass sie nicht nur ideale Leiter sind, sondern außerdem ideale Diamagneten (magnetische Suszeptibilität $\chi = -1$) sind.

2.2. Klassen von Supraleitern

Im letzten Abschnitt wurde das Verhalten von Supraleitern in schwachen Magnetfeldern diskutiert. Verstärkt man das magnetische Feld immer weiter, so kann man sehen, dass die Supraleitung oberhalb eines bestimmten Wertes zusammenbricht. Der Punkt an dem dies geschieht, wird kritisches Feld $H_c(T)$ genannt. Diese Grenze gilt für eine einzelne

2.3 Supraleitung als Phase

Probe unabhängig vom Weg, den man im H-T-Diagramm durchläuft, weswegen man den supraleitenden Zustand als Phase klassifiziert.

Innerhalb der Supraleiter kann man anhand des Phasendiagramms zwei Typen von Supraleitern unterscheiden.

2.2.1. Typ-I-Supraleiter

Das Phasendiagramm eines Typ-I-Supraleiters nimmt eine Form wie in Abb. 2.3 an.

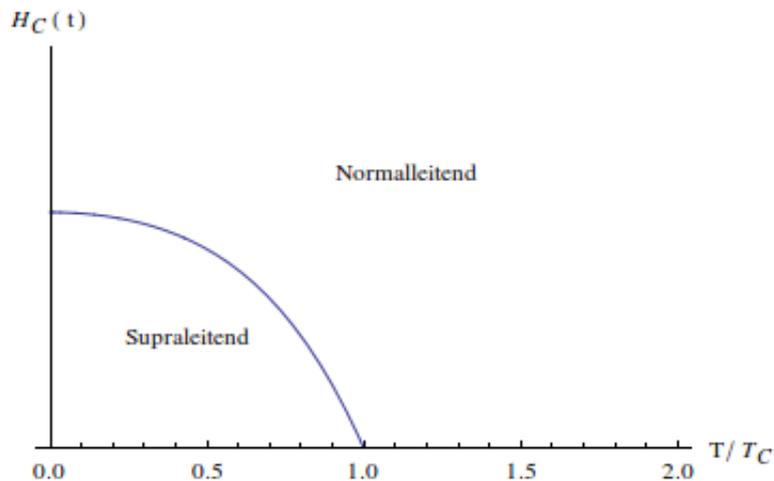


Abbildung 2.3: Dargestellt ist der qualitative Verlauf des Phasendiagramm eines Typ-I-Supraleiters. $H_c(t)$ definiert hierbei die Phasengrenze. Es wurde $t \equiv T/T_c$ gesetzt.

Unterhalb von $H_c(T)$ ist das Material vollkommen supraleitend, während man oberhalb des kritischen Feldes die Supraleitung gänzlich zerstört hat.

2.2.2. Typ-II-Supraleiter

Für einen Typ-II-Supraleiter existieren drei Phasen (Abb. 2.4).

Im Bereich unterhalb des ersten kritischen Feldes H_{c1} befindet sich ein Typ-II-Supraleiter in der sogenannten Meissner- bzw. supraleitenden Phase. Hier kann der Meissner-Ochsenfeld-Effekt beobachtet werden.

Zwischen H_{c1} und dem zweiten kritischen Feld H_{c2} befindet sich die sogenannte Schubnikov-Phase, in der magnetisches Feld teilweise in den Supraleiter eindringt und dadurch normaleleitende Bereiche innerhalb des Supraleiters entstehen.

Oberhalb von H_{c2} bricht die supraleitende Phase vollkommen zusammen und der Typ-II-Supraleiter befindet sich in der normalleitenden Phase.

2.3. Supraleitung als Phase

Experimentell findet man für einen Typ-I-Supraleiter qualitativ ein Phasendiagramm wie in Abb.2.3 dargestellt. Dieses kann verwendet werden, um die Ordnung des Phasenübergangs festzustellen.

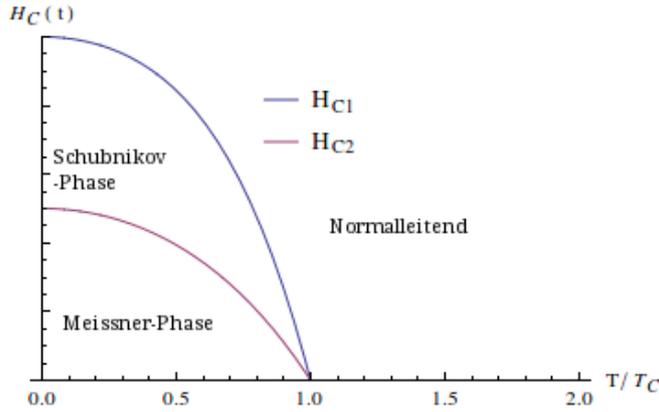


Abbildung 2.4: Phasendiagramm eines Typ-II-Supraleiters. Die kritischen Felder H_{C1} und H_{C2} wurden in Abhängigkeit von $t \equiv \frac{T}{T_c}$ abgetragen. Innerhalb der Schubnikov-Phase tritt magnetisches Feld teilweise in das Material ein.

Eine geeignete Näherung für das kritische Feld ist durch folgende Parametrisierung gegeben:

$$H_c(T) = H_0 \left[1 - (1 - c) \left(\frac{T}{T_c} \right)^2 - c \left(\frac{T}{T_c} \right)^4 \right] \quad (2.1)$$

$$c \in [0, 1]$$

$$H_0, c = \text{const.}$$

Zur Bestimmung des Phasenübergangs nach der Ehrenfest-Klassifikation muss die Stetigkeit der Gibbs-Enthalpie und ihrer Ableitungen überprüft werden. Im Folgenden sei die supraleitende Phase durch den Index s und die normalleitende Phase durch n gekennzeichnet. Aufgrund des Meissner-Ochsenfeld-Effekt gilt für die Magnetisierung im Supraleiter $M_s = -H$.

$$dG = -SdT - \frac{1}{4\pi} V M dH$$

$$\text{Supraleiter: } dG_s = -S_s dT + \frac{1}{4\pi} V H dH$$

$$\rightarrow G_s(T, H) = G_s(T, H = 0) + \frac{1}{8\pi} V H^2 \quad (2.2)$$

Im thermodynamischen Gleichgewicht beim Phasenübergang ist die Gibbs-Enthalpie in beiden Phasen gleich:

$$G_s(T, H_c) \stackrel{!}{=} G_n(T, H_c) \quad (2.3)$$

Zur Vereinfachung des Ausdrucks kann verwendet werden, dass die Magnetisierung im Normalleiter viel kleiner ist als im Supraleiter, d.h. $M_n \ll M_s$. Dadurch vereinfacht sich 2.3 zu:

$$G_s(T, H_c) \simeq G_n(T, 0) \quad (2.4)$$

Ein Maß für den Energieanteil eines Systems, der durch die Ordnung entsteht, wird durch die sogenannte Kondensationsenergie gegeben, die folgendermaßen definiert ist:

$$\text{Def(Kondensationsenergie): } \Delta G \equiv G_s(T, 0) - G_n(T, 0) \quad (2.5)$$

$$\begin{aligned} \Delta G &\stackrel{2.4}{\simeq} G_s(T, H=0) - G_s(T, H_c) & |2.2 \\ &= -\frac{1}{8\pi} H_c^2(T) & (2.6) \end{aligned}$$

Aus der Gibbs-Enthalpie können nun die Entropie und die Wärmekapazität berechnet werden:

$$\begin{aligned} S_n &= - \left(\frac{\partial G_n(T, H)}{\partial T} \right)_H & |M_n \ll M_s \\ &\simeq - \left(\frac{\partial G_n(T, H=0)}{\partial T} \right)_{H=0} \\ S_s &= - \left(\frac{\partial G_s(T, H)}{\partial T} \right)_H & |2.2 \\ &= - \frac{dG_s(T, H=0)}{dT} \\ \Rightarrow S_s - S_n &\simeq - \frac{d\Delta G}{dT} & |2.6 \\ &= \frac{1}{4\pi} V H_c(T) \frac{dH_c(T)}{dT} & (2.7) \end{aligned}$$

Anhand von Abb. 2.3 erkennt man, dass $\frac{dH_c(T)}{dT} < 0$. Hierdurch folgt aus 2.7, dass $S_s < S_n$, d.h. die supraleitende Phase stellt den geordneteren Zustand dar.

Bei $T = T_c$ gilt wegen $H_c(T_c) = 0$ hingegen: $S_n(T_c) = S_s(T_c)$. Damit ist gezeigt, dass in diesem Fall ein Phasenübergang erster Ordnung vorliegt.

Nun soll überprüft werden, ob bei $T \neq T_c$ ein Phasenübergang zweiter Ordnung vorliegt. Hierzu wird nun die Wärmekapazität bei $T = T_c$ berechnet:

$$\begin{aligned} (C_s - C_c)(T_c) &= T_c \left[\frac{\partial(S_s - S_n)}{\partial T} \right]_{T=T_c} & |2.7, 2.1 \\ &\simeq \frac{V H_0^2 T_c}{\pi} \frac{\partial}{\partial T} \left\{ \left[1 - (1-c) \left(\frac{T}{T_c} \right)^2 - c \left(\frac{T}{T_c} \right)^4 \right] \left[-2(1-c) \frac{T}{T_c^2} - 4c \left(\frac{T}{T_c} \right)^3 \frac{1}{T_c} \right] \right\}_{T=T_c} \\ &= \frac{V H_0^2}{\pi T_c} (1+c)^2 \\ &> 0 \end{aligned}$$

Damit kann zusammenfassend folgendes Ergebnis festgehalten werden:

Für $T < T_c$: $S_n(T) \neq S_s(T)$ und deshalb Phasenübergang erster Ordnung

Für $T = T_c$: $S_n(T) = S_s(T)$, $C_n(T) \neq C_s(T)$ und deshalb Phasenübergang zweiter Ordnung

3. Phänomenologische Theorien für konventionelle Supraleiter

3.1. London-Theorie

3.1.1. Einleitung

Es dauerte vierzehn Jahre von der Entdeckung der Supraleitung an, bis eine erste Theorie von den Brüdern Fritz und Heinz London [7] entwickelt wurde, die sowohl den widerstandsfreien Transport von Elektronen als auch den Meissner-Ochsenfeld-Effekt in Supraleitern einheitlich beschreiben konnte. Die London-Theorie stellt eine phänomenologische Theorie dar, die nicht im Mikroskopischen ansetzt, sondern Zusammenhänge in makroskopischen Größen zu bestimmen versucht. Das Ziel der beiden Brüder bestand darin, die elektromagnetischen Eigenschaften von Supraleitern auf Grundlage der Maxwellgleichungen zu bestimmen.

Bei der Begründung der beiden fundamentalen Gleichungen der London-Theorie kann verschieden vorgegangen werden, aber grundsätzlich ist der Gedanke entscheidend, dass sich Elektronen (wenigstens ein Teil von ihnen) ohne Reibungsverluste in einem Supraleiter bewegen.

Im Laufe der Zeit wurde die London-Theorie weiterentwickelt, sodass man aus ihr sogar einige Effekte der Typ-II-Supraleiter ableiten kann. Zu diesen gehört beispielsweise die Flussquantisierung oder die Bestimmung des unteren kritischen Feldes.

In diesem Abschnitt sollen die wichtigsten Ableitungen der erweiterten London-Theorie diskutiert werden, wobei man sich immer vor Augen halten sollte, auf wie wenig Annahmen die Theorie basiert und dass die teilweise nicht rigoros begründbaren Näherungen ihre Legitimation im experimentellen Erfolg finden.

In diesem Kapitel leite ich die zweite Londongleichung aus einem variationellen Ansatz explizit her (Appendix A). Darüber hinaus berechne ich einen Zusammenhang zwischen der Stromdichte \vec{j} und dem Vektorpotential \vec{A} innerhalb des Supraleiters. Schließlich führe ich die Berechnungen für Typ-II-Supraleiter im Bereich $H_{c1} \ll H \ll H_{c2}$ explizit aus, um die Magnetisierung in diesem Bereich zu erhalten.

3.1.2. Herleitung der London-Gleichungen

Zur Beschreibung elektrischer Transporteigenschaften, die auf dem experimentellen Befund von Kamerlingh-Onnes [5] beruhen sollen, muss angenommen werden, dass in der Formulierung der Bewegungsgleichung eines Elektrons im Supraleiter kein Reibungsterm auftritt, d.h.:

$$m\ddot{\vec{r}} = e\vec{E} \quad (3.1)$$

\vec{E} bezeichnet hierin das angelegte elektrische Feld.

Um die kollektive Bewegung der Elektronen zu beschreiben, führt man eine elektrische Stromdichte ein.

$$\text{Def(Stromdichte): } \vec{j} \equiv n_s e \dot{\vec{r}} \quad (3.2)$$

n_s : Dichte der supraleitenden Elektronen

Dadurch lässt sich 3.1 umschreiben zu

$$\frac{d\vec{j}}{dt} = \frac{n_s e^2}{m} \vec{E} \quad \mathbf{1. \text{ London-Gleichung}} \quad (3.3)$$

Im nächsten Schritt wird das erweiterte Durchflutungsgesetz aus den Maxwellgleichungen umgeformt, um aus der ersten London-Gleichung die zweite abzuleiten.

Hierbei soll angenommen werden, dass sich die Stromdichte nur unwesentlich innerhalb des Supraleiters ändert, d.h. dass näherungsweise u.a. ein räumlich homogenes elektrisches Feld anliegt und die Form und Zusammensetzung des Leiters an jeder Stelle gleich ist. Dann kann nämlich die totale Zeitableitung durch eine partielle ersetzt werden.

$$\text{Durchflutungsgesetz: } \nabla \times \vec{B} = \frac{4\pi}{c} \vec{j} + \frac{\epsilon}{c} \partial_t \vec{E} \quad |\partial_t| |\nabla \times| \quad (3.4)$$

$$\nabla \times (\nabla \times \partial_t \vec{B}) = \left(\frac{4\pi n_s e^2}{mc} + \frac{\epsilon}{c} \partial_t^2 \right) (\nabla \times \vec{E})$$

$$\text{Induktionsgesetz } \nabla \times \vec{E} = -\frac{1}{c} \partial_t \vec{B} \quad \text{einsetzen:} \quad (3.5)$$

$$\nabla \times (\nabla \times \partial_t \vec{B}) = -\left(\frac{1}{\lambda_L^2} + \frac{\epsilon}{c^2} \partial_t^2 \right) \partial_t \vec{B} \quad (3.6)$$

An dieser Stelle haben wir eine Konstante definiert, deren Bedeutung bald deutlich werden wird.

$$\text{Def(Londonsche Eindringtiefe): } \lambda_L^{-2} \equiv \frac{4\pi n_s e^2}{mc^2} \quad (3.7)$$

Die zeitliche Integration von 3.6 bei Anfangswert $\vec{B}(t=0) = 0$ liefert einen Ausdruck, der eine zweite partielle Zeitableitung der magnetischen Flussdichte enthält. Es stellt sich heraus, dass dieser Beitrag viel kleiner als die restlichen Terme ist und daher vernachlässigt werden kann, sodass folgende Gleichung übrig bleibt:

$$\nabla \times (\nabla \times \vec{B}) = -\frac{1}{\lambda_L^2} \vec{B} \quad \mathbf{2. \text{ London-Gleichung}} \quad (3.8)$$

An dieser Stelle soll noch ein Zusammenhang zwischen dem Vektorpotential \vec{A} , der magnetischen Flussdichte \vec{B} und der Stromdichte \vec{j} hergestellt werden. Dieser Ausdruck wird nämlich im Rahmen der zweiten phänomenologischen Theorie zum Vergleich der beiden Theorien dienen:

$$\nabla \times \vec{B} = \frac{4\pi}{c} \vec{j} + \frac{\epsilon}{c} \partial_t \vec{E} \quad |\nabla \times \quad |3.5$$

$$\nabla \times (\nabla \times \vec{B}) + \frac{\epsilon}{c^2} \partial_t^2 \vec{B} = \nabla \times \frac{4\pi}{c} \vec{j} \quad |3.8$$

$$-\frac{1}{\lambda_L^2} \vec{B} + \frac{\epsilon}{c^2} \partial_t^2 \vec{B} = \nabla \times \frac{4\pi}{c} \vec{j} \quad |\nabla \times \vec{A} = \vec{B}$$

$$\left(-\frac{1}{\lambda_L^2} + \frac{\epsilon}{c^2} \partial_t^2 \right) (\nabla \times \vec{A}) = \nabla \times \frac{4\pi}{c} \vec{j} \quad |3.7 \text{ |Vernachlässigung}$$

der zweiten Zeitableitung

$$\vec{j} = -\frac{n_s e^2}{mc} \vec{A} \quad (3.9)$$

Mithilfe der beiden London-Gleichungen kann man nun zur Überprüfung der London-Theorie übergehen. Zuvor soll jedoch auf eine alternative Ableitung der London-Gleichungen per Variationsrechnung in Appendix A hingewiesen werden.

3.1.3. Meissner-Ochsenfeld-Effekt

Nun soll geprüft werden, ob die London-Theorie tatsächlich den Meissner-Ochsenfeld-Effekt vorhersagen kann.

Dazu werden die zwei Fälle a) magnetisches Feld senkrecht zur Oberfläche und b) magnetisches Feld parallel zur Oberfläche separat behandelt. Hierzu betrachtet man eine dünne weit ausgedehnte supraleitende Platte in der x-y-Ebene. Die Platte soll weit ausgedehnt sein, damit keine magnetischen Randeffekte auftreten. Zudem soll die Platte dünn sein, damit kein Stromfluß in z-Richtung stattfinden kann.

a)

Ein äußeres Magnetfeld $\vec{H}(z) = H_z \hat{e}_z$ soll an die supraleitende Platte angelegt werden. Aufgrund der Quellfreiheit des magnetischen Feldes folgt, dass $\vec{H} = const.$ Nutzt man nun die Identität $\nabla \times (\nabla \times \vec{B}) = \nabla(\nabla \cdot \vec{B}) - \Delta \vec{B}$, so lautet in diesem Spezialfall 3.8:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\lambda_L^2} \vec{B} + 0 &= 0 \\ \Rightarrow \vec{B} &= 0 \end{aligned}$$

Es folgt also, dass kein Magnetfeld senkrecht zur Oberfläche eines Supraleiters eindringen kann.

b)

Liegt das Magnetfeld parallel zur Oberfläche, so kann unter Berücksichtigung der Quellfreiheit beispielsweise folgendes Feld angenommen werden: $\vec{H}(z) = H(z) \hat{e}_x$.

Es gilt dann folgende Version von 3.8:

$$\begin{aligned} -\Delta \vec{B} + \frac{1}{\lambda_L^2} \vec{B} &= 0 & |\vec{B} \uparrow \vec{H} \\ \partial_z^2 B_x - \frac{1}{\lambda_L^2} B_x &= 0 \end{aligned}$$

Bei der Lösung dieser Differentialgleichung muss die Stetigkeit beim Übergang in den freien Raum ($z < 0$) berücksichtigt werden, sodass folgt:

$$\vec{B}(z) = H_x(z=0)e^{-z/\lambda_L}\hat{e}_x \quad (3.10)$$

Innerhalb eines Supraleiters kann also magnetisches Feld parallel zur Oberfläche eindringen, wird aber mit der Tiefe exponentiell unterdrückt.

Diese Verdrängung geschieht aufgrund von Oberflächenströmen, die man mittels 3.4 simpel berechnen kann:

$$\vec{j}(z) = -\frac{c}{4\pi\lambda_L}H_x(z=0)e^{-z/\lambda_L}\hat{e}_y$$

Auch diese Oberflächenströme werden mit der Tiefe im Supraleiter schwächer.

3.1.4. Oberflächenenergie zwischen supraleitender und normalleitender Phase

Bisher wurde in der Argumentation nicht berücksichtigt, dass das kritische Feld über die Magnetisierung auch von der Geometrie des Systems abhängt.

So erzeugt eine Kugel in einem homogenen, externen Magnetfeld ein Dipolfeld, weswegen abhängig von der Position im Material das kritische Magnetfeld erreicht werden kann, während dies in benachbarten Bereichen noch nicht der Fall ist. Bei der Kugel würde beim langsamen Hochfahren des Magnetfeldes in der Region um den Äquator zuerst die supraleitende Phase zusammenbrechen.

Es ist also durchaus sinnvoll, sich mit Grenzflächeneffekten auseinanderzusetzen.

Es sei eine dünne supraleitende Platte in der x-y-Ebene in einem magnetischen Feld $\vec{H} = H_c\hat{e}_y$ gegeben. Die Platte soll im Bereich $x > 0$ gerade noch supraleitend sein, d.h. $\vec{H}(x > 0) = \lim_{\eta \rightarrow 0^-} (H_c + \eta)\hat{e}_y$, während sie ansonsten bereits normalleitend ist.

Die Grenzfläche zwischen beiden Phasen sei A.

Für die freie Energie gilt nach A.1, wenn man zusätzlich die Definition der Kondensationsenergie 2.5 miteinbezieht:

$$F_s = A \int_0^\infty \left[f_s + \frac{B^2(\vec{r})}{8\pi} + \frac{\lambda_L^2}{8\pi} (\nabla \times \vec{B}(\vec{r}))^2 \right] \quad (3.11)$$

mit f_s : Kondensationsenergiedichte

Ein Maß für den Energieunterschied aufgrund der Grenzfläche wird durch die sogenannte Oberflächenenergie gegeben, die über den Unterschied in den Gibbsenthalpien berechnet:

$$\text{Def(Oberflächenenergie): } \sigma \equiv \int_{-\infty}^\infty [g_s - g_n] dx \quad (3.12)$$

mit g : Gibbsenthalpiedichte

Zur Berechnung verwenden wir die Legendre-Transformation und 3.10:

$$\begin{aligned}
 G_s &= F_s - \frac{A}{4\pi} \int_0^\infty \vec{H} \vec{B} dx \\
 &= F_s - \frac{A}{4\pi} \int_0^\infty (H_c \hat{e}_z)(H_c e^{-x/\lambda_L} \hat{e}_z) dx \quad |3.11 \\
 &= A \int_0^\infty \left[f_s + H_c^2 \left(\frac{1}{8\pi} e^{-2x/\lambda_L} + \frac{1}{8\pi} e^{-2x/\lambda_L} - \frac{1}{4\pi} e^{-x/\lambda_L} \right) \right] dx \\
 &= \int_{Sl} f_s d^3r - \lambda_L \frac{H_c^2}{8\pi} A \quad (3.13)
 \end{aligned}$$

Dadurch, dass sich g_s im Bereich der normalleitenden Phase nicht von g_n unterscheidet, kann σ mit dem zweiten Term in 3.13 identifiziert werden.

$$\begin{aligned}
 \sigma &= \gamma A \\
 \gamma &\equiv -\lambda_L \frac{H_c^2}{8\pi} < 0 \quad (3.14)
 \end{aligned}$$

Wie man sieht ist die Oberflächenenergie immer negativ, so dass eine Vergrößerung der Grenzfläche die Energie des Gesamtsystems minimieren würde. Diese Vergrößerung geschieht durch das Eindringen von sogenannten Flussschläuchen in die supraleitende Phase, was gerade im Verhalten von Typ-II-Supraleitern beobachtet wird (Abb. 3.1). Jedoch muss an dieser Stelle noch die Kondensationsenergie berücksichtigt werden. Dies führt zu einer ersten einfachen Unterscheidung zwischen Typ-I- und Typ-II-Supraleitern. Zuvor muss aber eine Größe eingeführt werden, die ihre Bedeutung erst im Rahmen der zweiten phänomenologischen Theorie genauer erläutert werden kann: Die Kohärenzlänge ξ .

Es wird später gezeigt werden, dass durch das Eindringen der Flussschläuche mit Oberfläche A ein supraleitendes Volumen der Ordnung $O(A\xi)$ verlorenght.

Typ-I-Supraleiter

Hier gilt die Ungleichung $\xi > \lambda_L$, so dass die Änderung in der Volumenenergie den Beitrag der Oberflächenenergie überkompensiert und es dadurch energetisch günstiger ist, die Phasengrenze nicht zu vergrößern, d.h. es dringen keine Flussschläuche in den Supraleiter ein.

Typ-II-Supraleiter

In diesem Fall ist $\xi \lesssim \lambda_L$, d.h. dass durch zusätzliche Grenzflächen die Energie des Systems herabgesetzt werden kann.

Diese erste mathematische Formulierung für Supraleiter zweiter Art darf nicht überstrapaziert werden, da die London-Theorie aus der klassischen Bewegungsgleichung für Elektronen abgeleitet wurde und hierin keine Beschränkung für die Anzahl der Flussschläuche ableitbar ist. Erst ein quantenmechanischer Zwang verhindert diese Divergenz, wie im Abschnitt 3.1.6 gezeigt wird.

Auf diesen Aspekt soll nun im Rahmen einer kleinen quantenmechanischen Erweiterung der London-Theorie eingegangen werden.

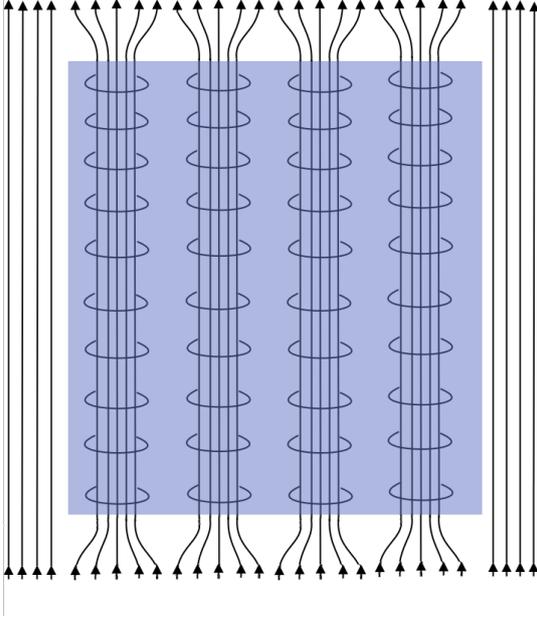


Abbildung 3.1: Magnetisches Feld bzw. normaleleitende Phase dringt in einen Supraleiter (blau) in Form von Flussschläuchen ein.

3.1.5. Flussquantisierung

Um die Flussschläuche genauer zu beschreiben, untersucht man nach Abb. 3.1 einen Fluss Schlauch, der parallel zum magnetischen Feld verläuft, einen Durchmesser der Ordnung $O(\xi)$ aufweist und dessen Feld, das durch supraleitende Elektronenvortizes nach außen abgeschirmt wird, auf Skalen der Ordnung $O(\lambda_L)$ abklingt.

Im Falle sehr schmaler Wirbel ($\xi \rightarrow 0$) sollte die Londontheorie anwendbar sein, da hierdurch nur eine kleine Störung des supraleitenden Zustandes hergestellt wird.

Startet man mit 3.8, leitet diese Gleichung nach der Zeit ab und integriert über eine Fläche A , die senkrecht zum Fluss Schlauch liegt, so erhält man:

$$\begin{aligned}
 \partial_t \int_A \left[\nabla \times (\nabla \times \vec{B}) + \frac{1}{\lambda_L^2} \vec{B} \right] d^2 r &= 0 \quad |3.4 \\
 \partial_t \int_A \left[\frac{mc}{n_s e^2} \nabla \times \vec{j} + \vec{B} \right] d^2 r &= 0 \quad | \text{Integrationskonstante, da kein Meissner-Effekt} \\
 \int_A \left[\frac{mc}{n_s e^2} \nabla \times \vec{j} + \vec{B} \right] d^2 r &= \Phi \quad | \text{Satz von Stokes} \\
 \oint_{S(A)} \frac{mc}{ne^2} \vec{j} d\vec{r} + \int_A \vec{B} d^2 r &= \Phi \quad | \nabla \times \vec{A} = \vec{B} \\
 \oint_{S(A)} \left[\frac{mc}{ne^2} \vec{j} + \vec{A} \right] d\vec{r} &= \Phi \quad | \vec{j} = ne\vec{v} = ne \frac{\vec{p}}{m} \\
 \oint_{S(A)} \left[\vec{p} + \frac{e}{c} \vec{A} \right] d\vec{r} &= \frac{e}{c} \Phi \quad | S(A) \text{ weit, so dass } \vec{j}\text{-Beitrag auch eingeht}
 \end{aligned} \tag{3.15}$$

Der Integrand in 3.15 kann mit dem kanonischen Impuls für bewegte Ladungen in elektromagnetischen Feldern identifiziert werden, sodass die Bohr-Sommerfeld-Quantisierungsregel

anwendbar ist:

$$\frac{|e|\hbar}{c}\Phi \equiv nh \quad , \text{wobei } n \in \mathbb{N} \quad (3.16)$$

Insgesamt kann also der Fluss Φ des eindringenden Fadens als Vielfaches des sogenannten Flussquantums geschrieben werden:

$$\begin{aligned} \Phi &= n\Phi_0 & (3.17) \\ \text{Def(Flussquantum): } \Phi_0 &\equiv \frac{hc}{|e|} \end{aligned}$$

Zusammenfassend kann also festgestellt werden, dass die normalleitende Phase bzw. magnetischer Fluss in Form von Flussschläuchen eindringt, die quantisierten Fluss aufweisen.

Betrachtet man die Wirbel um den Flussschlauch in einer Kreisfläche A mithilfe von Zylinderkoordinaten, wobei für den Radius $\xi \ll r \ll \lambda_L$ gilt, dann wird in 3.15 der Beitrag der kreisenden Elektronen dominant sein, während das magnetische Feld noch außerhalb von $S(A)$ einen nennenswerten Beitrag leistet, d.h.:

$$\begin{aligned} \oint_{S(A)} \vec{p} d\vec{r} &= \frac{e}{c}\Phi \quad | \text{Betrachte nur } n=1 \text{ beim Fluss} \\ 2\pi r p &= h \\ \vec{p} &= \frac{\hbar}{r} \hat{\phi} \quad | \vec{p} = m\vec{v} \\ \vec{v}(\vec{r}) &= \frac{\hbar}{mr} \hat{\phi} & (3.18) \end{aligned}$$

Gleichung 3.18 stellt das Wirbelfeld der kreisenden Elektronen dar, d.h. $\nabla \times \vec{v}$ sollte ungleich Null sein, aber tatsächlich verschwindet dieser Ausdruck für $r \neq 0$ und dennoch ist $\oint_{S(A)} \vec{v} d\vec{r}$ ungleich Null. Damit ist ersichtlich, dass der Wirbel nur bei exakt $r=0$ lokalisiert ist, was daher resultiert, dass in der Herleitung $\xi \rightarrow 0$ angenommen wurde. Um dies zu berücksichtigen, sollte in 3.8 ein Quellterm $\Phi_0 \hat{z} \delta^{(2)}(\vec{r})$ ergänzt werden:

$$\begin{aligned} \nabla \times (\nabla \times \vec{B}) + \frac{1}{\lambda_L^2} \vec{B} &= \Phi_0 \hat{z} \delta^{(2)}(\vec{r}) \quad | \text{magnetischer Fluss nur in } z\text{-Richtung} \\ \frac{1}{r} \frac{d}{dr} \left(r \frac{dB_z}{dr} \right) + \frac{1}{\lambda_L^2} B_z &= \Phi_0 \delta^{(2)}(\vec{r}) & (3.19) \end{aligned}$$

Die allgemeine Lösung der Differentialgleichung 3.19 ist durch die modifizierte Bessel-Funktion $K_0(x)$ gegeben:

$$B_z = \frac{\Phi_0}{2\pi\lambda_L^2} K_0 \left(\frac{r}{\lambda_L} \right) \quad | 3.4 \quad (3.20)$$

$$\vec{j} = -\frac{c}{4\pi} \frac{dB_z}{dr} \hat{\phi} \quad (3.21)$$

Mithilfe der Eigenschaften der Bessel-Funktion kann gezeigt werden, dass die bisherigen Ergebnisse mit 3.20 und 3.21 konsistent sind.

$$K_0\left(\frac{r}{\lambda_L}\right) = -i\frac{\pi}{2}H_0^{(2)}\left(-i\frac{r}{\lambda_L}\right) \stackrel{r \ll \lambda_L}{\approx} \ln\left(\frac{\lambda_L}{r}\right) \quad (3.22)$$

$$K_0\left(\frac{r}{\lambda_L}\right) \stackrel{r \gg \lambda_L}{\approx} \sqrt{\frac{\pi\lambda_L}{2r}}e^{-\frac{r}{\lambda_L}} \quad (3.23)$$

$H_0^{(2)}$: Hankelfunktion zweiter Art

Nun können die Grenzfälle verwendet werden, um \vec{j}, \vec{v} und \vec{B} zu bestimmen:

$$r \ll \lambda_L: \quad j_\phi \stackrel{3.22}{\simeq} \frac{c}{4\pi} \frac{\Phi_0}{2\pi\lambda_L^2 r} \quad |3.2$$

$$v \simeq \frac{\hbar}{mr} \quad (3.24)$$

$$r \gg \lambda_L: \quad B_z \stackrel{3.23}{\simeq} \frac{1}{r} e^{-\frac{r}{\lambda_L}} \quad (3.25)$$

Diese Ergebnisse stimmen mit 3.18 und 3.10 überein und stellen daher eine gute Erweiterung zur Beschreibung von Flussschläuchen dar.

Mittels A.1 kann nun auch noch die Energie eines Flussschlauchs berechnet werden. Es sei angenommen, dass dieser eine Grundfläche A und Länge L aufweise:

$$E = \frac{1}{8\pi} L \int_A [B^2(\vec{r}) + \lambda_L^2 (\nabla \times \vec{B}(\vec{r}))^2] d^2r \quad |\text{analoge Rechnung wie für A.3, wenn } \delta\vec{B} \rightarrow \vec{B}$$

$$\frac{E}{L} = \frac{\lambda_L^2}{8\pi} \oint_{S(A)} \vec{B}(\vec{r}) \times (\nabla \times \vec{B}(\vec{r})) d\vec{r} + \frac{1}{8\pi} \int_A \vec{B}(\vec{r}) \underbrace{[\vec{B}(\vec{r}) + \lambda_L^2 \nabla \times (\nabla \times \vec{B}(\vec{r}))]}_{\stackrel{3.19}{=} \lambda_L^2 \Phi_0 \delta^{(2)}(\vec{r})} d^2r \quad (3.26)$$

An dieser Stelle kann verwendet werden, dass die Erweiterung mit einem Quellterm (3.19) zu einer Divergenz in $r=0$ führt (3.20), weswegen man hier wieder zur ursprünglichen Londongleichung 3.8 zurückkehrt und das Flächenintegral verschwindet. Bei der Berechnung des Kurvenintegrals wählen wir eine Kontur, die zunächst die Randfläche von A abläuft ($r \gg \lambda_L$) und kurz vor dem Zusammenschließen des Kreises das eine Ende in das Innere des großen Kreises dringt und dort zwei Mal einen kleinen Kreis ($r = \xi$) durchläuft und wieder heraustritt. Das zweite Ende wendet sich auch nach Innen hinein und läuft denselben kleinen Kreis einmal ab und trifft dann das andere Ende auf Höhe des großen Kreises, sodass sich die Schleife schließt.

Der Beitrag auf dem Rand von A ist verschwindend, weil \vec{B} in diesem Bereich schon stark abgeklungen ist. Die inneren Kreise werden sich bis auf einen Durchlauf wegheben, so dass dies als einziger Beitrag im Konturintegral übrig bleibt.

Verwendet man zudem 3.22, so kann die Energie pro Länge folgendermaßen geschrieben werden:

$$\frac{E}{L} = \frac{\lambda_L^2}{8\pi} \oint_{S(A)} \frac{\Phi_0^2}{(2\pi\lambda_L^2)^2} \frac{1}{r} \ln\left(\frac{\lambda_L}{r}\right) dr$$

$$= \frac{\lambda_L^2}{8\pi} \frac{\Phi_0^2}{(2\pi\lambda_L^2)^2} \ln\left(\frac{\lambda_L}{\xi}\right) \quad (3.27)$$

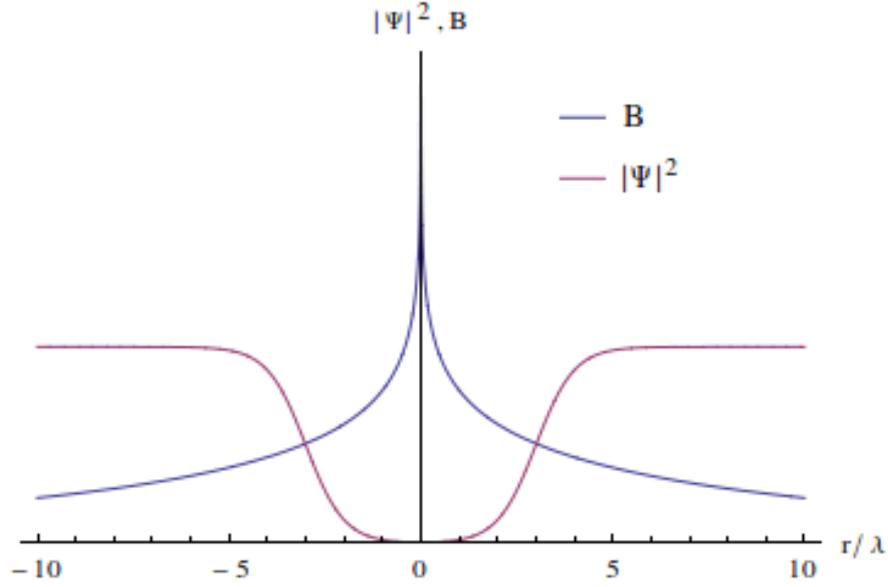


Abbildung 3.2: Verlauf des magnetischen Flusses B und der Dichte der supraleitenden Elektronen $n_s = |\psi|^2$ eines Flussschlauchs, wenn dieser um $r=0$ zentriert ist. Die Ergebnisse entstammen der Ginzburg-Landau-Theorie und verhindern eine Divergenz des Geschwindigkeitsfeldes der supraleitenden Elektronen.

Um die Geschwindigkeitsdivergenz bei $r=0$ (3.24) zu umgehen, muss man annehmen, dass die Dichte supraleitenden Elektronen schnell genug gegen Null abfällt, sodass die Divergenz vermieden wird, aber noch ausreichend vorhanden ist, um das Vordringen von magnetischem Fluss in die supraleitende Umgebung abzdämpfen.

