

Unkonventionelle Supraleitung

Wintersemester 2005/06

Manfred Sigrist
Institut für Theoretische Physik HPZ G13
Tel.: 01-633-2584
Email: sigrist@itp.phys.ethz.ch

Inhaltsverzeichnis

1	Konventionelle versus unkonventionelle Supraleitung	4
1.1	Konventionelle Supraleitung und Coulomb-Wechselwirkung	5
1.1.1	Elektron-Phonon-Wechselwirkung	5
1.1.2	Supraleitungsinstabilität und Retardierungseffekt	6
1.2	Stark-korrelierte Elektronensysteme	9
1.2.1	Andere Paarungskanäle	9
1.2.2	Spin-Fluktuationen als Paarungsmechanismus	10
1.2.3	Supraleitung am quantenkritischen Punkt	13
2	Verallgemeinerte BCS-Theorie	17
2.1	Die Gap-Funktion	17
2.1.1	Parität und Spin-Konfiguration	18
2.1.2	Bogolyubov-Quasiteilchen und Selbstkonsistenz-Gleichung	19
2.2	Kondensationsenergie bei $T=0$	22
2.3	Spezifische Wärme bei T_c	22
2.4	Symmetrie-Eigenschaften	24
2.4.1	Paarungspartner	24
2.4.2	Symmetrie-Operationen	24
2.4.3	Beispiele für Gapfunktionen	25
2.5	Tiefemperatur-Eigenschaften	27
2.5.1	Zustandsdichten	27
2.5.2	Thermodynamische Eigenschaften bei $T \rightarrow 0$	28
3	Zwei charakteristische Eigenschaften unkonventioneller Supraleiter	30
3.1	Nicht-magnetische Verunreinigungen	30
3.1.1	Andersons Theorem	30
3.1.2	Nicht-magnetische Verunreinigungen in unkonventionellen Supraleitern	32
3.1.3	Quasiteilchen-Zustände der verunreinigten Supraleiter	34
3.2	Spinsuszeptibilität	36
3.2.1	Paramagnetische Limitierung	39
4	Verallgemeinerte Ginzburg-Landau Theorie	41
4.1	Ordnungsparameter und konventionelle Ginzburg-Landau-Theorie	41
4.2	Ordnungsparameter für unkonventionelle Supraleiter	44
4.3	Beispiel eines zwei-komponentigen Ordnungsparameters	45
4.3.1	Zeitumkehr-Symmetrie-Verletzung und Magnetismus	48
4.3.2	Mehrfache Phasenübergänge	49

5	Theoretische Aspekte der Hochtemperatur-Supraleiter	51
5.1	Grundlagen des elektronischen Systems	51
5.1.1	Wo sind die wichtigen Elektronen?	51
5.1.2	Das t - J -Modell	53
5.2	Antiferromagnetische Spinfluktuationen und die Supraleitung	55
5.2.1	Einfaches Modell und Paarungszustände	56
5.2.2	Bildliches Verständnis	57
5.3	Der Resonating-Valence-Bond (RVB) Zustand	58
5.3.1	Molekularfeld-Analyse	59

Kapitel 1

Konventionelle versus unkonventionelle Supraleitung

Elektronen in einfachen Metallen lassen sich, analog zur Quantenflüssigkeit ^3He , bei genügend tiefen Temperaturen (viel tiefer als die Fermi-Temperatur $T_F = E_F/k_B$) gut durch die Landau'sche Fermi-Flüssigkeitstheorie beschreiben. Die elementaren Anregungen mit kleinen Energien verhalten sich wie fast freie Quasiteilchen, die analog zu freien Elektronen eine eindeutige Energie-Impuls-Beziehung besitzen. Dabei wird die ursprüngliche Wechselwirkung zwischen Elektronen grossteils durch renormierte Massen oder Geschwindigkeiten absorbiert. Viele Fermiflüssigkeiten sind jedoch bei genügend tiefen Temperaturen aufgrund der verbleibenden effektiven Wechselwirkungen zwischen den Quasiteilchen instabil. Die wichtigsten Instabilitäten sind magnetische Ordnung, Spin- und Ladungsdichtewellen und die Supraleitung. Magnetische Ordnung und Dichtewellen sind oft an spezielle Bedingungen der Bandstruktur gebunden, insbesondere die Form der Fermifläche. Die Supraleitung ist dagegen eher anspruchslos. Sie entsteht aus der Cooper-Instabilität, der Formation von gebundenen Quasiteilchen-Paaren mit (im Normalfall) entgegengesetztem Impuls und Spin, falls eine attraktive Wechselwirkung vorhanden ist.

Eine bekannte Form der attraktive Wechselwirkung zwischen Quasiteilchen leitet sich aus der Elektron-Phonon-Wechselwirkung ab. Hingegen gibt es natürlich immer noch die Coulomb-Abstossung, die der Paarbildung entgegenwirkt. Diese spielt jedoch in normalen Metallen, wo die Bandbreite, die charakteristische Energieskala der Elektronen, grösser ist als die effektive (abgeschirmte) Coulomb-Wechselwirkung, eine untergeordnete Rolle. Zudem wird sie im Zusammenhang mit der Supraleitung aufgrund eines Retardierungseffektes elegant in eine Nebenrolle verbannt, wie wir gleich sehen werden. Dies erlaubt es den Elektronen, Paare mit der höchst möglichen Symmetrie zu bilden.

Andererseits liegt in Metallen mit sogenannten stark-korrelierten Elektronen die Bandbreite der Elektronen unterhalb der Coulomb-Energie. Sie ist dann nicht mehr vernachlässigbar, insbesondere im Zusammenhang mit der Supraleitung. Die Natur hat jedoch auch in diesem Fall einen Weg gefunden, trotz der Coulomb-Abstossung Cooperpaare zu formieren. Der Trick liegt in der (nicht-trivialen) orbitalen Struktur der Cooperpaare, die die Wahrscheinlichkeit, dass gepaarte Elektronen sich stark annähern, unterdrückt. Wie wir später sehen werden, hat dies mit dem internen Drehimpuls der Paare zu tun. Wir sprechen in diesem Fall von *unkonventioneller* Supraleitung, die durch neue exotische Eigenschaften, bedingt durch die Symmetrie-Eigenschaften der Cooperpaare, charakterisiert ist.

1.1 Konventionelle Supraleitung und Coulomb-Wechselwirkung

Wir werden zunächst den Standardfall der Supraleitung betrachten, wie er schon in der Vorlesung “Supraleitung” im letzten Semester am Jellium-Modell vorgestellt wurde. Dabei werden wir jedoch einige neue Aspekte hervorheben, die für die Unterscheidung von konventioneller und unkonventioneller Supraleitung wesentlich sind.

1.1.1 Elektron-Phonon-Wechselwirkung

Wir beschreiben das Metall in einfachster Näherung als ein Gas freie Elektronen in Zuständen mit Impuls \vec{k} , Spin s und der Energie $\varepsilon_{\vec{k}} = \hbar^2 \vec{k}^2 / 2m$. Die Wechselwirkungen zwischen Elektronen führen zu Paar-Streuungen und sind verantwortlich für eventuelle Instabilitäten des Metalls. Das für die Cooperinstabilität relevante Matrixelement der Wechselwirkung hat in Impulsraum die Form

$$V_{\vec{k}, \vec{k}'} = \langle \vec{k}', -\vec{k}' | \hat{V} | \vec{k}, -\vec{k} \rangle, \quad (1.1)$$

d.h. die Streuung zwischen Zwei-Elektronenzuständen mit verschwindendem Gesamtimpuls ($|\vec{k}\rangle \otimes |-\vec{k}\rangle \rightarrow |\vec{k}'\rangle \otimes |-\vec{k}'\rangle$). Die effektive Wechselwirkung leitet man aus der renormierten Coulombwechselwirkung her

$$V_{\vec{k}, \vec{k}'}^{eff} = \frac{4\pi e^2}{q^2 \epsilon(q, \omega)} \quad (1.2)$$

mit $\vec{q} = \vec{k} - \vec{k}'$ und $\omega = \varepsilon_{\vec{k}} - \varepsilon_{\vec{k}'}$. Dabei ist $\epsilon(q, \omega)$ die dynamische Dielektrizitätskonstante, die beschreibt, wie die Elektronen durch ihre Ladung ihre geladene Umgebung polarisieren. Die Dielektrizitätskonstante ist näherungsweise gegeben durch

$$\frac{1}{\epsilon(q, \omega)} \approx \frac{q^2}{q^2 + k_{TF}^2} \left(1 + \frac{\omega_q^2}{\omega^2 - \omega_q^2} \right), \quad (1.3)$$

und enthält im ersten Term die Polarization der Elektronen und im zweiten Term diejenige der positiv geladenen Ionen. Die Länge $k_{TF}^{-1} = \lambda_{TF} / 2\pi$ entspricht der Thomas-Fermi-Abschirmlänge:

$$k_{TF}^2 = \frac{6\pi e^2 n_e}{\varepsilon_F} \Rightarrow \lambda_{TF} \approx 5 - 10 \text{ \AA} \quad (1.4)$$

in einfachen Metallen und $\omega_q = sq$ der Phononenergie (s : Schallgeschwindigkeit im Metall). Man beachte, dass die Zeitskala der Elektronen durch \hbar/E_F gegeben ist. Daher dürfen wir diese für die untersuchten Streu-Prozesse von Elektronen nahe bei der Fermifläche als instantan betrachten.¹ Somit behandeln wir den elektronische Anteil von ϵ statisch. Die Response der (schweren) Ionen hingegen passiert auf der Zeitskala $1/\omega_D$ (ω_D : Debye-Frequenz der Phononen) und ist viel langsamer, so dass der ionische Anteil dynamisch berücksichtigt werden muss. Das Verhältnis der beiden Zeitskalen offenbart sich durch \hbar Debye-Frequenz / Fermienergie = $\hbar\omega_D/\varepsilon_F \sim \sqrt{m/M_{ion}} \sim 10^{-3} - 10^{-2}$, das wir in ähnlicher Form aus der Born-Oppenheimer-Näherung kennen. Ein Blick auf (1.3) verrät, dass trotz der unterschiedlichen Zeitskalen, die Reichweite der beiden Anteile ungefähr gleich sein muss, nämlich λ_{TF} , also sehr kurz. In einem gewissen Frequenzbereich ist die Wechselwirkung attraktiv im andern repulsiv.

¹Beachte, dass die eigentliche Zeitskala für die dynamische dielektrische Response durch die Plasmafrequenz gegeben wird, $\omega_p = [4\pi n e^2 / m]^{1/2}$, die auch sehr gross ist.