Man wird qualitativ einen Verlauf wie in Abb. 3.2 erhalten, der explizit in der Ginzburg-Landau-Theorie abgeleitet werden wird.

Zum Abschluss soll noch die Wechselwirkungsenergie zwischen zwei Wirbeln berechnet werden, wobei sich der eine Wirbel bei \vec{r}_1 und der andere bei \vec{r}_2 befinden soll. Man kann wieder 3.8 plus zweier zusätzlicher Quellterme verwenden, um wie eben die Energie pro Länge zu berechnen:

$$\begin{aligned} \nabla \times (\nabla \times \vec{B}) + \frac{1}{\lambda_L^2} \vec{B} &= \Phi_0 \hat{z} [\delta^{(2)}(\vec{r} - \vec{r}_1) + \delta^{(2)}(\vec{r} - \vec{r}_2)] \quad | \text{Gleichung ist linear} \quad (3.28) \\ \Rightarrow B_z &= B_z^{(1)} + B_z^{(2)} = \frac{\Phi_0}{2\pi\lambda_L^2} \left[K_0 \left(\frac{|\vec{r} - \vec{r}_1|}{\lambda_L} \right) + K_0 \left(\frac{|\vec{r} - \vec{r}_2|}{\lambda_L} \right) \right] \\ &= B_z^{(1)}(|\vec{r} - \vec{r}_1|) + B_z^{(2)}(|\vec{r} - \vec{r}_2|) \quad (3.29) \end{aligned}$$

Die Gesamtenergie des Systems ist bekanntermaßen proportional zu B_z^2 . Man kann sich überlegen, dass die Quadratur von 3.29 zwei Terme der Selbstenergie und einen Term für die Wechselwirkungsenergie ergeben wird.

Dieser ergibt sich analog wie 3.26 zu:

$$\frac{E^{(12)}}{L} = \int \frac{1}{8\pi} \{ \vec{B}^{(1)} [\vec{B}^{(2)} + \lambda_L^2 \nabla \times (\nabla \times \vec{B}^{(2)})] + \vec{B}^{(2)} [\vec{B}^{(1)} + \lambda_L^2 \nabla \times (\nabla \times \vec{B}^{(1)})] \} d^2r$$

Verwendet man an dieser Stelle Linearität von 3.28 und setzt die Ausdrücke für die Terme in den eckigen Klammern ein, so erhält man:

$$\begin{aligned}
 \frac{E^{(12)}}{L} &= \int \frac{\Phi_0}{8\pi} \{ \vec{B}^{(1)}(|\vec{r} - \vec{r}_1|) \delta^{(2)}(\vec{r} - \vec{r}_2) \\
 &\quad + \vec{B}^{(2)}(|\vec{r} - \vec{r}_2|) \delta^{(2)}(\vec{r} - \vec{r}_1) \} \quad |3.29 \\
 &= \frac{\Phi_0}{8\pi} [B_z^{(1)}(|\vec{r}_2 - \vec{r}_1|) + B_z^{(2)}(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|)] \\
 &= \frac{\Phi_0}{8\pi} \frac{\Phi_0}{2\pi\lambda_L^2} \left[K_0 \left(\frac{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}{\lambda_L} \right) + K_0 \left(\frac{|\vec{r}_2 - \vec{r}_1|}{\lambda_L} \right) \right] \\
 &= 2 \left(\frac{\Phi_0}{4\pi\lambda_L^2} \right)^2 K_0 \left(\frac{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}{\lambda_L} \right) \\
 &\equiv \frac{\Phi_0}{4\pi} B^{(12)} > 0 \\
 \Rightarrow E^{(12)} &\equiv -\vec{\mu} \vec{B}^{(12)} \quad , \text{ wobei definiert wurde:} \quad (3.30) \\
 \vec{B}^{(12)} &\equiv B^{(12)} \hat{z} \\
 \vec{\mu} &\equiv -\frac{\Phi_0 L}{4\pi} \hat{z} \\
 B^{(12)} &\equiv B_z^{(1)}(\vec{r} = \vec{r}_2) = B_z^{(2)}(\vec{r} = \vec{r}_1)
 \end{aligned}$$

Damit keine zusätzlichen Wechselwirkungen betrachtet werden müssen, wurde implizit die Annahme verwendet, dass sich die Flussschläuche nicht berühren, d.h. $|\vec{r}_2 - \vec{r}_1| \gtrsim \xi$. Der Gradient dieser Wechselwirkungsenergie entspricht der Kraft zwischen den beiden Wirbeln und dieser ist nach 3.30 vom Betrag her negativ, was eine Abstoßung der beiden Wirbel bedeutet.

3.1.6. Typ-II-Supraleiter bei $H \gtrsim H_{c1}$

Mithilfe der London-Theorie kann gezeigt werden, dass die Meissner-Phase oberhalb eines kritischen Feldes H_{c1} instabil wird und das Eindringen von Flussschläuchen angeregt wird.

Für die Gibbs-Enthalpiedichte kann in dem Bereich $H \gtrsim H_{c1}$ folgender Ausdruck angesetzt werden:

$$g(H) = g(0) + \underbrace{n_L \frac{E}{L}}_{\text{Selbstenergien}} + \underbrace{\frac{1}{L} \sum_{i < j} E^{(ij)}}_{\text{Wirbel-Wechselwirkung}} - \underbrace{\frac{\vec{B} \vec{H}}{4\pi}}_{\text{Feld-Wechselwirkung}} \quad (3.31)$$

n_L : Anzahl der Flussschläuche pro Einheitsfläche

Zunächst soll angenommen werden, dass die Flussschläuche homogen verteilt sind, d.h. $B = n_L \Phi_0$. Im Bereich $H \simeq H_{c1}$ werden noch kaum Wirbel im Material vorhanden sein, so dass der Wirbel-Wechselwirkungsterm in 3.31 vernachlässigt werden kann:

$$g(H) = g(0) + n_L \left(\frac{E}{L} - \frac{H \Phi_0}{4\pi} \right) \quad (3.32)$$

Aus dieser Gleichung kann nun das untere kritische Feld abgelesen werden. Hierzu muss man nur den zweiten Summanden betrachten und überlegen, wann dieser die

Gibbsenthalpiedichte minimieren kann:

$$\begin{aligned}
 & \text{Für } \begin{array}{l} H > \frac{4\pi E}{\Phi_0 L} \\ H < \frac{4\pi E}{\Phi_0 L} \end{array} \text{ kann } g \text{ minimiert werden, wenn } \begin{array}{l} n_L > 0 \\ n_L = 0 \end{array} \\
 \Rightarrow H_{c1} &= \frac{4\pi E}{\Phi_0 L} \quad | \text{3.27} \\
 &= \frac{\Phi_0}{4\pi\lambda_L^2} \ln\left(\frac{\lambda_L}{\xi}\right) \quad (3.33)
 \end{aligned}$$

Im klassischen Limit ($\Phi_0 \xrightarrow{h \rightarrow 0} 0$) würde die Anzahl der Flussschläuche divergieren, weil in diesem Fall das untere kritische Feld exakt Null und eine supraleitende Phase gar nicht möglich wäre.

Quantenmechanisch muss aber auch verhindert werden, dass n_L nicht nach $-\infty$ divergiert. Hierzu muss jedoch beachtet werden, dass bei Auftreten vieler Wirbel, die Näherung 3.32 wieder durch den vollständigen Ausdruck 3.31 ersetzt werden muss.

Um den Übergang ins Gleichgewicht zu beschreiben, kann die Minimierung von $\Delta g \equiv g(H > H_{c1}) - g(H_{c1})$ herangezogen werden, denn dies beschreibt gerade den Phasenübergang ins Gleichgewicht.

$$\begin{aligned}
 \Delta g &= \frac{1}{L} \sum_{i < j} E^{(ij)} - \frac{BH}{4\pi} + \frac{BH_{c1}}{4\pi} \\
 &= \frac{B}{4\pi} [H_{c1} - H + \frac{4\pi}{BL} \sum_{i < j} E^{(ij)}]
 \end{aligned}$$

Da die Wechselwirkungsenergie nach 3.30 exponentiell abfällt, kann die Summe über alle Kombinationen auch auf die z nächsten Nachbarn beschränkt werden, wobei man einen Faktor 0.5 wegen der Doppelzählung einführen muss. Experimentell findet man, dass das Dreiecksgitter energetisch am stabilsten und daher auch am häufigsten in der Natur vorzufinden ist, weswegen dies für die Rechnung angenommen werden soll. Die Herleitung dieser Tatsache wird im Rahmen der Ginzburg-Landau-Theorie nachgeliefert.

$$\begin{aligned}
 |\vec{r}_i - \vec{r}_j| &\equiv d \\
 n_L &= \frac{B}{\Phi_0} = \frac{2}{\sqrt{3}} d^2 \\
 z &= 6
 \end{aligned} \quad (3.34)$$

$$\begin{aligned}
 \Delta g &= \frac{B}{4\pi} \left[H_{c1} - H + \frac{4\pi}{BL} \sum_{i < j} E^{(ij)} \right] \\
 &= \frac{B}{4\pi} \left[H_{c1} - H + \frac{1}{2} z \frac{\Phi_0}{2\pi n_L \lambda_L^2} K_0 \left(\frac{d}{\lambda_L} \right) \right]
 \end{aligned}$$

In Abb. 3.3 ist der Verlauf von Δg für $H \approx H_{c1}$ gezeigt. Wie man erkennt, existiert bei $H \gtrsim H_{c1}$ immer ein Minimum der Gibbsenthalpie für Wirbelabstände größer Null, sodass die Anzahl der Flusslinien nicht divergiert.

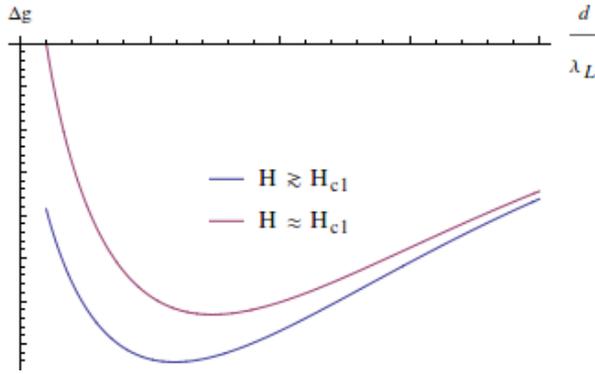


Abbildung 3.3: Qualitativer Verlauf von Δg für zwei verschiedene Magnetfelder H . Bei größeren magnetischen Feldern ist das Minimum der Funktion zu niedrigeren Wirbelabständen verschoben und tiefer.

Aus der Position der Minima kann die magnetische Flussdichte B für verschiedene H im thermodynamischen Gleichgewicht bestimmt werden, so dass sich die Magnetisierung über $B = H + 4\pi M$ ableiten lässt.

Nun kann das kritische Feld H_c eines Typ-II-Supraleiters über die Kondensationsenergie definiert werden. Diese entspricht nach 2.5 gerade derjenigen Energie, die an einen Supraleiter übergeben werden muss, damit dieser zum Normalleiter wird. Andererseits ist diese Energie bereits in dem Supraleiter als Magnetisierung aufgewendet, so dass sich die Gleichheit ergibt:

$$\int_0^{H_{c2}} M(H) dH \equiv -\frac{1}{8\pi} H_c^2 \quad (3.35)$$

3.1.7. Typ-II-Supraleiter bei $H_{c1} \ll H \ll H_{c2}$

In diesem Abschnitt soll die Typ-II-Supraleitung im Bereich $H_{c1} \ll H \ll H_{c2}$ betrachtet werden. In diesem Bereich gilt für den Abstand d der Wirbel: $\xi \ll d \ll \lambda_L$. Aus diesem Grund kann die magnetische Flussdichte B durch die inhomogene London-Gleichung 3.19 beschrieben werden, da der Abstand zwischen den Wirbeln groß im Vergleich zu ihrer Ausdehnung ist:

$$\nabla \times (\nabla \times \vec{B}) + \frac{1}{\lambda_L^2} \vec{B} = \Phi_0 \hat{z} \sum_i \delta^{(2)}(\vec{r} - \vec{r}_i)$$

i : Index des i -ten Wirbels

Aufgrund der Periodizität des Wirbelgitters kann eine Fourier-Zerlegung von B durchgeführt werden.

$$\vec{B}(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} \vec{B}_{\vec{G}} e^{-i\vec{G}\vec{r}}$$

wobei $\vec{B}_{\vec{G}} = n_L \int_{\text{Elementarzelle}} \vec{B}(\vec{r}) e^{i\vec{G}\vec{r}} d^2r$

\vec{G} : Gittervektoren des reziproken Gitters

n_L : Inverses der Fläche der Einheitszelle bzw. Wirbelldichte

Es sei angenommen, dass sich in der betrachteten Probe N_L Wirbel befinden und die Querschnittsfläche des Supraleiters den Wert A umfasst. Setzt man die Fourierentwicklung in die inhomogene London-Gleichung ein, so kann umgeformt werden:

$$\begin{aligned}
 \sum_{\vec{G}} \left[\vec{B}_{\vec{G}} e^{-i\vec{G}\vec{r}} + \lambda_L^2 \nabla \times (\nabla \times \vec{B}_{\vec{G}} e^{-i\vec{G}\vec{r}}) \right] &= \Phi_0 \hat{z} \sum_i \delta^{(2)}(\vec{r} - \vec{r}_i) \quad | \nabla \times (\nabla \times \vec{B}) = \nabla(\nabla \cdot \vec{B}) - \Delta \vec{B} \\
 \sum_{\vec{G}} \left[\vec{B}_{\vec{G}} e^{-i\vec{G}\vec{r}} - \lambda_L^2 \Delta \vec{B}_{\vec{G}} e^{-i\vec{G}\vec{r}} \right] &= \Phi_0 \hat{z} \sum_i \delta^{(2)}(\vec{r} - \vec{r}_i) \quad | \cdot e^{i\vec{G}'\vec{r}} \\
 \sum_{\vec{G}} \vec{B}_{\vec{G}} \left[e^{-i(\vec{G}-\vec{G}')\vec{r}} + \lambda_L^2 \vec{G}^2 e^{-i(\vec{G}-\vec{G}')\vec{r}} \right] &= \Phi_0 \hat{z} \sum_i e^{i\vec{G}'\vec{r}} \delta^{(2)}(\vec{r} - \vec{r}_i) \quad | \int_A d^2r \\
 \sum_{\vec{G}} \vec{B}_{\vec{G}} \int_A \left[e^{-i(\vec{G}-\vec{G}')\vec{r}} + \lambda_L^2 \vec{G}^2 e^{-i(\vec{G}-\vec{G}')\vec{r}} \right] d^2r &= \Phi_0 \hat{z} \sum_i e^{i\vec{G}'\vec{r}_i} \quad | \vec{G}'\vec{r}_i = 2\pi n \\
 \sum_{\vec{G}} \vec{B}_{\vec{G}} \int_A \left[e^{-i(\vec{G}-\vec{G}')\vec{r}} + \lambda_L^2 \vec{G}^2 e^{-i(\vec{G}-\vec{G}')\vec{r}} \right] d^2r &= \Phi_0 \hat{z} \sum_i 1 \quad | \text{Beitrag nur bei } \vec{G} = \vec{G}' \\
 \sum_{\vec{G}} \vec{B}_{\vec{G}} \int_A [1 + \lambda_L^2 \vec{G}^2] \delta_{\vec{G}\vec{G}'} d^2r &= \Phi_0 \hat{z} N_L \\
 \vec{B}_{\vec{G}'} \int_A [1 + \lambda_L^2 \vec{G}'^2] d^2r &= \Phi_0 \hat{z} N_L \\
 \vec{B}_{\vec{G}'} A [1 + \lambda_L^2 \vec{G}'^2] d^2r &= \Phi_0 \hat{z} N_L \quad | n_L = \frac{N_L}{A} \\
 \Rightarrow H_G &= \frac{\Phi_0 n_L}{1 + \lambda_L^2 G^2} = \frac{B}{1 + \lambda_L^2 G^2} \quad (3.36)
 \end{aligned}$$

Die Fourierkoeffizienten sind parallel zum externen magnetischen Feld. Hieraus kann nun die Energie des Wirbelgitters nach 3.26 berechnet werden, wobei beachtet werden muss, dass das reziproke Gitter verständlicherweise nur in der x-y-Ebene liegt, d.h. eine z-Komponente Null ist.

$$\begin{aligned}
 \frac{E}{L} &= \frac{1}{8\pi} \int_A [B^2(\vec{r}) + \lambda_L^2 (\nabla \times \vec{B}(\vec{r}))^2] d^2r \quad | \text{Fourier-Zerlegung} \\
 &= \frac{1}{8\pi} \int_A \left[\sum_{\vec{G}\vec{G}'} B_G B_{G'} e^{-i(\vec{G}+\vec{G}')\vec{r}} - \lambda_L^2 B_G B_{G'} e^{-i(\vec{G}+\vec{G}')\vec{r}} (G_y G'_y + G_x G'_x) \right] \\
 &= \frac{1}{8\pi} \sum_{\vec{G}} [B_G B_{-G} A - \lambda_L^2 B_G B_{-G} A (-G_y^2 - G_x^2)] \\
 &= \frac{1}{8\pi} \sum_{\vec{G}} [B_G B_{-G} A + \lambda_L^2 B_G B_{-G} A G^2] \quad | 3.36 \\
 &= \frac{B^2 A}{8\pi} \sum_{\vec{G}} \frac{1}{1 + \lambda_L^2 G^2} \\
 \Rightarrow \rho_E &\equiv \frac{E}{AL} = \frac{B^2}{8\pi} + \frac{B^2}{8\pi} \sum_{G \neq 0} \frac{1}{1 + \lambda_L^2 G^2} \quad (3.37)
 \end{aligned}$$

Die kleinsten reziproken Gittervektoren ungleich Null eines beliebigen Gitters werden im Betrag $|\vec{G}_{min}| \cong \frac{2\pi}{d}$ erfüllen, so dass mit den Annahmen dieses Abschnitts ($d \ll \lambda_L$)

folgt:

$$\begin{aligned} \lambda_L^2 G_{min}^2 &\gg 1 \\ \Rightarrow \frac{1}{1 + \lambda_L^2 G^2} &\approx \frac{1}{\lambda_L^2 G^2} \end{aligned} \quad (3.38)$$

Nun soll noch die Summe über die reziproken Gittervektoren durch ein Integral ersetzt werden, wobei die obere Integrationsgrenze $G_{max} \sim \frac{2\pi}{\xi}$ ist, weil bei solchen Abständen die Supraleitung zusammenbrechen würde, d.h. wir setzen $G_{max} = \frac{2\beta\pi}{\xi}$ an, wobei β ein Korrekturparameter ist:

$$\begin{aligned} \sum_{G \neq 0} \frac{1}{G^2} &\rightarrow \frac{1}{(2\pi)^2 n_L} \int_0^{2\pi} d\phi \int_{G_{min}}^{G_{max}} \frac{G}{G^2} dG \\ &= \frac{1}{2\pi n_L} \ln \left(\frac{G_{min}}{G_{max}} \right) \end{aligned}$$

Insgesamt folgt mit 3.33 für die Energiedichte:

$$\rho_E \simeq \frac{B^2}{8\pi} + \frac{BH_{c1}}{4\pi} \frac{\ln(\beta d/\xi)}{\ln(\lambda_L/\xi)} \quad (3.39)$$

Vernachlässigt man den Entropiebeitrag, so kann man die Energie mit der freien Energiedichte gleichsetzen: $\rho_E = f$. Aus der Minimierung der Gibbsenthalpiedichte bezüglich des magnetischen Flusses kann ein einfacher Ausdruck für den magnetischen Fluss gefunden werden:

$$\begin{aligned} g &= f - \frac{1}{4\pi} BH \\ \frac{\partial g}{\partial B} &\stackrel{!}{=} 0 \quad |3.39 \\ 0 &= \frac{B}{4\pi} + \frac{H_{c1}}{4\pi} \frac{\ln(\beta d/\xi)}{\ln(\lambda_L/\xi)} - \frac{H}{4\pi} + \frac{BH_{c1}}{4\pi} \frac{1}{\ln(\lambda_L/\xi)} \frac{\xi\beta\sqrt{3}\Phi_0}{4\beta d^2\xi} \quad |3.34 \\ &= \frac{B}{4\pi} + \frac{H_{c1}}{4\pi} \frac{\ln(\beta d/\xi)}{\ln(\lambda_L/\xi)} - \frac{H}{4\pi} + \frac{H_{c1}}{8\pi} \frac{1}{\ln(\lambda_L/\xi)} \\ &= \frac{B}{4\pi} - \frac{H}{4\pi} + \frac{H_{c1}}{4\pi} \frac{1}{\ln(\lambda_L/\xi)} (\ln(\beta d/\xi) + \ln(e^{-0.5})) \\ \Rightarrow B &= H - H_{c1} \frac{\ln(\beta' d/\xi)}{\ln(\lambda_L/\xi)} \quad \text{mit } \beta' = \beta e^{-0.5} \\ \Rightarrow M &= -H_{c1} \frac{\ln(\beta' d/\xi)}{\ln(\lambda_L/\xi)} \end{aligned} \quad (3.40)$$

Wegen $d \sim B^{1/2}$ (3.34) nimmt die Magnetisierung M also logarithmisch zu, wenn der magnetische Fluss ansteigt (Abb. 3.4). Die Londontheorie stößt bei größeren Abweichungen von H gegenüber H_{c1} schnell an ihre Grenzen. Experimentell wird dies bei der Magnetisierung deutlich, wo der Verlauf für größere Felder stark von der theoretischen Vorhersage in 3.40 abweicht. Vor allem zur Beschreibung von Typ-II-Supraleitern ist also eine bessere Theorie notwendig.

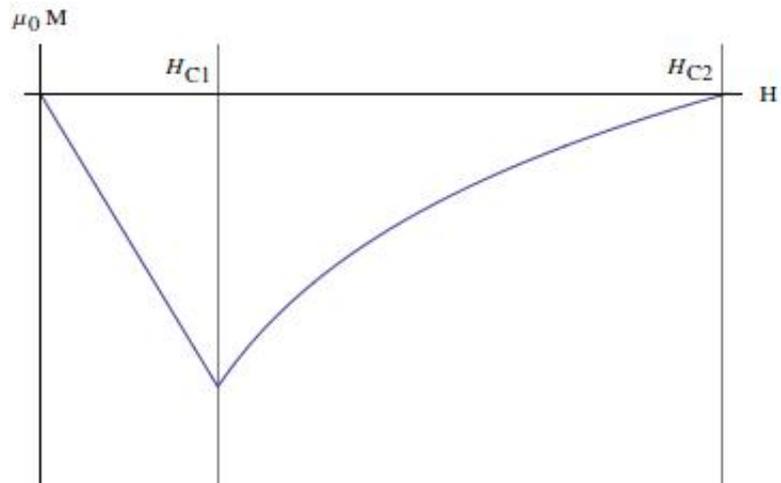


Abbildung 3.4: Qualitativer Verlauf von der Magnetisierung eines Typ-II-Supraleiters. In dem Bereich zwischen H_{c1} und H_{c2} kann ein logarithmisches Ansteigen approximiert werden.

3.2. Ginzburg-Landau-Theorie

3.2.1. Einleitung

Landau veröffentlichte im Jahre 1937 eine Arbeit, die es ermöglichen sollte, Phasenübergänge zweiter Ordnung in einem allgemeineren Rahmen zu beschreiben [8], ohne das System oder den Phasenübergang im Speziellen kennen zu müssen. Einige Jahre später wurde diese phänomenologische Theorie unter dem Namen Ginzburg-Landau-Theorie auf Supraleiter angewendet.

In diesem Kapitel führe ich die Variation zur Herleitung der Ginzburg-Landau-Gleichungen eigenhändig durch. Außerdem berechne ich die Abrikosov-Parameter für Dreiecks- und Quadratgitter (B) numerisch. Im Weiteren leite ich die Eichtransformationen zu den Ginzburg-Landau-Gleichungen her und rechne daraus die Oberflächenenergie explizit nach. Im Rahmen der Vortextgitter prüfe ich zudem die Eigenschaften der entsprechenden Wellenfunktionen nach. Zuletzt berechne ich die Lösung einer symmetrischen Josephson-Verbindung (Abb. 3.10).

3.2.2. Herleitung der Ginzburg-Landau-Gleichungen

Die Theorie geht davon aus, dass sich die freie Energie eines Systems in der Nähe seines Phasenübergangs durch Potenzen eines sogenannten Ordnungsparameters darstellen lässt, der in einer Phase Null und in der anderen Phase ungleich Null ist. So stellt beispielsweise die Magnetisierung in einem Ferromagneten den Ordnungsparameter beim Übergang in den entmagnetisierten Zustand dar.

Dadurch, dass ein abgeschlossenes System generell zu einer minimalen freien Energie tendiert, muss dieses Minimum abhängig von der Phase seine Position ändern. Ein Minimum bei verschwindendem Ordnungsparameter ist nur möglich, wenn gerade Potenzen des Ordnungsparameters auftreten. Es soll vom allgemeinen Fall eines inhomogenen Systems ausgegangen werden, so dass sich die Rechnungen mit Dichten besser eignen. Der einfachste Ansatz geht bis zur vierten Potenz und weist folgende Struktur für die freie Energiedichte des Supraleiters $f_s(\vec{r})$ auf, wenn man den Ordnungsparameter mit $|\psi(\vec{r})|$, die freie Energie des normalleitenden Zustands mit f_n bezeichnet und die phasenbestimmende thermodynamische Variable T ist:

$$f_s(\psi, T)(\vec{r}) = f_n(T)(\vec{r}) + \alpha |\psi(\vec{r})|^2 + \frac{\beta}{2} |\psi(\vec{r})|^4 \quad (3.41)$$
$$\alpha, \beta \in \mathbb{R}$$

Wichtig ist, dass α und β Funktionen sind, deren Eigenschaften aus dem Verhalten des Ordnungsparameters abgeleitet werden können.

Zunächst einmal darf β nur positiv sein, da ansonsten ein unendlich großer Ordnungsparameter die freie Energie minimieren könnte. Betrachtet man den Verlauf 3.41 bei verschiedenen Vorzeichen von α an einem festen Ort \vec{r}_0 (Abb. 3.5), so erkennt man, dass durch eine geeignete Wahl von α das Verschwinden des Ordnungsparameters in einer Phase modelliert werden kann. Hierzu müsste α ein Vorzeichenwechsel bei der kritischen Temperatur T_c durchlaufen. Im einfachsten Fall geschieht dies durch die Funktion 3.42.

$$\alpha(T) = a(T - T_c) \quad (3.42)$$
$$a > 0$$

β kann daraufhin als konstant betrachtet werden, sodass die Minima der freien Energie bei $|\psi_{min}|_{T>T_c} = 0$ und bei $|\psi_{min}|_{T<T_c} = \pm\sqrt{\frac{-\alpha(T-T_c)}{\beta}}$ liegen.

In der Ginzburg-Landau-Theorie wird angenommen, dass der supraleitende Zustand als makroskopischer Quantenzustand mit Wellenfunktion $\psi \in \mathbb{C}$ betrachtet werden kann, womit sich die Verwendung als Ordnungsparameter begründen lässt.

Dass diese Annahme tatsächlich richtig ist, wird im Rahmen der mikroskopischen BCS-Theorie deutlich, da sich aus dieser die Ginzburg-Landau-Gleichungen ableiten lassen [9].

Experimentell erzielt die Ginzburg-Landau-Theorie u.a. einen großen Erfolg bei der Analyse der Vortexstruktur in Typ-II-Supraleitern, wie in den nächsten Abschnitten erläutert wird.

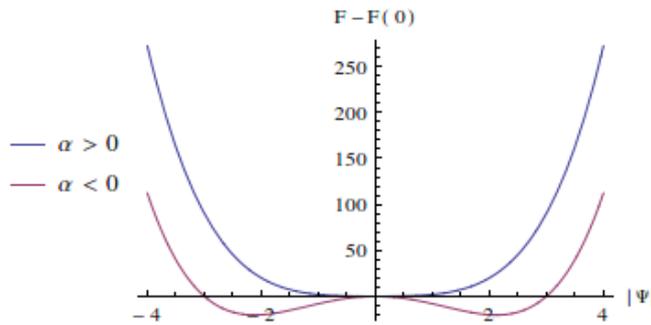


Abbildung 3.5: Abhängig von dem Vorzeichen von α liegt das Minimum der freien Energie entweder bei $|\psi|=0$ oder bei $|\psi| = \pm\sqrt{\frac{-\alpha}{\beta}}$

Da die Ginzburg-Landau-Theorie nicht erklärt, wie Supraleitung mikroskopisch zustande kommt, werden in den Gleichungen der Ginzburg-Landau-Theorie folgende Ersetzungen gemacht:

$$\begin{aligned} m &\longrightarrow m^* \\ e &\longrightarrow e^* \end{aligned}$$

Die BCS-Theorie stellt fest, dass der Ladungstransport durch sogenannte Cooper-Paare geschieht, die doppelte Elektronenmasse und -ladung aufweisen.

Bisher fehlt in 3.41 der Beitrag eines magnetischen Feldes $f_m = \frac{1}{8\pi}B^2(\vec{r})$ und die kinetische Energie der supraleitenden Elektronen $f_{kin} = \frac{\hbar^2}{2m^*}|(\nabla - \frac{ie^*}{\hbar c}\vec{A}(\vec{r}))\psi(\vec{r})|^2$, wobei der kanonische Impuls verwendet werden muss und \vec{A} das Vektorpotential zum Feld \vec{B} ist, sodass man insgesamt für einen Supraleiter mit Volumen V erhält:

$$\begin{aligned} F_s = F_n(T, H = 0) + \int_V d^3r &\left[\alpha|\psi(\vec{r})|^2 + \frac{\beta}{2}|\psi(\vec{r})|^4 \right. \\ &\left. + \frac{\hbar^2}{2m^*} \left| \left(\nabla - \frac{ie^*}{\hbar c}\vec{A}(\vec{r}) \right) \psi(\vec{r}) \right|^2 + \frac{1}{8\pi}B^2(\vec{r}) \right] \end{aligned} \quad (3.43)$$

Es soll nun eine Bestimmungsgleichung für ψ abgeleitet werden, wobei die Minimierung der freien Energie unter Variation $\delta\psi^*$ ein geeignetes Vorgehen darstellt. Zunächst aber sollen alle auftretenden variationellen Terme einzeln bestimmt werden:

$$\begin{aligned}\delta|\psi|^2 &= \delta\psi\psi^* = \psi\delta\psi^* \\ \delta|\psi|^4 &= \psi^2\delta(\psi^*)^2 = 2|\psi|^2\psi\delta\psi^*\end{aligned}$$

Setzt man dies in δF_s ein, so erhält man:

$$\delta F_s = \int_V d^3r \left\{ \alpha\psi\delta\psi^* + \beta|\psi|^2\psi\delta\psi^* + \frac{\hbar^2}{2m^*} \delta \left[\left(\nabla - \frac{ie^*}{\hbar c} \vec{A}(\vec{r}) \right) \psi(\vec{r}) \left(-\nabla + \frac{ie^*}{\hbar c} \vec{A}(\vec{r}) \right) \psi^*(\vec{r}) \right] \right\}$$

Der Term in den eckigen Klammern wird nun partiell integriert, wobei die i -te Komponente des kanonischen Impulses als eine Ableitung $\tilde{\partial}_i$ aufgefasst werden kann, weil das zusätzliche Vektorpotential keinen Einfluss auf die Produktregel hat, so dass man formal folgende Umformung unternimmt:

$$\begin{aligned}\tilde{\partial}_i\psi(-\tilde{\partial}_i\psi^*) &\equiv g(-\tilde{\partial}_i\psi^*) \\ &= -\tilde{\partial}_i(g\psi^*) + (\tilde{\partial}_i g)\psi^* \\ &= -\tilde{\partial}_i[(\tilde{\partial}_i\psi)\psi^*] + (\tilde{\partial}_i^2\psi)\psi^*\end{aligned}$$

Damit lässt sich δF nun weiter umformen.

$$\begin{aligned}\delta F_s &= \int_V d^3r \left\{ \alpha\psi\delta\psi^* \right. \\ &\quad \left. + \beta|\psi|^2\psi\delta\psi^* + \frac{\hbar^2}{2m^*} \delta \left[\left(\nabla - \frac{ie^*}{\hbar c} \vec{A} \right) \left(\left(\left(\nabla - \frac{ie^*}{\hbar c} \vec{A} \right) \psi \right) \psi^* \right) - \left(\left(\nabla - \frac{ie^*}{\hbar c} \vec{A} \right)^2 \psi \right) \psi^* \right] \right\}\end{aligned}$$

Nun wendet man den Satz von Gauß auf den ersten Term in den eckigen Klammern an.

$$\begin{aligned}\delta F_s &= \int_V d^3r \left\{ \alpha\psi\delta\psi^* + \beta|\psi|^2\psi\delta\psi^* \right\} \\ &\quad + \frac{\hbar^2}{2m^*} \left\{ \delta \oint_{S(V)} d\vec{F} \left[\left(\nabla - \frac{ie^*}{\hbar c} \vec{A} \right) \psi \right] \psi^* - \int_V d^3r \left[\left(\nabla - \frac{ie^*}{\hbar c} \vec{A} \right)^2 \psi \right] \delta\psi^* \right\} \\ &= \int_V d^3r \left\{ \alpha\psi + \beta|\psi|^2\psi - \frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\nabla - \frac{ie^*}{\hbar c} \vec{A} \right)^2 \psi \right\} \delta\psi^* \quad (3.44)\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}&+ \oint_{S(V)} d\vec{F} \frac{\hbar^2}{2m^*} \left[\left(\nabla - \frac{ie^*}{\hbar c} \vec{A} \right) \psi \right] \delta\psi^* \quad (3.45) \\ &\stackrel{!}{=} 0\end{aligned}$$

Da dieser Ausdruck für beliebige Variationen gültig sein soll, müssen beide Integranden Null sein. 3.45 beschreibt hierbei die Implementierung von Randbedingungen, z.B. dass kein Wahrscheinlichkeitsstrom an einer Supraleiter-Vakuum-Grenze auftritt.

Aus 3.44 wird die erste Ginzburg-Landau-Gleichung gewonnen:

$$0 = \alpha\psi + \beta|\psi|^2\psi - \frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\nabla - \frac{ie^*}{\hbar c} \vec{A} \right)^2 \psi \quad \mathbf{1. \text{Ginzburg-Landau-Gleichung}} \quad (3.46)$$

Zur Herleitung der zweiten Ginzburg-Landau-Gleichung wird die Variation von F nach $\delta\vec{A}$ betrachtet, wobei beachtet werden muss, dass $\vec{B}(\vec{r}) = \nabla \times \vec{A}$.

$$\delta F_s = \int_V d^3r \left\{ \frac{-e^*c}{4m^*} \left[\psi^* \left(-i\hbar\nabla - \frac{e^*}{c} \vec{A} \right) \psi + \psi \left(i\hbar\nabla - \frac{e^*}{c} \vec{A} \right) \psi^* \right] \delta\vec{A} + \frac{1}{8\pi} \delta \left(\nabla \times \vec{A} \right)^2 \right\}$$

Der letzte Summand lässt sich analog wie in A.3 umformen, wenn man \vec{B} durch \vec{A} ersetzt. Es folgt also:

$$\delta F = \int_V d^3r \left\{ \frac{-e^*c}{4m^*} \left[\psi^* \left(-i\hbar\nabla - \frac{e^*}{c} \vec{A} \right) \psi + \psi \left(i\hbar\nabla - \frac{e^*}{c} \vec{A} \right) \psi^* \right] + \frac{1}{8\pi} \nabla \times \left(\nabla \times \vec{A} \right) \right\} \delta\vec{A} \stackrel{!}{=} 0 \quad (3.47)$$

In diesem Ausdruck kann die Wahrscheinlichkeitsstromdichte abgelesen werden, so dass die zweite Ginzburg-Landau-Gleichung die quantenmechanische Form des Ampèreschen Gesetzes trägt.

Def(Wahrscheinlichkeitsstromdichte):

$$\begin{aligned} \vec{j}(\vec{r}) &\equiv \frac{e^*}{2m^*} \left[\psi^*(\vec{r}) \left(-i\hbar\nabla - \frac{e^*}{c} \vec{A}(\vec{r}) \right) \psi(\vec{r}) + \psi(\vec{r}) \left(i\hbar\nabla - \frac{e^*}{c} \vec{A}(\vec{r}) \right) \psi^*(\vec{r}) \right] \quad (3.48) \\ &= \frac{-ie^*\hbar}{2m^*} [\psi^*(\vec{r})\nabla\psi(\vec{r}) - \psi(\vec{r})\nabla\psi^*(\vec{r})] - \frac{e^{*2}}{m^*c} |\psi(\vec{r})|^2 \vec{A}(\vec{r}) \end{aligned}$$

Damit kann also 3.47 mit folgendem Ausdruck identifiziert werden:

$$\nabla \times \vec{B} = \frac{4\pi}{c} \vec{j} \quad \mathbf{2. \text{Ginzburg-Landau-Gleichung}} \quad (3.49)$$

3.2.3. Eichinvarianz und Oberflächeneffekte

Nun sollen diejenigen U(1)-Transformationen gefunden werden, die 3.46 invariant lassen. In diesem Abschnitt wird sich herausstellen, dass diese eine spezielle Struktur haben, was sich im Weiteren noch als sehr nützlich herausstellen wird.

Die einfachste erdenkliche nicht-triviale Lösung ist der einheitliche Supraleiter, d.h. $\psi \neq \psi(\vec{r})$ mit $\vec{A} = 0$. In diesem Fall kann 3.46 bei Temperaturen über der kritischen Temperatur nur $\psi = 0$ als Lösung haben, da alle Terme auf der rechten Seite positiv sind, im anderen Fall kann umgeformt werden, so dass folgt:

$$\begin{aligned} |\psi| &= 0 && \text{für } T > T_c \\ |\psi| &= \sqrt{\frac{a(T_c - T)}{\beta}} && \text{für } T < T_c \end{aligned} \quad (3.50)$$

Weitaus interessanter sind aber die ortsabhängigen Lösungen.