1.1.2 Supraleitungsinstabilität und Retardierungseffekt

Wir formulieren nun das Vielteilchen-Problem und konzentrieren uns dabei auf den Teil der Wechselwirkung mit der stärksten Singularität für die supraleitende Instabilität, d.h. die Streuung von Elektronenpaaren mit verschwindendem Gesamtimpuls:

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_{paar} &= \frac{1}{2\Omega} \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} \sum_{s, s'} V_{\vec{k}, \vec{k}'}^{eff} c_{\vec{k}, s}^\dagger c_{-\vec{k}, s'}^\dagger c_{-\vec{k}', s'} c_{\vec{k}', s} \\ &= \frac{1}{2\Omega} \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} \sum_{s, s'} \left(V_{\vec{k}, \vec{k}'}^{ee} + V_{\vec{k}, \vec{k}'}^{ep} \right) c_{\vec{k}, s}^\dagger c_{-\vec{k}, s'}^\dagger c_{-\vec{k}', s'} c_{\vec{k}', s}\end{aligned}\quad (1.5)$$

wobei $c_{\vec{k}, s}^\dagger$ ($c_{\vec{k}, s}$) ein Elektron mit Impuls \vec{k} , Spin s und Energie $\varepsilon_{\vec{k}} = \hbar^2 \vec{k}^2 / 2m$ erzeugt (vernichtet) und Ω bezeichnet das Volumen. Die Wechselwirkung enthält einen repulsiven Anteil der Elektron-Elektron-Abstoßung $V_{\vec{k}, \vec{k}'}^{ee}$ und einen attraktiven Anteil der von der Elektron-Phonon-Wechselwirkung $V_{\vec{k}, \vec{k}'}^{ep}$ stammt.

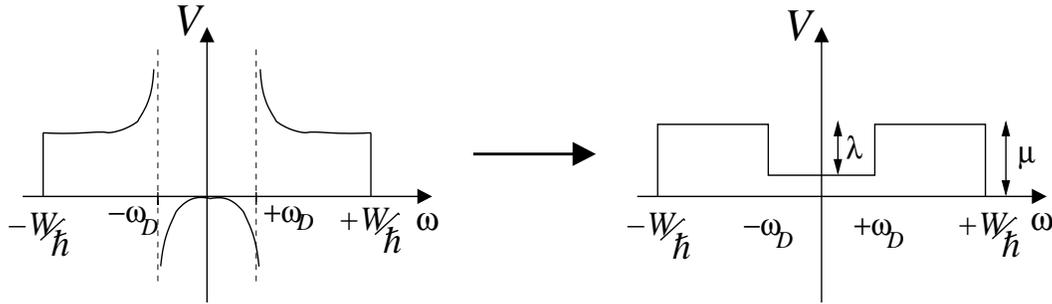


Abb. 1: Paarungspotential: "Realistisch" und schematisch (Poorman's model).

Der Energiebereich, auf dem die attraktive phonon-induzierte Wechselwirkung aktiv ist, wird begrenzt durch die Debye-Frequenz ω_D um das Fermi-Niveau herum. Höhere Energien sind unwichtig, da diese schnellen Prozessen entsprechen, die auf die Ionen-Gitterdeformationen keinen Einfluss haben. Die abgeschirmte Coulomb-Abstoßung zwischen den Elektronen wirkt hingegen über die ganze Bandbreite ($2W$) hinweg, $-W < \hbar\omega < +W$, da sie instantan ist. Der Aspekt der unterschiedlichen Zeitskalen kann in eine einfache Näherung eingebaut werden, die die wesentlichen Dinge erfasst, nämlich ein sogenanntes "poorman's model". In diesem einfachen Modell liegt das Elektronband zwischen den Energien $-W$ und $+W$ mit dem chemischen Potential bei 0 (damit entspricht $W = E_F = \hbar^2 k_F^2 / 2m$) und die Zustandsdichte wird als konstant, N_0 , angenommen. Die Wechselwirkung im Cooperpaarungskanal wird angenähert als:

$$\tilde{V}_{\vec{k}, \vec{k}'} = V_{\vec{k}, \vec{k}'}^{ee} + V_{\vec{k}, \vec{k}'}^{ep} \Rightarrow \begin{cases} N_0 V_{\vec{k}, \vec{k}'}^{ee} = N_0 V^{ee}(\xi_{\vec{k}}, \xi_{\vec{k}'}) = \begin{cases} \mu > 0 & -W \leq \xi_{\vec{k}}, \xi_{\vec{k}'} \leq +W \\ 0, & \text{sonst.} \end{cases} \\ N_0 V_{\vec{k}, \vec{k}'}^{ep} = N_0 V^{ep}(\xi_{\vec{k}}, \xi_{\vec{k}'}) = \begin{cases} \lambda < 0 & -\hbar\omega_D \leq \xi_{\vec{k}}, \xi_{\vec{k}'} \leq +\hbar\omega_D \\ 0, & \text{sonst.} \end{cases} \end{cases} \quad (1.6)$$

mit $\xi_{\vec{k}} = \varepsilon_{\vec{k}} - \varepsilon_F$ (siehe Abb.1). Dabei erhalten wir μ und λ aus der Mittelung des Potentials über den Impulsraum wie unten in (1.11) gezeigt wird.

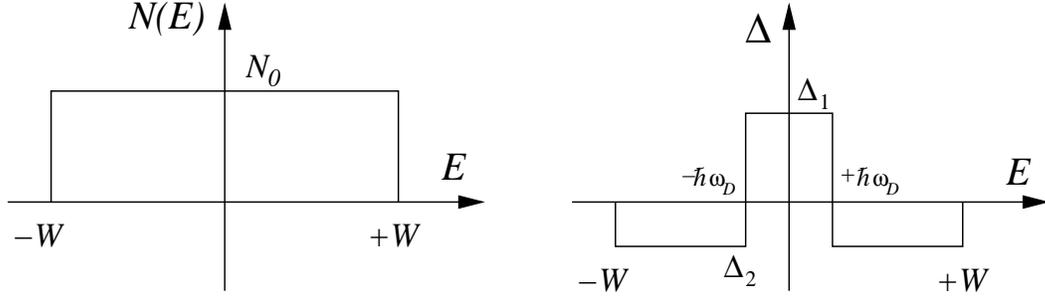


Abb. 2: Poorman's Model: Zustandsdichte konstant über ganze Bandbreite $-W < E < +W$. Gap-Funktion stückweise konstant.

Wir betrachten nun die Instabilität eines solchen Systems gegenüber Cooper-Paarung. Dafür führen wir den folgenden Hamilton-Operator ein:

$$\mathcal{H} = \sum_{\vec{k},s} \xi_{\vec{k}} c_{\vec{k},s}^\dagger c_{\vec{k},s} + \frac{1}{2\Omega} \sum_{\vec{k},\vec{k}'} \tilde{V}_{\vec{k},\vec{k}'} c_{\vec{k}\uparrow}^\dagger c_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger c_{-\vec{k}'\downarrow} c_{\vec{k}'\uparrow} \quad (1.7)$$

Wir schränken uns insofern ein, dass wir Cooperpaare mit antiparallelen Spins voraussetzen, d.h. Spin-Singulett-Paarung. Um das Vielteilchen-Problem zu lösen, führen wir die Gapfunktion als ein Molekularfeld ein:

$$\Delta_{\vec{k}} = - \sum_{\vec{k}'} \tilde{V}_{\vec{k},\vec{k}'} \langle c_{-\vec{k}'\downarrow} c_{\vec{k}'\uparrow} \rangle, \quad \Delta_{\vec{k}}^* = - \sum_{\vec{k}'} \tilde{V}_{\vec{k},\vec{k}'} \langle c_{\vec{k}'\uparrow}^\dagger c_{-\vec{k}'\downarrow}^\dagger \rangle. \quad (1.8)$$

Wie schon im letzten Semester gezeigt wurde, führt dies auf ein effektives Einteilchenproblem, das nun selbst-konsistent gelöst werden muss. Die resultierend Selbstkonsistenz-Gleichung erlaubt dann, unter der Bedingung $\Delta_{\vec{k}} \rightarrow 0$ die Übergangstemperatur T_c und die Form der Gapfunktion zu bestimmen. Unter der Annahme, dass die Fermifläche kugelförmig ist, schreiben wir

$$\Delta_{\vec{k}} = \Delta(\xi) g_{\vec{k}}, \quad (1.9)$$

so dass

$$\Delta(\xi) = -N_0 \int d\xi' \tilde{V}(\xi, \xi') \frac{\tanh(\beta\xi'/2)}{\xi'} \Delta(\xi'), \quad (1.10)$$

mit der Definition

$$\tilde{V}(\xi, \xi') = \frac{1}{\Omega} \sum_{\vec{k},\vec{k}'} g_{\vec{k}}^* V_{\vec{k},\vec{k}'} g_{\vec{k}'} \delta(\xi - \xi_{\vec{k}}) \delta(\xi' - \xi_{\vec{k}'}). \quad (1.11)$$

Gleichung (1.10) definiert ein Eigenwertproblem und legt T_c fest. Wenn wir für (1.11) die Näherung (1.6) einführen, dann entspricht der Instabilität mit höchstem T_c eine isotrope Gapfunktion, d.h. $g_{\vec{k}} = 1$. Dies bedeutet, dass der relative Drehimpuls l des Cooperpaars verschwindet. Dies ist ein wichtiger Aspekt der sehr kurzreichweitigen Wechselwirkungen.

Nun machen wir den Ansatz für die energieabhängige Gapfunktion $\Delta(\xi)$:

$$\Delta(\xi) = \begin{cases} \Delta_1 & |\xi| < \hbar\omega_D \\ \Delta_2 & \hbar\omega_D < |\xi| < W \end{cases} \quad (1.12)$$

Mit der Näherung (1.6) erhalten wir die Gleichungen

$$\begin{aligned}\Delta_1 &= (\lambda - \mu)\Delta_1 \int_0^{\hbar\omega_D} d\xi' \frac{\tanh(\beta\xi'/2)}{\xi'} - \mu\Delta_2 \int_{\hbar\omega_D}^W d\xi' \frac{\tanh(\beta\xi'/2)}{\xi'} \\ &= (\lambda - \mu)\Delta_1 \ln(1.13\hbar\omega_D/k_B T) - \mu\Delta_2 \ln(W/\hbar\omega_D)\end{aligned}\tag{1.13}$$

$$\begin{aligned}\Delta_2 &= -\mu\Delta_1 \int_0^{\hbar\omega_D} d\xi' \frac{\tanh(\beta\xi'/2)}{\xi'} - \mu\Delta_2 \int_{\hbar\omega_D}^W d\xi' \frac{\tanh(\beta\xi'/2)}{\xi'} \\ &= -\mu\Delta_1 \ln(1.13\hbar\omega_D/k_B T) - \mu\Delta_2 \ln(W/\hbar\omega_D)\end{aligned}$$

Die Bedingung, dass $\Delta_{1,2} \neq 0$ gibt T_c :

$$k_B T_c = 1.13\hbar\omega_D \exp\left(-\frac{1}{\lambda - \mu^*}\right)\tag{1.14}$$

mit

$$\mu^* = \frac{\mu}{1 + \mu \ln(W/\hbar\omega_D)}.\tag{1.15}$$

Dabei ist μ^* ein renormiertes Coulomb-Potential, d.h. die Coulombabstossung ist durch den Retardierung der Phononen-induzierten Wechselwirkung in ihrer Wirkung geschwächt. Dies lässt sich stark vereinfacht folgendermassen erklären: Ein Elektron, das sich durch das Metall bewegt, hinterlässt eine Spur von Gitterdeformation dadurch, dass es die umliegenden Ionen anzieht. Diese Deformation kommt einem leicht positiv geladenen Kielwasser gleich, das sich nur langsam, auf der Zeitskala der Phononen (Ionengitter), glättet, und somit ein anderes Elektron anziehen kann. Da das erzeugende Elektron in der Phononen-Zeitskala schon weit weggelaufen ist, kommt seine Coulomb-Abstossung kaum zum Vorschein und es besteht eine effektive Anziehung zwischen den Elektronen. Der Effekt dieser Retardierung ist umso stärker, je weiter die Elektron- und Phonon-Energieskalen auseinander liegen, d.h. je grösser $W/\hbar\omega_D$.

Man beachte, dass die Renormierung von μ selbst dann zu einer effektiven Anziehung führt, wenn $|\lambda| < |\mu|$, d.h. das Potential nirgends "wirklich attraktiv" ist. Die Lösung von (1.13) ergibt, dass die Gapfunktion bei $\xi = \hbar\omega_D$ das Vorzeichen wechselt:

$$\frac{\Delta_1}{\Delta_2} = \frac{\mu^* - \lambda}{\mu^*} < 0\tag{1.16}$$

Eine ähnliche Form für T_c erhält man aus der vollen, retardierten Lösung der Supraleitungsinstabilität mit Hilfe der Eliashberg-Formulierung für sogenannte Starkkopplungssupraleiter. Gleichung (1.14) entspricht dem schwachgekoppelten Fall. Der Starkkopplungsfall (W.L. MacMillan, Phys. Rev. 167, 331 (1968)), ergibt:

$$k_B T_c = 0.7\hbar\omega_D \exp\left(-\frac{1.04(1 + \lambda)}{\lambda - \mu^*(1 + 0.62\lambda)}\right).\tag{1.17}$$

Die zusätzlichen Korrekturen ergeben sich aus der Tatsache, dass die Kopplung an die Phonon die Elektronen weitgehender beeinflusst, z.B. ihre Zustandsdichte und den Anteil des Quasiteilchengewichtes (Anteil des Elektrons, der selbst unter der Einwirkung der Phonon als kohärente Quasiteilchen beschreibbar bleibt).

Ein interessanter Aspekt der Korrektur, die sich aus der Coulomb-Abstossung ergibt, ist die Tatsache, dass ω_D auch im Exponenten für T_c auftaucht. Damit ist die einfache Beziehung $T_c \propto M_{ion}^{-1/2}$ nicht mehr gültig.

1.2 Stark-korrelierte Elektronensysteme

1.2.1 Andere Paarungskanäle

In einfachen Metallen kann die Elektron-Phonon-Wechselwirkung die Coulomb-Abstossung überwinden, weil die kinetische Energie der Elektronen relativ gross ist. Die Leitungselektronen bewegen sich schnell, da sie sich von ihren Atomen losgelöst haben. Anders ist es für stark-korrelierte Elektronensysteme wie Übergangsmetalle, Übergangsmetall-Oxiden oder Systeme schwerer Elektronen. Dort finden wir Elektronen, die nahezu auf den Atomen lokalisiert sind. Die Elektronen-Wellenfunktionen benachbarter Atome überlappen nur wenig. Daher ist die kinetische Energie und die Bandbreite verhältnismässig klein. Gleichzeitig wird der Effekt der Coulomb-Abstossung grösser und kann zu einem zusätzlichen Schrumpfen der effektiven Bandbreite führen. Unter diesen Umständen ist der Retardierungseffekt stark geschwächt und die Elektron-Phonon-Wechselwirkung nicht mehr ausreichend, um Cooper-Paare zu bilden.

Betrachten wir die Form der renormierten Coulomb-Wechselwirkung in (1.2) und (1.3) finden wir, dass diese beinahe einer Kontaktwechselwirkung entspricht, da ihr Wirkungsradius λ_{TF} sehr kurz ist, von der Grössenordnung des mittleren Zwischenelektron-Abstandes. Daher ist es zu Demonstrationszwecken zulässig, diese näherungsweise zu schreiben als:

$$V(\vec{r} - \vec{r}') = U_c \delta(\vec{r} - \vec{r}') + V_{ep} \delta(\vec{r} - \vec{r}') \quad (1.18)$$

Damit sind sie vollständig unabhängig von \vec{k} und \vec{k}' , d.h.

$$V_{\vec{k}, \vec{k}'}^{eff} \longrightarrow \int \frac{4\pi e^2}{\vec{q}^2 \epsilon(\vec{q}, \omega)} \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} \quad (1.19)$$

Falls nun aufgrund der schmalen Bandbreite $\lambda < \mu^*$, wird die Paarung im Kanal $g_{\vec{k}} = 1$ unterdrückt. Andere Paarungskanäle $g'(\vec{k})$ sind orthogonal zu $g_{\vec{k}}$, d.h.

$$\frac{1}{\Omega} \sum_{\vec{k}} g'_{\vec{k}} = 0 \quad (1.20)$$

Die Mittelung der Wechselwirkung für $g'(\vec{k})$, gemäss (1.11), ergibt dann $\mu' = 0$. Es gibt keinen Beitrag der Coulomb-Wechselwirkung. Gleichzeitig ist aber auch $\lambda' = 0$. Auch die Elektron-Phonon-Wechselwirkung ist nicht wirksam für $g'_{\vec{k}}$.

Wie schon erwähnt, können die Paarungskanäle durch ihren relativen Drehimpuls charakterisiert werden. Für $g_{\vec{k}} = 1$ gilt $l = 0$ der vollkommen symmetrische Zustand (“s-Wellen-Paarung”). Dagegen ist zum Beispiel $g'_{\vec{k}} = k_x/k_0$ ein $l = 1$ -Zustand (“p-Wellen-Paarung”), wobei k_0 für die Normierung einführt wird, so dass gilt:

$$\frac{1}{\Omega} \sum_{\vec{k}} |g_{\vec{k}}|^2 = 1. \quad (1.21)$$

Es ist offensichtlich, dass die Kontaktwechselwirkung nur für $l = 0$ Bedeutung hat, während für $l > 0$ die Paarwellenfunktion für den Relativabstand r wie r^l verschwindet für kleine r . Das

bedeutet: die Wahrscheinlichkeit, dass sich die Elektronen nahe kommen, ist klein. Somit ist auch die Coulomb-Abstossung weniger wirksam.²

1.2.2 Spin-Fluktuationen als Paarungsmechanismus

Da sowohl die Coulomb-Abstossung als auch die Elektron-Phonon-Wechselwirkung für die Cooper-Paarung von untergeordneter Bedeutung sind, wenn der relative Drehimpuls der Cooper-Paare verschieden von Null ist, ergibt sich ein Freiraum für alternative Paarungsmechanismen. Kohn und Luttinger (1965)³ haben gezeigt, dass es in einer Fermiflüssigkeit im Prinzip möglich ist mit einer rein abstossenden Elektron-Elektron-Wechselwirkung eine Cooper-Instabilität zu haben. Dies beruht auf der Tatsache, dass die scharfe Fermikante in der Fermiverteilung für die renormierte Coulomb-Wechselwirkung auf lange Distanzen ein oszillierendes Verhalten erzeugt, die sogenannten Friedel-Oszillationen:

$$V(r) \sim \frac{\cos(2k_F r)}{r^3} \quad (1.22)$$

so dass es sowohl abstossende als auch *anziehende* Bereiche gibt. Elektronen können aufgrund der anziehenden Wechselwirkung Cooperpaare mit höheren Drehimpulsen bilden. Diese Instabilität ist jedoch sehr schwach und würde eine sehr tiefe kritische Temperatur ergeben:

$$T_c \sim T_F e^{-2l^4} \quad (1.23)$$

mit l als Drehimpulsquantenzahl.

Die Elektron-Phonon-Wechselwirkung basiert darauf, dass es neben den Elektronen noch das polarisierbare Medium des Ionengitters gibt. Die Polarization liefert eine effektive Wechselwirkung. Berk und Schrieffer (1966)⁴ haben gezeigt, dass der Spin eine ähnliche Rolle spielen kann. Dabei kann sowohl der Spin der Elektronen als auch lokalisierte Spins (assoziiert mit den Ionen) in Betracht kommen. Auch die Spins können ein polarisierbares Medium bilden.

a Ein Elektron mit Spin \vec{S} sei zur Zeit t am Punkt \vec{r} . Aufgrund der Austauschwechselwirkung polarisiert der Elektronspin seine Umgebung, d.h. die Spins der anderen Elektronen. Dies kann durch ein effektives lokales Magnetfeld \vec{H} ausgedrückt werden:

$$\vec{H}(\vec{r}, t) = -\frac{I}{\mu_B \hbar} \vec{S}(\vec{r}, t). \quad (1.24)$$

Dabei ist $\mu_B = e\hbar/2mc$ das Bohrmagneton und $I = U/\Omega$ die Austauschwechselwirkung:

$$\mathcal{H}_{ex} = \int d^3 r d^3 r' U \delta(\vec{r} - \vec{r}') \hat{\rho}_\uparrow(\vec{r}) \hat{\rho}_\downarrow(\vec{r}'). \quad (1.25)$$

Diese wird hier als abstossende Kontaktwechselwirkung zwischen Elektronen mit umgekehrtem Spin ($\rho_s(\vec{r})$ bezeichnet die Dichte der Elektronen mit Spin s am Punkt \vec{r}) beschrieben. Der Spin eines anderen Elektrons in der Nähe wird durch dieses Feld polarisiert, was mittels linearen Responses beschrieben wird:

$$\vec{S}(\vec{r}', t') = \mu_B \int d^3 r dt \chi(\vec{r}' - \vec{r}, t' - t) \vec{H}(\vec{r}, t) \quad (1.26)$$

²Man beachte, dass die Näherung der phonon-medierte Wechselwirkung zwischen Elektronen als Kontaktwechselwirkung nicht zulässig ist, falls die Phononen aus irgendeinem Grunde nur kleine Impulsüberträge liefern.