Hierzu wendet man die allgemeine Form einer U(1)-Transformation ($\psi \longrightarrow \psi e^{i\Phi(\vec{r})}$) auf 3.46 an. Bei den ersten beiden Summanden kann der Exponentialterm ausgeklammert werden. Der dritte Term muss entsprechend der Forderung nach Eichinvarianz folgende

Relation erfüllen:

$$\begin{aligned}
 e^{i\Phi(\vec{r})} \left(\nabla - \frac{ie^*}{\hbar c} \vec{A}(\vec{r}) \right) \psi(\vec{r}) &\stackrel{!}{=} \left(\nabla - \frac{ie^*}{\hbar c} \vec{A}(\vec{r}) \right) \left(\psi(\vec{r}) e^{i\Phi(\vec{r})} \right) && \text{|Produktregel} \\
 0 &= \left(\nabla - \frac{ie^*}{\hbar c} \vec{A}(\vec{r}) \right) e^{i\Phi(\vec{r})} \\
 &= ie^{i\Phi(\vec{r})} \nabla \Phi(\vec{r}) - \frac{ie^*}{\hbar c} \vec{A}(\vec{r}) e^{i\Phi(\vec{r})} \\
 \Rightarrow \vec{A}(\vec{r}) &= \frac{\hbar c}{e^*} \nabla \Phi(\vec{r})
 \end{aligned}$$

Wie man sieht, ist die U(1)-Symmetrie gebrochen. Setzt man das gefundene Vektorpotential in 3.49 ein, so ergibt sich sofort eine verschwindende Wahrscheinlichkeitsstromdichte, was sich mit der Erwägung eines einheitlichen Supraleiters deckt.

Die globale Phase Φ kann nie gemessen werden, jedoch erlaubt der sogenannte Josephson-Effekt die Messung von relativen Phasen, worauf später genauer eingegangen wird.

Bei der Vorstellung der London-Theorie wurde auf einige Ergebnisse der Ginzburg-Landau-Theorie vorgegriffen, die nun ausführlich hergeleitet werden sollen.

Hierzu betrachtet man erneut eine supraleitende Platte in der x-y-Ebene, wobei im Bereich $x > 0$ ein supraleitender Zustand und im Bereich $x < 0$ ein normalleitender Zustand vorliegen soll. Zunächst soll angenommen werden, dass sich eine reelle Lösung ψ finden lässt. Darüber hinaus wird erst der Fall ohne magnetisches Feld betrachtet, weswegen $\vec{A} = 0$ gewählt werden kann, sodass sich 3.46 in x-Richtung vereinfacht zu:

$$\frac{-\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2\psi}{dx^2} + \alpha\psi + \beta\psi^3 = 0 \quad (3.51)$$

An dieser Stelle wird die Definition der Ginzburg-Landau-Kohärenzlänge nachgetragen, auf die bereits in der London-Theorie vorgegriffen wurde.

$$\begin{aligned}
 \text{Def(Ginzburg-Landau-Kohärenzlänge): } \xi &\equiv \frac{\hbar^2}{2m^*|\alpha|} && |3.42 \\
 &= \sqrt{\frac{\hbar^2}{2m^*aT_c}} \left(1 - \frac{T}{T_c} \right)^{-1/2} && (3.52)
 \end{aligned}$$

Die physikalische Bedeutung dieser Größe wird deutlich, wenn man das Grenzflächenbeispiel 3.51 durchrechnet:

$$\begin{aligned}
 \frac{-\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2\psi}{dx^2} + \alpha\psi + \beta\psi^3 &= 0 && \text{Substitution: } \frac{\beta}{|\alpha|} \psi^2 \equiv f^2 \\
 -\xi^2 \frac{d^2f}{dx^2} - f + f^3 &= 0 && | \cdot \frac{df}{dx} \\
 \frac{d}{dx} \left[-\xi^2 \frac{1}{2} \left(\frac{df}{dx} \right)^2 - \frac{1}{2} f^2 + \frac{f^4}{4} \right] &= 0 \\
 -\xi^2 \frac{1}{2} \left(\frac{df}{dx} \right)^2 - \frac{1}{2} f^2 + \frac{f^4}{4} &= c && (3.53)
 \end{aligned}$$

Zur Bestimmung der Konstante c kann der Grenzfall betrachtet werden, dass man sich sehr weit innen im Supraleiter ($x \gg 0$) befindet. Der Ordnungsparameter nimmt dann den Wert wie für eine reine unendlich ausgedehnte supraleitende Phase an:

$\psi(x \gg 0) = \sqrt{\frac{|\alpha|}{\beta}}$ nach 3.47 bzw. $f(x \gg 0) = 1$. Damit ergibt sich für c nach 3.53:

$$\begin{aligned} -\xi^2 \frac{1}{2} \left(\frac{df}{dx} \right)^2 - \frac{1}{2} f^2 + \frac{f^4}{4} &= c & |x \gg 0 \\ 0 - \frac{1}{2} + \frac{1}{4} &= -\frac{1}{4} = c \\ \Rightarrow -\xi^2 \frac{1}{2} \left(\frac{df}{dx} \right)^2 - \frac{1}{2} f^2 + \frac{f^4}{4} &= -\frac{1}{4} \end{aligned} \quad (3.54)$$

Als Lösung für 3.54 setzt man $f(x) = \tanh(ax)$ an, wobei $a \in \mathbb{R}$. Einsetzen liefert:

$$\begin{aligned} -\frac{1}{4} &= -\frac{\xi^2}{2} [a - a \tanh(ax)]^2 - \frac{1}{2} \tanh^2(ax) + \frac{\tanh^4(ax)}{4} \\ -1 &= -2\xi^2 (a^2 - 2a^2 \tanh^2(ax) + a^2 \tanh^4(ax)) - 2 \tanh^2(ax) + \tanh^4(ax) \\ a &= \frac{1}{\sqrt{2\xi}} \\ \Rightarrow f(x) &= \tanh\left(\frac{x}{\sqrt{2\xi}}\right) \\ \psi(x) &= \sqrt{\frac{|\alpha|}{\beta}} \tanh\left(\frac{x}{\sqrt{2\xi}}\right) \end{aligned} \quad (3.55)$$

Betrachtet man den Verlauf der Lösung in Abb.3.6, so erkennt man, dass die Kohärenzlänge ξ ein Maß dafür angibt, auf welchen Längenskalen der Ordnungsparameter auf eine Störung reagiert.

Allgemein gilt nach 3.52, dass $\xi \xrightarrow{T \rightarrow T_c^-} \infty$, was bedeutet, dass sich bei der kritischen Temperatur keine supraleitende Phase nach der Störung an der Grenzfläche wieder herstellen kann.

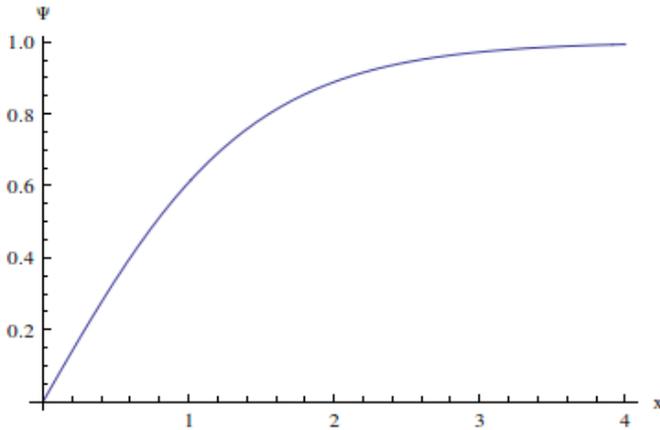


Abbildung 3.6: An der Grenzfläche zwischen supraleitender und normalleitender Phase bezeichnet die Kohärenzlänge ξ die charakteristische Länge, auf der sich der Ordnungsparameter verändert. Es wurde $\xi \equiv 1$ und $\sqrt{\frac{|\alpha|}{\beta}} \equiv 1$ gesetzt.

Ein weiterer Zusammenhang zur London-Theorie wird deutlich, wenn man einen homogenen, weit ausgedehnten Supraleiter betrachtet. In diesem Fall ist im Inneren $\psi(\vec{r}) \simeq \psi = \sqrt{\frac{|\alpha|}{\beta}}$ und nach 3.48 ist $\vec{j}(\vec{r}) \simeq -\frac{e^*c}{m^*c} |\psi(\vec{r})|^2 \vec{A}(\vec{r})$. Der Vergleich mit 3.9 bestätigt die Interpretation von $|\psi|^2$ als Dichte der supraleitenden Elektronen n_s . Dadurch kann die Londonsche Eindringtiefe umformuliert werden:

$$\lambda_L = \sqrt{\frac{m^*c^2\beta}{4\pi e^{*2}aT_c}} \left(1 - \frac{T}{T_c}\right)^{-1/2}$$

Die Kondensationsenergie kann gewonnen werden, wenn man die freien Energiedichten des supraleitenden und normalleitenden Zustandes ohne Einflüsse von elektromagnetischen Feldern vergleicht (3.41):

$$\begin{aligned} f_s(\vec{H} = \vec{E} = 0) &= f_n + \alpha\psi^2 + \frac{\beta}{2}\psi^4 & |f_s = \min \leftrightarrow \psi^2 = -\frac{\alpha}{\beta} = n_s \\ &= f_n - \frac{\alpha^2}{\beta} + \frac{\alpha^2}{2\beta} \\ &= f_n - \frac{\alpha^2}{2\beta} \\ &\equiv f_n + \frac{H_c^2}{8\pi} \\ \Rightarrow E_{Kondensation} &= \frac{-\alpha^2}{2\beta} & (3.56) \\ \Rightarrow H_c^2(T) &= -\frac{4\pi^2\alpha^2}{\beta} & | -\frac{\alpha}{\beta} = n_s \\ &= -4\pi^2n_s & | 3.42 \text{ nahe } T_c \\ &\approx 4\pi n_s a \left(1 - \frac{T}{T_c}\right) \end{aligned}$$

Das Ergebnis für das kritische Magnetfeld eines Supraleiters kann also näherungsweise -wie in 2.1 verwendet- rekonstruiert werden.

Es wird nun der Ginzburg-Landau-Parameter eingeführt, der eine bessere Unterscheidung zwischen Typ-I- und Typ-II-Supraleitern erlaubt, was im Folgenden hergeleitet wird.

$$\begin{aligned} \text{Def(Ginzburg-Landau-Parameter): } \kappa &\equiv \frac{\lambda_L}{\xi} \\ &= \frac{m^*c}{e^*\hbar} \sqrt{\frac{\beta}{2\pi}} \end{aligned} \quad (3.57)$$

Nun soll die Oberflächenwechselwirkung für dasselbe System, das für die London-Theorie diskutiert wurde, mithilfe der Definition der Oberflächenenergie 3.12 und der Gibbs-Enthalpie 3.13 betrachtet werden, um ein Kriterium für die Art des Supraleiters finden zu können. Dabei handelt es sich um eine dünne Platte, die im Bereich $x > 0$ supraleitend und im Bereich $x < 0$ normalleitend ist. Um dies zu erreichen, liegt ein magnetisches Feld vor, das in dem einen Bereich knapp über und in dem anderen Bereich

knapp unter dem kritischen Feld H_c liegt.

$$\begin{aligned} G_s &= A \int_{-\infty}^{\infty} \left[f_s(x) - \frac{1}{4\pi} \vec{H}_c \vec{B}(x) \right] \quad | \text{Eichung: } \vec{A} = A(x) \hat{e}_y \quad | 3.43 \\ &= A \int_{-\infty}^{\infty} \left[\alpha \psi(x)^2 + \frac{\beta}{2} \psi(x)^4 \right. \\ &\quad \left. + \frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{d\psi(x)}{dx} \right)^2 + \frac{e^*}{2m^*c^2} \vec{A}(x)^2 \psi(x)^2 + \frac{1}{8\pi} B^2(x) - \frac{1}{4\pi} H_c B(x) \right] \end{aligned}$$

Durch Vergleich mit 3.13 und der Definition der Oberflächenenergiedichte kann ein Ausdruck für die Oberflächenenergiedichte im Rahmen der Ginzburg-Landau-Theorie gefunden werden, da die Kondensationsenergie 3.56 auch bekannt ist:

$$\begin{aligned} \gamma &= \int_{-\infty}^{\infty} \left[\frac{\alpha^2}{2\beta} + \frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{d\psi(x)}{dx} \right)^2 + \frac{e^*}{2m^*c^2} \vec{A}(x)^2 \psi(x)^2 + \alpha \psi(x)^2 + \frac{\beta}{2} \psi(x)^4 \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{8\pi} B^2(x) - \frac{1}{4\pi} H_c B(x) \right] dx \quad (3.58) \end{aligned}$$

Zur Vereinfachung dieses langen Ausdrucks sollen die Ginzburg-Landau-Gleichungen für dieses System gelöst werden.

Mit der speziellen Wahl der Eichung gilt:

$$\begin{aligned} j_y(x) &\simeq -\frac{e^{*2}}{m^*c} \psi(x)^2 A(x) \\ j_x &= j_z = 0 \\ \rightarrow \vec{B}(x) &= B(x) \hat{e}_z = -\frac{dA_y}{dx} \hat{e}_z \end{aligned}$$

Außerdem werden die physikalischen Ausdrücke in folgende einheitenlose Größen überführt:

$$\begin{aligned} x &\rightarrow \frac{x}{\lambda_L} & \psi &\rightarrow \sqrt{\frac{\beta}{|\alpha|}} \psi \\ A &\rightarrow \frac{A}{H_c \lambda_L} & B &\rightarrow \frac{B}{H_c} \end{aligned} \quad (3.59)$$

Dadurch nehmen beide Ginzburg-Landau-Gleichungen eine einfachere Form an:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = \kappa \left[\left(\frac{1}{2} A^2 - 1 \right) \psi + \psi^3 \right] \quad (3.60)$$

$$\frac{d^2A}{dx^2} = A\psi^2 \quad (3.61)$$

Als Randbedingungen betrachtet man die Fälle $x \rightarrow \infty$, wo das System die ungestörten supraleitenden Eigenschaften zeigt, und $x \rightarrow -\infty$, wo die ungestörte normalleitende Phase existiert. Für den Ordnungsparameter und die magnetische Flussdichte lassen sich entsprechend folgende Randbedingungen formulieren:

$$\begin{aligned} \psi &\xrightarrow{x \rightarrow \infty} 1 & B &\xrightarrow{x \rightarrow \infty} 0 \\ \psi &\xrightarrow{x \rightarrow -\infty} 0 & B &\xrightarrow{x \rightarrow -\infty} 1 \end{aligned}$$

Die beiden Differentialgleichungen 3.60 und 3.61 lassen sich lösen, wenn man die erste mit $\frac{d\psi}{dx}$ und die zweite mit $\frac{dA}{dx}$ multipliziert:

$$\begin{aligned}\frac{1}{\kappa^2} \frac{d}{dx} \left(\frac{d\psi}{dx} \right)^2 &= \frac{d}{dx} \left[\left(\frac{1}{2} A^2 - 1 \right) \psi^2 + \frac{1}{4} \psi^4 \right] - \psi^2 \frac{d}{dx} \frac{A^2}{2} \\ \frac{d}{dx} \frac{1}{2} \left(\frac{dA}{dx} \right)^2 &= \psi^2 \frac{d}{dx} \frac{A^2}{2}\end{aligned}$$

Ineinander einsetzen liefert:

$$\frac{d}{dx} \left[\frac{2}{\kappa^2} \left(\frac{d\psi}{dx} \right)^2 + (2 - A^2) \psi^2 - \psi^4 + \left(\frac{dA}{dx} \right)^2 \right] = 0 \quad (3.62)$$

Zur Bestimmung der Integrationskonstanten kann der Fall $x \rightarrow -\infty$ herangezogen werden. Dann geht $\frac{dA}{dx} = B$ nach 1, während alle anderen auftretenden Terme, die ψ oder $\frac{d\psi}{dx}$ enthalten, entsprechend nach Null gehen:

$$\underbrace{\frac{2}{\kappa^2} \left(\frac{d\psi}{dx} \right)^2 + (2 - A^2) \psi^2 - \psi^4}_{\rightarrow 0} + \underbrace{\left(\frac{dA}{dx} \right)^2}_{\rightarrow 1} = 1 \quad (3.63)$$

Im anderen Grenzfall $x \rightarrow \infty$ wird in Gleichung 3.62 A nach Null gehen, weil B nach Null geht. Die Differentialgleichung vereinfacht sich dann zu:

$$\frac{d\psi}{dx} = \frac{\kappa}{\sqrt{2}} (1 - \psi^2)$$

Die Lösung einer analogen Gleichung wurde bereits in 3.53 gefunden, so dass sich analog ergibt:

$$\psi(x) = \tanh \left(\frac{\kappa x}{\sqrt{2}} \right) \quad (3.64)$$

Nun können diese Ergebnisse sukzessive verwendet werden, um die Oberflächenenergiedichte auszurechnen. Gestartet wird bei dem Ausdruck 3.58:

$$\begin{aligned}\gamma &= \int_{-\infty}^{\infty} \left[\frac{\alpha^2}{2\beta} + \frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{d\psi(x)}{dx} \right)^2 + \frac{e^*}{2m^*c^2} \vec{A}(x)^2 \psi(x)^2 + \alpha \psi(x)^2 + \frac{\beta}{2} \psi(x)^4 \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{8\pi} B^2(x) - \frac{1}{4\pi} H_c B(x) \right] dx \quad |3.59\end{aligned}$$

$$= \frac{\lambda_L H_c^2}{8\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \left[\frac{2}{\kappa} \left(\frac{d\psi}{dx} \right)^2 + (A^2 - 2) \psi^2 + \psi^4 + \left(\frac{dA}{dx} - 1 \right)^2 \right] dx \quad |3.63$$

$$= \frac{\lambda_L H_c^2}{8\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \left[\frac{2}{\kappa} \left(\frac{d\psi}{dx} \right)^2 + \frac{dA}{dx} \left(\frac{dA}{dx} - 1 \right) \right] dx \quad |3.64 \quad (3.65)$$

Für $A=0$:

$$\begin{aligned}
 &= \frac{\lambda_L H_c^2}{8\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{2}{\kappa^2} \frac{\kappa^2}{2 \cosh^4\left(\frac{\kappa x}{\sqrt{2}}\right)} dx && |y \equiv \frac{\kappa}{\sqrt{2}}x \\
 &= \frac{\lambda_L H_c^2}{8\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sqrt{2}}{\kappa} \frac{1}{\cosh^4(y)} dy \\
 &= \frac{\lambda_L H_c^2}{8\pi} \frac{\sqrt{2}}{\kappa} \left[\frac{2 \tanh(y)}{3} + \frac{\tanh(y)}{3 \cosh^2(y)} \right]_{-\infty}^{\infty} \\
 &= \frac{\lambda_L H_c^2}{3\sqrt{2}\pi\kappa} \\
 &\simeq \frac{1.9\lambda_L H_c^2}{8\pi\kappa}
 \end{aligned}$$

Dieses Ergebnis deckt sich bis auf konstante Vorfaktoren gut mit dem Ergebnis der London-Theorie.

Schließlich soll das Verhalten in einem schmalen Abschnitt um die Phasengrenze $x=0$ betrachtet werden, so dass ψ räumlich schwach variabel angenommen werden kann und die Wirkung einer Änderung von H bzw. A analysiert wird.

Das Vektorpotential wird analog zur magnetischen Flussdichte einen exponentiellen Verlauf annehmen, wobei noch unklar ist, auf welchen Längenskalen dies geschieht:

$$\begin{aligned}
 \text{Ansatz: } A &\sim e^{-x/\delta} && |3.61 \\
 \rightarrow \psi^2 &\sim \frac{1}{\delta^2}
 \end{aligned}$$

Vergleicht man dies mit der Reihenentwicklung von 3.64 für kleine Änderungen in x , so erkennt man:

$$\delta \sim \sqrt{\frac{1}{\kappa}}.$$

Damit ist also der Beitrag des Vektorpotentials zur Oberflächenenergie negativ, da sie mit $\int \frac{dA}{dx} \left(\frac{dA}{dx} - 1 \right) dx$ eingeht und entsprechend von der Ordnung $O(-\sqrt{\kappa})$ ist. Nach 3.65 ergibt sich damit für die gesamte Oberflächenenergiedichte ein Vorzeichenwechsel bei $\kappa = \frac{1}{\sqrt{2}}$ [10], so dass hiermit das Kriterium zur Unterscheidung zwischen Typ-I- und Typ-II-Supraleitern entsteht:

$$\kappa \begin{cases} < 1/\sqrt{2} & \rightarrow \text{Typ-I-Supraleiter} \\ > 1/\sqrt{2} & \rightarrow \text{Typ-II-Supraleiter} \end{cases}$$

Dieses Kriterium ist besser als das in 3.1.4 hergeleitete, da es weitaus genauer differenziert, während die London-Theorie die Unterscheidung nur auf Grundlage einer Abschätzung der Größenordnungen treffen kann.

3.2.4. Oberes kritisches Feld im Typ-II-Supraleiter

Steigt die Dichte der Flussschläuche soweit an, dass deren Abstand von der Ordnung der Kohärenzlänge ist, d.h. $\sqrt{n_L} \sim \xi$, dann findet der Übergang zum Normalleiter statt. Das vorherrschende Feld wird dann mit H_{c2} bezeichnet und ψ wird in diesem Fall entsprechend klein sein. Die Ginzburg-Landau-Theorie sollte in diesem kritischen Bereich entsprechend plausible Resultate liefern.

Aufgrund der Tatsache, dass ψ im Bereich des Phasenübergangs klein sein wird, kann man in der zweiten Ginzburg-Landau-Gleichung alle nichtlinearen Terme vernachlässigen, so dass gilt:

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\nabla - \frac{ie^*}{\hbar c} \vec{A} \right)^2 \psi + \alpha \psi = 0 \quad (3.66)$$

Diese Gleichung entspricht der stationären Schrödingergleichung eines Teilchens mit Energie $-\alpha$, Masse m^* und Ladung e^* im Feld \vec{H} mit Vektorpotential \vec{A} . Zur Bestimmung von H_{c2} setzen wir zunächst $\vec{H} = H_0 \vec{e}_z$ und können dann die Landau-Eichung $\vec{A} = H_0 x \hat{y}$ nutzen, um 3.66 folgendermaßen umzuschreiben:

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \left[\partial_x^2 + \left(\partial_y - \frac{ie^*}{\hbar c} H_0 x \right)^2 + \partial_z^2 \right] \psi = -\alpha \psi \quad (3.67)$$

Wir wählen einen Separationsansatz $\psi_{n,k_y,k_z}(x,y,z) = e^{ik_y y + ik_z z} u_n(x)$ und erhalten einen Ausdruck mit der Form eines harmonischen Oszillators:

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \left[\partial_x^2 u_n(x) + \frac{1}{2} m^* \omega_c^2 (x - x_0)^2 u_n(x) \right] = \epsilon_n u_n(x) \quad (3.68)$$

$$\text{wobei } x_0 = \frac{\hbar c}{e^* H_0} k_y$$

$$\epsilon_n = -\alpha - \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m^*}$$

$$\omega_c^2 = \frac{e^{*2} H_0^2}{m^{*2} c^2}$$

Die Lösung des quantenmechanischen harmonischen Oszillators ist bekannt und kann an dieser Stelle verwendet werden, so dass als Lösung für 3.67 folgt:

$$\psi_{n,k_y,k_z}(x,y,z) = e^{i(k_y y + k_z z)} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2a_H^2}} H_n \left(\frac{x-x_0}{a_H} \right) \quad (3.69)$$

$$\text{mit } a_H^2 = \frac{\hbar}{m^* \omega_c}$$

$$\epsilon_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_c$$

Der kleinste Energieeigenwert ($n = 0$ und $k_z = 0$) entspricht gerade dem höchsten magnetischen Feld, bei dem der supraleitende Zustand noch aufrecht erhalten bleibt, da in diesem Fall der Ordnungsparameter entsprechend klein und flach verteilt ist:

$$\begin{aligned} \epsilon_0 = -\alpha &= \frac{1}{2} \hbar \omega_c \\ \Leftrightarrow H_{c2} &= -\frac{2m^* c \alpha}{\hbar e^*} = \frac{2m^* c a (T_c - T)}{\hbar e^*} = \frac{\Phi_0}{2\pi \xi^2} \\ &\Rightarrow a_{H_{c2}} = \xi \end{aligned}$$

Dieses Ergebnis ist konsistent mit dem Phasendiagramm von Supraleitern am kritischen Punkt (T_C, H_{C2}) , weil das Ergebnis $H_{C2}(T_C) = 0$ reproduziert wird. In der bisherigen Betrachtung wurde nur der Grundzustand der linearisierten Ginzburg-Landau-Gleichung betrachtet, wobei die variable Anzahl an Flussschläuchen durch die Entar-

ung in k_y repräsentiert wird. Im nächsten Abschnitt soll die eben abgeleitete Lösung als Startpunkt zur Konstruktion allgemeinerer Lösungen dienen.

3.2.5. Typ-II-Supraleiter im Bereich $H \lesssim H_{c2}$

Um eine Lösung für die erste Ginzburg-Landau-Gleichung im Bereich $H \lesssim H_{c2}$ zu finden, betrachtet man zunächst die Grundzustandsfunktion ($n = 0$ und $k_z = 0$) der linearisierten Ginzburg-Landau-Gleichung in der x-y-Ebene im Feld $\vec{H} = H_{c2}\hat{z}$:

$$\psi(x, y) = C e^{ik_y y} e^{-(x-x_0)^2/2\xi^2} \quad (3.70)$$

C: Normierungskonstante

Für den Ansatz soll angenommen werden, dass die Lösung für den Bereich $H \lesssim H_{c2}$ und 3.70 ähnlich sind, aber zusätzlich die Wirbelstruktur berücksichtigen. Daher setzt man eine Superposition von 3.70 an, die entsprechend in x und y periodisch ist. 3.70 ist in y-Richtung bereits periodisch (Periode: $T_y = \frac{2\pi}{k_y}$) und so kann man k_y nach nk_y und damit auch $x_0 \rightarrow x_n$ übergehen lassen, wobei n der Index für die Superposition ist:

$$\Rightarrow \psi(x, y) = C \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{ink_y y} e^{-(x-x_n)^2/2\xi^2} \quad (3.71)$$

mit $x_n = \frac{2\pi n \xi^2}{T_y}$

Es kann in wenigen Schritten gezeigt werden, dass ψ in x-Richtung quasiperiodisch mit Periode $T_x = x_{n+1} - x_n = \frac{2\pi\xi^2}{T_y}$ ist, d.h. in unserem Fall bis auf einen Vorfaktor vom Betrag 1:

$$\begin{aligned} \psi(x - T_x, y) &= C \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{ink_y y} e^{-(x-T_x-x_n)^2/2\xi^2} \\ &= C \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{ink_y y} e^{-(x-x_{n+1})^2/2\xi^2} \\ &= C \sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{i(m-1)k_y y} e^{-(x-x_m)^2/2\xi^2} \\ &= e^{-ik_y y} \psi(x, y) \end{aligned}$$

Aufgrund dieser Tatsache ist $|\psi|^2$ strikt periodisch und die Fläche einer Einheitszelle ist auf $T_x T_y = 2\pi\xi^2$ begrenzt. Wir verallgemeinern 3.71, indem wir $C \rightarrow C_n \in \mathbb{C}$ und $C_{n+\nu} = C_n$, $\nu \in \mathbb{N}$ zulassen. Wir erhalten somit:

$$\psi(x, y) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} C_n e^{ink_y y} e^{-(x-x_n)^2/2\xi^2} \quad (3.72)$$

Die Pseudoperiodizität in x-Richtung bleibt weiterhin erhalten, wenn $T_x \rightarrow \nu T_x$:

$$\begin{aligned}\psi(x - T_x, y) &= \psi(x - \nu(x_{n+1} - x_n), y) \\ &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} C_n e^{ik_y y} e^{-(x - \nu \frac{2\pi\xi^2}{T_y} - x_n)^2 / 2\xi^2} \\ &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} C_n e^{i(n+\nu)k_y y} e^{-(x-x_n)^2 / 2\xi^2} \\ &= e^{i\nu k_y y} \psi(x, y)\end{aligned}$$

Die Fläche der Einheitszelle wird damit auf $T_x T_y = 2\pi\nu\xi^2$ beschränkt und der Vergleich mit 3.71 liefert ν Flussschläuche pro Einheitszelle. Zur Vereinfachung der Notation setzen wir $k = k_y$.

Experimentell sind zwei Gitterstrukturen bedeutsam:

1) Das quadratische Gitter

Hier gilt:

$$\begin{aligned}C_n &= C \leftrightarrow \nu = 1 \\ x_n &= nT_x\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}T_x = T_y &= \frac{2\pi}{k} \\ \Rightarrow \psi_{\square}(x, y) &= C \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{2\pi i n y / T_y} e^{-(x - nT_x)^2 / 2\xi^2}\end{aligned}\tag{3.73}$$

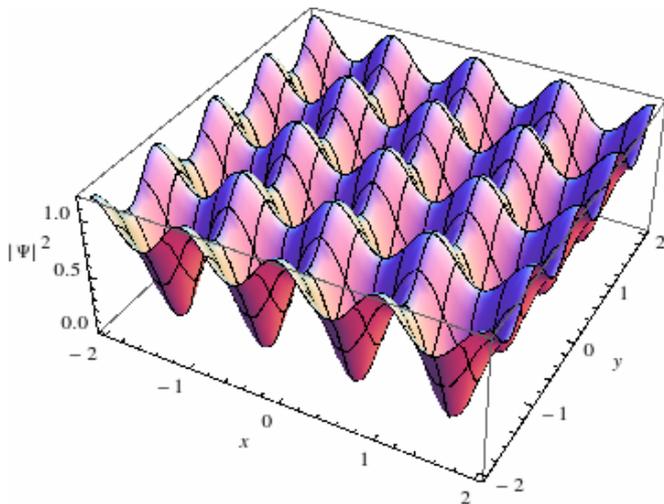


Abbildung 3.7: $|\psi_{\square}|^2$ für $T_x = T_y = 1$. An den Stellen, wo $|\psi|^2 = 0$ ist, befinden sich die Flussschläuche.

2) Das Dreiecksgitter

In diesem Fall gilt:

$$\begin{aligned}
 C_n &= C_{n+2} \leftrightarrow \nu = 2 \\
 C_1 &= iC_0 \\
 \Rightarrow \psi_\Delta(x, y) &= C \left[\sum_{\text{n gerade}} e^{inky} e^{-(x-x_n)^2/2\xi^2} + i \sum_{\text{n ungerade}} e^{inky} e^{-(x-x_n)^2/2\xi^2} \right] \\
 &= C \sum_{\text{n gerade}} \left[e^{2\pi iny/T_y} e^{-(x-\frac{nT_x}{2})^2/2\xi^2} + i e^{2\pi iny/T_y} e^{-(x-\frac{(n+1)T_x}{2})^2/2\xi^2} \right] \\
 &= C \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{4\pi iny/T_y} \left(e^{-(x-nT_x)^2/2\xi^2} + i e^{2\pi iny/T_y} e^{-(x-(n+\frac{1}{2})T_x)^2/2\xi^2} \right)
 \end{aligned} \tag{3.74}$$

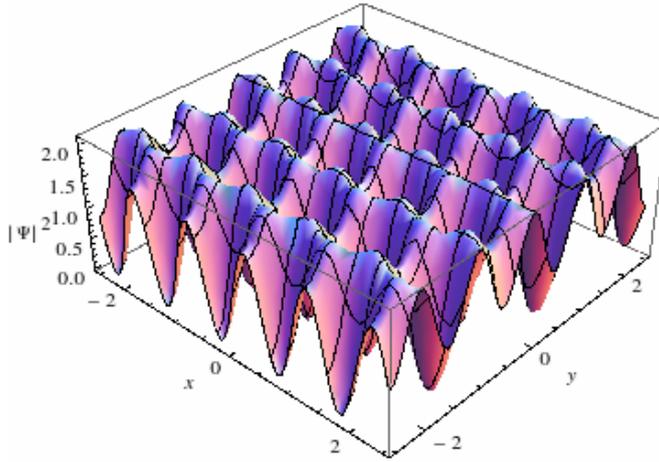


Abbildung 3.8: $|\psi_\Delta|^2$ für $T_x = 1$ und $T_y = 2$. An den Stellen, wo $|\psi|^2 = 0$ ist, befinden sich die Flussschläuche.

Als Nächstes soll die Normierungskonstante bestimmt werden.

Hierzu suchen wir wieder einen stationären Ausdruck für die freie Energie bei einer Variation von ψ , d.h. $\delta F \stackrel{!}{=} 0$. Nach analogen Rechnungen wie bei der Herleitung der Ginzburg-Landau-Gleichungen 3.46 erhält man:

$$\int \left[-\frac{1}{2m^*} \left| \left(\frac{\hbar}{i} \nabla - \frac{e^*}{c} \vec{A} \right) \psi \right|^2 + \alpha |\psi|^2 + \beta |\psi|^4 \right] d^3r = 0 \tag{3.75}$$

Zur Vereinfachung soll ab nun folgende Schreibweise gelten:

$$\frac{1}{V} \int |f(\vec{r})| d^3r \equiv \overline{f(\vec{r})}$$

Das Feld $\vec{H}(\vec{r})$ im Inneren eines Fluss Schlauchs setzt sich aus dem externen Feld \vec{H}_0 und dem Feld $\vec{H}^{(s)}(\vec{r})$, das durch die supraleitenden Ströme induziert wird, zusammen.

Um das innere Feld für kleine Abweichungen von H_{C2} zu betrachten, schreiben wir folgendermaßen um:

$$\vec{H}(\vec{r}) = \vec{H}_0 + \vec{H}^{(s)}(\vec{r}) \equiv \vec{H}_{c2} + \vec{H}^{(1)}(\vec{r}) \quad (3.76)$$

$$\text{wobei definiert wurde: } \vec{H}^{(1)}(\vec{r}) \equiv \vec{H}_0 - \vec{H}_{c2} + \vec{H}^{(s)}(\vec{r}) = \nabla \times \vec{A}^{(1)}$$

Nun kann der Ausdruck 3.75 bis zur ersten Ordnung in $\vec{A}^{(1)}$ entwickelt werden, wobei zusätzlich 3.70 verwendet wird:

$$\begin{aligned} & \overline{-\frac{1}{2m^*} \left| \left[\frac{\hbar}{i} \nabla - \frac{e^*}{c} (\vec{A}_{c2} + \vec{A}^{(1)}) \right] \psi \right|^2 + \alpha |\psi|^2 + \beta |\psi|^4 = 0} \\ & \frac{\hbar e^*}{2im^* c} \vec{A}^{(1)} \left[\psi^* \left(\nabla - \frac{ie^*}{\hbar c} \vec{A}^s \right) \psi - \psi \left(\nabla + \frac{ie^*}{\hbar c} \vec{A}^s \right) \psi^* \right] + \beta |\psi|^4 = \\ & \overline{\beta |\psi|^4 - \frac{1}{c} \vec{j}^{(s)} \vec{A}^{(1)} =} \\ & \overline{\beta |\psi|^4 - \vec{A}^{(1)} (\nabla \times \frac{1}{4\pi} \vec{H}^{(s)}) =} \end{aligned}$$

An dieser Stelle kann partiell integriert werden und mithilfe der London-Eichung $\nabla \vec{A}^{(1)} = 0$ und der Quellfreiheit des magnetischen Feldes weiter umgeformt werden:

$$\begin{aligned} & \overline{\beta |\psi|^4 - \frac{1}{4\pi} \vec{H}^{(s)} \vec{H}^{(1)} = 0} \quad |\vec{H}^{(s)} \uparrow \vec{H}^{(1)} \\ & \overline{\beta |\psi|^4 - \frac{1}{4\pi} H^{(s)} H^{(1)} = 0} \end{aligned} \quad (3.77)$$

Zur Berechnung von $\vec{H}^{(s)}$ bzw. $\vec{j}^{(s)}$ werden folgende Definitionen nützlich sein:

$$\text{Def(kanonischer Impulsoperator): } \Pi \equiv \frac{\hbar}{i} \nabla - \frac{e^*}{c} \vec{A}^{(s)}$$

$$\text{mit Vertauschungsrelation } [\Pi_x, \Pi_y] = \frac{\hbar e^*}{ic} (\partial_y A_x^{(s)} - \partial_x A_y^{(s)}) = \frac{i\hbar e^*}{c} H^{(s)}$$

$$\text{Def(Leiteroperatoren): } \Pi_{\pm} \equiv \Pi_x \pm i\Pi_y$$

Dass Π_{\pm} tatsächlich Leiteroperatoren sind, kann an 3.67 leicht überprüft werden, wenn man die Eigenschaften der Hermite-Polynome verwendet. Für den Grundzustand, den wir in 3.72 betrachten, muss daher gelten:

$$\Pi_- \psi = \left[\left(\frac{\hbar}{i} \partial_x - \frac{e^*}{c} A_x^{(s)} \right) - i \left(\frac{\hbar}{i} \partial_y - \frac{e^*}{c} A_y^{(s)} \right) \right] \psi = 0 \quad (3.78)$$

$$\text{Eichfreiheit: } \psi = |\psi| e^{i\Phi(\vec{r})} \quad (3.79)$$

$$\text{und entsprechend } \vec{j}^{(s)} = \frac{e^*}{m^*} |\psi|^2 \left(\hbar \nabla \Phi - \frac{e^*}{c} \vec{A}^{(s)} \right) \quad (3.80)$$

Setzt man 3.79 in 3.78 ein und separiert Real- und Imaginärteil, dann führt ein Vergleich

mit 3.80 zu:

$$\begin{aligned} j_x^{(s)} &= -\frac{e^*\hbar}{2m^*} \partial_y |\psi|^2 \\ j_y^{(s)} &= \frac{e^*\hbar}{2m^*} \partial_x |\psi|^2 \\ j_z^{(s)} &= 0 \end{aligned}$$

Dass $j_z^{(s)} = 0$ gilt, wurde bereits in der London-Theorie vorhergesagt, wenn das äußere Feld in z-Richtung zeigt.

Mittels Maxwell-Gleichung kann nun das Feld bestimmt werden:

$$\begin{aligned} \nabla \times \vec{H}^{(s)} &= 4\pi \vec{j}^{(s)} \\ \text{Integration führt zu } \vec{H}^{(s)} &= -4\pi \frac{e^*\hbar}{2m^*c} |\psi|^2 \hat{z} \end{aligned} \quad (3.81)$$

Die Integrationskonstante wurde so gewählt, dass für $|\psi|^2 = 0$ auch das durch die supraleitenden Ströme verursachte Feld verschwindet.

Gleichsam kann $\vec{H}^{(s)}$ wegen 3.81 als eine Magnetisierung interpretiert werden:

$$\begin{aligned} \vec{B} &= \vec{H}_0 + 4\pi \overline{M^{(s)}} \\ \overline{M^{(s)}} &= -\frac{e^*\hbar}{2m^*c} |\psi|^2 \hat{z} < 0 \end{aligned}$$

Dass die Magnetisierung negativ ist, macht Sinn, da Supraleiter grundsätzlich diamagnetisch sind.

Insgesamt erhält man durch Einsetzen von 3.81 in 3.77 den Ausdruck

$$\begin{aligned} 0 &= \beta |\psi|^4 - \frac{e^*\hbar}{2m^*c} |\psi|^2 \left(H_0 - H_{c2} - 4\pi \frac{e^*\hbar}{2m^*c} |\psi|^2 \right) \\ \text{mittels } \psi(\vec{r}) &= \psi_0 f(\vec{r}) \text{ , wobei } \psi_0^2 = \frac{|\alpha|}{\beta} \\ \kappa &= \frac{m^*c}{e^*\hbar} \left(\frac{\beta}{2\pi} \right)^{1/2} \\ H_{c2} &= -\frac{2m^*c\alpha}{\hbar e^*} \end{aligned} \quad (3.82)$$

kann man vereinfachen:

$$0 = \overline{f^4} \left(1 - \frac{1}{2\kappa^2} \right) - \overline{f^2} \left(1 - \frac{H_0}{H_{c2}} \right) \quad (3.83)$$

An dieser Stelle soll eine Größe definiert werden, die später Auskunft darüber geben wird, welche Gitterstruktur energetisch günstiger ist.

$$\text{Def(Abrikosov-Parameter): } \beta_A \equiv \frac{\overline{f^4}}{\overline{f^2}^2} \quad (3.84)$$

Zum Schluss dieses Abschnitts sollen die Ergebnisse genutzt werden, um einige ther-

modynamische Eigenschaften von Typ-II-Supraleitern im Bereich $H \lesssim H_{C2}$ abzuleiten:

$$\begin{aligned} B &= H_0 + \overline{H^{(s)}} && |3.81 \\ &= H_0 - \frac{H_{c2} \overline{f^2}}{2\kappa^2} && |3.83, 3.84 \end{aligned} \quad (3.85)$$

$$\begin{aligned} &= H_0 - \frac{H_{c2} - H_0}{\beta_A(2\kappa^2 - 1)} \\ \Leftrightarrow H_0 &= B + \frac{H_{c2} - B}{1 + \beta_A(2\kappa^2 - 1)} \end{aligned} \quad (3.86)$$

$$\Rightarrow M = \frac{B - H_0}{4\pi} = \frac{H_0 - H_{c2}}{4\pi\beta_A(2\kappa^2 - 1)} \quad (3.87)$$

Die Magnetisierung ist nahe des oberes kritischen Feldes linear in H_0 . Schließlich lässt sich die freie Energie mit den obigen Ergebnissen sehr stark vereinfachen, da sich aufgrund von 3.83 viele Terme aufheben:

$$\begin{aligned} F_S &= F_0 + \int d^3r \left[\alpha |\psi(\vec{r})|^2 + \frac{\beta}{2} |\psi(\vec{r})|^4 \right. \\ &\quad \left. + \frac{\hbar^2}{2m^*} \left| \left(\nabla - \frac{ie^*}{\hbar c} \vec{A}(\vec{r}) \right) \psi(\vec{r}) \right|^2 + \frac{1}{8\pi} H^2(\vec{r}) \right] \end{aligned} \quad |3.83$$

$$= F_0 + \int d^3r \left[-\frac{\beta}{2} |\psi(\vec{r})|^4 + \frac{1}{8\pi} H^2(\vec{r}) \right] \quad |3.82$$

$$= F_0 + V \left[-\frac{H_{c2}^2 \overline{f^4}}{8\pi \cdot 2\kappa^2} + \frac{1}{8\pi} \overline{\left(H_0 - \frac{H_{c2}}{2\kappa^2} f^2 \right)^2} \right] \quad |3.85$$

$$= F_0 + \frac{V}{8\pi} \left[-H_{c2}^2 \left(1 - \frac{1}{2\kappa^2} \right) \frac{\overline{f^4}}{2\kappa^2} + H_0 \left(H_0 - \frac{H_{c2}}{\kappa^2} \overline{f^2} \right) \right] \quad |3.84, 3.83$$

$$= F_0 + \frac{V}{8\pi} \left[H_0^2 - \frac{H_{c2}^2 - H_0^2}{\beta_A(2\kappa^2 - 1)} \right] = F(H_0) \quad |3.86 \quad (3.88)$$

$$= F_0 + \frac{V}{8\pi} \left[B^2 - \frac{(B - H_{c2})^2}{1 + \beta_A(2\kappa^2 - 1)} \right] = F(B) \quad (3.89)$$

Wie man an 3.88 oder 3.89 sieht, wird die freie Energie kleiner, wenn der Abrikosov-Parameter kleiner wird.

In Appendix B wird die numerische Berechnung des Abrikosov-Parameters für das Quadrat- und Dreiecksgitter vorgestellt. Es stellt sich heraus, dass das Dreiecksgitter etwas stabiler ist als das Quadratgitter, so dass dieses auch häufig in konventionellen Supraleitern beobachtet werden konnte (Abb. 3.9).

3.2.6. Exkurs: Josephson-Effekt

Eine interessante Anwendung der Ginzburg-Landau-Theorie ist die Berechnung der relativen Phase zwischen zwei supraleitenden Bauelementen, die sich im sogenannten DC-SQUID (engl: superconducting quantum interference device) dazu eignet kleinste Änderungen von magnetischen Feldern zu messen.

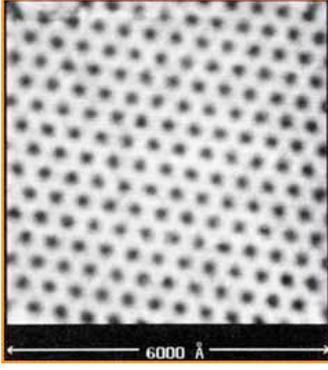


Abbildung 3.9: Im Typ-II-Supraleiter NbSe₂ ordnen sich bei einem externen magnetischen Feld von 1T und einer Temperatur von 1.8 K die Flusschläuche in einem Dreiecksgitter an. (aus[11])

Ausgangspunkt der Überlegungen soll die Wahrscheinlichkeitsstromdichte 3.48 sein:

$$\begin{aligned}
 \vec{j}(\vec{r}) &= \frac{-ie^*\hbar}{2m^*} [\psi^*(\vec{r})\nabla\psi(\vec{r}) - \psi(\vec{r})\nabla\psi^*(\vec{r})] - \frac{e^{*2}}{m^*c} |\psi(\vec{r})|^2 \vec{A}(\vec{r}) \\
 &= \frac{-ie^*\hbar}{2m^*} \left[\psi^*(\vec{r}) \left(\nabla - \frac{e^*}{m^*c} \vec{A}(\vec{r}) \right) \psi(\vec{r}) - c.c. \right] \quad |\psi| = |\psi| e^{i\Phi(\vec{r})} \\
 &= \frac{e^*\hbar}{m^*} |\psi|^2 \left[\nabla\Phi - \frac{e^*}{\hbar c} \vec{A}(\vec{r}) \right] \tag{3.90}
 \end{aligned}$$

Wie im Abschnitt 3.2.3 gezeigt wurde, weisen eichinvariante Lösungen der Ginzburg-Landau-Gleichung ein Vektorpotential $\vec{A}(\vec{r}) = \frac{\hbar c}{e^*} \nabla\Phi(\vec{r})$ auf, so dass aufgrund der zweiten Ginzburg-Landau-Gleichung 3.49 die Wahrscheinlichkeitsstromdichte Null ist. An der Grenzfläche zwischen Supraleiter und Normalleiter sollte ohnehin kein Wahrscheinlichkeitsstrom in die normalleitende Phase fließen, d.h. $\vec{j}\vec{n} = 0$, falls \vec{n} der Einheitsvektor auf der Grenzfläche ist. Dementsprechend muss der kanonische Impuls angewendet auf ψ in Richtung der normalleitenden Phase auch verschwinden:

$$\vec{n} \left[\frac{\hbar}{i} \nabla - \frac{e^*}{c} \vec{A} \right] \psi = 0$$

An dieser Stelle ist jedoch wichtig zu erwähnen, dass der Ordnungsparameter beim Übergang in die normalleitende Phase nicht sofort verschwindet, sondern gegeben durch die im letzten Abschnitt hergeleitete tanh-Funktion abklingt. Um dies nicht außer Acht zu lassen, wird auf der rechten Seite der Gleichung ein Term $-\frac{1}{b}\psi$ ergänzt, wobei b ein Parameter für die Eindringtiefe von ψ ist.

$$\vec{n} \left[\frac{\hbar}{i} \nabla - \frac{e^*}{c} \vec{A} \right] \psi = -\frac{1}{b} \psi \tag{3.91}$$

Demzufolge ist es möglich ein Tunneln in einer Supraleiter/Nicht-Supraleiter/Supraleiter-Verbindung zu erwirken, wenn das nicht-supraleitende Element schmal genug ist (Abb. 3.10). Dadurch ist es also möglich permanente supraleitende Ströme in einem supraleitenden Ring zu messen, auch wenn ein kleines nicht-supraleitendes Element dazwischengeschaltet wird. Dieses Phänomen wird als Josephson-Effekt bezeichnet und kann sowohl bei einer "Verunreinigung" durch einen Normalleiter als auch durch einen Nicht-

leiter beobachtet werden.

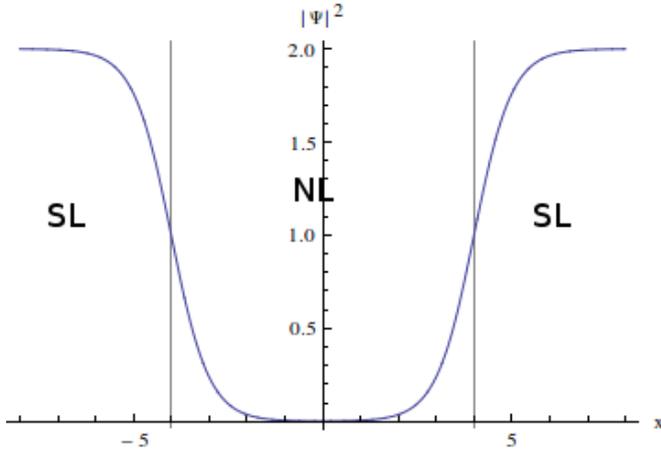


Abbildung 3.10: Die Anordnung von zwei Supraleitern (SL) im Bereich $|x| > 4$ mit einer schmalen normalleitenden Phase (NL) dazwischen $-|x| < 4$ erlaubt einen Tunnelstrom zwischen den beiden supraleitenden Elementen. Quantitativ kann die Wahrscheinlichkeitsstromdichte durch ein gekoppeltes Gleichungssystem für den Ordnungsparameter beschrieben werden.

Kennzeichnet man das linke supraleitende System mit einem Index 1 und das rechte mit 2, dann lautet der allgemeinste lineare Ansatz -analog zu 3.91- zur Beschreibung dieses Systems:

$$\begin{aligned} \psi_1 &= M_{11}\psi_2 + M_{12} \left(\frac{d}{dx} - \frac{ie^*}{\hbar c} A_x \right) \psi_2 \\ \left(\frac{d}{dx} - \frac{ie^*}{\hbar c} A_x \right) \psi_1 &= M_{21}\psi_2 + M_{22} \left(\frac{d}{dx} - \frac{ie^*}{\hbar c} A_x \right) \psi_2 \end{aligned} \quad (3.92)$$

Bedingungen an die Koeffizienten M_{ij} können durch die Stromerhaltung $j_1(0) = j_2(0)$ einfach festgelegt werden, wenn man diese reell wählt:

$$\begin{aligned} j_k(x) &= \frac{-ie^*\hbar}{2m^*} \left\{ \psi_k^*(x) \left[\frac{d}{dx} - \frac{e^{*2}}{m^*c} A_x \right] \psi_k(x) - c.c. \right\}, \quad k \in \{1, 2\} \quad |3.92 \\ j_1(x) &= \frac{-ie^*\hbar}{2m^*} \left\{ \psi_2^* \left[\frac{1}{M_{12}} \psi_1 - \frac{M_{11}}{M_{12}} \psi_2 \right] - c.c. \right\} \\ j_2(x) &= \frac{-ie^*\hbar}{2m^*} \left\{ \psi_1^* \left[\frac{M_{22}}{M_{12}} \psi_1 + \left(M_{21} - \frac{M_{22}M_{11}}{M_{12}} \right) \psi_2 \right] - c.c. \right\} \\ \xrightarrow{j_1(0)=j_2(0)} M_{21} - \frac{M_{22}M_{11}}{M_{12}} &= -M_{12} \\ \Leftrightarrow \det(M) &= 1 \end{aligned}$$

Abhängig von den speziellen Eigenschaften eines Systems dienen die verbleibenden Freiheitsgrade in der Festlegung von M_{ij} dazu, diese Eigenschaften zu parametrisieren. Als einfaches Beispiel soll hier der Fall einer schwachen Kopplung zwischen den beiden

Supraleiterabschnitten betrachtet werden. In diesem Fall sind die Diagonalelemente $M_{11} = M_{22} = 0$ und die außerdiagonalen Elemente $M_{12} = -\frac{1}{M_{21}} \equiv \lambda$. Setzt man dies in die Wahrscheinlichkeitsstromdichte ein, erhält man für 3.92 und die Wahrscheinlichkeitsstromdichte:

$$\begin{aligned} \partial_x \psi_1 - \frac{ie^*}{\hbar c} A_x \psi_1 &= \frac{1}{\lambda} \psi_2 \\ \partial_x \psi_2 - \frac{ie^*}{\hbar c} A_x \psi_2 &= \frac{1}{\lambda} \psi_1 \\ \Leftrightarrow j_x = j_1 = j_2 &= \frac{-ie^* \hbar}{2m^*} \left[\psi_1^* \left(\frac{1}{\lambda} \psi_2 + \frac{ie^*}{\hbar c} A_x \psi_1 \right) - \psi_1 \left(\frac{1}{\lambda^*} \psi_2^* - \frac{ie^*}{\hbar c} A_x \psi_1^* \right) \right] \\ &\quad - \frac{e^{*2}}{m^* c} A_x |\psi_1|^2 \end{aligned} \tag{3.93}$$

Unter Vernachlässigung von Spin-Einflüssen sind die supraleitenden Eigenschaften zeitumkehrinvariant, so dass man durch Zeitumkehr von 3.93 ablesen kann, dass $\lambda \in \mathbb{R}$. Damit kann die Stromdichte noch weiter vereinfacht werden zu:

$$j_x = \frac{-ie^* \hbar}{2m^* \lambda} (\psi_1^* \psi_2 - \psi_1 \psi_2^*) \tag{3.94}$$

Nun soll zur weiteren Diskussion der Fall behandelt werden, dass beide Bereiche des Supraleiters aus demselben Material stammen, d.h. $|\psi_1| = |\psi_2| \equiv |\psi|$, wobei wieder die Polarform $\psi_j = |\psi_j| e^{i\Phi_j}$ verwendet wird:

$$j_x = \frac{e^* \hbar}{m^* \lambda} |\psi|^2 \sin \Phi_{21} \tag{3.95}$$

$$= j_m \sin \Phi_{21} \tag{3.96}$$

$$\text{mit } \Phi_{21} \equiv \Phi_2 - \Phi_1$$

$$j_m \equiv \frac{e^* \hbar}{m^* \lambda} |\psi|^2$$

j_m bezeichnet hierin den maximalen Stromfluss in dem System. Die Messung der relativen Phase Φ_{21} , die später noch in einer praktischen Anwendung vorgestellt werden soll, wird mithilfe von externen elektromagnetischen Feldern ermöglicht. Hierbei wird von der Eichinvarianz der elektromagnetischen Potentiale Gebrauch gemacht. Die grundlegendsten Relationen seien an dieser Stelle kurz aufgelistet:

$$\begin{aligned} \vec{H} &= \nabla \times \vec{A} & \vec{E} &= -\nabla \phi - \frac{1}{c} \partial_t \vec{A} \\ \vec{A} &\longrightarrow \vec{A} + \nabla \chi(\vec{r}, t) & \phi &\longrightarrow \phi - \frac{1}{c} \partial_t \chi(\vec{r}, t) \end{aligned}$$

wobei $\chi(\vec{r}, t)$ eine beliebige differenzierbare Funktion ist.

Zu Beginn des Abschnitts 3.2.3 gelang es, eine eichinvariante Lösung $\psi = |\psi| e^{i\Phi}$ der Ginzburg-Landau-Gleichungen zu konstruieren, deren Phase den Zusammenhang $\vec{A} = \frac{\hbar c}{e^*} \nabla \Phi$ erfüllt. Hierauf können nun die Eichtransformationen der elektromagnetischen

Potentiale angewendet werden:

$$\begin{aligned}
 \vec{A} &= \frac{\hbar c}{e^*} \nabla \Phi \quad | + \nabla \chi & (3.97) \\
 \vec{A} + \nabla \chi &= \frac{\hbar c}{e^*} \nabla \left[\Phi + \frac{e^*}{\hbar c} \nabla \chi \right] \\
 \Rightarrow \Phi &\rightarrow \Phi + \frac{e^*}{\hbar c} \nabla \chi
 \end{aligned}$$

Somit konnte die dazugehörige Eichtransformation für die Phase des Ordnungsparameters gefunden werden.

Die Zeitentwicklung der Phase kann mithilfe eines eleganten Arguments über die Eichinvarianz hergeleitet werden. Hierzu verwendet man, dass im schmalen Bereich zwischen den nichtsupraleitenden Materialien ein annähernd räumlich homogenes elektrisches Feld, das einem Potential ϕ_{21} entspricht, vorliegt. Damit kann die zeitabhängige Schrödingergleichung für 3.93 mit Kopplungskonstanten K folgendermaßen geschrieben werden:

$$\begin{aligned}
 i\hbar \partial_t \psi_1 &= E_1 \psi_1 + K \psi_2 \\
 i\hbar \partial_t \psi_2 &= E_2 \psi_2 + K \psi_1
 \end{aligned} \tag{3.98}$$

Setzt man nun für jedes ψ die Form $|\psi|e^{i\Phi}$ ein und trennt nach Real- und Imaginärteil, so erhält man:

$$\begin{cases}
 i\hbar |\psi_1|' - \hbar |\psi_1| \Phi_1' &= E_1 |\psi_1| + K |\psi_2| e^{i\Phi_{21}} \\
 i\hbar |\psi_2|' - \hbar |\psi_2| \Phi_2' &= E_2 |\psi_2| + K |\psi_1| e^{-i\Phi_{21}}
 \end{cases}$$

Realteil:

$$\begin{cases}
 -\hbar |\psi_1| \Phi_1' &= E_1 |\psi_1| + K |\psi_2| \cos(\Phi_{21}) \\
 -\hbar |\psi_2| \Phi_2' &= E_2 |\psi_2| + K |\psi_1| \cos(\Phi_{21})
 \end{cases}$$

Imaginärteil:

$$\begin{cases}
 \hbar |\psi_1|' &= K |\psi_2| \sin(\Phi_{21}) \\
 \hbar |\psi_2|' &= -K |\psi_1| \sin(\Phi_{21})
 \end{cases} \tag{3.99}$$

Verwendet man nun die Symmetrie des Versuchsaufbaus ($|\psi_1| = |\psi_2|$), so kann an 3.99 die Erhaltung der Cooperpaare abgelesen werden: $|\psi_2|' = -|\psi_1|'$.

Für den Realteil ergibt sich unter Berücksichtigung, dass die Differenz in den Energien E_2 und E_1 durch das Potential ϕ_{21} hervorgerufen wird:

$$\begin{aligned}
 -\hbar |\psi_2| \Phi_{21}' &= (E_2 - E_1) |\psi_2| & |E_2 - E_1| &= -e^* \phi_{21} \\
 \partial_t \Phi_{21} &= -\frac{e^*}{\hbar} \phi_{21}
 \end{aligned}$$

Nun kann Gebrauch von der Eichinvarianz gemacht werden.

$$\begin{aligned}
 \partial_t \Phi_{21} + \frac{e^*}{\hbar} \phi_{21} &= 0 && \text{|Eichtrafo} \\
 \partial_t \Phi_{21} + \frac{\partial_t e^*}{\hbar c} \partial_t \chi + \frac{e^*}{\hbar} \phi_{21} - \frac{e^*}{\hbar c} \partial_t \chi &= 0 \\
 \Rightarrow \Phi_{21} &= \Phi_{21}^{(0)} - \frac{e^*}{\hbar} \phi_{21} t && \text{|3.95} \\
 j_x(t) &= j_m \sin(\Phi_{21}^{(0)} - \frac{e^*}{\hbar} \phi_{21} t) \\
 &\equiv j_m \sin(\Phi_{21}^{(0)} - \omega t) \\
 \omega &\equiv \frac{e^*}{\hbar} \phi_{21}
 \end{aligned}$$

Die letzte Gleichung sagt aus, dass sich aufgrund des Tunnelns auf beiden Seiten zusätzlich zum statischen elektrischen Feld eine oszillierende Spannung einstellt. Anschaulich rührt dies daher, dass sich wegen des elektrischen Feldes eine Vorzugsrichtung für das Tunneln etabliert und dies solange geschieht, bis sich aufgrund der Überzahl an getunnelten Elektronen ein Gegenfeld einstellt und bevorzugt in die andere Richtung getunnelt wird usw.

Betrachtet man den Effekt eines schwachen magnetischen Feldes -dies wird angenommen, damit die Dynamik von supraleitenden Vortizes den Effekt auf die Phase des Ordnungsparameters nicht überragt-, so lässt sich der eichinvariante Ausdruck 3.97 durch Integration dazu verwenden, die Ortsabhängigkeit der Phase Φ_{21} im nichtsupraleitenden Bereich zu bestimmen:

$$\begin{aligned}
 \vec{A} &= \frac{\hbar c}{e^*} \nabla \Phi \\
 \rightarrow \Phi_{21} &= \Phi_{21}^{(0)} + \frac{2\pi}{\Phi_0} \int_1^2 \vec{A} d\vec{r} && \text{(3.100)}
 \end{aligned}$$

Das Ergebnis wird in Einheiten des Flussquantums geschrieben, weil in der nun vorgestellten Anwendung das Verhältnis zum gesamten Fluss wichtig ist. Grundsätzlich beschreibt 3.100, wie sich relative Phasen durch ein externes magnetisches Feld berechnen lassen.

Es wird nun ein Versuchsaufbau vorgestellt, der es erlaubt, auch kleinste Änderungen im magnetischen Feld durch eine präzise Strommessung zu erfassen. Hierzu wird der Aufbau in Abb. 3.11 verwendet:

Ein äußeres Magnetfeld $\vec{H} = \nabla \times \vec{A}$ wird an ein supraleitendes Quadrat angelegt, wobei beide senkrecht zueinander sind. Innerhalb des Quadrats befinden sich auf der Ober- und Unterseite zwei Josephson-Verbindungen, die Einfluss auf den Strom nehmen werden. An der linken und rechten Seite wird mithilfe eines Messgeräts der Gesamtstrom I gemessen. Das Magnetfeld soll immer in dieselbe Richtung zeigen und nur in seinem Betrag variieren, weswegen man diese Konstruktion als DC-SQUID bezeichnet.

An der Stelle 1 teilt sich der Strom I auf den oberen und unteren Abschnitt des Quadrats auf, d.h.

$$I = I_u + I_o$$

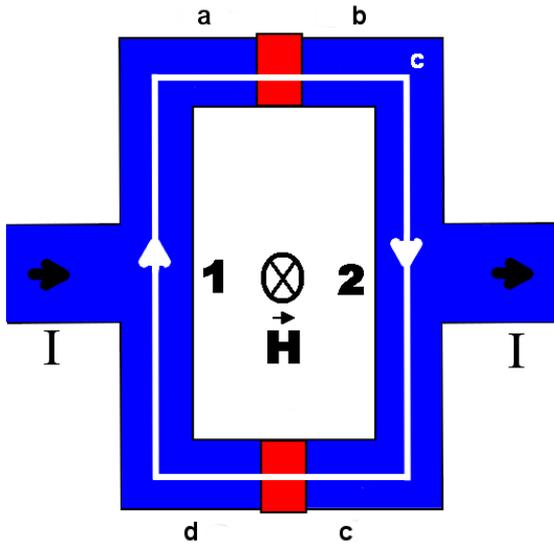


Abbildung 3.11: DC-SQUID: In einem supraleitenden Quadrat wird aufgrund eines angelegten magnetischen Feldes senkrecht zur Bildebene ein Strom I induziert, der mittels oben und unten eingefügter Josephson-Verbindungen in Abhängigkeit des magnetischen Feldes oszilliert.

,wobei I_u den Strom im unteren Abschnitt und I_o im oberen Abschnitt bezeichnet. Die Indizes sollen im Folgenden allgemein zwischen oberer und unterer Josephson-Verbindung unterscheiden. Beide Teilströme werden entsprechend 3.100 moduliert. Verwendet man zusätzlich, dass $I = \int_A \vec{j} d\vec{A}$, wenn A die Querschnittsfläche des Leiters ist und 3.96, so lässt sich schreiben:

$$I = I_{max,u} \sin(\Delta\Phi_u) + I_{max,o} \sin(\Delta\Phi_o)$$

Die konstante Phase $\Phi^{(0)}$ wurde zu Null gesetzt und die beiden $\Delta\Phi$ deklarieren entsprechend die Phasenänderung, die durch die Josephson-Verbindung entsteht. Unter der Annahme, dass der obere und der untere Teil des Quadrats baugleich sind ($I_{max,u} = I_{max,o} \equiv I_m$), verwendet man die Additionstheoreme, um den Gesamtstrom I umzuschreiben:

$$I = 2I_m \sin\left(\frac{\Delta\Phi_o + \Delta\Phi_u}{2}\right) \cos\left(\frac{\Delta\Phi_o - \Delta\Phi_u}{2}\right) \quad (3.101)$$

Die Phase Φ des Ordnungsparameters kann durch eine Wegintegration (Weg C in Abb. 3.11) über das Quadrat gewonnen werden. Es muss nur bedacht werden, dass sich bei Wiederkehr an den Anfangspunkt die Phase nur um ein Vielfaches von 2π geändert haben kann, denn sonst hätte sich der Zustand des Systems damit geändert. Der Integrationsweg soll im Uhrzeigersinn verlaufen.

$$\begin{aligned} 2\pi n &= \oint_C \nabla\Phi d\vec{r} && \text{[Phasenänderungen nur an Phasengrenzen möglich]} \\ \text{mit } n &\in \mathbb{N} \\ &= (\Phi_b - \Phi_a) + (\Phi_c - \Phi_b) + (\Phi_d - \Phi_c) + (\Phi_a - \Phi_d) \end{aligned} \quad (3.102)$$

Die auftretenden Differenzen mit a,b und c,d können nun mittels 3.100 berechnet werden:

$$\Phi_b - \Phi_a = \Delta\Phi_o + \frac{2\pi}{\Phi_0} \int_a^b \vec{A} d\vec{r} \quad (3.103)$$

$$\Phi_d - \Phi_c = \Delta\Phi_u + \frac{2\pi}{\Phi_0} \int_c^d \vec{A} d\vec{r} \quad (3.104)$$

Die Phasenänderung innerhalb der supraleitenden Strecken können über 3.90 berechnet werden:

$$\begin{aligned} \Phi_c - \Phi_b &= \int_b^c \nabla\Phi d\vec{r} && |3.90 \\ &= \frac{2\pi}{\Phi_0} \int_b^c \left(\vec{A} + \frac{4\pi\lambda_L^2}{c} \vec{j} \right) d\vec{r} && (3.105) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Phi_a - \Phi_d &= \int_d^a \nabla\Phi d\vec{r} && |3.90 \\ &= \frac{2\pi}{\Phi_0} \int_d^a \left(\vec{A} + \frac{4\pi\lambda_L^2}{c} \vec{j} \right) d\vec{r} && (3.106) \end{aligned}$$

Aus den Ausdrücken 3.102-3.106 werden nun die für 3.101 benötigten Phasendifferenzen berechnet:

$$\begin{aligned} \Delta\Phi_o - \Delta\Phi_u &= 2\pi n + \frac{2\pi}{\Phi_0} \underbrace{\oint_C \vec{A} d\vec{r}} + \frac{2\pi}{\Phi_0} \frac{4\pi\lambda_L^2}{c} \int_{C'} \vec{j} d\vec{r} \\ &= \int_{A(C)} \vec{H} d\vec{A} = \Phi : \text{Gesamtfluss} \end{aligned}$$

Die Kontur C' umfasst denselben Weg wie C abgesehen von den nichtsupraleitenden Abschnitten.

Die Leiterabschnitte sind gewöhnlich sehr viel dicker als $O(\lambda_L)$ und legt man darüberhinaus den Pfad C' sehr weit innerhalb des Leiterelements, ist der Strom \vec{j} bereits sehr stark abgefallen, so dass der letzte Term ohne großen Fehler vernachlässigt werden kann. Der gewonnene Ausdruck kann dann in 3.101 eingesetzt werden.

$$\Delta\Phi_o - \Delta\Phi_u = 2\pi n + \frac{2\pi\Phi}{\Phi_0} \quad |3.101$$

$$I = 2I_m \sin\left(\Delta\Phi_u + \frac{\pi\Phi}{\Phi_0}\right) \cos\left(\frac{\pi\Phi}{\Phi_0}\right)$$

Mithilfe der maximalen Stromamplitude I_{max} kann man letztlich auch eine sehr kleine Änderung im magnetischen Feld bestimmen:

$$\begin{aligned} \frac{\partial I}{\partial \Delta\Phi_u} &\stackrel{!}{=} 0 \\ \Rightarrow \Delta\Phi_{u,max} + \frac{\pi\Phi}{\Phi_0} &= \left(n + \frac{1}{2}\right) \pi \\ I_{max} &= |I(\Phi_{u,max})| = 2I_m \left| \cos\left(\frac{\pi\Phi}{\Phi_0}\right) \right| \end{aligned}$$

Da das Flussquantum Φ_0 sehr klein ist und im Nenner des Kosinus steht, wird die Stromamplitude bei kleinsten Änderungen des Magnetfeldes und damit auch von Φ einen großen Effekt auf den maximal gemessenen Strom haben.

In den letzten Jahrzehnten hat das Interesse an SQUIDs zugenommen und es wurden raffiniertere und vielseitig anwendbare andere Instrumente entworfen, die sich grundsätzlich das Tunneln von supraleitenden Elektronen zunutze machen [12].

4. Mikroskopische Theorie für konventionelle Supraleiter

4.1. Einleitung

Das mikroskopische Verständnis der Supraleitung wurde 1957 durch die Physiker Bardeen, Cooper und Schrieffer (BCS) ermöglicht [13]. Bereits mit der London- und der Ginzburg-Landau-Theorie wurde insoweit der Grundstein gelegt, als dass in beiden Theorien der Gedanke eines makroskopisch besetzten kohärenten Quantenzustands Eingang findet.

Grundlegend für das Verständnis der Supraleitung wird die sogenannte Cooper-Paarung sein. Hierbei wird es sich um ein attraktives Potential zwischen Elektronen in einem Kristallgitter handeln, was letztlich zu einer Energielücke gegenüber den normalleitenden Elektronen führt. Diese Energielücke ist nun der Grund dafür, dass die Cooper-Paare keine Anregungen durch die gewöhnlich möglichen Wechselwirkungen in einem Festkörper erfahren können und damit widerstandsfrei ihre Ladung transportieren können. Das attraktive Potential ist aber sehr schwach und so ist die Cooper-Paarbildung nur bei sehr tiefen Temperaturen möglich.

Die BCS-Theorie ist erfolgreich auf viele Supraleiter angewendet worden, wobei diejenigen Supraleiter, die sich mithilfe einer Elektronen-Phononen-Wechselwirkung beschreiben lassen, als konventionelle Supraleiter bezeichnet werden.

Innerhalb der BCS-Theorie ist eine Formulierung für eine höchstmögliche kritische Temperatur T_c möglich. Diese ist materialunabhängig und liegt bei etwa 30K. Zu Beginn des zwanzigsten Jahrhunderts wurde eine Reihe von Materialien (sogenannte Kuprate) entdeckt, die noch weit oberhalb dieser Temperatur supraleitend sind und somit nicht durch die BCS-Theorie beschrieben werden können. Zur Abgrenzung von den konventionellen Supraleitern werden diese Materialien Hochtemperatur-Supraleiter oder unkonventionelle Supraleiter genannt. Auf diese soll im Rahmen dieser Arbeit nicht eingegangen werden.

Im Rahmen der BCS-Theorie rechne ich zunächst die Bindungsenergie eines Cooper-Paars nach. Außerdem bestimme ich die Kommutationsrelationen der Cooperpaarerzeuger und -vernichter und derjenigen für die Bogoliubov-Valatin-Quasiteilchen. Danach leite ich die Koeffizienten des BCS-Grundzustands aus der Annahme eines kohärenten Zustands explizit her. Bei der Minimierung der Grundzustandsenergie rechne ich die ausgelassenen Schritte aus Lehrbüchern nach und bestimme darauf aufbauend die Anregungsenergie eines Cooper-Paars. Hierauf folgen dann meine Berechnungen zur Bogoliubov-Valatin-Transformation, die die schrittweise Herleitung der Verteilungsfunktion und die Bestimmung der Anregungszustände umfasst. Zuletzt berechne ich numerisch die Temperaturabhängigkeit der Energielücke und die kritische Temperatur (Appendix C).

4.2. Herleitung des Fröhlich-Hamiltonians

Der wichtigste Ausgangspunkt zum Verständnis der BCS-Theorie wird darin bestehen, die attraktive Wechselwirkung von Elektronen in einem periodischen Potential (Ionen-gitter) und einem Fermi-See (gebundene Elektronen im Gitter) nachzuvollziehen. Hierzu sind einige Näherungen auf den Hamiltonian des supraleitenden Festkörpers anzuwenden, der generell folgende Gestalt hat:

$$H = H_e + H_{Ion} + H_{e-Ion}$$

$$= \sum_i \frac{\vec{p}_i^2}{2m} + \frac{1}{2}c \sum_{i \neq j} \frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \quad (4.1)$$

$$+ \sum_m \frac{\vec{p}_m^2}{2M} + \frac{1}{2} \sum_{m \neq m'} V_{Ion}(\vec{R}_m - \vec{R}_{m'}) \quad (4.2)$$

$$+ \sum_{i,m} V_{el,Ion}(\vec{r}_i - \vec{R}_m) \quad (4.3)$$

Der Ausdruck 4.1 umfasst die kinetische Energie der Elektronen (Masse m) und die Coulomb-Abstoßung zwischen den Elektronen. Der Faktor $\frac{1}{2}$ dient zur Vermeidung von Doppelzählungen und c ist die Kopplungskonstante der e-e-Wechselwirkung.

In 4.2 ist zunächst auch wieder die kinetische Energie der Rumpfatome und zusätzlich die Wechselwirkung V_{Ion} der Rumpfatome untereinander vertreten.

Schließlich taucht noch die e-Gitter-Wechselwirkung $V_{el,Ion}$ in Term 4.3 auf.

Im ersten Schritt wird 4.2 genähert. Hierzu macht man sich zunutze, dass die Rumpfatome durch die Gitterwechselwirkungen grundsätzlich jeweils eine ausgezeichnete Ruhelage $\vec{R}_m^{(0)}$ haben. Verschiedenste Störungen des Gitters führen dann zu einer kleinen Abweichung \vec{u}_m von dieser Ruhelage, so dass sich für die Lage des m -ten Gitteratoms folgender Ausdruck ergibt:

$$\vec{R}_m = \vec{R}_m^{(0)} + \vec{u}_m$$

Die hierin implizierte harmonische Näherung erlaubt eine Reihenentwicklung des Wechselwirkungspotentials.

$$V_{Ion}(\vec{R}_m - \vec{R}_{m'}) = V_{Ion}(\vec{R}_m^{(0)} - \vec{R}_{m'}^{(0)} + \vec{u}_m - \vec{u}_{m'})$$

$$\approx V_{Ion}(\vec{R}_m^{(0)} - \vec{R}_{m'}^{(0)}) + (\vec{u}_m - \vec{u}_{m'}) \cdot \nabla_{\vec{R}} V_{Ion}(\vec{R}) \Big|_{\vec{R}=\vec{R}_m^{(0)}-\vec{R}_{m'}^{(0)}}$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{\nu,\mu=1}^3 (u_m^\nu - u_{m'}^\nu)(u_m^\mu - u_{m'}^\mu) \frac{\partial^2 V_{Ion}(\vec{R})}{\partial R_m^\nu \partial R_{m'}^\mu} \Big|_{\vec{R}=\vec{R}_m^{(0)}-\vec{R}_{m'}^{(0)}} \quad (4.4)$$

Der zweite Summand ist Null, da die Ableitung des Potentials an der Gleichgewichtslage ausgewertet wird. Bei der Berechnung dieser gekoppelten harmonischen Oszillatoren stößt man auf Normalmoden mit Wellenvektor \vec{q} und Winkeldispersion $\omega_\lambda(\vec{q})$. Bei der Herleitung des attraktiven Potentials spielen nur die akustischen Phononen ($\omega(\vec{q} \rightarrow 0) = 0$) eine entscheidende Rolle, weswegen nur diese im Folgenden betrachtet werden sollen. Hierbei deutet λ die Unterscheidung der jeweiligen Moden aufgrund ihrer Polarisation an: Es existieren jeweils zwei transversale Zweige und ein longitudinaler Zweig.