³New Mechanism for Superconductivity", W. Kohn and J.M. Luttinger, Phys. Rev. Lett. 15, 524 (1965)

⁴Effect of Ferromagnetic Spin Correlation on Superconductivity", N.F. Berk and J.R. Schrieffer, Phys. Rev. Lett. 17, 433 (1966).

wobei $\mu_B^2 \chi(\vec{r}, t)$ der dynamischen Spinsuszeptibilität für ein isotropes System entspricht. Über den Austauschterm erzeugt diese Spinpolarisation wiederum ein Molekularfeld $\vec{H}(\vec{r}')$ $= -I \vec{S}(\vec{r}', t') / (\mu_B \hbar)$, das dann auf die (Zeeman) Energie

$$\Delta E = -\frac{\mu_B}{\hbar} \vec{S}(\vec{r}', t') \cdot \vec{H}(\vec{r}', t') = \frac{I}{\hbar} \vec{S}(\vec{r}', t') \cdot \mu_B \int d^3r dt \chi(\vec{r}' - \vec{r}, t' - t) \vec{H}(\vec{r}, t) \quad (1.27)$$

führt, wobei wir (1.26) benutzt haben. Unter Verwendung von (1.24) erhalten wir schliesslich eine effektive Wechselwirkung zwischen Elektronen-Spindichten:

$$\mathcal{H}_{sf} = -\frac{I^2}{2\hbar^2} \int d^3r d^3r' \int dt dt' \{ \chi(\vec{r} - \vec{r}'; t - t') + \chi(\vec{r}' - \vec{r}; t' - t) \} \vec{S}(\vec{r}, t) \cdot \vec{S}(\vec{r}', t'). \quad (1.28)$$

Beachte, dass wir eine Symmetrisierung vorgenommen haben, da die dynamische Suszeptibilität eine retardierte Responsefunktion ist, d.h. $\chi(\vec{r}, t) = 0$ für $t < 0$. Diese Wechselwirkung stellt (sehr vereinfacht) den Austausch von sogenannten Paramagnonen zwischen Elektronen dar. Paramagnonen sind kollektive Spinanregungen eines paramagnetischen (also nicht magnetisch geordneten) Metalls.

Wir schreiben nun diese Wechselwirkung im Impuls-Frequenz-Raum:

$$\mathcal{H}_{sf} = -\frac{1}{\Omega} \frac{I^2}{4} \int d\omega \sum_{\vec{q}, \vec{k}, \vec{k}'} \text{Re}(\chi(\vec{q}, \omega)) \sum_{s_1, s_2, s_3, s_4} \{ c_{\vec{k} + \vec{q}, s_1}^\dagger \vec{\sigma}_{s_1 s_2} c_{\vec{k}, s_2} \} \cdot \{ c_{\vec{k}' - \vec{q}, s_3}^\dagger \vec{\sigma}_{s_3 s_4} c_{\vec{k}', s_4} \} \quad (1.29)$$

wobei die dynamische Suszeptibilität für eine Elektronensystem mit dem Hamilton-Operator $\mathcal{H} = \mathcal{H}_{kin} + \mathcal{H}_{ex}$ näherungsweise die Form hat:

$$\chi(\vec{q}, \omega) = \frac{\chi_0(\vec{q}, \omega)}{1 - I\chi_0(\vec{q}, \omega)} \quad \text{mit} \quad \chi_0(\vec{q}, \omega) \approx N_0 \left(1 - \frac{\vec{q}^2}{12k_F^2} + i\frac{\pi}{2} \frac{\omega}{v_F |\vec{q}|} \right), \quad (1.30)$$

wobei $\chi_0(\vec{q}, \omega)$ für kleine Impulse und Frequenzen angenähert wurde.

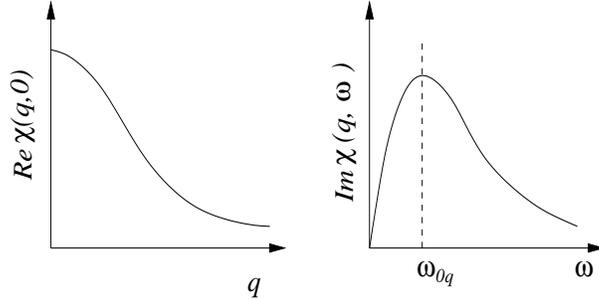


Abb.3: Spinsuszeptibilität: Die statische Suszeptibilität hat ein Maximum bei $\vec{q} = 0$ (Tendenz zu Ferromagnetismus). Der Imaginärteil der dynamischen Suszeptibilität beschreibt das Spektrum der magnetischen Anregungen und entspricht hier einer breiten Paramagnonanregung bei ω_{0q} .

Dabei wurde die Bandstruktur als $\xi_{\vec{k}} = \hbar^2 \vec{k}^2 / 2m - E_F$ angenommen. Die statische Suszeptibilität hat ein Maximum bei $\vec{q} = 0$ (Abb.3): $\chi(\vec{q} = 0, \omega = 0) = N_0 / (1 - IN_0)$ wobei die Divergenz dieses Ausdrucks der Stoner-Instabilitätsbedingung für einen ferromagnetischen Zustand entspricht: $1 = IN_0$. Der Imaginärteil $\text{Im}\chi(\vec{q}, \omega)$ hat für gegebenes $q = |\vec{q}|$ ein breites Maximum bei $\omega_{0q} = \frac{2}{\pi IN_0} (1 - IN_0) v_F q$ (Abb.3), das die stark gedämpfte Paramagnon-Anregung darstellt, deren Propagator $\chi(\vec{q}, \omega)$ ist.

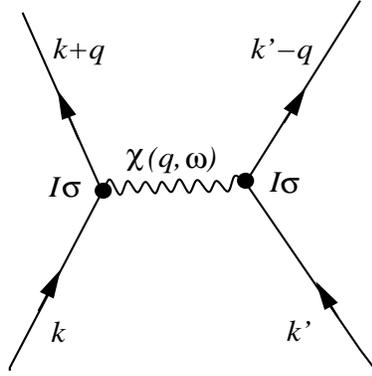


Abb.4: Wechselwirkung durch Austausch eines Paramagnons zwischen zwei Elektronen;
 $\chi(\vec{q}, \omega)$ Paramagnon-Propagator.

Analog zur Elektron-Phonon-Wechselwirkung, können wir nun den Paramagnon-Austausch als Paarungspotential benutzen. Dies wird oft als *Spinfluktuationsmechanismus* bezeichnet. Eingeschränkt auf den Cooper-Paarungskanal ergibt sich

$$\mathcal{H}'_{sf} = \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} \sum_{s_1, s_2, s_3, s_4} V_{\vec{k}, \vec{k}'; s_1 s_2 s_3 s_4} c_{\vec{k}, s_1}^\dagger c_{-\vec{k}, s_2}^\dagger c_{-\vec{k}', s_3} c_{\vec{k}', s_4} \quad (1.31)$$

mit

$$V_{\vec{k}, \vec{k}'; s_1 s_2 s_3 s_4} = -\frac{I^2}{4} \text{Re} \chi(\vec{k} - \vec{k}', \omega = \varepsilon_{\vec{k}} - \varepsilon_{\vec{k}'}) \vec{\sigma}_{s_1 s_4} \cdot \vec{\sigma}_{s_2 s_3} . \quad (1.32)$$

Wegen der Spinkonfiguration ergibt sich, dass für Spin-Singulett- ($S = 0$) und Spin-Triplett-Konfiguration ($S = 1$) eine unterschiedliche Kopplungsstärke resultiert:

$$V_{\vec{k}, \vec{k}'}^s = \frac{3I^2}{4} \text{Re} \chi(\vec{k} - \vec{k}', \omega = \varepsilon_{\vec{k}} - \varepsilon_{\vec{k}'}) \quad \text{für } S = 0 , \quad (1.33)$$

$$V_{\vec{k}, \vec{k}'}^t = -\frac{I^2}{4} \text{Re} \chi(\vec{k} - \vec{k}', \omega = \varepsilon_{\vec{k}} - \varepsilon_{\vec{k}'}) \quad \text{für } S = 1 .$$

Ähnlich wie bei der Elektron-Phonon-Wechselwirkung finden wir hier den Retardierungseffekt. Es ist leicht zu sehen, dass die Suszeptibilität für Frequenzen $\omega < \omega_{0q}$ einen grossen Beitrag gibt. Mit $q \sim 2k_F$ ergibt sich eine natürliche cutoff-Frequenz

$$\omega_s = \frac{8}{\pi I N_0} (1 - I N_0) E_F \quad (1.34)$$

so dass $\omega_s \ll E_F$ nahe bei einer ferromagnetischen Instabilität.