In der Impulsdarstellung lautet 4.2 damit:

$$H_{Ion} \rightarrow H_{Phon} = \frac{1}{2M} \left(\sum_{\lambda, \vec{q}} \vec{p}_{\lambda, \vec{q}} \vec{p}_{\lambda, -\vec{q}} + M^2 \omega_{\lambda}^2(\vec{q}) \vec{u}_{\lambda, \vec{q}} \vec{u}_{\lambda, -\vec{q}} \right)$$

mit Fouriertransformation: $\vec{u}_m = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\lambda, \vec{q}} \sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega_{\lambda}^2(\vec{q})}} \vec{e}_{\lambda}(\vec{q}) e^{i\vec{q}\vec{R}_m^{(0)}} (b_{\lambda, \vec{q}} + b_{\lambda, -\vec{q}}^{\dagger})$ (4.5)

\vec{e}_{λ} ist der Polarisationsvektor und N gibt die Anzahl der Gitteratome an. Mittels Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren kann dies in einen einfachen Ausdruck umgeschrieben werden:

$$H_{Phon} = \sum_{\lambda, \vec{q}} \hbar \omega_{\lambda}(\vec{q}) \left(b_{\lambda, \vec{q}}^{\dagger} b_{\lambda, \vec{q}} + \frac{1}{2} \right)$$

Die ionische Wechselwirkung lässt sich also aufgrund der harmonischen Näherung in der Impulsdarstellung als Überlagerung unabhängiger harmonischer Oszillatoren mit Wellenvektor \vec{q} umschreiben.

Analog lässt sich die e-Ion-Wechselwirkung aus 4.3 mittels Taylor-Entwicklung vereinfachen, wobei für den i-m-ten Term gilt:

$$V_{el-Ion}(\vec{r}_i - \vec{R}_m) = V_{el-Ion}(\vec{r}_i - \vec{R}_m^{(0)} - \vec{u}_m) \\ \approx V_{el-Ion}(\vec{r}_i - \vec{R}_m^{(0)}) - \vec{u}_m \nabla_{\vec{r}} V_{el-Ion}(\vec{r})|_{\vec{r}=\vec{r}_i - \vec{R}_m^{(0)}}$$

Der erste Summand beschreibt die Wechselwirkung der Elektronen mit einem statischen periodischen Gitter (wenn die Summe über i,m ergänzt werden würde). Aus diesem Grund soll dieser Term erst bei der Diskussion von 4.1 wieder aufgegriffen werden. In der Impulsdarstellung der zweiten Quantisierung lautet der verbleibende Term:

$$V_{el-Ion} = \sum_{\vec{k}, \vec{k}', \sigma} (\nabla_{\vec{r}} V_{el-Ion}(\vec{r})|_{\vec{r}=\vec{r}_i - \vec{R}_m^{(0)}})_{\vec{k}, \vec{k}'} c_{\vec{k}', \sigma}^{\dagger} c_{\vec{k}, \sigma}$$

mit: $(\nabla_{\vec{r}} V_{el-Ion}(\vec{r})|_{\vec{r}=\vec{r}_i - \vec{R}_m^{(0)}})_{\vec{k}, \vec{k}'} = \frac{1}{\nu} \int d^3 r e^{i(\vec{k} - \vec{k}')\vec{r}} (\nabla_{\vec{r}} V_{el-Ion}(\vec{r})|_{\vec{r}=\vec{r}_i - \vec{R}_m^{(0)}})$

ν : Volumen der Einheitszelle

Durch partielle Integration des Matrixelements erhält man:

$$-i(\vec{k} - \vec{k}') \frac{1}{\nu} \int d^3 r e^{i(\vec{k} - \vec{k}')\vec{r}} V_{el-Ion}(\vec{r})|_{\vec{r}=\vec{r}_i - \vec{R}_m^{(0)}} \quad | \text{Fourier-Transformation} \\ = i(\vec{k}' - \vec{k}) e^{i(\vec{k} - \vec{k}')\vec{R}_m^{(0)}} \frac{1}{\nu} V_{el-Ion}(\vec{k} - \vec{k}')$$

Setzt man das errechnete Matrixelement wieder ein und verwendet für \vec{u}_m die Fouriertransformierte 4.5, so gelangt man zu:

$$H_{e-Phon} = \frac{-i}{\nu} \sum_{\sigma, m, \vec{k}, \vec{k}', \lambda, \vec{q}} \sqrt{\frac{1}{NM}} \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_{\lambda}(\vec{q})}} \vec{e}_{\lambda}(\vec{q}) e^{i\vec{q}\vec{R}_m^{(0)}} (b_{\lambda, \vec{q}} + b_{\lambda, -\vec{q}}^{\dagger}) c_{\vec{k}', \sigma}^{\dagger} c_{\vec{k}, \sigma} (\vec{k}' - \vec{k}) \\ \cdot e^{i(\vec{k} - \vec{k}')\vec{R}_m^{(0)}} V_{el-Ion}(\vec{k} - \vec{k}')$$

Die Summe über m kann einfach ausgeführt werden, wobei aufgrund der Periodizität des Gitters gilt:

$$\sum_m e^{i(\vec{q}+\vec{k}-\vec{k}')R_m^{(0)}} = N \sum_{\vec{G}} \delta_{\vec{q}+\vec{k}-\vec{k}',\vec{G}}$$

Im Argument des Kronecker- δ sollen Umklapp-Prozesse in die erste Brillouin-Zone vernachlässigt werden ($\vec{G} = 0$), was bedeutet, dass nur die Effekte in der ersten Brillouin-Zone eine Rolle spielen sollen. Diese Annahme impliziert longitudinale Polarisation, da der Beitrag aus $\vec{k} + \vec{q} = \vec{k}'$ nur dann ungleich Null ist, wenn $\vec{e}_\lambda(\vec{q}) \parallel \vec{q}$ ist. Damit ergibt sich für H_{e-Ion} :

$$\begin{aligned} H_{e-Phon} &= \frac{-i}{\nu} \sqrt{N} \sum_{\vec{k},\sigma,\vec{q}} \sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega_\lambda(\vec{q})}} \vec{e}_\lambda(\vec{q}) \vec{q} V(-\vec{q}) (b_{\vec{q}} + b_{-\vec{q}}^\dagger) c_{\vec{k}+\vec{q},\sigma}^\dagger c_{\vec{k},\sigma} \\ &\equiv \sum_{\vec{k},\sigma,\vec{q}} M_{\vec{q}} (b_{\vec{q}} + b_{-\vec{q}}^\dagger) c_{\vec{k}+\vec{q},\sigma}^\dagger c_{\vec{k},\sigma} \end{aligned} \quad (4.6)$$

$$\text{mit } M_{\vec{q}} \equiv \frac{-i}{\nu} \sqrt{N} \sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega_\lambda(\vec{q})}} \vec{e}_\lambda(\vec{q}) \vec{q} V(-\vec{q}) \quad (4.7)$$

Damit der Ausdruck weiterhin hermitesch ist, muss $\omega_{\vec{q}} = \omega_{-\vec{q}}^*$ gelten.

Physikalisch wird die Wechselwirkung zwischen den Elektronen und dem Gitter nun also durch elastische Stöße zwischen Elektronen und Phononen modelliert.

Der erste Term in 4.6 ist die mathematische Formulierung einer elastischen Wechselwirkung zwischen einem einfallenden Elektron mit Wellenvektor \vec{k} und Spin σ , das ein Phonon mit Wellenvektor \vec{q} absorbiert und entsprechend mit Wellenvektor $\vec{k} + \vec{q}$ und Spin σ fortbesteht. Der zweite Term beschreibt die Alternative, dass ein Elektron mit Wellenvektor \vec{k} und Spin σ ein Phonon mit Wellenvektor $-\vec{q}$ emittiert und entsprechend als Elektron mit Wellenvektor $\vec{k} - \vec{q}$ und Spin σ weiterexistiert.

Die Elektron-Elektron-Wechselwirkung wird in Hartree-Fock-Näherung die Form des gesamten Hamiltonians nicht ändern und kann deshalb in eine effektive Masse absorbiert werden. Fügt man die bisherigen Näherungen zusammen, so erhält man unter Vernachlässigung der reinen Elektron-Elektron-Wechselwirkung:

$$\begin{aligned} H &= H_0 + H_{e-Phon} \quad (4.8) \\ \text{wobei } H_0 &\equiv \sum_{\vec{k},\sigma} \epsilon_{\vec{k}} c_{\vec{k},\sigma}^\dagger c_{\vec{k},\sigma} + \sum_{\vec{q}} \hbar\omega(\vec{q}) (b_{\vec{q}} + b_{-\vec{q}}^\dagger) \end{aligned}$$

D.h. H_0 ist der Hamilton-Operator der freien Elektronen (Energie: $\epsilon_{\vec{k}}$) und Phononen (Energie: $\hbar\omega(\vec{q})$).

Der nächste Schritt besteht darin, eine unitäre Transformation zu finden, die die Elektronen-Phononen-Wechselwirkung möglichst entkoppelt, so dass die e-Phon-Wechselwirkung eine einfachere Gestalt annimmt. Der Transformationsoperator U soll als Reihe der Form $U = e^S$ geschrieben werden.

$$H' = e^{-S} H e^S$$

$$\text{Unitarität: } (e^{-S})^\dagger (e^{-S}) = 1$$

$$S^\dagger = -S$$

Der Operator S ist also antihermitesch. Die Transformation wird so gewählt werden, dass sie proportional zu $M_{\vec{q}}$ ist, d.h. innerhalb einer Reihenentwicklung können die Terme der Ordnung $O(M^3(\vec{q}))$ vernachlässigt werden:

$$\begin{aligned}
 H' &\approx \left(1 - S + \frac{1}{2}S^2\right) H \left(1 + S + \frac{1}{2}S^2\right) \\
 &= H + [H, S] + \frac{1}{2}[[H, S], S] \quad |4.8 \\
 &= H_0 + \underbrace{H_{e-Phon} + [H_0, S]}_{\stackrel{!}{=} 0} + \underbrace{[H_{e,Phon}, S]}_{\Rightarrow} + \frac{1}{2}[[H_0, S], S] + \frac{1}{2}[[H_{e,Phon}, S], S] \\
 &\quad \quad \stackrel{4.9}{=} O(M_{\vec{q}}^3)
 \end{aligned}$$

Als Ansatz zur Realisierung dieser Forderung dient eine Reihe mit Koeffizienten $\alpha_{\vec{k},\vec{q},\sigma}, \beta_{\vec{k},\vec{q},\sigma}$:

$$0 = H_{e-Phon} + [H_0, S] \quad | \text{Ansatz: } S = \sum_{\vec{k},\vec{q},\sigma} M_{\vec{q}} \left(\alpha_{\vec{k},\vec{q},\sigma} b_{\vec{q}} + \beta_{\vec{k},\vec{q},\sigma} b_{-\vec{q}}^\dagger \right) c_{\vec{k}+\vec{q},\sigma}^\dagger c_{\vec{k},\sigma} \quad (4.9)$$

$$\Rightarrow 1 = \alpha_{\vec{k},\vec{q}} \left(\epsilon_{\vec{k}} - \epsilon_{\vec{k}+\vec{q}} + \hbar\omega(\vec{q}) \right) \quad (4.10)$$

$$1 = \beta_{\vec{k},\vec{q}} \left(\epsilon_{\vec{k}} - \epsilon_{\vec{k}+\vec{q}} - \hbar\omega(\vec{q}) \right) \quad (4.11)$$

$$\Rightarrow S = \sum_{\vec{k},\vec{q},\sigma} M_{\vec{q}} \left(\frac{1}{\epsilon_{\vec{k}} - \epsilon_{\vec{k}+\vec{q}} + \hbar\omega(\vec{q})} b_{\vec{q}} + \frac{1}{\epsilon_{\vec{k}} - \epsilon_{\vec{k}+\vec{q}} - \hbar\omega(\vec{q})} b_{-\vec{q}}^\dagger \right) c_{\vec{k}+\vec{q},\sigma}^\dagger c_{\vec{k},\sigma} \quad (4.12)$$

Dadurch ergibt sich für den transformierten Hamilton-Operator H' :

$$\begin{aligned}
 H' &= H_0 + \frac{1}{2}[H_{e-Phon}, S] \quad |4.12 \\
 &= H_0 + \frac{1}{2} \sum_{\vec{k},\vec{q},\sigma,\vec{k}',\vec{q}',\sigma'} M_{\vec{q}} M_{\vec{q}'} \left[\left(b_{\vec{q}} + b_{-\vec{q}}^\dagger \right) c_{\vec{k}+\vec{q},\sigma}^\dagger c_{\vec{k},\sigma}, \left(\alpha_{\vec{k}',\vec{q}'} b_{\vec{q}'} + \beta_{\vec{k}',\vec{q}'} b_{-\vec{q}'}^\dagger \right) c_{\vec{k}'+\vec{q}',\sigma'}^\dagger c_{\vec{k}',\sigma'} \right]
 \end{aligned}$$

In diesem Ausdruck treten vier verschiedene Kommutatoren der phononischen Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren auf:

$$b_{\vec{q}} b_{\vec{q}'} \quad b_{-\vec{q}}^\dagger b_{\vec{q}'} \quad b_{\vec{q}} b_{-\vec{q}'}^\dagger \quad b_{-\vec{q}}^\dagger b_{-\vec{q}'}^\dagger \quad (4.13)$$

Es sei angenommen, dass keine Mehrfachstreuungen stattfinden, so dass der erste und letzte Term verschwinden. Die verbliebenen Terme können mittels der Kommutatorbeziehung für bosonische Vernichtungs- und Erzeugungsoperatoren $[b_{-\vec{q}}^\dagger, b_{\vec{q}'}] = -\delta_{-\vec{q},\vec{q}'}$

verrechnet werden, so dass wegen 4.10 und 4.11 folgt:

$$\begin{aligned}
 \beta_{\vec{k},\vec{q}} - \alpha_{\vec{k},\vec{q}} &= \frac{2\hbar\omega(\vec{q})}{\left(\epsilon_{\vec{k}+\vec{q}} - \epsilon_{\vec{k}}\right)^2 - (\hbar\omega(\vec{q}))^2} \\
 \Rightarrow \frac{1}{2}[H_{e-Phon}, S] &\equiv V^{Fr} \\
 &= \sum_{\vec{k},\vec{q},\sigma,\vec{k}',\sigma'} V_{\vec{k},\vec{q}}^{Fr} c_{\vec{k}+\vec{q},\sigma}^\dagger c_{\vec{k}-\vec{q},\sigma'}^\dagger c_{\vec{k}',\sigma'} c_{\vec{k},\sigma} \\
 \text{mit } V_{\vec{q},\vec{k}}^{Fr} &\equiv \frac{|M_{\vec{q}}|^2 (\hbar\omega(\vec{q}))^2}{\left(\epsilon_{\vec{k}+\vec{q}} - \epsilon_{\vec{k}}\right)^2 - (\hbar\omega(\vec{q}))^2} \quad (4.14)
 \end{aligned}$$

Dies ist letztlich der Ausdruck für das Fröhlich-Potential, das die Wechselwirkung zwischen Elektronen und Gitter vollständig entkoppelt von den Termen der freien Elektronen und Phononen darstellt:

$$\begin{aligned}
 H &= H_e + V^{Fr} \\
 &= \sum_{\vec{k},\sigma} \epsilon_{\vec{k}} c_{\vec{k},\sigma}^\dagger c_{\vec{k},\sigma} + \sum_{\vec{q}} \hbar\omega(\vec{q})(b_{\vec{q}} + b_{-\vec{q}}^\dagger) + \sum_{\vec{k},\vec{q},\sigma,\vec{k}',\sigma'} V_{\vec{k},\vec{q}}^{Fr} c_{\vec{k}+\vec{q},\sigma}^\dagger c_{\vec{k}-\vec{q},\sigma'}^\dagger c_{\vec{k}',\sigma'} c_{\vec{k},\sigma} \quad (4.15)
 \end{aligned}$$

Die freien Phononen werden keinen physikalischen Beitrag leisten, da sie nicht an die Elektronen koppeln. Dementsprechend kann V^{Fr} die Wechselwirkung der Elektronen untereinander durch Kopplung an Phononen beschreiben.

Aus 4.14 kann leicht abgelesen werden, wann es zu einer Anziehung zwischen Elektronen kommen kann:

$$V_{\vec{k},\vec{q}}^{Fr} \begin{cases} < 0, & |\epsilon_{\vec{k}+\vec{q}} - \epsilon_{\vec{k}}| < \hbar\omega(\vec{q}) \leq \hbar\omega_D \\ > 0, & \text{sonst} \end{cases} \quad (4.16)$$

ω_D bezeichnet die Debye-Frequenz, die die maximale Schwingungsfrequenz eines Gitters angibt, bevor dieses auseinanderbricht.

Zusammenfassend lässt sich also sagen, dass Elektronen oberhalb der Fermioberfläche in einem periodischen Potential durch Streuprozesse mit Phononen ein attraktives Potential untereinander spüren können.

Anschaulich geschieht dies dadurch, dass ein Leitungselektron beim Durchqueren eines Kristallgitters die nächstliegenden Gitteratome anziehen wird und auch wenn das Elektron bereits nicht mehr da ist, eine effektive positive Ladung zurückbleibt, da die schweren Gitteratome länger brauchen, um in ihre Ruhelage zurückzukehren. Dies führt nun dazu, dass ein weiteres Elektron diese effektive positive Ladung spürt und in die Richtung des ersten Elektrons gezogen wird.

Die Bindungslängen können dabei einige hundert Nanometer betragen [2]. Die Bindungen sind also entsprechend schwach, so dass allzu große thermische Anregung diese Bindung wieder aufbrechen kann. Hier erkennt man bereits ein erstes Indiz, dass Supraleitung nur bei tiefen Temperaturen auftreten kann. Auf diesen Aspekt soll im Rahmen der BCS-Theorie näher eingegangen werden.

Mit den bisherigen Ergebnissen kann zudem der Isotopeneffekt erklärt werden. Der Isotopeneffekt wird beispielsweise bei Quecksilber [14],[15] beobachtet und stellt eine Relation zwischen der kritischen Temperatur T_c und dem Isotop eines jeweiligen Ma-

terials her: $T_c \propto \frac{1}{\sqrt{M}}$, wobei M die Massenzahl ist. Anhand von 4.7 und 4.14 erkennt man sehr gut, dass die Bindungsenergie der Elektronen-Paare invers proportional zur Masse der Gitteratome ist. Das bedeutet, dass schwerere Gitteratome eine höhere Bindungsenergie erzeugen, so dass die kritische Temperatur niedriger ist. Dies deckt sich qualitativ mit Abb. 4.1.

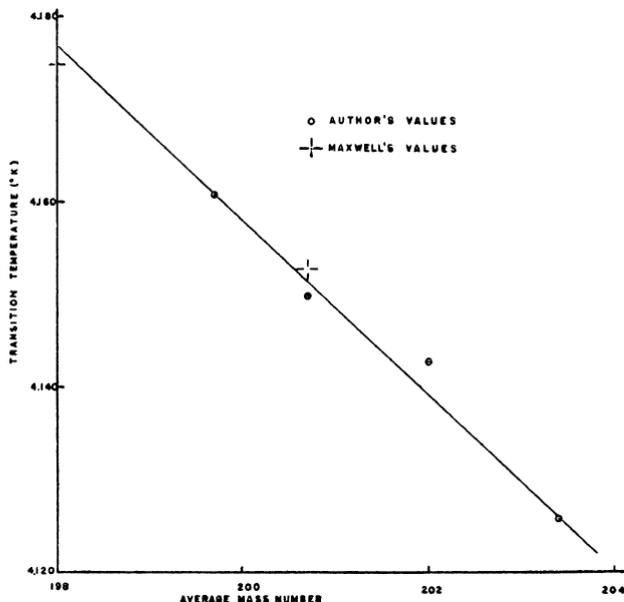


Abbildung 4.1: Isotopeneffekt: Auf der Ordinate ist die kritische Temperatur T_c von Quecksilber gegen die mittlere Massenzahl der Gitteratome im Quecksilbergitter abgetragen. Die Messungen zeigen, dass mit steigender Massenzahl eine niedrigere kritische Temperatur vorliegt. (aus [14])

Der Hamiltonian, der im Rahmen der BCS-Theorie verwendet wird, stellt eine nochmalige Vereinfachung des Fröhlich-Hamiltonians dar, weil aufgrund des schmalen Energiebereichs in 4.16 und der Annahme der Isotropie das Wechselwirkungspotential als konstant angenommen wird:

$$2V_{\vec{k},\vec{q}}^{Fr} \approx \begin{cases} -\frac{U}{\nu} & , |\epsilon_{\vec{k}+\vec{q}} - \epsilon_{\vec{k}}| < \hbar\omega(\vec{q}) \leq \hbar\omega_D \\ 0 & , \text{sonst} \end{cases} \quad (4.17)$$

Aus der Konstanz des Potentials folgt auch dessen Isotropie, weswegen bei der Kopplung der Elektronen (fermionische Statistik) nur die antisymmetrischen Singulett-Zustände in Frage kommen, d.h. $\sigma' = -\sigma$. Zudem gilt im Schwerpunktsystem des Cooperpaars: $\vec{k}' = -\vec{k}$. Damit wird aus 4.15 unter Vernachlässigung des freien Phononenbeitrags, der

Nach diesen Überlegungen wird nun die Schrödingergleichung dieses Systems aufgestellt und gelöst:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}(\Delta_1^2 + \Delta_2^2) + V(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \right] \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \left(\epsilon + 2\frac{\hbar k_F^2}{2m} \right) \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \quad (4.22)$$

Hierbei wurde die Energie des Elektronenpaares bezüglich der Fermi-Energie $\epsilon_F = \frac{\hbar k_F^2}{2m}$ angegeben, damit sich später leichter sagen lässt, ob ein gebundener oder ungebundener Zustand vorliegt. Das Potential ist durch 4.19 gegeben.

Einsetzen von 4.20 unter Verwendung der Fouriertransformation 4.21 führt zu:

$$\sum_{\vec{k}'} \left(\frac{\hbar^2}{2m} 2k'^2 + V \right) g(\vec{k}') e^{i\vec{k}\vec{\rho}} = (\epsilon + 2\epsilon_F) \sum_{\vec{k}'} g(\vec{k}') e^{i\vec{k}'\vec{\rho}} \quad | \cdot e^{-i\vec{k}\vec{\rho}} | \int d^3\rho$$

$$\frac{\hbar^2}{m} \int \sum_{\vec{k}'} e^{i(\vec{k}' - \vec{k})\vec{\rho}} g(\vec{k}') k'^2 d^3\rho + \int \sum_{\vec{k}'} V e^{i(\vec{k}' - \vec{k})\vec{\rho}} g(\vec{k}') d^3\rho = (\epsilon + 2\epsilon_F) \int \sum_{\vec{k}'} e^{i(\vec{k}' - \vec{k})\vec{\rho}} g(\vec{k}') d^3\rho$$

An dieser Stelle kann verwendet werden, dass die Terme $\int e^{i(\vec{k}' - \vec{k})\vec{\rho}} d^3\rho$ nur dann einen Beitrag leisten, wenn $\vec{k} = \vec{k}'$:

$$\frac{\hbar^2}{m} k^2 g(\vec{k}) + \sum_{\vec{k}'} g(\vec{k}') \frac{V}{\nu} = (\epsilon + 2\epsilon_F) g(\vec{k})$$

mit eingeschlossenen Volumen: $\int d^3\rho = \nu$

$$-\frac{V}{\nu} \sum_{\vec{k}'} g(\vec{k}') = \left(-\frac{\hbar^2}{m} k^2 + \epsilon + 2\epsilon_F \right) g(\vec{k})$$

$$g(\vec{k}) = -\frac{V}{\nu \left(-\frac{\hbar^2}{m} k^2 + \epsilon + 2\epsilon_F \right)} \sum_{\vec{k}'} g(\vec{k}') \quad | \sum_{\vec{k}}$$

$$\sum_{\vec{k}} g(\vec{k}) = \sum_{\vec{k}} \frac{V}{\nu \left(\frac{\hbar^2}{m} k^2 - \epsilon - 2\epsilon_F \right)} \sum_{\vec{k}'} g(\vec{k}')$$

$$1 = \sum_{\vec{k}} \frac{V}{\nu \left(\frac{\hbar^2}{m} k^2 - \epsilon - 2\epsilon_F \right)} \quad | \frac{\hbar^2}{2m} k^2 - \epsilon_F \equiv \xi$$

$$1 = \frac{V}{\nu} \sum_{\vec{k}} \frac{1}{2\xi - \epsilon} \quad | \frac{1}{\nu} \sum_{\vec{k}} \rightarrow \int_0^{\hbar\omega_D} n(\xi) d\xi$$

$n(\xi)$: Zustandsdichte

$$1 = V \int_0^{\hbar\omega_D} \frac{n(\xi)}{2\xi - \epsilon} d\xi$$

Die Zustandsdichte für Besetzungen oberhalb der Fermioberfläche wird bei den betrachteten niedrigen Temperaturen sehr klein sein, sodass $n(\xi)$ durch $n(0)$ abgeschätzt werden kann. Außerdem wird aus demselben Grund die Energie der Elektronen weit

unterhalb der Debye-Energie liegen.

$$\frac{1}{2}n(0)V \ln \left(\frac{\epsilon - 2\hbar\omega_D}{\epsilon} \right) = 1 \quad ||\epsilon| \ll \hbar\omega_D$$

$$\epsilon = -2\hbar\omega_D e^{-2/n(0)V} \quad (4.23)$$

Die Energie eines solchen Elektronenpaares (Cooper-Paar) ist negativ an der Fermienergie bemessen, d.h. das es handelt es sich um einen gebundenen Zustand, der auch für sehr schwache Wechselwirkung zwischen den Elektronen existiert.

Bezüglich des Energiespektrums der ungebundenen Elektronen entsteht eine Energielücke ϵ , die dafür sorgt, dass das Cooper-Paar keine Anregung durch Wechselwirkungen im Gitter erfahren kann, da die damit einhergehenden Energieabsorptionen zu gering sind (Abb. 4.2).

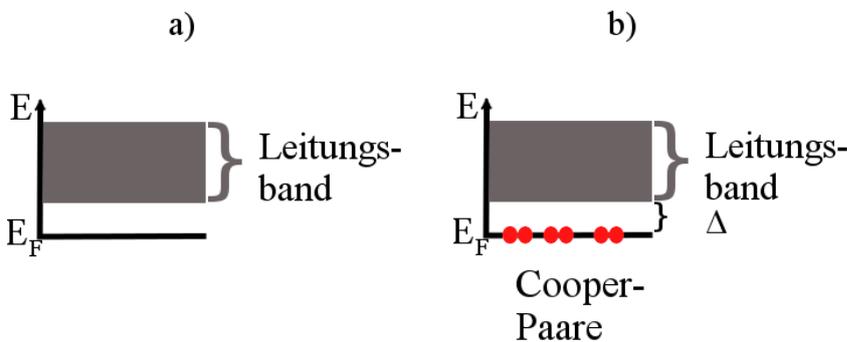


Abbildung 4.2: (a) Im Energiespektrum der normalleitenden Elektronen sind die möglichen Zustände sehr dicht beisammen, so dass viele Wechselwirkungen im Gitter den Ladungstransport abbremsen. (b) Im Supraleiter ist die Energie der Cooper-Paare herabgesetzt, sodass diese Wechselwirkungen verhindert werden und der Ladungstransport widerstandsfrei geschieht.

Im Resultat transportieren die Cooper-Paare ihre Ladung ohne jeglichen Widerstand. Auf diesem Ergebnis gründet sich nun die BCS-Theorie, die diese Ergebnisse auf ein N-Teilchen-System überträgt.

4.4. BCS-Grundzustand

Aufbauend auf dem Cooper-Problem wird nun ein System aus N Elektronen untersucht, die entsprechend zu N/2 Paaren koppeln. Um dies korrekt zu beschreiben, startet man mit einem Vielteilchenansatz, der ein Produkt von einzelnen Cooper-Paaren ist:

$$\psi_N = \psi(1, 2)\psi(3, 4) \cdots \psi(N - 1, N)$$

für $i \in \{1, \dots, N - 1\}$: $\psi(i, i + 1) = \Phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)\chi(\sigma_1, \sigma_2)$

Die $\psi(i, i+1)$ beschreiben jeweils ein Cooper-Paar, wobei die Schwerpunktswellenfunktion weggelassen wurde, da sie für den Zustand nur eine globale Phase darstellt. Zur Berücksichtigung des Pauliprinzips muss dieser Ausdruck mit dem Antisymmetrisierungsoperator A multipliziert werden (Bsp: $A\psi(1, 2) = \psi(1, 2) - \psi(2, 1)$).

$$\begin{aligned} \psi_N &= A[\psi(1, 2)\psi(3, 4) \cdots \psi(N-1, N)] \quad |4.21 \\ &= \sum_{\vec{k}_1} \cdots \sum_{\vec{k}_{N/2}} g_{\vec{k}_1} \cdots g_{\vec{k}_{N/2}} A[e^{i\vec{k}_1(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)} \cdots e^{i\vec{k}_{N/2}(\vec{r}_{N-1} - \vec{r}_N)}][\chi(\uparrow_1 \downarrow_2) \cdots \chi(\uparrow_{N-1} \downarrow_N)] \end{aligned}$$

$$\chi(\uparrow_i \downarrow_{i+1}) = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow_i \downarrow_{i+1}\rangle - |\downarrow_i \uparrow_{i+1}\rangle) \quad \text{:Singulett-Bildung}$$

In der Sprache der zweiten Quantisierung wird der Antisymmetrisierungsoperator implizit durch die Kommutationsrelationen der fermionischen Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren $c_{\vec{k}\sigma}, c_{\vec{k},\sigma}^\dagger$ eingebaut, weswegen nun die Ausdrücke auf diese Art geschrieben werden sollen.

$$\begin{aligned} A e^{i\vec{k}_i(\vec{r}_i - \vec{r}_{i+1})} \chi(\uparrow_i \downarrow_{i+1}) &\longrightarrow c_{\vec{k}_i \uparrow}^\dagger c_{-\vec{k}_i \downarrow}^\dagger |0\rangle \\ \Rightarrow \psi_N &= \sum_{\vec{k}_1} \cdots \sum_{\vec{k}_{N/2}} g_{\vec{k}_1} \cdots g_{\vec{k}_{N/2}} c_{\vec{k}_1 \uparrow}^\dagger c_{-\vec{k}_1 \downarrow}^\dagger \cdots c_{\vec{k}_{N/2} \uparrow}^\dagger c_{-\vec{k}_{N/2} \downarrow}^\dagger |0\rangle \quad (4.24) \end{aligned}$$

Die Kommutationsrelationen der fermionischen Erzeuger und Vernichter, wobei der Antikommutator durch $\{\cdot, \cdot\}$ gekennzeichnet wird, lauten:

$$\{c_{\vec{k}\sigma}^\dagger, c_{\vec{l}\sigma'}^\dagger\} = 0 \quad (4.25)$$

$$\{c_{\vec{k}\sigma}, c_{\vec{l}\sigma'}\} = 0 \quad (4.26)$$

$$\{c_{\vec{k}\sigma}^\dagger, c_{\vec{l}\sigma'}\} = \delta_{\vec{k}\vec{l}} \delta_{\sigma\sigma'} \quad (4.27)$$

Da der Umgang mit 4.24 sehr kompliziert wird, bedient man sich der Erfolge der Ginzburg-Landau- und London-Theorie und setzt als Grundzustandswellenfunktion einen kohärenten Zustand an. Dieser Ansatz soll mit ψ^{BCS} bezeichnet werden:

$$\begin{aligned} \psi^{BCS} &= c \exp \left(\sum_{\vec{k}} \alpha_{\vec{k}} c_{\vec{k}\uparrow}^\dagger c_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger \right) |0\rangle \\ &= c \prod_{\vec{k}} \exp \left(\alpha_{\vec{k}} c_{\vec{k}\uparrow}^\dagger c_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger \right) |0\rangle \quad \text{|Pauli-Prinzip} \\ &= c \prod_{\vec{k}} \left(1 + \alpha_{\vec{k}} c_{\vec{k}\uparrow}^\dagger c_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger \right) |0\rangle \\ &\equiv \prod_{\vec{k}} \left(u_{\vec{k}} + v_{\vec{k}} c_{\vec{k}\uparrow}^\dagger c_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger \right) |0\rangle \quad (4.28) \end{aligned}$$

Zur Normierung werden nun einige Operatoren definiert, die außerdem den Umgang mit dem BCS-Hamiltonian für den Grundzustand, wo alle Elektronen zu Cooper-Paaren

kondensiert sind, stark vereinfachen werden:

$$\begin{aligned} b_{\vec{k}}^\dagger &\equiv c_{\vec{k}\uparrow}^\dagger c_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger & b_{\vec{k}} &\equiv c_{-\vec{k}\downarrow} c_{\vec{k}\uparrow} \\ N &\equiv n_{\vec{k}\uparrow} + n_{-\vec{k}\downarrow} = 2b_{\vec{k}}^\dagger b_{\vec{k}} \end{aligned} \quad (4.29)$$

Die Operatoren b bzw b^\dagger sind Vernichter bzw. Erzeuger von Cooper-Paaren. N ist der Anzahloperator und kann dementsprechend auch als zwei Mal die Anzahl der Cooper-Paare geschrieben werden. Die Vertauschungsrelationen für b^\dagger, b ergeben sich aus 4.25, 4.26 und 4.27:

$$\begin{aligned} [b_{\vec{k}}, b_{\vec{k}'}^\dagger] &= [c_{-\vec{k}\downarrow} c_{\vec{k}\uparrow}^\dagger, c_{\vec{k}'\uparrow}^\dagger c_{-\vec{k}'\downarrow}^\dagger] \\ &= c_{-\vec{k}\downarrow} c_{\vec{k}\uparrow}^\dagger c_{\vec{k}'\uparrow}^\dagger c_{-\vec{k}'\downarrow}^\dagger - c_{\vec{k}'\uparrow}^\dagger c_{-\vec{k}'\downarrow}^\dagger c_{-\vec{k}\downarrow} c_{\vec{k}\uparrow}^\dagger && |4.26, 4.25 \\ &= \begin{cases} 0 & , \vec{k}' \neq \vec{k} \\ c_{-\vec{k}\downarrow} c_{\vec{k}\uparrow}^\dagger c_{\vec{k}\uparrow}^\dagger c_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger - c_{\vec{k}\uparrow}^\dagger c_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger c_{-\vec{k}\downarrow} c_{\vec{k}\uparrow}^\dagger, & \text{sonst} \end{cases} \end{aligned}$$

Der Fall $\vec{k} = \vec{k}'$ führt zu:

$$\begin{aligned} [b_{\vec{k}}, b_{\vec{k}}^\dagger] &= c_{-\vec{k}\downarrow} c_{\vec{k}\uparrow}^\dagger c_{\vec{k}\uparrow}^\dagger c_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger - c_{\vec{k}\uparrow}^\dagger c_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger c_{-\vec{k}\downarrow} c_{\vec{k}\uparrow}^\dagger && |4.27 \\ &= c_{-\vec{k}\downarrow} c_{\vec{k}\uparrow}^\dagger c_{\vec{k}\uparrow}^\dagger c_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger - c_{\vec{k}\uparrow}^\dagger (1 - c_{-\vec{k}\downarrow} c_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger) c_{\vec{k}\uparrow}^\dagger \\ &= c_{-\vec{k}\downarrow} c_{\vec{k}\uparrow}^\dagger c_{\vec{k}\uparrow}^\dagger c_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger - c_{\vec{k}\uparrow}^\dagger c_{\vec{k}\uparrow}^\dagger + c_{\vec{k}\uparrow}^\dagger c_{-\vec{k}\downarrow} c_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger c_{\vec{k}\uparrow}^\dagger \\ &= c_{-\vec{k}\downarrow} c_{\vec{k}\uparrow}^\dagger c_{\vec{k}\uparrow}^\dagger c_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger - n_{\vec{k}\uparrow} + c_{-\vec{k}\downarrow} c_{\vec{k}\uparrow}^\dagger c_{\vec{k}\uparrow}^\dagger c_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger \\ &= c_{-\vec{k}\downarrow} c_{\vec{k}\uparrow}^\dagger c_{\vec{k}\uparrow}^\dagger c_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger - n_{\vec{k}\uparrow} + c_{-\vec{k}\downarrow} (1 - c_{\vec{k}\uparrow} c_{\vec{k}\uparrow}^\dagger) c_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger \\ &= -n_{\vec{k}\uparrow} + c_{-\vec{k}\downarrow} c_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger \\ &= 1 - n_{\vec{k}\uparrow} - n_{-\vec{k}\downarrow} \end{aligned} \quad (4.30)$$

Die neu definierten Operatoren 4.29 können verwendet werden, um den kürzlich hergeleiteten BCS-Hamiltonian 4.18, der bisher mit den fermionischen Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren geschrieben wurde, umzuschreiben.

$$\begin{aligned} H^{BCS} &= 2 \underbrace{\sum_{\vec{k}} \epsilon_{\vec{k}} b_{\vec{k}}^\dagger b_{\vec{k}}}_{= H_0} - \underbrace{\sum_{\vec{k}', \vec{k}} \tilde{V}_{\vec{k}', \vec{k}-\vec{k}'}^{Fr} b_{\vec{k}}^\dagger b_{\vec{k}'}}_{= H_{WW}} \\ \tilde{V}_{\vec{k}', \vec{k}-\vec{k}'}^{Fr} &\equiv -2V_{\vec{k}', \vec{k}-\vec{k}'}^{Fr} \end{aligned}$$

Das Fröhlich-Potential wurde hier umgeschrieben, um herauszustellen, dass der Hamiltonian nun speziell für die Cooper-Paare verwendet werden soll, d.h. in dem Fall, wo es ein attraktives Potential zwischen zwei Elektronen gibt.

An dieser Stelle besteht noch das Problem, dass die Teilchenzahl in $|\psi^{BCS}\rangle$ nicht festgelegt werden kann. Stattdessen kann aber die mittlere Anzahl an Cooper-Paaren durch das chemische Potential μ adjustiert werden:

Die mittlere Anzahl der Cooper-Paare soll durch $\bar{N} \equiv \langle \psi^{BCS} | N | \psi^{BCS} \rangle$ gegeben sein.

$$H^{BCS} \longrightarrow H^{BCS} - \mu N = 2 \underbrace{\sum_{\vec{k}} \xi_{\vec{k}} b_{\vec{k}}^\dagger b_{\vec{k}}}_{H_0} - \underbrace{\sum_{\vec{k}', \vec{k}} \tilde{V}_{\vec{k}', \vec{k}}^{Fr} b_{\vec{k}}^\dagger b_{\vec{k}'}}_{H_{WW}} \quad (4.31)$$

$$\xi \equiv \epsilon_k - \mu$$

Bei der Normierung von 4.28 empfiehlt es sich zunächst nur mit den Koeffizienten $\alpha_{\vec{k}}$ zu arbeiten und die Koeffizienten $u_{\vec{k}}, v_{\vec{k}}$ später wieder zu identifizieren.

$$\begin{aligned} |\psi^{BCS}\rangle &= \prod_{\vec{k}} \left(1 + \alpha_{\vec{k}} b_{\vec{k}}^\dagger\right) |0\rangle \\ \rightarrow \langle \psi^{BCS} | \psi^{BCS} \rangle &= \prod_{\vec{k}, \vec{k}'} \langle 0 | \left(1 + \alpha_{\vec{k}}^* b_{\vec{k}}\right) \left(1 + \alpha_{\vec{k}'} b_{\vec{k}'}^\dagger\right) |0\rangle & |b|0\rangle = \langle 0|b^\dagger = 0 \\ &= \prod_{\vec{k}, \vec{k}'} \langle 0 | \left(1 + \alpha_{\vec{k}}^* \alpha_{\vec{k}'} b_{\vec{k}} b_{\vec{k}'}^\dagger\right) |0\rangle & [4.30 \\ &= \prod_{\vec{k}, \vec{k}'} \langle 0 | \left[1 + \alpha_{\vec{k}}^* \alpha_{\vec{k}'} \left(1 - n_{\vec{k}\uparrow} - n_{-\vec{k}\downarrow}\right) \delta_{\vec{k}, \vec{k}'} + b_{\vec{k}}^\dagger b_{\vec{k}'}\right] |0\rangle & |b|0\rangle = n|0\rangle \\ &= \prod_{\vec{k}} \left(1 + \alpha_{\vec{k}}^* \alpha_{\vec{k}}\right) \end{aligned}$$

Der normierte Zustand lautet also:

$$\begin{aligned} |\psi^{BCS}\rangle &= \prod_{\vec{k}} \frac{\left(1 + \alpha_{\vec{k}} b_{\vec{k}}^\dagger\right)}{\left(1 + |\alpha_{\vec{k}}|^2\right)^{1/2}} |0\rangle & [\text{Koeffizientenvergleich 4.28}] \\ \Rightarrow u_{\vec{k}} &= \frac{1}{\left(1 + |\alpha_{\vec{k}}|^2\right)^{1/2}} \\ v_{\vec{k}} &= \frac{\alpha_{\vec{k}}}{\left(1 + |\alpha_{\vec{k}}|^2\right)^{1/2}} \\ \Rightarrow 1 &= |u_{\vec{k}}|^2 + |v_{\vec{k}}|^2 \quad \forall \vec{k} & [4.32] \end{aligned}$$

Die letzte Gleichung ist die gesuchte Normierungsbedingung. Hiermit sind die Koeffizienten $u_{\vec{k}}, v_{\vec{k}}$ noch nicht vollständig festgelegt, was wiederum dazu verwendet wird, um die mittlere Gesamtenergie zu minimieren, was gerade dem Grundzustand des Systems entspricht. Die Diskussion kann nun erfolgen.

Mit diesen Ergebnissen kann nun der Erwartungswert der Energie im Grundzustand berechnet werden:

$$\langle \psi^{BCS} | H | \psi^{BCS} \rangle = \langle \psi^{BCS} | H_0 | \psi^{BCS} \rangle + \langle \psi^{BCS} | H_{WW} | \psi^{BCS} \rangle$$

Erster Summand:

$$\begin{aligned} \langle \psi^{BCS} | H_0 | \psi^{BCS} \rangle &= \prod_{\vec{k}, \vec{k}'} \langle 0 | (u_{\vec{k}}^* + v_{\vec{k}}^* b_{\vec{k}}) 2 \sum_{\vec{l}} \xi_{\vec{l}} b_{\vec{l}}^\dagger b_{\vec{l}} (u_{\vec{k}} + v_{\vec{k}} b_{\vec{k}}^\dagger) |0\rangle \\ &= 2 \sum_{\vec{l}} \prod_{\vec{k}, \vec{k}'} \xi_{\vec{l}} \langle 0 | [u_{\vec{k}}^* u_{\vec{k}'}^* b_{\vec{l}}^\dagger b_{\vec{l}} + u_{\vec{k}}^* v_{\vec{k}'}^* b_{\vec{l}}^\dagger b_{\vec{l}} b_{\vec{k}}^\dagger + u_{\vec{k}} + v_{\vec{k}} b_{\vec{k}}^\dagger] b_{\vec{l}} + v_{\vec{k}}^* v_{\vec{k}'}^* b_{\vec{k}} b_{\vec{l}}^\dagger b_{\vec{l}} b_{\vec{k}}^\dagger] |0\rangle \end{aligned}$$

Der erste Term verschwindet, da ein Vernichter auf das Vakuum angewendet wird. Bei der Auswertung des zweiten und dritten Terms fällt auf, dass die Anzahl der Erzeuger nicht derjenigen der Vernichter entspricht, so dass hier das Skalarprodukt zwischen zwei orthogonalen Zuständen ausgerechnet wird und somit kein Beitrag entsteht. Es bleibt:

$$\langle \psi^{BCS} | H_0 | \psi^{BCS} \rangle = 2 \sum_{\vec{l}} \prod_{\vec{k}, \vec{k}'} \xi_{\vec{l}} \langle 0 | v_{\vec{k}}^* v_{\vec{k}'} b_{\vec{k}}^\dagger b_{\vec{l}}^\dagger b_{\vec{l}} b_{\vec{k}'}^\dagger | 0 \rangle$$

Dieser Ausdruck ist nur dann von Null verschieden, wenn alle Indizes gleich sind, da auch hier ansonsten orthogonale Zustände erzeugt werden.

$$\langle \psi^{BCS} | H_0 | \psi^{BCS} \rangle = 2 \sum_{\vec{k}} \xi_{\vec{k}} |v_{\vec{k}}|^2$$

Die Auswertung von $\langle \psi^{BCS} | H_{WW} | \psi^{BCS} \rangle$ läuft genau analog, weswegen letztlich folgt:

$$\langle \psi^{BCS} | H_{WW} | \psi^{BCS} \rangle = \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} u_{\vec{k}}^* v_{\vec{k}} u_{\vec{k}'} v_{\vec{k}'}^* \tilde{V}_{\vec{k}', \vec{k}-\vec{k}'}^{Fr}$$

Insgesamt:

$$\langle \psi^{BCS} | H | \psi^{BCS} \rangle = 2 \sum_{\vec{k}} \xi_{\vec{k}} |v_{\vec{k}}|^2 + \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} u_{\vec{k}}^* v_{\vec{k}} u_{\vec{k}'} v_{\vec{k}'}^* \tilde{V}_{\vec{k}', \vec{k}-\vec{k}'}^{Fr} \quad (4.33)$$

Die Koeffizienten $u_{\vec{k}}, v_{\vec{k}}$ seien reell, so dass zur Erfüllung der Normierungsbedingung 4.32 die Koeffizienten $|u_{\vec{k}}| = \cos \theta_{\vec{k}}$ und $|v_{\vec{k}}| = \sin \theta_{\vec{k}}$ gewählt werden können. Damit gilt für den Erwartungswert der Energie unter Verwendung von $\sin 2x = 2 \sin x \cos x$:

$$\langle \psi^{BCS} | H | \psi^{BCS} \rangle = 2 \sum_{\vec{k}} \xi_{\vec{k}} \sin^2 \theta_{\vec{k}} + \frac{1}{4} \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} \tilde{V}_{\vec{k}', \vec{k}-\vec{k}'}^{Fr} \sin 2\theta_{\vec{k}} \sin 2\theta_{\vec{k}'}$$

Das Minimum der Energie kann durch Differentiation nach $\theta_{\vec{l}}$ bestimmt werden:

$$0 \stackrel{!}{=} 2\xi_{\vec{l}} \sin 2\theta_{\vec{l}} + \cos 2\theta_{\vec{l}} \sum_{\vec{k}'} \tilde{V}_{\vec{k}', \vec{l}-\vec{k}'}^{Fr} \sin 2\theta_{\vec{k}'} \sin 2\theta_{\vec{k}'} \\ \xi_{\vec{l}} \tan 2\theta_{\vec{l}} = -\frac{1}{2} \sum_{\vec{k}'} \tilde{V}_{\vec{k}', \vec{l}-\vec{k}'}^{Fr} \sin 2\theta_{\vec{k}'} \sin 2\theta_{\vec{k}'} \quad (4.34)$$

Die Energielücke, die zwischen supraleitenden Cooper-Paaren und normalleitenden Elektronen besteht, wird folgendermaßen definiert:

$$\text{Def(Energielücke): } \Delta_{\vec{k}}(T=0) \equiv - \sum_{\vec{k}'} \tilde{V}_{\vec{k}', \vec{k}-\vec{k}'}^{Fr} u_{\vec{k}'} v_{\vec{k}'} \quad (4.35)$$

$$= -\frac{1}{2} \sum_{\vec{k}'} \tilde{V}_{\vec{k}', \vec{k}-\vec{k}'}^{Fr} \sin 2\theta_{\vec{k}'}$$

$$\tilde{\epsilon}_{\vec{k}} \equiv \sqrt{\xi_{\vec{k}}^2 + \Delta_{\vec{k}}^2} \quad (4.36)$$

$\tilde{\epsilon}_{\vec{k}}$ ist das Anregungsspektrum des Supraleiters, das entsprechend eine etwas höhere Energie als die normalleitenden Elektronen aufweisen. Dies wird im nächsten Abschnitt

über die Bogoliubov-Valatin-Transformation genauer erläutert. Setzt man diese Definitionen in 4.34 ein, so erhält man:

$$\begin{aligned}\tan 2\theta_{\vec{l}} &= \frac{\Delta_{\vec{l}}}{\xi_{\vec{l}}} \\ &= \frac{2 \sin \theta_{\vec{l}} \cos \theta_{\vec{l}}}{\cos^2 \theta_{\vec{l}} - \sin^2 \theta_{\vec{l}}} \\ \xrightarrow{4.36} \sin 2\theta_{\vec{l}} &= \frac{\Delta_{\vec{l}}}{\tilde{\epsilon}_{\vec{l}}} \\ \cos 2\theta_{\vec{l}} &= \frac{\xi_{\vec{l}}}{\tilde{\epsilon}_{\vec{l}}}\end{aligned}$$

Die Umformung nach $u_{\vec{k}}, v_{\vec{k}}$ geschieht durch die Lösung des folgenden Gleichungssystems.

$$\begin{aligned}\sin 2\theta_{\vec{k}} &= 2u_{\vec{k}}v_{\vec{k}} \\ &= \frac{\Delta_{\vec{k}}}{\tilde{\epsilon}_{\vec{k}}}\end{aligned}\quad (4.37)$$

$$\begin{aligned}\cos 2\theta_{\vec{k}} &= u_{\vec{k}}^2 - v_{\vec{k}}^2 \\ &= \frac{\xi_{\vec{k}}}{\tilde{\epsilon}_{\vec{k}}}\end{aligned}\quad (4.38)$$

Quadriert man 4.37 und eliminiert durch 4.38 einen der Koeffizienten, z.B. $u_{\vec{k}}$, so verbleibt:

$$\begin{aligned}\begin{cases} 4u_{\vec{k}}^2v_{\vec{k}}^2 &= \Delta_{\vec{k}}^2/\tilde{\epsilon}_{\vec{k}}^2 \\ u_{\vec{k}}^2 &= \xi_{\vec{k}}/\tilde{\epsilon}_{\vec{k}} + v_{\vec{k}}^2 \end{cases} \\ \rightarrow 4(\xi_{\vec{k}}/\tilde{\epsilon}_{\vec{k}} + v_{\vec{k}}^2)v_{\vec{k}}^2 &= \Delta_{\vec{k}}^2/\tilde{\epsilon}_{\vec{k}}^2 \\ v_{\vec{k}}^2 &= -\frac{\xi_{\vec{k}}}{2\tilde{\epsilon}_{\vec{k}}} \pm \sqrt{\frac{\xi_{\vec{k}}^2}{4\tilde{\epsilon}_{\vec{k}}^2} + \frac{\Delta_{\vec{k}}^2}{\tilde{\epsilon}_{\vec{k}}^2}} \quad |4.36 \\ &= \pm \frac{1}{2} - \frac{\xi_{\vec{k}}}{2\tilde{\epsilon}_{\vec{k}}} \quad | \text{nur pos. Vorzeichen wegen Quadrat} \\ &= \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\xi_{\vec{k}}}{\tilde{\epsilon}_{\vec{k}}}\right) \quad (4.39) \\ \Rightarrow u_{\vec{k}}^2 &= \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\xi_{\vec{k}}}{\tilde{\epsilon}_{\vec{k}}}\right) \quad (4.40)\end{aligned}$$

Setzt man diese beiden Ausdrücke in die Definition der Energielücke 4.35 ein, so gelangt man zu einer Gleichung für die Energielücke, die selbstkonsistent gelöst werden muss:

$$\begin{aligned}\Delta_{\vec{k}} &\equiv - \sum_{\vec{k}'} \tilde{V}_{\vec{k}', \vec{k}-\vec{k}'}^{Fr} \frac{1}{2} \sqrt{1 - \frac{\xi_{\vec{k}'}}{\tilde{\epsilon}_{\vec{k}'}}} \quad |4.36 \\ &= - \sum_{\vec{k}'} \tilde{V}_{\vec{k}', \vec{k}-\vec{k}'}^{Fr} \frac{\Delta_{\vec{k}'}}{2\tilde{\epsilon}_{\vec{k}'}}\end{aligned}$$

$$= - \sum_{\vec{k}'} \tilde{V}_{\vec{k}', \vec{k}-\vec{k}'}^{Fr} \frac{\Delta_{\vec{k}'}}{2\sqrt{\xi_{\vec{k}'}^2 + \Delta_{\vec{k}'}^2}} \quad (4.41)$$

Zur Lösung von 4.41 setzt man den expliziten Ausdruck für das attraktive Potential 4.19 ein. Dabei muss beachtet werden, dass die \vec{k} -Abhängigkeit mit dem Potential verschwindet und dass $\Delta_{\vec{k}}$ die Unstetigkeit bei $\hbar\omega_D$ erbt:

$$\Delta_{\vec{k}} = \begin{cases} \Delta & , |\xi_{\vec{k}}| \leq \hbar\omega_D \\ 0 & , \text{sonst} \end{cases} \quad (4.42)$$

Damit lautet 4.41 in dem nicht-verschwindenden Bereich:

$$\begin{aligned} \Delta &= -\frac{U}{\nu} \sum_{|\vec{k}'| \leq \hbar\omega_D} \frac{\Delta}{2\sqrt{\xi_{\vec{k}'}^2 + \Delta^2}} \quad \Big| \frac{1}{\nu} \sum_{|\vec{k}'| \leq \hbar\omega_D} \longrightarrow \int_{-\hbar\omega_D}^{\hbar\omega_D} n(\xi) d\xi \\ 1 &\approx U n(0) \int_{-\hbar\omega_D}^{\hbar\omega_D} \frac{1}{2\sqrt{\xi^2 + \Delta^2}} d\xi \\ &= n(0) U \sinh^{-1} \left(\frac{\hbar\omega_D}{\Delta} \right) \\ \Rightarrow \Delta &= 2\hbar\omega_D \left[\sinh \left(\frac{2}{n(0)U} \right) \right]^{-1} \\ &\approx 2\hbar\omega_D e^{-\frac{1}{n(0)U}} \end{aligned} \quad (4.43)$$

Bei der obigen Rechnung wurde wie gewohnt die Summe durch ein Integral ersetzt und die Zustandsdichte innerhalb des kleinen Integrationsbereichs durch ihren Wert an der Fermikante approximiert. Im letzten Schritt wurde eine kleine Energielücke angenommen und entsprechend die sinh-Funktion angeschätzt. Das Ergebnis stimmt also bis auf den Faktor zwei im Exponenten mit dem Ergebnis des Cooper-Problems 4.23 überein. An dieser Stelle erkennt man zudem, dass 4.43 nach oben hin durch $2\hbar\omega_D$ beschränkt ist. Diese Energie entspricht einer kritischen Temperatur von etwa 20K, so dass Hochtemperatursupraleiter tatsächlich nicht durch die BCS-Theorie beschrieben werden können.

Mit diesem Ergebnis kann nun wieder zur minimierten mittleren Energie zurückgegangen werden. Sie lautet damit:

$$\langle \psi^{BCS} | H | \psi^{BCS} \rangle = E - \mu \bar{N} = 2 \sum_{\vec{k}} \frac{\xi}{2} \left(1 - \frac{\xi_{\vec{k}}}{\tilde{\epsilon}_{\vec{k}}} \right) + \frac{1}{4} \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} \tilde{V}_{\vec{k}', \vec{k}-\vec{k}'}^{Fr} \frac{\Delta_{\vec{k}} \Delta_{\vec{k}'}}{\tilde{\epsilon}_{\vec{k}} \tilde{\epsilon}_{\vec{k}'}} \quad (4.44)$$

1. Term:

$$\begin{aligned} 2 \sum_{\vec{k}} \frac{\xi}{2} \left(1 - \frac{\xi_{\vec{k}}}{\tilde{\epsilon}_{\vec{k}}} \right) &= \sum_{\vec{k}} \xi_{\vec{k}} \left(1 - \frac{\xi_{\vec{k}}}{\sqrt{\xi_{\vec{k}}^2 + \Delta_{\vec{k}}^2}} \right) \quad \Big| \sum \longrightarrow \int \\ &\approx \int_{-\mu}^{\infty} n(\xi) \xi \left(1 - \frac{\xi}{\sqrt{\xi^2 + \Delta_{\vec{k}}^2}} \right) d\xi \quad | 4.42 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 &= \int_{-\mu}^{-\hbar\omega_D} n(\xi)(\xi-|\xi|)d\xi + \int_{-\hbar\omega_D}^{\hbar\omega_D} n(\xi)\xi \left(1 - \frac{\xi}{\sqrt{\xi^2 + \Delta^2}}\right) d\xi \\
 &+ \int_{\hbar\omega_D}^{\infty} n(\xi)(\xi-|\xi|)d\xi
 \end{aligned}$$

Im zweiten Integral kann wieder $n(\xi) \approx n(0)$ verwendet werden. Außerdem kann das erste und dritte Integral zusammengezogen werden, da ein Integrationsbereich von $2\hbar\omega_D$, in dem der Integrand keine vergleichsweise hohen Werte annimmt, keinen großen Fehler bedeutet.

$$\begin{aligned}
 2 \sum_{\vec{k}} \frac{\xi}{2} \left(1 - \frac{\xi_{\vec{k}}}{\tilde{\epsilon}_{\vec{k}}}\right) &\approx \int_{-\hbar\omega_D}^{\hbar\omega_D} n(0)|\xi|d\xi - \int_{-\hbar\omega_D}^{\hbar\omega_D} n(0) \frac{\xi}{\sqrt{\xi^2 + \Delta^2}} d\xi + \int_{-\mu}^{\infty} n(\xi)(\xi-|\xi|)d\xi \quad |x \equiv \frac{\xi^2}{\Delta^2} \\
 &= -\Delta^2 n(0) \int_{-\hbar\omega_D/\Delta}^{\hbar\omega_D/\Delta} \frac{x^2}{\sqrt{x^2 + 1}} dx + \int_{-\hbar\omega_D}^{\hbar\omega_D} n(0)|\xi|d\xi + \int_{-\mu}^{\infty} n(\xi)(\xi-|\xi|)d\xi
 \end{aligned}$$

Die Grundzustandsenergie (T=0) für normaleleitende Elektronen ist gegeben durch ein Integral über die Zustandsdichte, wobei ein Faktor 2 wegen der Spinartung auftritt:

$$E_0 = 2 \int_{-\mu}^0 n(\xi)\xi d\xi \quad (4.45)$$

Das letzte Integral gibt nur für negative Werte von ξ einen Beitrag, weswegen folgt:

$$\begin{aligned}
 2 \sum_{\vec{k}} \frac{\xi}{2} \left(1 - \frac{\xi_{\vec{k}}}{\tilde{\epsilon}_{\vec{k}}}\right) &\approx -\Delta^2 n(0) \frac{\hbar\omega_D}{\Delta} \sqrt{\frac{\hbar^2\omega_D^2}{\Delta^2} + 1} + \Delta^2 n(0) \sinh^{-1} \left[\frac{\hbar\omega_D}{\Delta}\right] \\
 &+ n(0)\hbar^2\omega_D^2 + 2 \int_{-\mu}^0 n(\xi)\xi d\xi \quad |4.43 \quad |\sqrt{1+x^2}| \stackrel{x \ll 1}{\approx} 1 + \frac{1}{2}x^2 \\
 &\approx -n(0)\hbar^2\omega_D^2 \left[1 + \frac{1}{2} \left(\frac{\Delta}{\hbar\omega_D}\right)^2\right] + n(0)\hbar^2\omega_D^2 + \frac{\Delta^2}{U} + 2 \int_{-\mu}^0 n(\xi)\xi d\xi \\
 &= -\frac{1}{2}n(0)\Delta^2 + \frac{\Delta^2}{U} + 2 \int_{-\mu}^0 n(\xi)\xi d\xi \quad |4.45 \\
 &= E_0 - \frac{1}{2}n(0)\Delta^2 + \frac{\Delta^2}{U}
 \end{aligned}$$

Der zweite Term aus 4.44 lautet:

$$\begin{aligned}
 \frac{1}{4} \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} \tilde{V}_{\vec{k}', \vec{k}-\vec{k}'}^{Fr} \frac{\Delta_{\vec{k}} \Delta_{\vec{k}'}}{\tilde{\epsilon}_{\vec{k}} \tilde{\epsilon}_{\vec{k}'}} &\stackrel{4.19}{=} -\frac{1}{U} \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} \left(\frac{V \Delta_{\vec{k}}}{2\tilde{\epsilon}_{\vec{k}}}\right) \left(\frac{V \Delta_{\vec{k}'}}{2\tilde{\epsilon}_{\vec{k}'}}\right) \\
 &= -\frac{1}{U} \sum_{\vec{k}} \left(\frac{V \Delta_{\vec{k}}}{2\tilde{\epsilon}_{\vec{k}}}\right) \sum_{\vec{k}'} \left(\frac{V \Delta_{\vec{k}'}}{2\tilde{\epsilon}_{\vec{k}'}}\right) \quad |4.41 \\
 &= -\frac{\Delta^2}{U}
 \end{aligned}$$

Setzt man beides zusammen, gelangt man zu einem einfachen Ausdruck für den Erwar-

tungswert der Gesamtenergie im Grundzustand:

$$E - \mu\bar{N} = E_0 - \frac{1}{2}n(0)\Delta^2 \quad (4.46)$$

Die Kondensationsenergie kann einfach abgelesen werden und beträgt $-\frac{1}{2}n(0)\Delta^2$.

4.5. Anregungen des Grundzustands: Bogoliubov-Valatin-Transformation

Ausgehend vom Erwartungswert der Energie im Grundzustand 4.33 kann nun die Energie $\tilde{\epsilon}_{\vec{k}}$ berechnet werden, die benötigt wird, um ein Cooper-Paar aufzubrechen und eines der beiden Elektronen in den Zustand $|\vec{k}\rangle|\uparrow\rangle$, wenn $|\vec{k}\rangle|\downarrow\rangle$ unbesetzt bleibt, zu bringen. Es kann in wenigen Schritten gezeigt werden, dass dies gerade der vorher definierten Energie $\tilde{\epsilon}_{\vec{k}}$ in 4.36 entspricht:

Bei diesem Prozess muss a) die Bindungsenergie zwischen dem Cooper-Paar aufgebracht werden und b) dem Elektron die Energie $\xi_{\vec{k}}$ zur Besetzung des neuen Zustands mitgegeben werden. Man beachte hierbei, dass zur Bestimmung des Grundzustandes reelle Koeffizienten verwendet wurden.

$$\begin{aligned} \langle \psi^{BCS} | H | \psi^{BCS} \rangle &= 2 \sum_{\vec{k}} \xi_{\vec{k}} v_{\vec{k}}^2 + \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} u_{\vec{k}} v_{\vec{k}} u_{\vec{k}'} v_{\vec{k}'} \tilde{V}_{\vec{k}', \vec{k}-\vec{k}'}^{Fr} \\ E_a) &= -2v_{\vec{k}}^2 \xi_{\vec{k}} - \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} u_{\vec{k}} v_{\vec{k}} u_{\vec{k}'} v_{\vec{k}'} \tilde{V}_{\vec{k}', \vec{k}-\vec{k}'}^{Fr} && \text{[Paarzustand symmetrisch]} \\ &= -2v_{\vec{k}}^2 \xi_{\vec{k}} - 2u_{\vec{k}} v_{\vec{k}} \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} u_{\vec{k}'} v_{\vec{k}'} \tilde{V}_{\vec{k}', \vec{k}-\vec{k}'}^{Fr} && \text{[4.23]} \\ &= -2v_{\vec{k}}^2 \xi_{\vec{k}} + 2u_{\vec{k}} v_{\vec{k}} \Delta_{\vec{k}} \end{aligned}$$

$$E_b) = \xi_{\vec{k}}$$

Zusammen ergibt dies:

$$\tilde{\epsilon}_{\vec{k}} = E_a) + E_b) = \xi_{\vec{k}} \left(1 - 2v_{\vec{k}}^2\right) + 2u_{\vec{k}} v_{\vec{k}} \Delta_{\vec{k}} \quad |4.40, 4.39$$

$$= \xi_{\vec{k}} \left[1 - \left(1 - \frac{\xi_{\vec{k}}}{\tilde{\epsilon}_{\vec{k}}}\right)\right] + \frac{\Delta_{\vec{k}}^2}{\tilde{\epsilon}_{\vec{k}}} \quad |4.36$$

$$= \sqrt{\xi_{\vec{k}}^2 + \Delta_{\vec{k}}^2} = \tilde{\epsilon}_{\vec{k}}$$

Wie man sieht, weist das Anregungsspektrum der supraleitenden Cooper-Paare eine Energielücke $\Delta_{\vec{k}}$ auf, die zugleich der minimale Anregungsenergie entspricht. Da $|\Psi^{BCS}\rangle$ eine Überlagerung aus verschiedenartigen Viel-Teilchen-Wellenfunktionen darstellt, soll nun betrachtet werden, wie die Erzeugung eines Elektrons $c_{\vec{k}\uparrow}^\dagger$ aus dem BCS-Grundzustand aussieht:

$$\begin{aligned} c_{\vec{k}\uparrow}^\dagger |\Psi^{BCS}\rangle &= \left(u_{\vec{k}} c_{\vec{k}\uparrow}^\dagger + v_{\vec{k}} c_{\vec{k}\uparrow}^\dagger c_{\vec{k}\uparrow}^\dagger c_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger\right) \prod_{\vec{k}' \neq \vec{k}} \left(u_{\vec{k}'} + v_{\vec{k}'} c_{\vec{k}'\uparrow}^\dagger c_{-\vec{k}'\downarrow}^\dagger\right) |0\rangle && \text{[Pauli-Prinzip: } c_{\vec{k}\uparrow}^\dagger c_{\vec{k}\uparrow}^\dagger = 0 \\ &= u_{\vec{k}} c_{\vec{k}\uparrow}^\dagger \prod_{\vec{k}' \neq \vec{k}} \left(u_{\vec{k}'} + v_{\vec{k}'} c_{\vec{k}'\uparrow}^\dagger c_{-\vec{k}'\downarrow}^\dagger\right) |0\rangle \end{aligned} \quad (4.47)$$

Der entstandene Zustand ist wieder ein Viel-Teilchen-Zustand, in dem alle elektronischen Zustände außer derjenige mit Wellenvektor \vec{k} in der typischen BCS-Form zu Cooper-Paaren gekoppelt werden. Damit rechtfertigt sich folgende Definition für die Quasi-Teilchen-Anregung bei Supraleitern:

$$|\vec{k}\sigma\rangle \equiv c_{\vec{k}\sigma}^\dagger \prod_{\vec{k}' \neq \vec{k}} \left(u_{\vec{k}'} + v_{\vec{k}'} c_{\vec{k}'\uparrow}^\dagger c_{-\vec{k}'\downarrow}^\dagger \right) |0\rangle \quad (4.48)$$

Dementsprechend lautet 4.47:

$$c_{\vec{k}\uparrow}^\dagger |\Psi^{BCS}\rangle = u_{\vec{k}} |\vec{k}\uparrow\rangle \quad (4.49)$$

Analog lässt sich die Locherzeugung bei $\vec{k}\downarrow$ berechnen:

$$\begin{aligned} c_{-\vec{k}\downarrow} |\Psi^{BCS}\rangle &= \left(u_{\vec{k}} c_{-\vec{k}\downarrow} + v_{\vec{k}} c_{-\vec{k}\downarrow} c_{\vec{k}\uparrow}^\dagger c_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger \right) \prod_{\vec{k}' \neq \vec{k}} \left(u_{\vec{k}'} + v_{\vec{k}'} c_{\vec{k}'\uparrow}^\dagger c_{-\vec{k}'\downarrow}^\dagger \right) |0\rangle & |c|0\rangle = 0 \\ &= v_{\vec{k}} c_{-\vec{k}\downarrow} c_{\vec{k}\uparrow}^\dagger c_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger \prod_{\vec{k}' \neq \vec{k}} \left(u_{\vec{k}'} + v_{\vec{k}'} c_{\vec{k}'\uparrow}^\dagger c_{-\vec{k}'\downarrow}^\dagger \right) |0\rangle & |4.27 \\ &= -v_{\vec{k}} c_{\vec{k}\uparrow}^\dagger c_{-\vec{k}\downarrow} c_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger \prod_{\vec{k}' \neq \vec{k}} \left(u_{\vec{k}'} + v_{\vec{k}'} c_{\vec{k}'\uparrow}^\dagger c_{-\vec{k}'\downarrow}^\dagger \right) |0\rangle & |4.27 \\ &= -v_{\vec{k}} c_{\vec{k}\uparrow}^\dagger \left(1 - c_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger c_{-\vec{k}\downarrow} \right) \prod_{\vec{k}' \neq \vec{k}} \left(u_{\vec{k}'} + v_{\vec{k}'} c_{\vec{k}'\uparrow}^\dagger c_{-\vec{k}'\downarrow}^\dagger \right) |0\rangle & |c|0\rangle = 0 \\ &= -v_{\vec{k}} c_{\vec{k}\uparrow}^\dagger \prod_{\vec{k}' \neq \vec{k}} \left(u_{\vec{k}'} + v_{\vec{k}'} c_{\vec{k}'\uparrow}^\dagger c_{-\vec{k}'\downarrow}^\dagger \right) |0\rangle & |4.48 \\ &= -v_{\vec{k}} |\vec{k}\uparrow\rangle & (4.50) \end{aligned}$$

Die verbleibenden Erzeugungs- und Vernichtungsmöglichkeiten lauten wie folgt.

$$\begin{aligned} c_{\vec{k}\uparrow} |\Psi^{BCS}\rangle &= \left(u_{\vec{k}} c_{\vec{k}\uparrow} + v_{\vec{k}} c_{\vec{k}\uparrow} c_{\vec{k}\uparrow}^\dagger c_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger \right) \prod_{\vec{k}' \neq \vec{k}} \left(u_{\vec{k}'} + v_{\vec{k}'} c_{\vec{k}'\uparrow}^\dagger c_{-\vec{k}'\downarrow}^\dagger \right) |0\rangle & |c|0\rangle = 0, \quad 4.27 \\ &= v_{\vec{k}} \left(1 - c_{\vec{k}\uparrow}^\dagger c_{\vec{k}\uparrow} \right) c_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger \prod_{\vec{k}' \neq \vec{k}} \left(u_{\vec{k}'} + v_{\vec{k}'} c_{\vec{k}'\uparrow}^\dagger c_{-\vec{k}'\downarrow}^\dagger \right) |0\rangle & |4.27 \\ &= v_{\vec{k}} \left(c_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger + c_{\vec{k}\uparrow}^\dagger c_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger c_{\vec{k}\uparrow} \right) \prod_{\vec{k}' \neq \vec{k}} \left(u_{\vec{k}'} + v_{\vec{k}'} c_{\vec{k}'\uparrow}^\dagger c_{-\vec{k}'\downarrow}^\dagger \right) |0\rangle & |c|0\rangle = 0, \quad 4.48 \\ &= v_{\vec{k}} |-\vec{k}\downarrow\rangle & (4.51) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} c_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger |\Psi^{BCS}\rangle &= \left(u_{\vec{k}} c_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger + v_{\vec{k}} c_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger c_{\vec{k}\uparrow}^\dagger c_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger \right) \prod_{\vec{k}' \neq \vec{k}} \left(u_{\vec{k}'} + v_{\vec{k}'} c_{\vec{k}'\uparrow}^\dagger c_{-\vec{k}'\downarrow}^\dagger \right) |0\rangle & |4.25 \\ &= \left(u_{\vec{k}} c_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger - v_{\vec{k}} c_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger c_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger c_{\vec{k}\uparrow}^\dagger \right) \prod_{\vec{k}' \neq \vec{k}} \left(u_{\vec{k}'} + v_{\vec{k}'} c_{\vec{k}'\uparrow}^\dagger c_{-\vec{k}'\downarrow}^\dagger \right) |0\rangle & \text{Pauliprinzip, } 4.48 \\ &= u_{\vec{k}} |-\vec{k}\downarrow\rangle & (4.52) \end{aligned}$$

Kombiniert man 4.49, 4.50, 4.51 und 4.52 in verschiedenen Varianten und verwendet die Normierung der Koeffizienten $u_{\vec{k}}, v_{\vec{k}}$, so findet man folgende Gleichungen:

$$\begin{aligned}
 (u_{\vec{k}}c_{-\vec{k}\downarrow} + v_{\vec{k}}c_{\vec{k}\uparrow}^\dagger)|\Psi^{BCS}\rangle &= (u_{\vec{k}}v_{\vec{k}} - v_{\vec{k}}u_{\vec{k}})|\vec{k}\uparrow\rangle = 0 \\
 (u_{\vec{k}}c_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger + v_{\vec{k}}c_{\vec{k}\uparrow})|\Psi^{BCS}\rangle &= (u_{\vec{k}}^2 + v_{\vec{k}}^2)|-\vec{k}\downarrow\rangle = |-\vec{k}\downarrow\rangle \\
 (u_{\vec{k}}c_{\vec{k}\uparrow}^\dagger - v_{\vec{k}}c_{-\vec{k}\downarrow})|\Psi^{BCS}\rangle &= (u_{\vec{k}}^2 + v_{\vec{k}}^2)|\vec{k}\uparrow\rangle = |\vec{k}\uparrow\rangle \\
 (u_{\vec{k}}c_{\vec{k}\uparrow} - v_{\vec{k}}c_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger)|\Psi^{BCS}\rangle &= (u_{\vec{k}}v_{\vec{k}} - v_{\vec{k}}u_{\vec{k}})|-\vec{k}\downarrow\rangle = 0
 \end{aligned}$$

Die verwendeten Linearkombinationen erzeugen somit die Quasi-Teilchen aus dem BCS-Grundzustand und werden Bogoliubov-Valatin-Operatoren genannt.

Def(Bogoliubov-Valatin-Operatoren):

$$\begin{aligned}
 \gamma_{\vec{k}\sigma}^\dagger &\equiv u_{\vec{k}}c_{\vec{k}\sigma}^\dagger - \sigma v_{\vec{k}}c_{-\vec{k}-\sigma} \\
 \gamma_{\vec{k}\sigma} &= u_{\vec{k}}c_{\vec{k}\sigma} - \sigma v_{\vec{k}}c_{-\vec{k}-\sigma}^\dagger
 \end{aligned} \tag{4.53}$$

Die Wirkung der Vernichtungsoperatoren auf den BCS-Grundzustand liefern die Null, weil sich in diesem definitionsgemäß keine Anregungen befinden. Ein Erzeugungsoperator hingegen erzeugt genau ein Quasiteilchen mit entsprechendem Spin und Wellenvektor.

Es sollen nun die Eigenschaften der Bogoliubov-Valatin-Operatoren diskutiert werden.