Da wir davon ausgehen, dass der symmetrische Paarungszustand mit $g_{\vec{k}} = 1$ wegen der Coulomb-Abstossung ausgeschlossen ist, können wir nun höhere Drehimpulse betrachten, z.B.: $l = 1$:

$$g_{\vec{k}}^\alpha = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2}k_0} (k_x + ik_y) & \alpha = +1 \\ \frac{k_z}{k_0} & \alpha = 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}k_0} (k_x - ik_y) & \alpha = -1 \end{cases} \quad (1.35)$$

Man beachte den Zusammenhang mit den Kugelfunktionen Y_{1m} . Um für das Cooperpaar mit $l = 1$ eine komplett antisymmetrische Paarwellenfunktion zu erhalten, muss die Spin-Konfiguration

ein Triplett sein, d.h. gerade unter Vertauschung der beiden Elektronen, denn der orbitale Teil ist ungerade unter $\vec{k} \rightarrow -\vec{k}$ (ungerade Parität der p-Wellenfunktion). Daraus ergibt sich, dass

$$\tilde{V}(\xi, \xi') = -\frac{I^2}{4\Omega} \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} g_{\vec{k}}^\alpha \chi(\vec{k} - \vec{k}', \omega = 0) g_{\vec{k}'}^\alpha \delta(\xi - \xi_{\vec{k}}) \delta(\xi' - \xi_{\vec{k}'}) \approx \begin{cases} V_1 & |\xi|, |\xi'| < \hbar\omega_s \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (1.36)$$

wobei

$$V_1 = -\frac{I}{12} \frac{IN_0}{(1 - IN_0)^2}. \quad (1.37)$$

Die Standard BCS-Formulierung ergibt dann

$$k_B T_c = \hbar\omega_s e^{-1/\lambda_s}, \quad (1.38)$$

mit

Die Korrektur der Coulomb-Wechselwirkung kann in diesem Falle vernachlässigt werden, da sie als beinahe-Kontaktwechselwirkung für den Drehimpuls $l \neq 0$ nur schwach ist. Aus dem gleichen Grunde spielt auch die Elektron-Phonon-Wechselwirkung eine untergeordnete Rolle. Man beachte, dass die räumliche Reichweite dieser beiden Potentiale der Thomas-Fermi-Abschirmlänge entspricht, während die Spinfluktuationen über die Korrelationslänge ξ_s wirksam sind. Die Korrelationslänge ist gegeben durch

$$\xi_s^2 \sim \int d^3r r^2 \langle \vec{S}(\vec{r}) \cdot \vec{S}(0) \rangle \quad (1.39)$$

welche sich aus der Ornstein-Zernike-Form der statischen Suszeptibilität ablesen lässt:

$$\chi(\vec{q}) \propto \frac{1}{1 + \xi_s^2 \vec{q}^2} \quad (1.40)$$

so dass

$$\xi_s^2 = \frac{1}{12k_F^2} \frac{IN_0}{1 - IN_0} \quad (1.41)$$

wobei ξ_s in der Nähe des ferromagnetischen Phaseüberganges verglichen mit k_{TF}^{-1} sehr lang werden kann. Beachte auch, dass das Spinfluktuationspotential, das wir hier betrachten, für die Drehimpulskanäle $l = 0, 2, 4, \dots$ abstossend sind (die entspricht Spin-Singulett-Paarung).

1.2.3 Supraleitung am quantenkritischen Punkt

Basierend auf diesen Betrachtung konstruieren wir nun eine vielleicht etwas naive Sicht eines Spin-Triplett-Supraleiters mit $l = 1$ ($l = 3, 5, \dots$ sind zwar auch attraktiv aber schwächer) in der Nähe eines quantenkritischen Punktes zu einem Ferromagneten. Das Stonerkriterium $1 - IN_0 = 0$ definiert den Null-Temperatur-Phasenübergang (Abb.5). Dieser Übergang kann im Prinzip durch Veränderung äusserer Parameter, wie etwa dem Druck, der die Zustandsdichte beeinflusst, durchlaufen werden. In der paramagnetischen Phase ist der Paramagnonaustausch- oder Spinfluktuationsmechanismus aktiv. Daher erwarten wir nahe am quantenkritischen Punkt eine Supraleitungsphase. Beachte, dass die Übergangstemperatur beim kritischen Punkt abnimmt, da die cutoff-Frequenz ω_s verschwindet. Diese näherungsweise Betrachtung ist natürlich nur qualitativ gültig, ist jedoch nicht so verschieden vom Result viel komplizierterer Näherungen, wie etwa der Fluktuationsaustausch-Theorien (FLEX = fluctuation exchange).

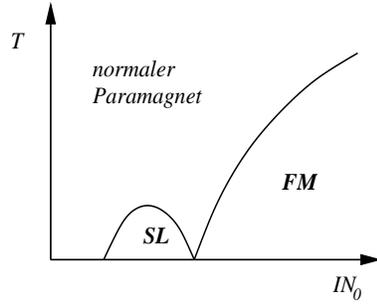


Abb.5: Phasendiagramm eines ferromagnetischen quantenkritischen Punktes als Funktion von IN_0 . Spin-Triplett-Supraleitung in der paramagnetischen Phase.

Es stellt sich die Frage, ob die Supraleitungsphase auch im ferromagnetischen Zustand auftauchen könnte. Aufgrund der Kenntnisse und Vermutungen, die wir von konventionellen Supraleitern haben, würden wir dies eher ausschliessen. Dass die Dinge jedoch nicht so einfach sind, haben die kürzlich entdeckten ferromagnetischen Supraleiter UGe_2 (Saxena et al., Nature 406, 587 (2000)) und $ZnZr_2$ (Pfleiderer et al., Nature 412, 58 (2001)) gezeigt, in denen die Supraleitung zwar in der Nähe des quantenkritischen Punktes auftaucht, aber ausschliesslich in der ferromagnetischen Phase. Dieser Fall muss aber in einem speziellen Lichte betrachtet werden, da es sich dabei um einen sogenannten nicht-unitären Supraleitungszustand handelt. Der Fall der Abb.5 wurde jedoch bisher nie wirklich in dieser Form beobachtet, mit Ausnahme des komplizierteren Falles von $\epsilon - Fe$ (K. Shimizu et al, Nature 406, 316 (2001)). Wir werden später sehen, dass die Sauberkeit des Materials hier eine wichtige Rolle spielt.

Neben der Tatsache, dass die ferromagnetisch dominiererten Spinfluktuationen einen Spin-Triplett (parallele Spins) bevorzugen, finden wir auch, dass die Cooperpaarstreuung mit kleinem Impulsübertrag $\vec{q} \rightarrow 0$ dominiert. Dies ist wichtig für die Stabilisierung des $l = 1$ -Zustandes. Wie steht es nun mit dem Paarungszustand $l = 2$ (d-Wellen-Paarung), der einem Spin-Singulett entspricht? Hier spielt die Bandstruktur eine wichtige Rolle zusammen mit der Austauschwechselwirkung. Die Bandstruktur kann nämlich dazu führen, dass $\chi(\vec{q}, 0)$ nicht mehr bei $\vec{q} = 0$ am grössten ist, sondern bei einem endlichen Vektor \vec{Q} . Dies ist dann die dominante Spinkorrelationswellenvektor und beschreibt schliesslich den Übergang zu einem antiferromagnetischen Zustand. Damit werden speziellen Impulsüberträge in der Cooper-Paarstreuung gefördert. Ferner werden in natürlicher Weise von antiferromagnetischen Spinfluktuationen Cooperpaare mit antiparallelem Spin (Spin-Singulett) bevorzugt. Wiederum ist aber im allgemeinen in starkkorrelierten Elektronensystemen der Kanal $l = 0$ durch die Coulomb-Abstossung unterdrückt. Wir werden uns hier nicht auf eine detaillierte Diskussion dieses Falles einlassen, da diese eine Einführung in die Bandstruktur und antiferromagnetische Spinfluktuationen bedingen würde. Wir werden jedoch im Zusammenhang mit der Hochtemperatur-Supraleitung ganz am Schluss der Vorlesung wieder darauf zurückkommen. Soviel jedoch! Auch für antiferromagnetischen Spinfluktuationenaustausch wird die Supraleitung in der Nähe des quantenkritischen Punktes zu langreichweitiger antiferromagnetischer Ordnung erzeugt. Da Koexistenz von Supraleitung und metallischem Antiferromagnetismus leichter zu sein scheint als im Falle von Ferromagnetismus kann es vorkommen, dass die Supraleitungsphase mit dem quantenkritischen Punkt überlappt, wie etwa im Falle von $CePd_2Si_2$ oder $CeIn_3$. Ist andererseits der Antiferromagnet ein Isolator, gibt es eine ganz klare Konkurrenz zwischen den beiden, wie etwa in der elektron-dotierten Hochtemperatur-Supraleitern oder in einigen organischen Supraleitern.

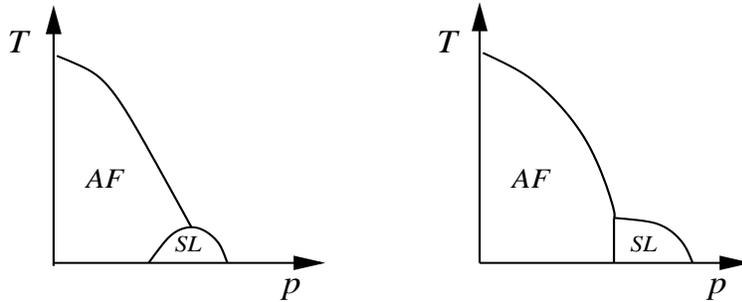


Abb.6: Antiferromagnetischer quantenkritischer Punkt als Funktion eines äusseren Parameters, z.B. Druck p : Supraleitung und Antiferromagnetismus koexistieren oder konkurrieren.

Neben den Spinfluktuationen gibt es noch andere möglich kollektive Anregungen die als Medium für einen Paarungsmechanismus herangezogen werden können. Dazu gehören Ladungsfluktuationen, Plasmonen, Excitonen, Orbitalfluktuationen u.s.w.. Ob und in welcher Form diese in der Natur eine Rolle spielen ist noch unklar. Supraleitung in starkkorrelierten Systemen ist intrinsisch sehr komplex, da die Elektronen, die für die Supraleitung verantwortlich sind auch gleichzeitig das Paarungspotential aufbauen. Diese Doppelrolle hat manchmal interessante Folgen, wie etwa *Feedback-Effekte*, da die Paarungspotentiale dadurch beeinflusst werden können, dass die Elektronen gepaart sind und folglich ein neues Energiespektrum besitzen.

Ein anderer wichtiger Aspekt ist, dass Supraleitung in starkkorrelierten Systemem oft nicht als Instabilität einer wohlverstandenen Fermiflüssigkeit auftritt, sondern dass der “Normalzustand” eher exotische Eigenschaften, unvereinbar mit dem Landau’schen Konzept der Fermiflüssigkeiten, aufweist und eine sogenannte *Non-Fermi-liquid (NFL)* darstellt. Solche NFL Eigenschaften kommen unter anderem in der Nähe eines quantenkritischen Punktes vor.