Zunächst sollen die Kommutationsrelationen bestimmt werden.

$$\begin{aligned}
 \{\gamma_{\vec{k}\sigma}, \gamma_{\vec{k}'\sigma'}\} &= (u_{\vec{k}}c_{\vec{k}\sigma} - \sigma v_{\vec{k}}c_{-\vec{k}-\sigma}^\dagger) (u_{\vec{k}'}c_{\vec{k}'\sigma'} - \sigma' v_{\vec{k}'}c_{-\vec{k}'-\sigma'}^\dagger) \\
 &\quad + (u_{\vec{k}'}c_{\vec{k}'\sigma'} - \sigma' v_{\vec{k}'}c_{-\vec{k}'-\sigma'}^\dagger) (u_{\vec{k}}c_{\vec{k}\sigma} - \sigma v_{\vec{k}}c_{-\vec{k}-\sigma}^\dagger) \quad |4.26, 4.25 \\
 &= -\sigma' u_{\vec{k}}c_{\vec{k}\sigma} v_{\vec{k}'}c_{-\vec{k}'-\sigma'}^\dagger - \sigma v_{\vec{k}}c_{-\vec{k}-\sigma}^\dagger u_{\vec{k}'}c_{\vec{k}'\sigma'} \\
 &\quad - \sigma u_{\vec{k}'}c_{\vec{k}'\sigma'} v_{\vec{k}}c_{-\vec{k}-\sigma}^\dagger - \sigma' v_{\vec{k}'}c_{-\vec{k}'-\sigma'}^\dagger u_{\vec{k}}c_{\vec{k}\sigma} \quad |4.27 \\
 &= \sigma u_{-\vec{k}'}v_{\vec{k}} - \sigma u_{-\vec{k}}v_{\vec{k}'} \\
 &= 0 \quad (4.54)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \{\gamma_{\vec{k}\sigma}^\dagger, \gamma_{\vec{k}'\sigma'}^\dagger\} &= (u_{\vec{k}}c_{\vec{k}\sigma}^\dagger - \sigma v_{\vec{k}}c_{-\vec{k}-\sigma}) (u_{\vec{k}'}c_{\vec{k}'\sigma'}^\dagger - \sigma' v_{\vec{k}'}c_{-\vec{k}'-\sigma'}^\dagger) \\
 &\quad + (u_{\vec{k}'}c_{\vec{k}'\sigma'}^\dagger - \sigma' v_{\vec{k}'}c_{-\vec{k}'-\sigma'}^\dagger) (u_{\vec{k}}c_{\vec{k}\sigma}^\dagger - \sigma v_{\vec{k}}c_{-\vec{k}-\sigma}) \quad |4.26, 4.25 \\
 &= -\sigma' u_{\vec{k}}c_{\vec{k}\sigma}^\dagger v_{\vec{k}'}c_{-\vec{k}'-\sigma'}^\dagger - \sigma v_{\vec{k}}c_{-\vec{k}-\sigma} u_{\vec{k}'}c_{\vec{k}'\sigma'}^\dagger \\
 &\quad - \sigma u_{\vec{k}'}c_{\vec{k}'\sigma'}^\dagger v_{\vec{k}}c_{-\vec{k}-\sigma} - \sigma' v_{\vec{k}'}c_{-\vec{k}'-\sigma'}^\dagger u_{\vec{k}}c_{\vec{k}\sigma}^\dagger \quad |4.27 \\
 &= \sigma u_{-\vec{k}'}v_{\vec{k}} - \sigma u_{-\vec{k}}v_{\vec{k}'} \\
 &= 0 \quad (4.55)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \{\gamma_{\vec{k}\sigma}^\dagger, \gamma_{\vec{k}'\sigma'}\} &= \left(u_{\vec{k}} c_{\vec{k}\sigma}^\dagger - \sigma v_{\vec{k}} c_{-\vec{k}-\sigma} \right) \left(u_{\vec{k}'} c_{\vec{k}'\sigma'} - \sigma' v_{\vec{k}'} c_{-\vec{k}'-\sigma'}^\dagger \right) \\
 &+ \left(u_{\vec{k}'} c_{\vec{k}'\sigma'} - \sigma' v_{\vec{k}'} c_{-\vec{k}'-\sigma'}^\dagger \right) \left(u_{\vec{k}} c_{\vec{k}\sigma}^\dagger - \sigma v_{\vec{k}} c_{-\vec{k}-\sigma} \right) \quad |4.26, 4.25 \\
 &= u_{\vec{k}} c_{\vec{k}\sigma}^\dagger u_{\vec{k}'} c_{\vec{k}'\sigma'} + \sigma' \sigma v_{\vec{k}} v_{\vec{k}'} c_{-\vec{k}-\sigma} c_{-\vec{k}'-\sigma'}^\dagger \\
 &+ u_{\vec{k}'} c_{\vec{k}'\sigma'} u_{\vec{k}} c_{\vec{k}\sigma}^\dagger + \sigma \sigma' v_{\vec{k}} v_{\vec{k}'} c_{-\vec{k}'-\sigma'}^\dagger c_{-\vec{k}-\sigma} \quad |4.27 \\
 &= (u_{\vec{k}} u_{\vec{k}'} + v_{\vec{k}} v_{\vec{k}'}) \delta_{\sigma\sigma'} \delta_{\vec{k}\vec{k}'} \quad |4.32 \\
 &= \delta_{\sigma\sigma'} \delta_{\vec{k}\vec{k}'} \quad (4.56)
 \end{aligned}$$

Die Bogoliubov-Valatin-Operatoren erfüllen somit dieselben Kommutationsrelationen wie die fermionischen Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren, so dass man diese Transformation als kanonisch bezeichnet. Zur Notation höherer Anregungen sei Folgendes vereinbart:

$$|\vec{k}_1 \sigma_1 \vec{k}_2 \sigma_2 \dots\rangle = \left(\gamma_{\vec{k}_1 \sigma_1}^\dagger \gamma_{\vec{k}_2 \sigma_2}^\dagger \dots \right) |\psi^{BCS}\rangle$$

Die Umkehrtransformation kann erraten oder durch Elimination gewonnen werden.

$$\begin{aligned}
 c_{\vec{k}\sigma}^\dagger &= u_{\vec{k}} \gamma_{\vec{k}\sigma}^\dagger + \sigma v_{\vec{k}} \gamma_{-\vec{k}-\sigma} \\
 c_{\vec{k}\sigma} &= u_{\vec{k}} \gamma_{\vec{k}\sigma} + \sigma v_{\vec{k}} \gamma_{-\vec{k}-\sigma}^\dagger \quad (4.57)
 \end{aligned}$$

Durch einfaches Einsetzen und unter Verwendung von $u_{\vec{k}} = u_{-\vec{k}}$ und $v_{\vec{k}} = v_{-\vec{k}}$, was aus 4.40 bzw. 4.39 direkt abgelesen werden kann, besteht die Möglichkeit dieses Ergebnis nachzuprüfen. Exemplarisch sei dieses für den Erzeugungsoperator demonstriert:

$$\begin{aligned}
 c_{\vec{k}\sigma}^\dagger &= u_{\vec{k}} \left(u_{\vec{k}} c_{\vec{k}\sigma}^\dagger - \sigma v_{\vec{k}} c_{-\vec{k}-\sigma} \right) + \sigma v_{\vec{k}} \left(u_{\vec{k}} c_{-\vec{k}-\sigma} + \sigma v_{\vec{k}} c_{\vec{k}\sigma}^\dagger \right) \\
 &= (u_{\vec{k}}^2 + v_{\vec{k}}^2) c_{\vec{k}\sigma}^\dagger \quad |4.32 \\
 &= c_{\vec{k}\sigma}^\dagger \checkmark
 \end{aligned}$$

Die Bogoliubov-Valatin-Transformation soll im nächsten Abschnitt verwendet werden, um thermodynamische Eigenschaften der Supraleiter herzuleiten.

4.6. Thermodynamische Eigenschaften von Supraleitern

Zur Bestimmung thermodynamischer Größen wird im Folgenden die Verteilungsfunktion der Quasi-Teilchen-Anregungen benötigt werden. Sie lautet in zweiter Quantisierung:

Def(Verteilungsfunktion Quasi-Teilchen):

$$\begin{aligned}
 f_{\vec{k}\sigma} &\equiv \langle \gamma_{\vec{k}\sigma}^\dagger \gamma_{\vec{k}\sigma} \rangle \quad |4.56 \\
 \langle \gamma_{\vec{k}\sigma} \gamma_{\vec{k}\sigma}^\dagger \rangle &= 1 - f_{\vec{k}\sigma} \quad (4.58)
 \end{aligned}$$

Zunächst aber schreibt man den BCS-Hamiltonian 4.18 ins großkanonische Ensemble um- wie zuvor für den Grundzustand. Daraufhin nutzt man die Bogoliubov-Valatin-Transformation 4.57. Alle Terme mit ungleicher Anzahl an Quasi-Teilchen-Vernichtungs- bzw. -Erzeugungs-Operatoren werden vorab vernachlässigt, weil sie im Laufenden kei-

nen Beitrag zum Energieerwartungswert liefern.

$$\begin{aligned}
 H_0 &= \sum_{\vec{k}\sigma} \xi_{\vec{k}} c_{\vec{k}\sigma}^\dagger c_{\vec{k}\sigma} \\
 &= \sum_{\vec{k}\sigma} \xi_{\vec{k}} \left[\left(u_{\vec{k}} \gamma_{\vec{k}\sigma}^\dagger + \sigma v_{\vec{k}} \gamma_{-\vec{k}-\sigma} \right) \left(u_{\vec{k}} \gamma_{\vec{k}\sigma} + \sigma v_{\vec{k}} \gamma_{-\vec{k}-\sigma}^\dagger \right) \right] \\
 &= \sum_{\vec{k}\sigma} \xi_{\vec{k}} \left[u_{\vec{k}}^2 \gamma_{\vec{k}\sigma}^\dagger \gamma_{\vec{k}\sigma} + \sigma^2 v_{\vec{k}}^2 \gamma_{-\vec{k}-\sigma} \gamma_{-\vec{k}-\sigma}^\dagger \right] \\
 &= \sum_{\vec{k}\sigma} \xi_{\vec{k}} \left[u_{\vec{k}}^2 \gamma_{\vec{k}\sigma}^\dagger \gamma_{\vec{k}\sigma} + v_{\vec{k}}^2 \left(1 - \gamma_{-\vec{k}-\sigma}^\dagger \gamma_{-\vec{k}-\sigma} \right) \right] \\
 &= \sum_{\vec{k}} \xi_{\vec{k}} \left[u_{\vec{k}}^2 \gamma_{\vec{k}\uparrow}^\dagger \gamma_{\vec{k}\uparrow} + u_{\vec{k}}^2 \gamma_{\vec{k}\downarrow}^\dagger \gamma_{\vec{k}\downarrow} + 2v_{\vec{k}}^2 - v_{\vec{k}}^2 \gamma_{-\vec{k}\uparrow}^\dagger \gamma_{-\vec{k}\uparrow} - v_{\vec{k}}^2 \gamma_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger \gamma_{-\vec{k}\downarrow} \right] \quad \text{[Summationsindex } \vec{k} \rightarrow -\vec{k}] \\
 &= \sum_{\vec{k}} \xi_{\vec{k}} \left[2v_{\vec{k}}^2 + \left(u_{\vec{k}}^2 - v_{\vec{k}}^2 \right) \left(\gamma_{\vec{k}\uparrow}^\dagger \gamma_{\vec{k}\uparrow} + \gamma_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger \gamma_{-\vec{k}\downarrow} \right) \right]
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 H_{WW} &= - \sum_{\vec{k}', \vec{k}} \tilde{V}_{\vec{k}', \vec{k}-\vec{k}'}^{Fr} \left[c_{\vec{k}\uparrow}^\dagger c_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger c_{-\vec{k}'\downarrow} c_{\vec{k}'\uparrow} \right] \\
 &= - \sum_{\vec{k}', \vec{k}} \tilde{V}_{\vec{k}', \vec{k}-\vec{k}'}^{Fr} \left[\left(u_{\vec{k}} \gamma_{\vec{k}\uparrow}^\dagger + v_{\vec{k}} \gamma_{-\vec{k}\downarrow} \right) \left(u_{\vec{k}} \gamma_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger - v_{\vec{k}} \gamma_{\vec{k}\uparrow} \right) \right. \\
 &\quad \cdot \left. \left(u_{\vec{k}'} \gamma_{-\vec{k}'\downarrow} - v_{\vec{k}'} \gamma_{\vec{k}'\uparrow}^\dagger \right) \left(u_{\vec{k}'} \gamma_{\vec{k}'\uparrow} + v_{\vec{k}'} \gamma_{-\vec{k}'\downarrow}^\dagger \right) \right] \\
 &= - \sum_{\vec{k}', \vec{k}} \tilde{V}_{\vec{k}', \vec{k}-\vec{k}'}^{Fr} \left[\left(-u_{\vec{k}} v_{\vec{k}} \gamma_{\vec{k}\uparrow}^\dagger \gamma_{\vec{k}\uparrow} + u_{\vec{k}} v_{\vec{k}} \gamma_{-\vec{k}\downarrow} \gamma_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger \right) \left(u_{\vec{k}'} v_{\vec{k}'} \gamma_{-\vec{k}'\downarrow} \gamma_{-\vec{k}'\downarrow}^\dagger - u_{\vec{k}'} v_{\vec{k}'} \gamma_{\vec{k}'\uparrow}^\dagger \gamma_{\vec{k}'\uparrow} \right) \right] \\
 &= - \sum_{\vec{k}', \vec{k}} \tilde{V}_{\vec{k}', \vec{k}-\vec{k}'}^{Fr} \left[\left(-u_{\vec{k}} v_{\vec{k}} \gamma_{\vec{k}\uparrow}^\dagger \gamma_{\vec{k}\uparrow} + u_{\vec{k}} v_{\vec{k}} \left(1 - \gamma_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger \gamma_{-\vec{k}\downarrow} \right) \right) \left(u_{\vec{k}'} v_{\vec{k}'} \left(1 - \gamma_{-\vec{k}'\downarrow}^\dagger \gamma_{-\vec{k}'\downarrow} \right) - u_{\vec{k}'} v_{\vec{k}'} \gamma_{\vec{k}'\uparrow}^\dagger \gamma_{\vec{k}'\uparrow} \right) \right] \\
 &= - \sum_{\vec{k}', \vec{k}} \tilde{V}_{\vec{k}', \vec{k}-\vec{k}'}^{Fr} \left[u_{\vec{k}} v_{\vec{k}} u_{\vec{k}'} v_{\vec{k}'} \left(1 - \gamma_{\vec{k}\uparrow}^\dagger \gamma_{\vec{k}\uparrow} - \gamma_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger \gamma_{-\vec{k}\downarrow} \right) \left(1 - \gamma_{\vec{k}'\uparrow}^\dagger \gamma_{\vec{k}'\uparrow} - \gamma_{-\vec{k}'\downarrow}^\dagger \gamma_{-\vec{k}'\downarrow} \right) \right]
 \end{aligned}$$

Verwendet man die Definition der Verteilungsfunktion der Quasi-Teilchen, kann die mittlere Energie angegeben werden:

$$\begin{aligned}
 \langle H \rangle &= \sum_{\vec{k}} \xi_{\vec{k}} \left[2v_{\vec{k}}^2 + \left(u_{\vec{k}}^2 - v_{\vec{k}}^2 \right) \left(f_{\vec{k}\uparrow} + f_{-\vec{k}\downarrow} \right) \right] \\
 &\quad - \sum_{\vec{k}', \vec{k}} \tilde{V}_{\vec{k}', \vec{k}-\vec{k}'}^{Fr} \left[u_{\vec{k}} v_{\vec{k}} u_{\vec{k}'} v_{\vec{k}'} \left(1 - f_{\vec{k}\uparrow} - f_{-\vec{k}\downarrow} \right) \left(1 - f_{\vec{k}'\uparrow} - f_{-\vec{k}'\downarrow} \right) \right]
 \end{aligned}$$

Da die Bogoliubov-Valatin-Operatoren dieselben Vertauschungsrelationen wie Fermionen erfüllen, wird ihre Verteilungsfunktion ebenfalls spinunabhängig sein. Für die Entro-

pie des Systems gilt dann folgende Gleichung:

$$\begin{aligned} S &\equiv -k_B \sum_{\vec{k}\sigma} [f_{\vec{k}} \ln f_{\vec{k}} + (1 - f_{\vec{k}}) \ln (1 - f_{\vec{k}})] \\ &= -2k_B \sum_{\vec{k}} [f_{\vec{k}} \ln f_{\vec{k}} + (1 - f_{\vec{k}}) \ln (1 - f_{\vec{k}})] \end{aligned}$$

Damit lautet die mittlere freie Energie:

$$\begin{aligned} \langle F \rangle &= \langle H \rangle - TS \\ &= \sum_{\vec{k}} \xi_{\vec{k}} \left[2v_{\vec{k}}^2 + \left(u_{\vec{k}}^2 - v_{\vec{k}}^2 \right) \left(f_{\vec{k}\uparrow} + f_{-\vec{k}\downarrow} \right) \right] \\ &\quad - \sum_{\vec{k}', \vec{k}} \tilde{V}_{\vec{k}', \vec{k}-\vec{k}'}^{Fr} \left[u_{\vec{k}} v_{\vec{k}} u_{\vec{k}'} v_{\vec{k}'} \left(1 - f_{\vec{k}\uparrow} - f_{-\vec{k}\downarrow} \right) \left(1 - f_{\vec{k}'\uparrow} - f_{-\vec{k}'\downarrow} \right) \right] \\ &\quad - 2k_B T \sum_{\vec{k}} [f_{\vec{k}} \ln f_{\vec{k}} + (1 - f_{\vec{k}}) \ln (1 - f_{\vec{k}})] \end{aligned} \quad (4.59)$$

Die Koeffizienten $u_{\vec{k}}, v_{\vec{k}}$ werden genau analog wie für 4.33 bestimmt, wobei aufgrund der nicht vollständig kondensierten Elektronen die Definition der Energielücke Δ um einen Faktor $(1 - 2f_{\vec{k}'})$ erweitert wird, um die thermisch aufgebrochenen Cooper-Paare zu berücksichtigen:

$$\begin{aligned} \Delta_{\vec{k}}(T) &\equiv - \sum_{\vec{k}'} \tilde{V}_{\vec{k}', \vec{k}-\vec{k}'}^{Fr} u_{\vec{k}'} v_{\vec{k}'} (1 - 2f_{\vec{k}'}) \\ u_{\vec{k}}^2 &= \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\xi_{\vec{k}}}{\tilde{\epsilon}_{\vec{k}}} \right) & v_{\vec{k}}^2 &= \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\xi_{\vec{k}}}{\tilde{\epsilon}_{\vec{k}}} \right) \end{aligned} \quad (4.60)$$

Zur Bestimmung der Verteilungsfunktion wird diejenige Verteilungsfunktion gesucht, die die freie Energie 4.59 minimiert.

$$\begin{aligned} \frac{\partial \langle F \rangle}{\partial f_{\vec{l}}} &\stackrel{!}{=} 0 \\ &= \sum_{\vec{k}} \xi_{\vec{k}} \left[\left(u_{\vec{k}}^2 - v_{\vec{k}}^2 \right) \left(\delta_{\vec{k}\vec{l}} + \delta_{-\vec{k}\vec{l}} \right) \right] \\ &\quad - 2 \sum_{\vec{k}', \vec{k}} \tilde{V}_{\vec{k}', \vec{k}-\vec{k}'}^{Fr} \left[u_{\vec{k}} v_{\vec{k}} u_{\vec{k}'} v_{\vec{k}'} \left(1 - \delta_{\vec{k}\vec{l}} - \delta_{-\vec{k}\vec{l}} \right) \left(1 - f_{\vec{k}'\uparrow} - f_{-\vec{k}'\downarrow} \right) \right] \\ &\quad - 2k_B T \sum_{\vec{k}} \left[\delta_{\vec{k}\vec{l}} \ln f_{\vec{k}} + \delta_{\vec{k}\vec{l}} - \delta_{\vec{k}\vec{l}} \ln (1 - f_{\vec{k}}) - \delta_{\vec{k}\vec{l}} \right] \quad |4.60 \\ &= 2\xi_{\vec{l}} \frac{\xi_{\vec{l}}}{\tilde{\epsilon}_{\vec{l}}} + 2\Delta \frac{\Delta_{\vec{l}}}{\tilde{\epsilon}_{\vec{l}}} - 2k_B T \ln (1 - f_{\vec{l}}) + 2k_B T \ln f_{\vec{l}} \\ 2\tilde{\epsilon}_{\vec{l}} &= 2k_B T \ln (1 - f_{\vec{l}}) - 2k_B T \ln f_{\vec{l}} \\ \ln \frac{1 - f_{\vec{l}}}{f_{\vec{l}}} &= \frac{\tilde{\epsilon}_{\vec{l}}}{k_B T} \\ f_{\vec{l}} &= \frac{1}{e^{\tilde{\epsilon}_{\vec{l}}/k_B T} + 1} \end{aligned} \quad (4.61)$$

Setzt man dieses Ergebnis wieder in die Definition der Energielücke ein, so erhält man

eine neue selbstkonsistent zu bestimmende Lösung für die Energielücke:

$$\begin{aligned}\Delta_{\vec{k}}(T) &= - \sum_{\vec{k}'} \tilde{V}_{\vec{k}', \vec{k}-\vec{k}'}^{Fr} u_{\vec{k}'} v_{\vec{k}'} \left(1 - \frac{2}{e^{\tilde{\epsilon}_{\vec{k}'}/k_B T} + 1} \right) \quad |4.60 \\ &= - \sum_{\vec{k}'} \tilde{V}_{\vec{k}', \vec{k}-\vec{k}'}^{Fr} \tanh \left(\frac{\tilde{\epsilon}_{\vec{k}'}}{2k_B T} \right) \frac{\Delta_{\vec{k}'}}{2\tilde{\epsilon}_{\vec{k}'}}\end{aligned}$$

Setzt man nun das Fröhlichpotential 4.19 ein, so gelangt man zu:

$$\begin{aligned}\Delta_{\vec{k}} &= \frac{U}{\nu} \sum_{|\xi_{\vec{k}'}| \leq \hbar\omega_D} \tanh \left(\frac{\tilde{\epsilon}_{\vec{k}'}}{2k_B T} \right) \frac{\Delta_{\vec{k}'}}{2\sqrt{\xi_{\vec{k}'}^2 + \Delta_{\vec{k}'}}^2} \quad |\Delta_{\vec{k}} = \Delta \\ 1 &= \frac{U}{\nu} \sum_{|\xi_{\vec{k}'}| \leq \hbar\omega_D} \tanh \left(\frac{\tilde{\epsilon}_{\vec{k}'}}{2k_B T} \right) \frac{1}{2\sqrt{\xi_{\vec{k}'}^2 + \Delta^2}} \quad |\sum \rightarrow \int \\ 1 &= n(0)U \int_{-\hbar\omega_D}^{\hbar\omega_D} \tanh \left(\frac{\sqrt{\xi^2 + \Delta^2}}{2k_B T} \right) \frac{1}{2\sqrt{\xi^2 + \Delta^2}} d\xi \quad (4.62)\end{aligned}$$

Die kritische Temperatur T_c kann mit der zusätzlichen Bedingung $\Delta(T_c) = 0$ gewonnen werden:

$$\begin{aligned}1 &= n(0)U \int_{-\hbar\omega_D}^{\hbar\omega_D} \tanh \left(\frac{\xi}{2k_B T_c} \right) \frac{1}{2\xi} d\xi \\ &= n(0)U \int_0^{\hbar\omega_D} \tanh \left(\frac{\xi}{2k_B T_c} \right) \frac{1}{\xi} d\xi\end{aligned}$$

Numerisch liefert die Integration das Ergebnis $k_B T_c \approx 1.13 \hbar\omega_D e^{-1/n(0)U}$, welches wiederum in 4.62 eingesetzt werden kann, um die temperaturabhängige Energielücke zu bestimmen. Die numerische Lösung von 4.62 und die Bestimmung von T_c wird in C vorgeführt. Der Verlauf ist in Abb. 4.3 gezeigt und ist in guter Übereinstimmung mit den experimentellen Ergebnissen für konventionelle Supraleiter.

Aus der freien Energie soll nun noch das kritische Magnetfeld $H_c(T)$ berechnet werden. Hierzu setzt man 4.60 und 4.61 in 4.59 ein:

$$\begin{aligned}\langle F \rangle &= 2 \sum_{\vec{k}} \xi_{\vec{k}} \left[v_{\vec{k}}^2 + \tilde{\epsilon}_{\vec{k}} f_{\vec{k}} - \frac{\Delta^2}{\tilde{\epsilon}_{\vec{k}}} f_{\vec{k}} \right] - \sum_{\vec{k}} \left[\frac{\Delta}{2\tilde{\epsilon}_{\vec{k}}} (1 - f_{\vec{k}}) \right] \\ &\quad - \sum_{\vec{k}} \left\{ f_{\vec{k}} \ln f_{\vec{k}} - (1 - f_{\vec{k}}) \ln \left[2 \cosh \left(\frac{\tilde{\epsilon}_{\vec{k}}}{2k_B T} \right) \right] \right\} \\ &= 2 \sum_{\vec{k}} \xi_{\vec{k}} \left[v_{\vec{k}}^2 + \tilde{\epsilon}_{\vec{k}} f_{\vec{k}} - \frac{\Delta^2}{\tilde{\epsilon}_{\vec{k}}} f_{\vec{k}} \right] - \frac{\Delta^2}{U} \\ &\quad + \sum_{\vec{k}} \left\{ \tilde{\epsilon}_{\vec{k}} (1 - 2f_{\vec{k}}) - 2k_B T \left[2 \cosh \left(\frac{\tilde{\epsilon}_{\vec{k}}}{2k_B T} \right) \right] \right\} \\ &= \sum_{\vec{k}} \left\{ 2\xi_{\vec{k}} v_{\vec{k}} + \tilde{\epsilon}_{\vec{k}} - \frac{\Delta^2}{\tilde{\epsilon}_{\vec{k}}} - 2k_B T \left[2 \cosh \left(\frac{\tilde{\epsilon}_{\vec{k}}}{2k_B T} \right) \right] \right\} - \frac{\Delta^2}{U}\end{aligned}$$

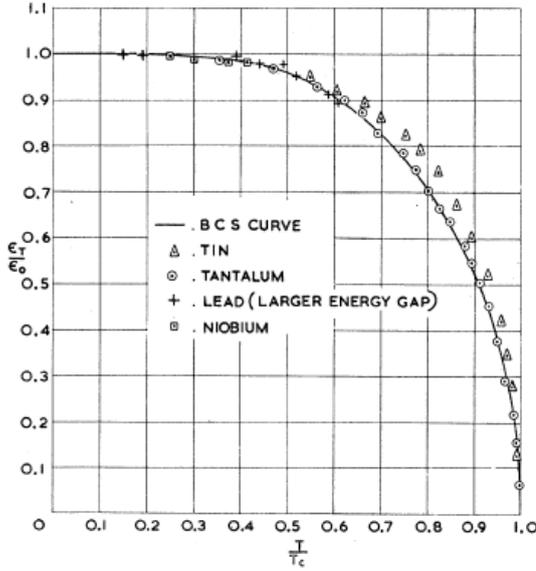


Abbildung 4.3: Aufgetragen ist die Energielücke E_T in Einheiten der Energielücke bei $T = 0$ in Abhängigkeit von T/T_c . Zusätzlich zum numerisch berechneten Verlauf (durchgezogene Linie) sind die experimentellen Ergebnisse für Zinn, Tantal, Blei und Niob aufgetragen. Die Verkleinerung der Energielücke nimmt nicht abrupt ab, da an der kritischen Temperatur ein Phasenübergang zweiter Ordnung stattfindet. (aus [17])

$$\Rightarrow \langle F_n - F_s \rangle \equiv \frac{1}{8\pi} H_c(T)$$

Das kritische Magnetfeld kann wieder numerisch bestimmt werden und nimmt näherungsweise denselben Verlauf an, wie in 2.3 geplottet wurde. Schließlich soll noch die Wärmekapazität berechnet werden.

$$\begin{aligned} C &= T \frac{dS}{dT} = -2k_B T \sum_{\vec{k}} [\ln f_{\vec{k}} - \ln(1 - f_{\vec{k}})] \partial_T f_{\vec{k}} & |4.61 \\ &= 2k_B T \sum_{\vec{k}} \frac{\tilde{\epsilon}_{\vec{k}}}{k_B T} \partial_T f_{\vec{k}} & |\tilde{\epsilon}_{\vec{k}} = \tilde{\epsilon}_{\vec{k}}(\Delta(T)) \\ &= -\frac{2}{k_B T^2} \sum_{\vec{k}} f_{\vec{k}} (1 - f_{\vec{k}}) \left(-\tilde{\epsilon}_{\vec{k}}^2 + T \Delta \frac{d\Delta}{dT} \right) & |\sum_{\vec{k}} \rightarrow \int d\xi \\ &= \frac{2}{k_B T^2} n(0) \int_0^\infty d\xi f(\xi) (1 - f(\xi)) \left(\tilde{\epsilon}_{\vec{k}}^2 - T \Delta \frac{d\Delta}{dT} \right) \end{aligned}$$

Im Bereich kleiner Temperaturen klingt $f(\xi)$ sehr schnell ab. Außerdem ist $\frac{d\Delta}{dT}$ in diesem Bereich ungefähr Null, wie man in Abb. 4.3 sehr gut sehen kann. Damit lässt sich vereinfachen:

$$\begin{aligned} C &\approx \frac{2n(0)}{k_B T^2} \int_0^\infty d\xi \frac{1}{e^{\sqrt{\xi^2 + \Delta^2}} + 1} (\xi^2 + \Delta^2) & |\Delta \approx \Delta(0), \sqrt{\xi^2 + \Delta^2} \approx \Delta + \frac{\xi^2}{2\Delta} \\ &\approx \frac{2n(0)}{k_B T^2} \int_0^\infty d\xi \Delta^2(0) e^{-\Delta(0)/k_B T} e^{-\xi^2/2k_B T \Delta(0)} \end{aligned}$$

$$= 2n(0)\Delta(0)\sqrt{2\pi}k_B \left(\frac{\Delta(0)}{k_B T}\right)^{3/2} e^{-\Delta(0)/k_B T}$$

Der qualitative Verlauf der Wärmekapazität für kleine Temperaturen ist in Abb. 4.4 gezeigt.

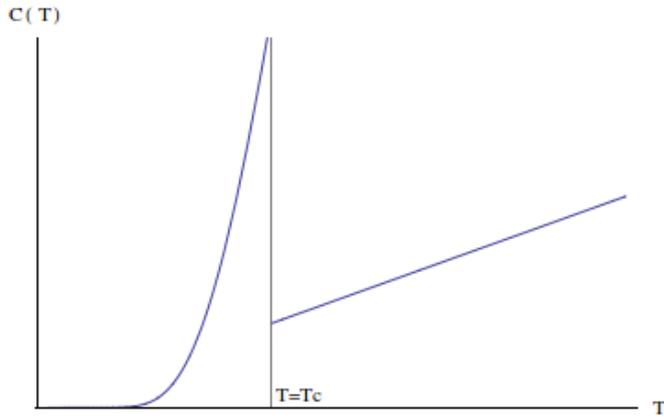


Abbildung 4.4: Die Wärmekapazität eines Supraleiters bei tiefen Temperaturen nimmt qualitativ die dargestellte Form an. Bei tiefen Temperaturen liegen die Elektronen als Cooper-Paare vor, so dass der Beitrag zur Wärmekapazität schnell sinkt. Bei $T = T_c$ findet dann der unstetige Übergang zur Wärmekapazität in der normalleitenden Phase statt.

Bei $T \approx 0$ sind die Elektronen beinahe alle kondensiert, sodass die Wärmekapazität schnell gegen Null geht. Andererseits brechen bei höheren Temperaturen immer mehr Cooper-Paare auf und der elektronische Anteil an der Wärmekapazität nimmt schnell zu. Bei $T = T_c$ findet dann der unstetige Übergang -Phasenübergang zweiter Ordnung- in die lineare Abhängigkeit des normalleitenden Zustands statt.

5. Ausblick

In dieser Arbeit wurde das Gebiet der unkonventionellen Supraleitung nicht behandelt. Hierauf soll nun in Form eines Ausblicks eingegangen werden.

Hochtemperatur-Supraleiter weisen kritische Temperaturen T_c weit über dem erlaubten T_c nach 4.43 auf:

$$\Delta \lesssim \hbar\omega_D$$

entspricht: $T_c \approx 25K$

Hieraus folgt, dass in solchen Materialien ein anderer Paarungsmechanismus vorliegen muss. Bisher liegt noch keine vollständige Theorie der Hochtemperatursupraleiter vor, aber es gibt bereits viele Erklärungsmodelle, die auf Spinfluktuationen und stark korrelierten Elektronensystemen aufbauen.

Experimentell findet man in einigen Hochtemperatursupraleitern (bspw. Sr_2RuO_4 [18]) quadratische Flussgitter realisiert, obwohl in den Berechnungen zur Ginzburg-Landau-Theorie das Dreiecksgitter stabiler sein sollte (Appendix B).

Sr_2RuO_4 weist darüber hinaus anstelle der Singulett-Bindung der BCS-Theorie eine Triplett-Bindung der Cooper-Paare auf. Allgemein findet man bei Hochtemperatursupraleitern neben der s-, und p-Wellensupraleitung auch d-, und f-Supraleiter, wo die Leitungselektronen zu noch höheren Drehimpulszuständen koppeln.

A. Herleitung der zweiten Londongleichung mittels Variationsansatz

Es wird diesmal bei der freien Energie F des supraleitenden Systems angesetzt, wobei wieder angenommen wird, dass sich ein Teil der Elektronen widerstandsfrei (Beitrag E_{kin}) und der andere Teil wie in einem Normalleiter (Beitrag F_n) bewegt. Zusätzlich zu diesen beiden Beiträgen kommt natürlich noch die magnetische Feldenergie hinzu. Außerdem soll ein konstantes elektrisches Feld angelegt werden.

$$F = F_n + E_{kin} + E_{mag} \equiv F_n + F_s \quad (\text{A.1})$$

$$E_{mag} = \frac{1}{8\pi} \int B^2(\vec{r}) d^3r$$

$$E_{kin} = \frac{1}{2} \int \rho_s(\vec{r}) v^2(\vec{r}) d^3r$$

$\rho_s = mn_s$: Massendichte der supraleitenden Elektronen

Mittels 3.5 bei konstantem elektrischen Feld und 3.2 kann die kinetische Energie weiter umgeformt werden zu:

$$E_{kin} = \frac{1}{8\pi} \int \lambda_L^2 (\nabla \times \vec{B}(\vec{r}))^2 d^3r$$

Es soll nun die minimale freie Energie unter einer Variation der magnetischen Induktion gefunden werden. Dabei kann man sich ganz auf F_s konzentrieren, da alle Beiträge zu F positiv sind und in Form einer Summe auftreten.

$$\begin{aligned} 0 &\stackrel{!}{=} \delta F_s \\ &= \int [\vec{B}(\vec{r}) \delta \vec{B}(\vec{r}) + \lambda_L^2 (\nabla \times \vec{B}(\vec{r})) (\nabla \times \delta \vec{B}(\vec{r}))] d^3r \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

Man kann den zweiten Term unter Zuhilfenahme des Levi-Cevita-Symbols folgendermaßen vereinfachen:

$$\begin{aligned} &\int (\nabla \times \vec{B}(\vec{r})) (\nabla \times \delta \vec{B}(\vec{r})) d^3r \\ &= \int (\epsilon_{ijk} \partial_j B_k) (\epsilon_{ilm} \partial_l \delta B_m) d^3r \quad |\text{part. Integration} \\ &= \int \partial_l [(\partial_j B_k) \epsilon_{ijk} \epsilon_{ilm} \delta B_m] d^3r - \int (\epsilon_{ijk} \partial_l \partial_j B_k) (\epsilon_{ilm} \delta B_m) d^3r \quad |\epsilon_{ijk} \epsilon_{ilm} = \delta_{jl} \delta_{km} - \delta_{jm} \delta_{kl} \\ &= \int \partial_l [\delta_{jl} \delta_{km} (\partial_j B_k) \delta B_m] d^3r - \int \partial_l [\delta_{jm} \delta_{kl} (\partial_j B_k) \delta B_m] d^3r \\ &\quad - \int (\epsilon_{ilm} \partial_l \epsilon_{ijk} \partial_j B_k) \delta B_m d^3r \quad |\epsilon_{ijk} \partial_j B_k = A_i \\ &= \int \partial_j [(\partial_j B_k) \delta B_k] d^3r - \int \partial_k [(\partial_j B_k) \delta B_j] d^3r \\ &\quad + \int (\epsilon_{ilm} \partial_l A_i) \delta B_m d^3r \quad |\text{Satz von Gauß} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 &= \int_{S(V)} (\partial_j B_k) \delta B_k dA_j - \int_{S(V)} (\partial_j B_k) \delta B_j dA_k \\
 &+ \int [\nabla \times (\nabla \times \vec{B})] \delta \vec{B} d^3 r && \text{|Setze } S(V) \text{ außerhalb des Supraleiters} \\
 &= \int [\nabla \times (\nabla \times \vec{B})] \delta \vec{B} d^3 r && \text{(A.3)}
 \end{aligned}$$

Zusammen mit A.3 lässt sich A.2 nun in folgende Form bringen:

$$0 = \int [\vec{B}(\vec{r}) + \lambda_L^2 \nabla \times (\nabla \times \vec{B}(\vec{r}))] \delta \vec{B}(\vec{r}) d^3 r$$

Dieser Ausdruck ist für beliebige Variationen $\delta \vec{B}(\vec{r})$ richtig, wenn der Integrand in den eckigen Klammern null ist.

Somit konnte 3.8 aus einem Minimalprinzip abgeleitet werden.

B. Numerische Berechnung des Abrikosov-Parameters für Dreiecks- und Quadratgitter

Die Berechnung eines Abrikosov-Parameters ist grundsätzlich auch analytisch möglich [19], [20]. Dieser Weg ist aber sehr langwierig und führt über unhandliche Jacobi-Theta-Funktionen. An dieser Stelle soll deswegen ein Programm in C vorgestellt werden, das diese Aufgabe übernehmen soll.

Prinzipiell stellt man bei 3.73 und 3.74 fest, dass nur Terme vom Betrag 1 und Gaußfunktionen, die um Gitterpunkte zentriert sind, auftreten. Diese fallen bekanntermaßen sehr schnell ab und so kann bei der weiteren Berechnung ohne großen Fehler der Bereich $|n| > 20$ vernachlässigt werden.

In den Programmen wird $T_x \equiv b$ genutzt und zur Vereinfachung der Schreibarbeit $T_y \equiv a$ genutzt.