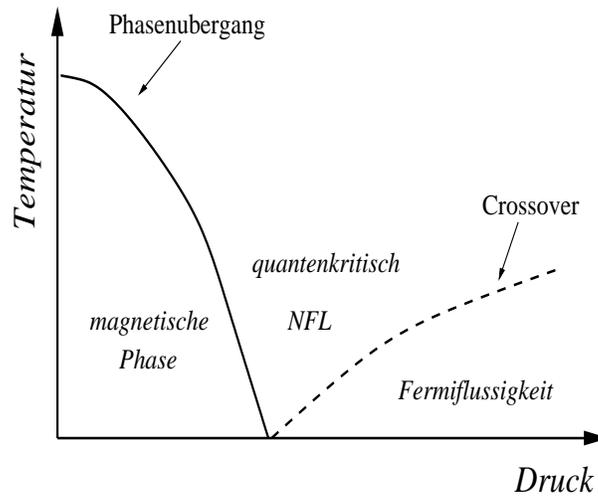


Abb. 7: Quantenphasenübergang: eine Non-Fermi-liquid Region taucht auf in der paramagnetischen Phase.

Zusätzliche Literatur:

- P. Morel and P.W. Anderson, *Calculation of the Superconducting State Parameters with Retarded Electron-Phonon Interaction*, Phys. Rev. 125, 1263 (1962).

- J.B. Ketterson and S.N. Song, *Superconductivity*, Cambridge University Press (1999).
- N.F. Berk and J.R. Schrieffer, *Effect of Ferromagnetic Spin Correlations on Superconductivity*, Phys. Rev. Lett. 17, 433 (1966).
- A.J. Leggett, *A theoretical description of the new phases of liquid ^3He* , Rev. Mod. Phys. 47, 331 (1975)
- P.W. Anderson *Basic Notions of Condensed Matter Physics*, besonders S. 287 (P.W. Anderson and W.F. Brinkman, *Theory of anisotropic superfluidity in ^3He* , Addison Wesley, Frontiers in Physics (1984).
- D. Fay and J. Appel, *Coexistence of p-state superconductivity and itinerant ferromagnetism*, Phys. Rev. B22, 3173 (1980).
- J. Singleton and C. Mielke, *Superconductors go organic*, Physics World, January 2002.
- J. Flouquet and A. Buzdin, *Ferromagnetic superconductors*, Physics World, January 2002.
- S. Sachdev, *Quantum Phase Transitions*, Physics World, April 1999.

Kapitel 2

Verallgemeinerte BCS-Theorie

In diesem Kapitel werden wir einen allgemeinen Formalismus einführen, der es uns erlaubt, sowohl konventionelle als auch unkonventionelle Supraleitung auf einem mikroskopischen Niveau zu beschreiben und den Supraleitungszustand nach seiner Symmetrie zu klassifizieren. (Literatur: M. Sigrist und K. Ueda, Rev. Mod. Phys. 63, 239 (1991)).

2.1 Die Gap-Funktion

Wir beginnen mit einem effektiven Modell, das gegeben sei durch den Hamilton-Operator

$$\mathcal{H} = \sum_{\vec{k},s} \xi_{\vec{k}} c_{\vec{k}s}^\dagger c_{\vec{k}s} + \frac{1}{2} \sum_{\vec{k},\vec{k}'} \sum_{s_1,s_2,s_3,s_4} V_{\vec{k},\vec{k}';s_1s_2s_3s_4} c_{\vec{k}s_1}^\dagger c_{-\vec{k}s_2}^\dagger c_{-\vec{k}'s_3} c_{\vec{k}'s_4} \quad (2.1)$$

wobei $\xi_{\vec{k}}$ wieder die Elektronbandenergie gemessen relativ zum Ferminiveau bezeichnet. Alle Bandrenormierungen der starken Korrelation sollen darin integriert sein, und die Fermiflüssigkeitstheorie soll anwendbar sein. Die Wechselwirkung entspricht dem Matrixelement für Cooperpaar-Streuung

$$V_{\vec{k},\vec{k}';s_1s_2s_3s_4} = \langle -\vec{k}, s_1; \vec{k}, s_2 | \widehat{V} | -\vec{k}', s_3; \vec{k}', s_4 \rangle . \quad (2.2)$$

Die Fermiantikommutation bedingt, dass $V_{\vec{k},\vec{k}';s_1s_2s_3s_4}$ folgende Eigenschaften hat

$$V_{\vec{k},\vec{k}';s_1s_2s_3s_4} = -V_{-\vec{k},\vec{k}';s_2s_1s_3s_4} = -V_{\vec{k},-\vec{k}';s_1s_2s_4s_3} = V_{-\vec{k},-\vec{k}';s_2s_1s_4s_3} . \quad (2.3)$$

Ferner nehmen wir an, dass diese Wechselwirkung nur in der Nähe der Fermifläche aktiv ist, d.h. für $-\varepsilon_c < \xi_{\vec{k}}, \xi_{\vec{k}'} < \varepsilon_c$, wobei ε_c einer charakteristischen cutoff-Energie entspricht. Wir betrachten hier den Fall schwacher Kopplung, d.h. $\varepsilon_c \ll E_F$.

Das Vielteilchen-Problem wird durch die Einführung eines Molekularfeldes in ein effektives Einteilchen-Problem verwandelt:

$$c_{-\vec{k}s} c_{\vec{k}s'} = \langle c_{-\vec{k}s} c_{\vec{k}s'} \rangle + \left[c_{-\vec{k}s} c_{\vec{k}s'} - \langle c_{-\vec{k}s} c_{\vec{k}s'} \rangle \right] , \quad (2.4)$$

wobei wir annehmen, dass der Ausdruck in der Klammer $\{[c_{-\vec{k}s} c_{\vec{k}s'} - \langle c_{-\vec{k}s} c_{\vec{k}s'} \rangle]^2\}$ klein ist im Vergleich zu $\langle c_{-\vec{k}s} c_{\vec{k}s'} \rangle$. Dies ergibt dann

$$\mathcal{H}' = \sum_{\vec{k},s} \xi_{\vec{k}} c_{\vec{k}s}^\dagger c_{\vec{k}s} - \frac{1}{2} \sum_{\vec{k},s_1,s_2} \left[\Delta_{\vec{k},s_1s_2} c_{\vec{k}s_1}^\dagger c_{-\vec{k}s_2}^\dagger + \Delta_{\vec{k},s_1s_2}^* c_{\vec{k}s_1} c_{-\vec{k}s_2} \right] + K + \text{“klein”} , \quad (2.5)$$

mit

$$K = -\frac{1}{2} \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} \sum_{s_1, s_2, s_3, s_4} V_{\vec{k}, \vec{k}'; s_1 s_2 s_3 s_4} \langle c_{\vec{k} s_1}^\dagger c_{-\vec{k} s_2}^\dagger \rangle \langle c_{-\vec{k}' s_3} c_{\vec{k}' s_4} \rangle. \quad (2.6)$$

Das Molekularfeld, das wir hier eingeführt haben, ist die sogenannte Gap-Funktion $\Delta_{\vec{k}; ss'}$, definiert durch

$$\begin{aligned} \Delta_{\vec{k}, ss'} &= - \sum_{\vec{k}', s_3 s_4} V_{\vec{k}, \vec{k}'; s s' s_3 s_4} \langle c_{\vec{k}' s_3} c_{-\vec{k}' s_4} \rangle, \\ \Delta_{\vec{k}, ss'}^* &= - \sum_{\vec{k}' s_1 s_2} V_{\vec{k}', \vec{k}; s_1 s_2 s' s} \langle c_{\vec{k}' s_1}^\dagger c_{-\vec{k}' s_2}^\dagger \rangle. \end{aligned} \quad (2.7)$$

2.1.1 Parität und Spin-Konfiguration

Bevor wir uns dem Quasiteilchen-Spektrum zuwenden, betrachten wir die grundlegenden Eigenschaften der Gapfunktion. Wir unterscheiden zwei Typen von Paarungszuständen gemäss ihrer Parität. Die Paarwellenfunktion ist im wesentlichen gegeben durch

$$\langle c_{-\vec{k} s_1} c_{\vec{k} s_2} \rangle = \phi(\vec{k}) \chi_{s_1 s_2}, \quad (2.8)$$

einen orbitalen und einen spinabhängigen Teil. Da die Wellenfunktion antisymmetrisch unter Teilchenaustausch sein muss, gilt:

$$\begin{aligned} \text{gerade Parität: } \quad \phi(\vec{k}) &= \phi(-\vec{k}) \quad \Leftrightarrow \quad \chi_{s_1 s_2} = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle) && \text{Spin-Singulett} \\ \text{ungerade Parität: } \quad \phi(\vec{k}) &= -\phi(-\vec{k}) \quad \Leftrightarrow \quad \chi_{s_1 s_2} = \begin{cases} |\uparrow\uparrow\rangle \\ \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle) \\ |\downarrow\downarrow\rangle \end{cases} && \text{Spin-Triplett} \end{aligned} \quad (2.9)$$

Dies bedeutet, dass die Parität des Paarungszustandes auch die Spin-Konfiguration bestimmt. Wenn wir davon ausgehen, dass im Supraleitungszustand die Parität bestimmt ist folgt, dass auch die Gapfunktion folgende Eigenschaft hat:

$$\Delta_{\vec{k}, s_1 s_2} = -\Delta_{-\vec{k}, s_2 s_1} = \begin{cases} \Delta_{-\vec{k}, s_1 s_2} = -\Delta_{\vec{k}, s_2 s_1} & \text{gerade} \\ -\Delta_{-\vec{k}, s_1 s_2} = \Delta_{\vec{k}, s_2 s_1} & \text{ungerade} \end{cases} \quad (2.10)$$

Daher können wir die Gapfunktionen als 2×2 -Matrizen im Spinraum darstellen, im Falle gerader Parität durch

$$\widehat{\Delta}_{\vec{k}} = \begin{pmatrix} \Delta_{\vec{k}, \uparrow\uparrow} & \Delta_{\vec{k}, \uparrow\downarrow} \\ \Delta_{\vec{k}, \downarrow\uparrow} & \Delta_{\vec{k}, \downarrow\downarrow} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \psi(\vec{k}) \\ -\psi(\vec{k}) & 0 \end{pmatrix} = i\hat{\sigma}_y \psi(\vec{k}) \quad (2.11)$$

parametrisiert durch eine skalare Funktion $\psi(\vec{k})$ mit $\psi(\vec{k}) = \psi(-\vec{k})$. Für ungerade Parität erfordert der Spin-Triplett-Zustand eine Vektorfunktion $\vec{d}(\vec{k})$, so dass

$$\widehat{\Delta}_{\vec{k}} = \begin{pmatrix} \Delta_{\vec{k},\uparrow\uparrow} & \Delta_{\vec{k},\uparrow\downarrow} \\ \Delta_{\vec{k},\downarrow\uparrow} & \Delta_{\vec{k},\downarrow\downarrow} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -d_x(\vec{k}) + id_y(\vec{k}) & d_z(\vec{k}) \\ d_z(\vec{k}) & d_x(\vec{k}) + id_y(\vec{k}) \end{pmatrix} = i \left(\vec{d}(\vec{k}) \cdot \hat{\sigma} \right) \hat{\sigma}_y, \quad (2.12)$$

wobei $\vec{d}(\vec{k}) = -\vec{d}(-\vec{k})$. Daher hat die Gapfunktion die allgemeine Eigenschaft:

$$\widehat{\Delta}_{\vec{k}} = -\widehat{\Delta}_{-\vec{k}}^T \quad (2.13)$$

Wenn wir annehmen, dass unser System vollständig rotationssymmetrisch ist, dann dürfen wir die Paarungszustände nach dem relativen Drehimpuls l der Elektronen klassifizieren. Die Parität ist dann $(-1)^l$. Somit gilt

$$l = 0, 2, 4, \dots \quad \text{Spin-Singulett} \quad (2.14)$$

$$l = 1, 3, 5, \dots \quad \text{Spin-Triplett}$$

und der konventionelle Supraleiter entspricht dem Spezialfall von $l = 0$ mit der Spin-Singulett-Konfiguration.

2.1.2 Bogolyubov-Quasiteilchen und Selbstkonsistenz-Gleichung

Der Einteilchenteil von \mathcal{H}' kann nun in Matrizenform umgeschrieben werden

$$\mathcal{H} = \sum_{\vec{k}} \mathbf{C}_{\vec{k}}^\dagger \widehat{\mathcal{E}}_{\vec{k}} \mathbf{C}_{\vec{k}} + K, \quad (2.15)$$

mit

$$\mathbf{C}_{\vec{k}} = \begin{pmatrix} c_{\vec{k}\uparrow} \\ c_{\vec{k}\downarrow} \\ c_{-\vec{k}\uparrow}^\dagger \\ c_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \widehat{\mathcal{E}}_{\vec{k}} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \xi_{\vec{k}} \hat{\sigma}_0 & \widehat{\Delta}_{\vec{k}} \\ \widehat{\Delta}_{\vec{k}}^\dagger & -\xi_{\vec{k}} \hat{\sigma}_0 \end{pmatrix}, \quad (2.16)$$

wobei $\hat{\sigma}_0$ die 2×2 -Einheitsmatrix ist. Wir suchen nun elementare Anregungen, die wir durch neue Quasiteilchen-Operatoren beschreiben:

$$\mathcal{H} = \sum_{\vec{k}} \mathbf{A}_{\vec{k}}^\dagger \widehat{E}_{\vec{k}} \mathbf{A}_{\vec{k}} + K \quad (2.17)$$

mit

$$\mathbf{A}_{\vec{k}} = \begin{pmatrix} a_{\vec{k}\uparrow} \\ a_{\vec{k}\downarrow} \\ a_{-\vec{k}\uparrow}^\dagger \\ a_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \widehat{E}_{\vec{k}} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} E_{\vec{k}+} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & E_{\vec{k}-} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -E_{-\vec{k}+} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -E_{-\vec{k}-} \end{pmatrix} \quad (2.18)$$

Es gibt eine unitäre Bogolyubov-Transformation, die beide verbindet:

$$\widehat{U}_{\vec{k}} = \begin{pmatrix} \widehat{u}_{\vec{k}} & \widehat{v}_{\vec{k}} \\ \widehat{v}_{-\vec{k}}^* & \widehat{u}_{-\vec{k}}^* \end{pmatrix} \Rightarrow \mathbf{C}_{\vec{k}} = \widehat{U}_{\vec{k}} \mathbf{A}_{\vec{k}} \quad \text{und} \quad \widehat{E}_{\vec{k}} = \widehat{U}_{\vec{k}}^\dagger \widehat{\mathcal{E}}_{\vec{k}} \widehat{U}_{\vec{k}} \quad (2.19)$$

wobei $\widehat{U}_{\vec{k}} \widehat{U}_{\vec{k}}^\dagger = \widehat{U}_{-\vec{k}}^\dagger \widehat{U}_{-\vec{k}} = \widehat{1}$.

Wir betrachten nur *unitäre* Zustände: $\widehat{\Delta}_{\vec{k}}^\dagger \widehat{\Delta}_{\vec{k}} \propto \widehat{\sigma}_0$. Dann gilt $E_{\vec{k}+} = E_{\vec{k}-}$, und wir können die Bogolyubov-Transformationen leicht bestimmen:

$$\widehat{u}_{\vec{k}} = \frac{(E_{\vec{k}} + \xi_{\vec{k}}) \widehat{\sigma}_0}{\sqrt{2E_{\vec{k}}(E_{\vec{k}} + \xi_{\vec{k}})}} \quad \text{und} \quad \widehat{v}_{\vec{k}} = \frac{-\widehat{\Delta}_{\vec{k}}}{\sqrt{2E_{\vec{k}}(E_{\vec{k}} + \xi_{\vec{k}})}} \quad (2.20)$$

mit

$$E_{\vec{k}} = \sqrt{\xi_{\vec{k}}^2 + |\Delta_{\vec{k}}|^2} \quad \text{und} \quad |\Delta_{\vec{k}}|^2 = \frac{1}{2} \text{tr} \left(\widehat{\Delta}_{\vec{k}}^\dagger \widehat{\Delta}_{\vec{k}} \right). \quad (2.21)$$

Nun können wir die Selbstkonsistenzgleichung aus (2.7) herleiten, indem wir verwenden, dass $\langle a_{\vec{k}_s}^\dagger a_{\vec{k}'_{s'}} \rangle = \delta_{\vec{k}\vec{k}'} \delta_{ss'} f(E_{\vec{k}})$ wobei $f(E) = 1/(\exp(E/k_B T) + 1)$ die Fermiverteilung ist.

$$\begin{aligned} \Delta_{\vec{k}, s_1 s_2} &= - \sum_{\vec{k}', s_3 s_4} V_{\vec{k}, \vec{k}'; s_1 s_2 s_3 s_4} \left\{ \sum_{s'} v_{\vec{k} s_4 s'} u_{\vec{k}' s' s_3} \langle a_{-\vec{k}' s'}^\dagger a_{\vec{k} s'} \rangle - u_{\vec{k} s_4 s'} v_{\vec{k}' s' s_3} \langle a_{\vec{k}' s'}^\dagger a_{\vec{k} s'} \rangle \right\} \\ &= - \sum_{\vec{k}', s_3 s_4} V_{\vec{k}, \vec{k}'; s_1 s_2 s_3 s_4} \frac{\Delta_{\vec{k}', s_4 s_3}}{2E_{\vec{k}'}} \tanh \left(\frac{E_{\vec{k}'}}{2k_B T} \right) \end{aligned} \quad (2.22)$$

Eine etwas einfachere Form der Selbstkonsistenz-Gleichung (auch Gapgleichung genannt) ergibt sich, wenn wir folgende Parametrisierung für das Paarungspotential einführen:

$$V_{\vec{k}, \vec{k}'; s_1 s_2 s_3 s_4} = J_{\vec{k}, \vec{k}'}^0 \widehat{\sigma}_{s_1 s_4}^0 \widehat{\sigma}_{s_2 s_3}^0 + J_{\vec{k}, \vec{k}'} \widehat{\sigma}_{s_1 s_4} \cdot \widehat{\sigma}_{s_2 s_3}, \quad (2.23)$$

wobei der erste Term einer Ladungsdichte-Ladungsdichte- und der zweite einer Spindichte-Spindichte-Wechselwirkung entspricht. Damit schreiben wir

$$\psi(\vec{k}) = - \sum_{\vec{k}'} \underbrace{(J_{\vec{k}, \vec{k}'}^0 - 3J_{\vec{k}, \vec{k}'})}_{= v_{\vec{k}, \vec{k}'}^s} \frac{\psi(\vec{k}')}{2E_{\vec{k}'}} \tanh \left(\frac{E_{\vec{k}'}}{2k_B T} \right) \quad (2.24)$$

für Spin-Singulett-Paarung mit $|\Delta_{\vec{k}}|^2 = |\psi(\vec{k})|^2$ und

$$\vec{d}(\vec{k}) = - \sum_{\vec{k}'} \underbrace{(J_{\vec{k}, \vec{k}'}^0 + J_{\vec{k}, \vec{k}'})}_{= v_{\vec{k}, \vec{k}'}^t} \frac{\vec{d}(\vec{k}')}{2E_{\vec{k}'}} \tanh \left(\frac{E_{\vec{k}'}}{2k_B T} \right) \quad (2.25)$$

für Spin-Triplett-Paarung mit $|\Delta_{\vec{k}}|^2 = |\vec{d}(\vec{k})|^2$. Beachte, dass für unitäre Zustände gilt $\vec{d}(\vec{k})^* \times \vec{d}(\vec{k}) = 0$.

Nun können wir die kritische Temperatur bestimmen, indem wir die Gapfunktion gegen Null gehen lassen. Daraus ergeben sich die linearisierten Gapgleichungen, die wir zunächst für den Singulett-Fall betrachten.

$$\begin{aligned}
\psi(\vec{k}) &= - \sum_{\vec{k}'} v_{\vec{k}, \vec{k}'}^s \frac{\psi(\vec{k}')}{2\xi_{\vec{k}'}} \tanh\left(\frac{\xi_{\vec{k}'}}{2k_B T}\right) \\
&= -N_0 \underbrace{\langle v_{\vec{k}, \vec{k}'}^s \psi(\vec{k}') \rangle_{\vec{k}', FS}}_{\vec{k}'\text{-Mittelung über die Fermifläche}} \underbrace{\int_0^{\epsilon_c} d\xi \frac{1}{\xi} \tanh\left(\frac{\xi}{2k_B T}\right)}_{= \ln(1.13\epsilon_c/k_B T)}
\end{aligned} \tag{2.26}$$

was einem einem Eigenwertproblem der folgenden Form entspricht:¹

$$-\lambda \psi(\vec{k}) = -N_0 \langle v_{\vec{k}, \vec{k}'}^s \psi(\vec{k}') \rangle_{\vec{k}', FS}, \tag{2.28}$$

das die kritische Temperatur bestimmt:

$$k_B T_c = 1.13 \epsilon_c e^{-1/\lambda}, \tag{2.29}$$

wobei λ dimensionslos und positiv ist. Eine analoge Gleichung ergibt sich für Spin-Triplett-Paarung:

$$-\lambda \vec{d}(\vec{k}) = -N_0 \langle v_{\vec{k}, \vec{k}'}^t \vec{d}(\vec{k}') \rangle_{\vec{k}', FS} \tag{2.30}$$

Die Näherung der Mittelung über die Fermifläche ist zulässig, solange $\epsilon_c \ll E_F$.