Quadratgitter:

Als wichtigster erster Schritt muss zunächst der Integrationsbereich bestimmt werden. Die Integration läuft grundsätzlich über die Einheitszelle. Lässt man sich in Mathematica das Gitter für verschiedene Werte von a und b plotten (bspw. in Abb. 3.7, so sieht man, dass sich eine Einheitszelle immer in der Fläche $x \in [-b/2, b/2]$ und $y \in [-a/2, a/2]$ finden lässt. Über diese Elementarzelle mit Fläche F soll im Folgenden integriert werden.

```
#include <stdio.h>
#include <math.h>
#include <complex.h>
#include <stdlib.h>

//Diese Funktion soll Speicherplatz fuer die x Listenelemente waehrend
//der Integration freigeben.
double * malloc_real(int x){

double *array;
array = (double *)malloc(x*sizeof(double));
return array;
}

//Diese Funktion kopiert die Elemente von list1 auf list2.
void copy_list(int N, double list1[], double list2[]){

int i;
for(i = 0; i < N; i++)
list2[i] = list1[i];
}

//Diese Funktion soll den Integrationsbereich auf N Punkte diskretisieren und
//in einer Liste abspeichern.
void linspace(double x0, double x1, int N, double list[N+1]){

double y = (x1-x0)/N;
int i;
for(i = 0; i < N+1; i++)
```

B NUMERISCHE BERECHNUNG DES ABRIKOSOV-PARAMETERS FÜR DREIECKS- UND QUADRATGITTER

```
list[i] = x0 + i*y;
}
//Diese Funktion kann verwendet werden, wenn man den Code ueberpruefen
//und die dabei auftretenden Listen ausgeben will.
void print_list(int N, double list[]){

int i;
for(i = 0; i < N; i++)
printf("%lf\n", list[i]);
}
//Die zu integrierende Funktion ist komplex und haengt von den
//Parametern x,y,a,b und F ab. Da die Summation auch negative n-Werte einschliesst,
//wird zunaechst Psi(n=0) berechnet, welches dann auf die Psi mit positivem n und
//dann auf die Psi mit negativem n addiert wird.
double complex psi(double x, double y, double a, int n_max, double F){

int n;
//Per Definition ist ab=F:
double b=F/a;
double chi = sqrt(F/(2*M_PI));
double complex psi = exp(-x*x/(2*chi*chi));
for(n = 1; n < n_max; n++){
psi = psi + cexp(2*M_PI*I*n*y/a)*cexp(-pow((x-n*b),2)/(2*pow(chi,2)));
psi = psi + cexp(-2*M_PI*I*n*y/a)*cexp(-pow((x+n*b),2)/(2*pow(chi,2)));
}
return psi;
}

//Hier werden die Funktionswerte von Psi fuer die diskretisierten
//list_x Werte berechnet, wobei zugleich der Betrag genommen und
//mit einem Exponenten (spaeter 2 oder 4) versehen wird. Die berechneten
//Werte werden in der Liste list_abspsi gespeichert.
void clc_psi(int N, double list_x[], double y, double a, int n_max, double F,
double list_abspsi[], double exponent){

int i;
double complex temp = 0;
for(i = 0; i < N; i++){
temp = psi(list_x[i], y, a, n_max, F);
list_abspsi[i] = pow(cabs(temp),exponent);
}
}

//Abhaengig von der Stepsize bestimmen wir die Anzahl N unserer
//diskretisierten Werte auf dem Integrationsbereich und geben einen
//entsprechenden Speicherplatz fuer die Intervalle und Funktionswerte
//frei.
double integral_xy(double a, double F, int n_max, double step_size){
```

```

double beta = 0;
double complex psi0 = 0, psi1 = 0;
int N = (int)(1/step_size);
double b=F/a;

double *list_x = malloc_real((N+1)*sizeof(double));
linspace(-b/2, b/2, N, list_x);

double *list_y = malloc_real((N+1)*sizeof(double));
linspace(-a/2, a/2, N, list_y);

int i,j;

double *list_abspsi0 = malloc_real((N+1)*sizeof(double));
double *list_abspsi1 = malloc_real((N+1)*sizeof(double));

//Hier wird nun das Integral von |Psi|^2 berechnet, wobei das Ergebnis
//in psi_int2 gespeichert werden soll. Dabei werden immer zunaechst
//die |Psi|^2-Werte fuer zwei benachbarte y-Arrays berechnet und in
//list_abspsi0 und list_abspsi1 gespeichert. Dies erledigt die erste
//for-Schleife. Die zweite for-Schleife laeuft entlang dieser beiden
//y-Arrays alle diskretisierten x-Werte ab und mittelt in jedem Schritt
//die vier auftretenden Werte und multipliziert diesen Wert mit dem
//zugrundeliegenden Quadrat (Step_size*Step_size*a) in der x-y-Ebene.
//Der Faktor a taucht deshalb auf, weil y ein Intervall a durchlauft
//und nicht nur 1 wie bei x.
double psi_int2 = 0;
clc_psi(N+1, list_x, list_y[0], a, n_max, F, list_abspsi0,2);
for(j = 1; j < N+1; j++){
clc_psi(N+1, list_x, list_y[j], a, n_max, F, list_abspsi1,2);
for(i = 1; i < N+1; i++){
psi_int2 += a*step_size*b*step_size*(list_abspsi1[i]
+list_abspsi1[i-1]+list_abspsi0[i]+list_abspsi0[i-1])/4;
}
//Nachdem die beiden benachbarten y-Arrays vollstaendig abgelaufen wurden,
//muss das obere Array als unteres Array fuer den naechsten
//Schleifendurchlauf dienen.
copy_list(N+1, list_abspsi1, list_abspsi0);
}

//Nun wird derselbe Algorithmus fuer die Integration von
//|Psi|^4 wiederholt.
double psi_int4 = 0;
clc_psi(N+1, list_x, list_y[0], a, n_max, F,list_abspsi0,4);
for(j = 1; j < N+1; j++){
clc_psi(N+1, list_x, list_y[j], a, n_max, F, list_abspsi1,4);
for(i = 1; i < N+1; i++){

```

B NUMERISCHE BERECHNUNG DES ABRIKOSOV-PARAMETERS FÜR
DREIECKS- UND QUADRATGITTER

```
psi_int4 += b*step_size*a*step_size*(list_abspsi1[i]
+list_abspsi1[i-1]+list_abspsi0[i]+list_abspsi0[i-1])/4;
}
copy_list(N+1, list_abspsi1, list_abspsi0);
}
//printf("psi_int4 = %lf\n", psi_int4);

//Zuletzt werden die beiden Ergebnisse nach der Definition des
//Abrikosov-Parameters miteinander verrechnet und ausgegeben.
beta = psi_int4/pow(psi_int2,2);
return beta;
}

int main(void){

//Hier wird Beta fuer den Fall T_x=T_y=F=1 berechnet, was das
//analytische Ergebnis Beta_square=1.18034 reproduziert.
/*
double step_size = 0.01;
double a = 1;
double F=1;
int n_max = 100;

double beta = integral_xy(a, n_max, step_size);

printf("%lf\t %lf\n",a , beta);
*/

//Hier kann zusaetzlich Beta fuer verschiedene Werte von
//a berechnet werden. Dabei gibt val_a die Anzahl der zu
//berechnenden a-Werte im Intervall a_begin bis a_end an.
//Das Intervall von a wird mit linspace diskretisiert
//und die Ergebnisse von clc_psi in beta abgespeichert.
//Die Flaechen der Einheitszelle wurde zu F=1 gesetzt.
double step_size = 0.01;
int val_a = 250;
int n_max = 30;
double F=1;

double a_begin = 0.05, a_end = 3;

double *a = malloc_real(val_a);

linspace(a_begin, a_end, val_a-1, a);

int i,j;

double beta = 0;
```

```

for(i = 0; i < val_a; i++){
beta = integral_xy(a[i], F, n_max, step_size);
printf("%lf\t%lf\n",a[i], beta);
}

}

```

Der Output des Programms ist in Abb. B.1 gezeigt.

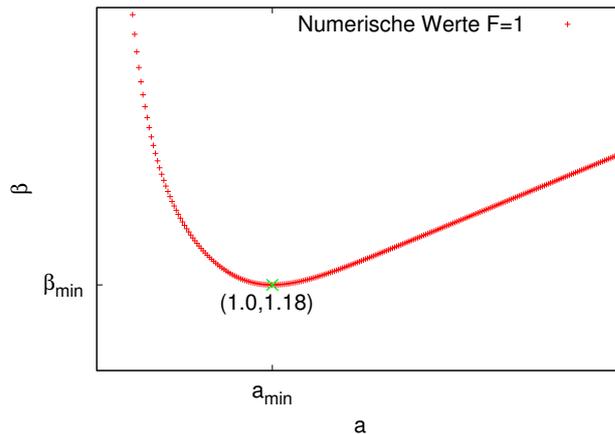


Abbildung B.1: Der Abrikosov-Parameter β_A nimmt bei $T_x = T_y = F = 1$ sein Minimum an, was gerade einem Quadratgitter der Vortexstruktur entspricht.

Nach [19] ist die analytische Lösung des Problems durch folgenden Ausdruck gegeben:

$$\beta_A = \frac{k}{\kappa\sqrt{2\pi}} \left(\sum_n -\frac{k^2}{2\kappa^2} n^2 \right)^2$$

k : Minimierungsparameter

Das Minimum wird in dieser Darstellung für $k = \kappa\sqrt{2\pi}$ angenommen und beträgt ebenfalls $\beta = 1.18$ (Abb. B.2).

An dieser Stelle sei nur kurz angemerkt, dass eine Vergrößerung der Elementarzelle β_A weiter verringert, wobei das Quadratgitter weiterhin die energetisch günstigste Konfiguration bleibt (Abb. B.3). Physikalisch ist dies so zu verstehen, dass ein Typ-II-Supraleiter Energie einsparen kann, wenn sich gegenseitig abstoßende Vortizes weit weg voneinander sind.

Dreiecksgitter:

Zur Berechnung des Dreiecksgitters kann das vorherige Programm wieder benutzt werden, wobei zunächst die Funktion durch 3.74 ersetzt werden muss:

B NUMERISCHE BERECHNUNG DES ABRIKOSOV-PARAMETERS FÜR DREIECKS- UND QUADRATGITTER

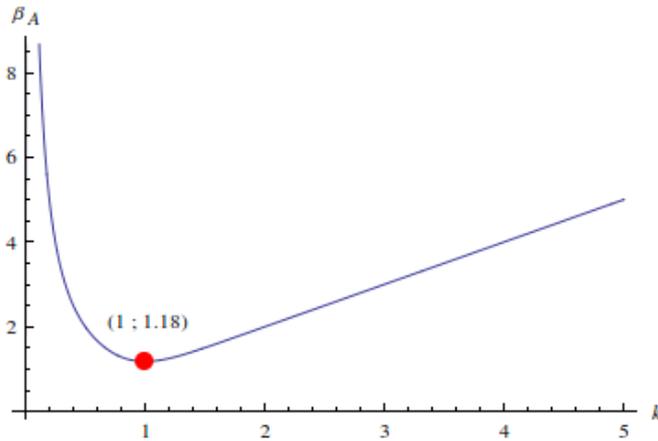


Abbildung B.2: Der Verlauf des Abrikosov-Parameters laut analytischer Lösung, wobei der Ginzburg-Landau-Parameter κ auf $1/\sqrt{2\pi}$ gesetzt wurde. Das Minimum wird aus diesem Grund auch an der Stelle $k = 1$ angenommen.

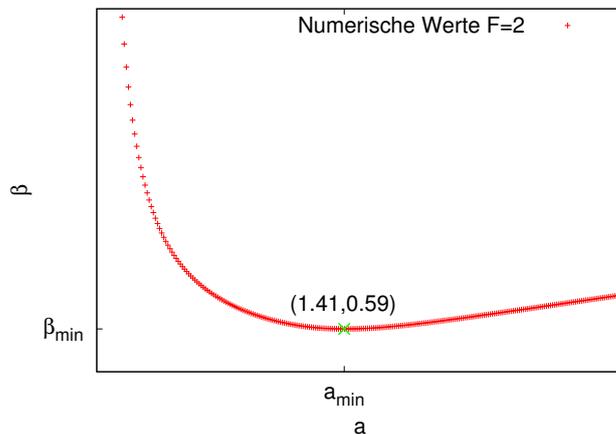


Abbildung B.3: Der Abrikosov-Parameter β_A nimmt bei $T_x = T_y = \sqrt{F} = \sqrt{2} = 1.41$ sein Minimum an. Der Wert ist gegenüber dem Fall $F=1$ geringer, weil die repulsiven Flusswirbel weiter voneinander entfernt sind.

```
double complex psi(double x, double y, double a, int n_max, double F){
    int n;
    //Per Definition ist ab=F:
    double b=F/a;
    //Innerhalb der Flaeche sind im Dreiecksgitter jedoch 2 Flusschlaeuche.
    double chi = sqrt(F/(4*M_PI));
    double complex psi = cexp(-pow(x,2)/(2*pow(chi,2)))+I*cexp(I*2*M_PI*y/a)*
    cexp(-pow(x-0.5*b,2)/(2*pow(chi,2)));
    for(n = 1; n < n_max; n++){
        psi = psi + cexp(4*M_PI*I*n*y/a)*(cexp(-pow(x-n*b,2)/(2*pow(chi,2)))
        +I*cexp(2*M_PI*I*y/a)*cexp(-pow((x-(n+0.5)*b),2)/(2*pow(chi,2))));
        psi = psi + cexp(-4*M_PI*I*n*y/a)*(cexp(-pow(x+n*b,2)/(2*pow(chi,2)))
        +I*cexp(2*M_PI*I*y/a)*cexp(-pow((x-(-n+0.5)*b),2)/(2*pow(chi,2))));
    }
}
```

```

}

return psi;
}

```

Die umständliche Integration über eine Dreiecksfläche kann umgangen werden, wenn man sich die Periodizität des Gitters zu Nutzen macht. Man kann nämlich über die gesamte Periode a in y -Richtung und b in x -Richtung integrieren und am Ende durch 4 teilen, da diese Fläche 4 Dreiecke enthält. Dies wird wie folgt innerhalb der Funktion `integral_xy` implementiert:

```

double integral_xy(double a, double F, int n_max, double step_size){

double beta = 0;
double complex psi0 = 0, psi1 = 0;
int N = (int)(1/step_size);
//Die Flaeche der Elementarzelle muss auf das Quadrat durch einen
//Faktor 4 angepasst werden.
double b=(4*F)/a;

double *list_x = malloc_real((N+1)*sizeof(double));
linspace(-b/2, b/2, N, list_x);

double *list_y = malloc_real((N+1)*sizeof(double));
linspace(-a/2, a/2, N, list_y);

int i,j;

double *list_abspsi0 = malloc_real((N+1)*sizeof(double));
double *list_abspsi1 = malloc_real((N+1)*sizeof(double));

double psi_int2 = 0;
clc_psi(N+1, list_x, list_y[0], a, n_max, F, list_abspsi0,2);
for(j = 1; j < N+1; j++){
clc_psi(N+1, list_x, list_y[j], a, n_max, F, list_abspsi1,2);
for(i = 1; i < N+1; i++){
psi_int2 += a*step_size*b*step_size*(list_abspsi1[i]
+list_abspsi1[i-1]+list_abspsi0[i]+list_abspsi0[i-1])/4;
}
copy_list(N+1, list_abspsi1, list_abspsi0);

}

double psi_int4 = 0;
clc_psi(N+1, list_x, list_y[0], a, n_max, F, list_abspsi0,4);
for(j = 1; j < N+1; j++){
clc_psi(N+1, list_x, list_y[j], a, n_max, F, list_abspsi1,4);
for(i = 1; i < N+1; i++){
psi_int4 += b*step_size*a*step_size*(list_abspsi1[i]
+list_abspsi1[i-1]+list_abspsi0[i]+list_abspsi0[i-1])/4;
}
}
}

```

```

}
copy_list(N+1, list_abspsi1, list_abspsi0);
}

//Die berechneten Integrale entsprechen 4 Dreiecksflaechen
//-> durch 4 teilen
beta = (psi_int4/4.0)/pow(psi_int2/4.0,2);
return beta;
}

```

Die Resultate sind in Abb. B.4 dargestellt und stimmen mit dem analytischen Ergebnis (Abb. B.5) überein.

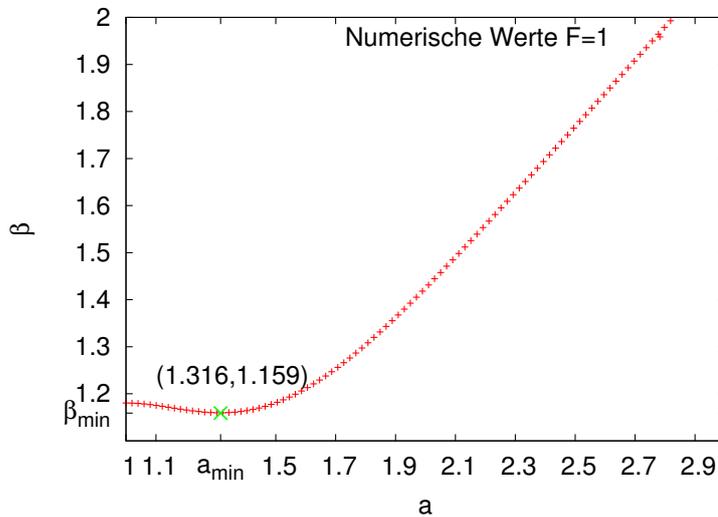


Abbildung B.4: Der Abrikosov-Parameter β_A nimmt im Dreiecksgitter für $F=ab=1$ bei $a = \sqrt[4]{3}$, d.h. $a/b = \frac{\sqrt[4]{3}}{1/\sqrt[4]{3}} = \sqrt{3}$, sein Minimum an. Er beträgt 1.159 und ist somit geringer als im Quadratgitter.

In der analytischen Lösung aus [20] konnte gezeigt werden, dass $\beta_A(a/b) = \beta_A(b/a)$. Dieselbe Eigenschaft kann auch in der numerischen Lösung beobachtet werden, wenn man den Wertebereich von a auf $[0.5, 1]$ beschränkt. In dieser Region (Abb. B.6) wird ein zu Abb. B.4 gespiegelter Verlauf beobachtet, was gerade Ausdruck dieser Eigenschaft ist.

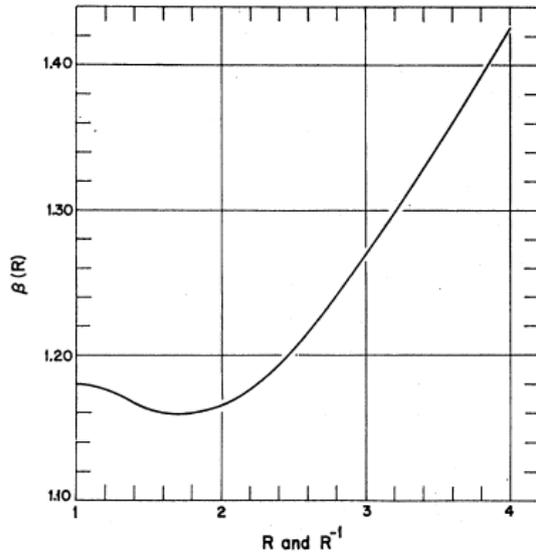


Abbildung B.5: Der Abrikosov-Parameter $\beta_A(a/b) \equiv \beta_A(R)$ nach analytischer Rechnung nimmt im Dreiecksgitter für $F=ab=1$ sein Minimum bei $a/b = \sqrt{3}$ an. In [20] wurde hierbei ausgenutzt, dass $\beta_A(a/b) = \beta_A(b/a)$. Der minimale Wert ist $\beta_A = 1.159$. (aus [20])

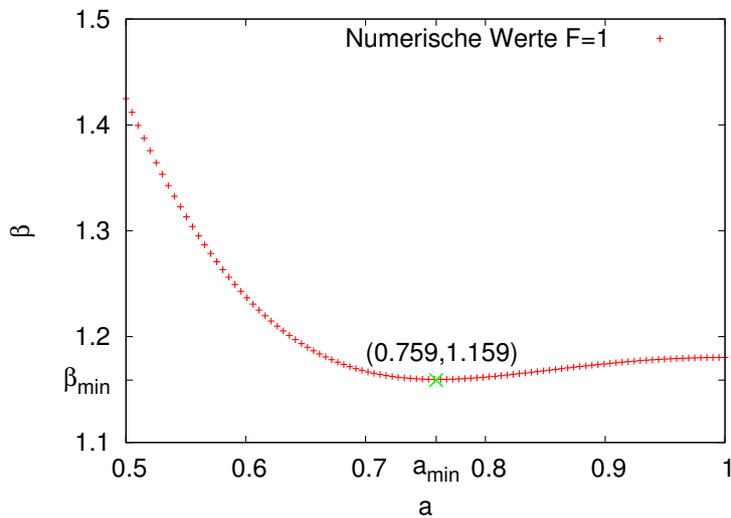


Abbildung B.6: Der Verlauf des Abrikosov-Parameters β_A ist im Bereich $[0.5,1]$ gerade die gespiegelte Version von 3.8, was gerade der Eigenschaft entspricht, dass für festes F die Relation $\beta_A(a/b) = \beta_A(b/a)$ erfüllt sein muss.

C. Numerische Berechnung der Energielücke und der kritischen Temperatur im Supraleiter

Ausgangspunkt der Rechnung soll die im Abschnitt 4.6 hergeleitete Bestimmungsgleichung 4.62 sein:

$$\begin{aligned}
 1 &= n(0)U \int_{-\hbar\omega_D}^{\hbar\omega_D} \tanh\left(\frac{\sqrt{\xi^2 + \Delta^2}}{2k_B T}\right) \frac{1}{2\sqrt{\xi^2 + \Delta^2}} d\xi & |y = \xi/\hbar\omega_D \\
 &= n(0)U \int_{-1}^1 \tanh\left(\frac{\sqrt{y^2 + \Delta'^2}}{2T'}\right) \frac{1}{2\sqrt{y^2 + \Delta'^2}} dy \\
 \frac{1}{n(0)U} &= \int_{-1}^1 \tanh\left(\frac{\sqrt{y^2 + \Delta'^2}}{2T'}\right) \frac{1}{2\sqrt{y^2 + \Delta'^2}} dy & \text{(C.1)}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \text{mit: } \Delta' &= \Delta/\hbar\omega_D \\
 T' &= k_B T/\hbar\omega_D
 \end{aligned}$$

Das Vorgehen besteht nun darin, eine Funktion zu schreiben, die das Integral für diverse Werte von T' und Δ' berechnet. Im nächsten Schritt muss dann der Schnitt beim Integralwert $\frac{1}{n(0)U}$ geplottet werden.

Bevor man zum Integral übergeht, muss zunächst überlegt werden, welchen Wertebereich Δ' und T' annehmen sollen. Hierbei kann man sich auf einige experimentelle Richtwerte stützen:

$$\begin{aligned}
 \hbar\omega_D &\sim 10^{-2} eV \\
 \Delta &\sim 10^{-3} eV \\
 k_B &= 8.6 \cdot 10^{-5} eV/K
 \end{aligned}$$

Damit werden sich T' und Δ' in einem Bereich der Größenordnung 10^{-2} bewegen. Im Rahmen der Programmierung sei $\Delta' \equiv D$ und $T' \equiv T$. Der auskommentierte Programmcode (C++) für die Berechnung und Darstellung des $\frac{1}{n(0)U} - T' - \Delta'$ -Plots lautet:

```

#include <stdio.h>
#include <math.h>
#include <stdlib.h>
#include <fstream>
#include <iostream>

void linspace(double x0, double x1, int N, double *list);
double simpson(double (*f)(double, void *params), double params[], double x0, double x1, int N);

//Der Integrand wird mit seinen beiden Parametern D und T definiert.
double f(double x, void *params)
{
    double *arr = (double *)params;
    double D = arr[0];
    double T = arr[1];

```

```

    return tanh((sqrt(x*x+D*D))/(2*T))*(1/(2*sqrt(x*x+D*D)));
}

int main(void)
{
    //x0 und x1 sind die Integrationsgrenzen
    double x0 = -1, x1 = 1;
    //N gibt die Anzahl der Schritte, in die der Integrationsbereich zerlegt
    //wird
    int N=10000;
    //Anzahl der Werte fuer D und T, die im Intervall [X_begin,X_end]
    //ausgewertet werden sollen
    const int val = 100;
    double X_begin = 0.00001, X_end = 0.05;
    //Freigabe von Speicherplatz fuer die auszuwertenden Wertepaare T und D
    double *X;
    X = (double *)malloc(val*sizeof(double));
    //Zerlegung des Wertebereichs fuer D und T in die oben genannten
    //val Werte. Dies geschieht durch die linspace-Funktion:
    linspace(X_begin, X_end, val-1, X);

    int i,j;
    //Die Ergebnisse der Berechnung werden in der Datei
    //"3dEnergiluecke.dat" gespeichert.
    std::ofstream fout("3dEnergiluecke.dat",std::ios::out);
    //In zwei for-Schleifen wird das Integral fuer alle val*val moeglichen
    //Kombinationen ausgewertet und direkt in der Datei gespeichert.
    for(j = 0; j < val; j++){
        //Die folgenden zwei Zeilen dienen zur Laufzeitabschaetzung.
        if(j%50==0)
            std::cout<<100.0*j/val<<std::endl;
        for(i = 0; i < val; i++){
            //hier werden dem Integral immer wieder zwei neue Wertepaare X[i],X[j]
            //uebergeben.
            double params[2] = {X[i],X[j]};
            fout<<X[i]<<'t'<<X[j]<<'t'<<simpson(f, params,x0,x1, N)<<std::endl;
        }
        //Der Absatz dient zu einer einfacheren Handhabung der Resultate fuer
        //gnuplot.
        fout<<std::endl;
    }
    //Nun wird die Datei geschlossen und der gesicherte Speicherplatz
    //wieder freigegeben.
    fout.close();
    free(X);
}

```

C NUMERISCHE BERECHNUNG DER ENERGIELÜCKE UND DER KRITISCHEN TEMPERATUR IM SUPRALEITER

```
//Die Berechnung des Integrals erfolgt nach der gewoehnlichen Simpson-Regel.
double simpson(double (*f)(double, void *params),double params[], double x0,
double x1, int N)
{
    double list[2*N+1];
    double h = (x1-x0)/N;
    linspace(x0,x1,2*N,list);
    double sum = 0;
    double temp1 = (*f)(list[0], params);
    double temp2 = 0;
    double temp3 = (*f)(list[2], params);
    int i;
    for (i = 0; i < N; i++){
        temp2 = (*f)(list[2*i+1], params);
        sum += h/6*(temp1+4*temp2+temp3);
        temp1 = temp3;
        temp3 = (*f)(list[2*i+4], params);
    }
    return sum;
}
```

```
//Die Funktion linspace teilt den Bereich [x0,x1] in N aequidistante
//Bereiche und speichert diese Werte in list.
void linspace (double x0, double x1, int N, double *list)
{
    double y = (x1-x0)/N;
    int i;
    for (i = 0; i < N+1; i++){
        list[i] = x0 + i*y;
    }
}
```

Die Ausgabe des Programms kann mithilfe von gnuplot visualisiert werden und ist in Abb. C.1 gezeigt. Wie man unschwer erkennt, behält die $\Delta'(T')$ -Abhängigkeit für unterschiedliche Werte von $1/n(0)U$ ihre Form bei.

Das Programm soll daher im zweiten Schritt $\Delta'(T')$ für $\frac{1}{n(0)U} \approx 4.5$ berechnen. Hierzu schreibt man die main-Funktion des bisherigen Programms ein wenig um.

```
int main(void)
{
    int N = 10000;
    double x0 = -1, x1 = 1;
    //Toleranzbereich err definieren, in dem Werte um 4.5 herum angenommen
    //werden duerfen
    double err= 0.005;
```

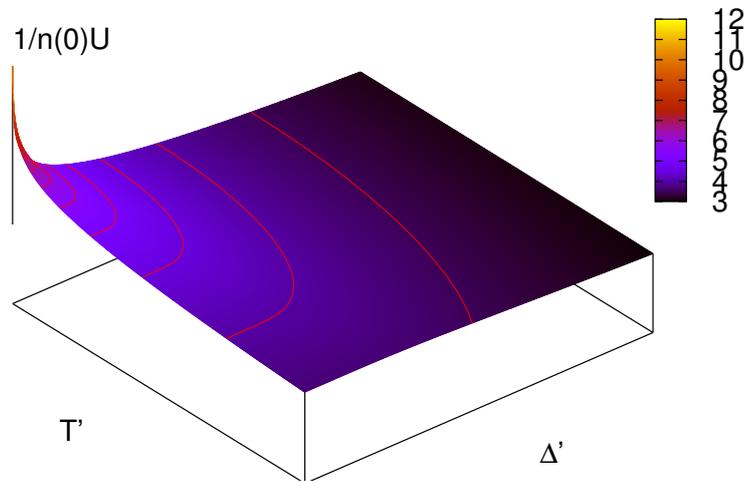


Abbildung C.1: Die Berechnung des Integrals aus C.1 liefert für beliebige Werte von $n(0)U$ qualitativ denselben Verlauf wie für $\Delta'(T')$. Dies lässt sich an den eingezeichneten Höhenlinien (rot) sehr gut erkennen.

```

double step_size = 0.001;
const int val = 100;
double X_begin = 0.00001, X_end = 0.05;

double *X;
X = (double *)malloc(val*sizeof(double));

linspace(X_begin, X_end, val-1, X);

int i,j;

double *Integral;
Integral = (double *)malloc(val*val*sizeof(double));
for(j = 0; j < val; j++){
for(i = 0; i < val; i++){
double params[2] = {X[i],X[j]};
Integral[j*val+i] = simpson(f, params,x0,x1, N);
//Wenn der Integralwert im Toleranzbereich liegt, sollen die
//Paare D und T als Wertepaar angenommen werden
if(fabs(Integral[j*val+i]-4.5)<err)
printf("%lf\t%lf\n",X[i],X[j]);
}
printf("\n");
}
free(Integral);
free(X);
}

```

C NUMERISCHE BERECHNUNG DER ENERGIELÜCKE UND DER KRITISCHEN TEMPERATUR IM SUPRALEITER

Die Ausgabe des Programms lässt sich mit gnuplot darstellen und ist in Abb. C.2 gezeigt.

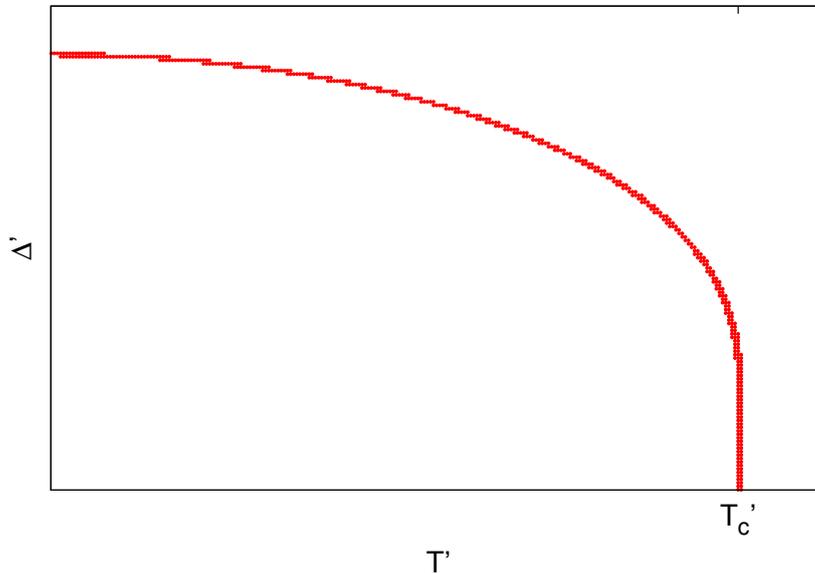


Abbildung C.2: Die Energielücke nimmt anfangs noch langsam ab und geht dann schnell gegen Null, wenn man sich T'_c nähert.

Schließlich kann aus C.1 die kritische Temperatur berechnet werden, wenn man die Bestimmungsgleichung $\Delta'(T'_c) = 0$ einsetzt. Man erhält:

$$\begin{aligned} \frac{1}{n(0)U} &= \int_{-1}^1 \tanh\left(\frac{\sqrt{y^2}}{2T'_c}\right) \frac{1}{2\sqrt{y^2}} dy && \text{|Symmetrie in } y \\ &= \int_0^1 \tanh\left(\frac{y}{2T'_c}\right) \frac{1}{y} dy \end{aligned}$$

Bezüglich der Divergenz bei $y=0$ muss kein besonderer Umstand gemacht werden, da das Integral dennoch schnell konvergiert, was man leicht sieht, wenn man die untere Grenze x_0 ein wenig näher oder weiter weg vom Nullpunkt verschiebt. Um diese Gleichung nach der kritischen Temperatur umzuformen, muss der bisherige Code nochmals leicht umgeschrieben werden:

```
int main(void)
{
    int N = 10000;
//Neue Integrationsgrenzen, wie eben diskutiert.
    double x0 = 0.00000001, x1 = 1;

    double step_size = 0.001;
    const int val = 100;
    double X_begin = 0.001, X_end = 0.05;
```

```

double *X;
X = (double *)malloc(val*sizeof(double));

linspace(X_begin, X_end, val-1, X);

int i;

double *Integral;
Integral = (double *)malloc(val*val*sizeof(double));
for(i = 0; i < val; i++){
double params[2] = {0,X[i]};
Integral[i] = simpson(f, params,x0,x1, N);
//Durch die Symmetrisierung muss der Wert des
//Integrals mal 2 gerechnet werden.
printf("%lf\t%lf\n",2*Integral[i],X[i]);
}
printf("\n");

free(Integral);
free(X);
}

```

Der numerisch berechnete Zusammenhang lässt sich dann an eine Exponentialfunktion fitten, wie in Abb. C.3 gezeigt.

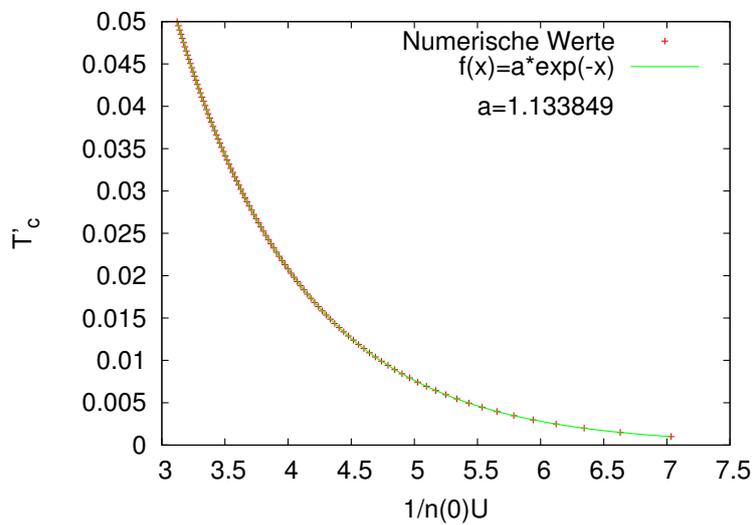


Abbildung C.3: Die kritische Temperatur kann in Abhängigkeit von $1/n(0)U$ sehr gut durch eine exponentiell fallende Funktion mit Vorfaktor 1.13 beschrieben werden.

Damit findet man also:

$$k_B T_c \approx 1.13 \hbar \omega_D e^{-1/n(0)U}$$

Literatur

- [1] JB Ketterson & SN Song. *Superconductivity*. Cambridge University Press, 1999.
- [2] James F. Annett. *Supraleitung, Suprafluiditaet und Kondensate*. Oldenbourg Wissenschaft.Vlg, 2011.
- [3] Wolfgang Nolting. *Grundkurs Theoretische Physik 6: Statistische Physik*. Springer, 2007.
- [4] David N Mermin Neil W Ashcroft. *Festkoerperphysik*. Oldenbourg Verlag, 2012.
- [5] H. Kamerlingh-Onnes. The superconductivity of mercury. *Comm. Phys. Lab. Univ. Leiden*, Nos. 122 and 124, 1911.
- [6] W. Meissner and R. Ochsenfeld. Ein neuer Effekt bei Eintritt der Supraleitfähigkeit. *Naturwissenschaften*, 21(44):787–788, November 1933.
- [7] F. London and H. London. The electromagnetic equations of the supraconductor. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A - Mathematical and Physical Sciences*, 149(866):71–88, 1935.
- [8] L. Landau. On the theory of phase transitions. *Zh. Eksp. Teor. Fiz.*, 7:19–32, 1937.
- [9] Rupert Frank, Christian Hainzl, Robert Seiringer, and Jan Philip Solovej. Microscopic derivation of ginzburg-landau theory. *American Mathematical Society Journal*, 25(3):667–713, 2012.
- [10] E.M. Lifshits L.D. Landau. *Statistical Physics*, volume 2. Butterworth-Heinemann, 1980.
- [11] H. F. Hess, R. B. Robinson, R. C. Dynes, J. M. Valles, and J. V. Waszczak. Scanning-tunneling-microscope observation of the abrikosov flux lattice and the density of states near and inside a fluxoid. *Phys. Rev. Lett.*, 62:214–216, Jan 1989.
- [12] J.C Gallop. *SQUIDS, the Josephson Effects and Superconducting Electronics*. Taylor & Francis, 1991.
- [13] J. Bardeen, L. N. Cooper, and J. R. Schrieffer. Microscopic theory of superconductivity. *Phys. Rev.*, 106:162–164, Apr 1957.
- [14] C. A. Reynolds, B. Serin, W. H. Wright, and L. B. Nesbitt. Superconductivity of isotopes of mercury. *Phys. Rev.*, 78:487–487, May 1950.
- [15] Emanuel Maxwell. Isotope effect in the superconductivity of mercury. *Phys. Rev.*, 78:477–477, May 1950.
- [16] Leon N. Cooper. Bound electron pairs in a degenerate fermi gas. *Phys. Rev.*, 104:1189–1190, Nov 1956.
- [17] P. Townsend and J. Sutton. Investigation by electron tunneling of the superconducting energy gaps in nb, ta, sn, and pb. *Phys. Rev.*, 128:591–595, Oct 1962.

- [18] Juergen Thoms. *Hochfrequenzuntersuchungen an niedrigdimensionalen Supraleitern*. PhD thesis, Fakultät Mathematik und Physik der Universität Stuttgart, 2004.
- [19] A. A. Abrikosov. On the magnetic properties of superconductors of the second group. *Soviet Physics JETP*, 5:1174, 1957.
- [20] W. H. Kleiner, L. M. Roth, and S. H. Autler. Bulk solution of ginzburg-landau equations for type ii superconductors: Upper critical field region. *Phys. Rev.*, 133:A1226–A1227, Mar 1964.