Betrachten wir nun die Grösse der Gapfunktion bei $T = 0$ am Beispiel eines Spin-Singulett-Zustandes. Wir parametrisieren $\psi(\vec{k}) = \Delta_m \tilde{g}_{\vec{k}}$, wobei $|\tilde{g}_{\vec{k}}| \leq 1$, so dass Δ_m der Maximalwert des Gaps ist. Die Gapgleichung bei $T = 0$ ergibt,

$$\Delta_m \tilde{g}_{\vec{k}} = -N_0 \left\langle v_{\vec{k}, \vec{k}'}^s \Delta_m \tilde{g}_{\vec{k}'} \int_0^{\epsilon_c} d\xi \frac{1}{\sqrt{\xi^2 + |\Delta_m \tilde{g}_{\vec{k}'}|^2}} \right\rangle_{\vec{k}', FS}. \tag{2.31}$$

Wir multiplizieren auf beiden Seiten mit $\tilde{g}_{\vec{k}}^*$ und mitteln \vec{k} über die Fermifläche. Dies ergibt zusammen mit (2.28), nach der Ausführung des Integrals nach ξ :

$$1 = -\lambda \left\langle |\tilde{g}_{\vec{k}}|^2 \ln\left(\frac{2\epsilon_c}{|\Delta_m \tilde{g}_{\vec{k}}|}\right) \right\rangle_{\vec{k}', FS} = -\lambda \ln\left(\frac{2\epsilon_c}{\Delta_m}\right) \left\{ 1 - \langle |\tilde{g}_{\vec{k}'}|^2 \ln(|\tilde{g}_{\vec{k}'}|) \rangle_{\vec{k}', FS} \right\} \tag{2.32}$$

und führt auf

$$\frac{\Delta_m}{k_B T_c} = 1.76 \exp\left(-\langle |\tilde{g}_{\vec{k}'}|^2 \ln(|\tilde{g}_{\vec{k}'}|) \rangle_{\vec{k}', FS}\right) \geq 1.76, \tag{2.33}$$

was im allgemeinen grösser ist als der Standard BCS-Wert 1.76, der nur im isotropen Fall $\tilde{g}_{\vec{k}} = 1$ erreicht wird.

¹Das Integral in der obigen Gleichung lässt sich folgendermassen umformen:

$$\int_0^{\epsilon_c} d\xi \frac{1}{\xi} \tanh\left(\frac{\xi}{2k_B T}\right) = \int_0^{\epsilon_c/2k_B T} dx \frac{1}{x} \tanh(x) = \ln\left(\frac{\epsilon_c}{2k_B T}\right) - \int_0^\infty dx \frac{\ln x}{\cosh^2 x} = \ln\left(\frac{\epsilon_c}{2k_B T}\right) - \ln\left(\frac{4e^\gamma}{\pi}\right) \tag{2.27}$$

wobei das zweite Integral mit oberer Grenze ∞ konvergiert. Ferner haben wir angenommen, dass $k_B T_c \ll \epsilon_c$. Hier ist $\ln \gamma = 0.577\dots$ die Euler-Konstante.

2.2 Kondensationsenergie bei $T=0$

Der Supraleitungszustand wird durch einen Energiegewinn gegenüber dem Normalzustand stabilisiert. Um diesen zu berechnen, gehen wir zum Hamilton-Operator (2.5) zurück

$$\begin{aligned}\mathcal{H}' &= \frac{1}{2} \sum_{\vec{k},s} \xi_{\vec{k}} \left(c_{\vec{k},s}^\dagger c_{\vec{k},s} - c_{-\vec{k},s} c_{-\vec{k},s}^\dagger \right) - \frac{1}{2} \sum_{\vec{k},s_1,s_2} \left[\Delta_{\vec{k},s_1s_2} c_{\vec{k},s_1}^\dagger c_{-\vec{k},s_2}^\dagger + \Delta_{\vec{k},s_1s_2}^* c_{\vec{k},s_1} c_{-\vec{k},s_2} \right] + K \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\vec{k},s} E_{\vec{k}} \left(a_{\vec{k},s}^\dagger a_{\vec{k},s} - a_{-\vec{k},s} a_{-\vec{k},s}^\dagger \right) + K.\end{aligned}\tag{2.34}$$

Der Term K lässt sich unter Verwendung der Selbstkonsistenzgleichung schreiben als

$$K = \frac{1}{2} \sum_{\vec{k},s_1,s_2} \frac{\Delta_{\vec{k},s_1s_2}^* \Delta_{\vec{k},s_2s_1}}{2E_{\vec{k}}} \tanh\left(\frac{E_{\vec{k}}}{2k_B T}\right).\tag{2.35}$$

Die Kondensationsenergie ist die Differenz zwischen der Energie im supraleitenden und im normalen Zustand: Bei $T = 0$ gilt

$$\begin{aligned}E_{Kond} &= \langle \mathcal{H}' \rangle_{\Delta} - \langle \mathcal{H}' \rangle_{\Delta=0} = \frac{1}{2} \sum_{\vec{k},s} (\xi_{\vec{k}} - E_{\vec{k}}) + \frac{1}{2} \sum_{\vec{k},s_1,s_2} \frac{\Delta_{\vec{k},s_1s_2}^* \Delta_{\vec{k},s_2s_1}}{2|E_{\vec{k}}|} \\ &= 2N_0 \left[\int_0^{\epsilon_c} d\xi (\xi - \langle \sqrt{\xi^2 + |\Delta_{\vec{k}}|^2} \rangle_{\vec{k},FS}) + \left\langle \frac{|\Delta_{\vec{k}}|^2}{2} \int_0^{\epsilon_c} d\xi \frac{1}{\sqrt{\xi^2 + |\Delta_{\vec{k}}|^2}} \right\rangle_{\vec{k},FS} \right] \\ &= -\frac{N_0}{2} \langle |\Delta_{\vec{k}}|^2 \rangle_{\vec{k},FS} = -\frac{N_0}{2} |\Delta_m|^2 \langle |\tilde{g}_{\vec{k}}|^2 \rangle_{\vec{k},FS},\end{aligned}\tag{2.36}$$

wobei wir annehmen, dass $|\Delta_{\vec{k}}| \ll \epsilon_c$ und die Zustandsdichte N_0 isotrop ist. Für eine anisotrope Zustandsdichte $N_0(\vec{k})$ können wir einfach verallgemeinern:

$$E_{kond} = -\frac{1}{2} \langle N_0(\vec{k}) |\Delta_{\vec{k}}|^2 \rangle_{\vec{k},FS}.\tag{2.37}$$

Beachte, dass

$$E_{kond} = -\frac{N_0}{2} \langle |\Delta_m \tilde{g}_{\vec{k}}|^2 \rangle_{\vec{k},FS} = -\frac{1}{2} N_0 (1.76 k_B T_c)^2 \langle |\tilde{g}_{\vec{k}}|^2 \rangle_{\vec{k},FS} \exp(-\langle |\tilde{g}_{\vec{k}}|^2 \ln |\tilde{g}_{\vec{k}}| \rangle_{\vec{k},FS})\tag{2.38}$$

kleiner ist als der BCS-Wert für eine isotrope Gapfunktion, falls die Zustandsdichte isotrop ist.

2.3 Spezifische Wärme bei T_c

Der Übergang vom Normal- zum Supraleitungszustand ist ein Phasenübergang zweiter Ordnung, wobei die Gapfunktion unterhalb von T_c kontinuierlich von Null anwächst. Um die Temperaturabhängigkeit bei T_c zu bestimmen, verwenden wir

$$\frac{1}{\lambda} = -\ln\left(\frac{T}{T_c}\right) - N_0 \int_0^{\epsilon_c} d\xi \frac{1}{\xi} \tanh\left(\frac{\xi}{2k_B T}\right).\tag{2.39}$$

Damit schreiben wir die Gapgleichung um

$$\begin{aligned} \langle |\tilde{g}_{\vec{k}}|^2 \rangle_{\vec{k},FS} \ln \left(\frac{T}{T_c} \right) &= \int_0^{\epsilon_c} d\xi \left\langle |\tilde{g}_{\vec{k}}|^2 \frac{1}{E_{\vec{k}}} \tanh \left(\frac{E_{\vec{k}}}{2k_B T} \right) \right\rangle_{\vec{k},FS} - \langle |\tilde{g}_{\vec{k}}|^2 \rangle_{\vec{k},FS} \int_0^{\epsilon_c} d\xi \frac{1}{\xi} \tanh \left(\frac{\xi}{2k_B T} \right) \\ &= |\Delta_m|^2 b \langle |\tilde{g}_{\vec{k}}|^4 \rangle_{\vec{k},FS} \end{aligned} \quad (2.40)$$

mit

$$b = - \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi \frac{d}{d\xi^2} \left\{ \frac{\tanh(\xi/2k_B T_c)}{2\xi} \right\} = \frac{7\zeta(3)}{8\pi^2 k_B^2 T_c^2}. \quad (2.41)$$

Wegen der schnellen Konvergenz wurden die Integralgrenzen bis nach ∞ (anstelle von ϵ_c) ausgedehnt ($\zeta(3) = \sum_{n=1}^{\infty} n^{-3} \approx 1.2$). Daraus folgt, dass

$$\begin{aligned} |\Delta_m(T)|^2 &\approx \frac{\langle |\tilde{g}_{\vec{k}}|^2 \rangle_{\vec{k},FS}}{b \langle |\tilde{g}_{\vec{k}}|^4 \rangle_{\vec{k},FS}} \left(1 - \frac{T}{T_c} \right) = 9.4 (k_B T_c)^2 \frac{\langle |\tilde{g}_{\vec{k}}|^2 \rangle_{\vec{k},FS}}{\langle |\tilde{g}_{\vec{k}}|^4 \rangle_{\vec{k},FS}} \left(1 - \frac{T}{T_c} \right) \\ &= 5.3 |\Delta_m(0)|^2 \left(1 - \frac{T}{T_c} \right) \frac{\langle |\tilde{g}_{\vec{k}}|^2 \rangle_{\vec{k},FS}}{\langle |\tilde{g}_{\vec{k}}|^4 \rangle_{\vec{k},FS}} \exp(\langle |\tilde{g}_{\vec{k}}|^2 \ln |\tilde{g}_{\vec{k}}| \rangle_{\vec{k},FS}) \end{aligned} \quad (2.42)$$

Nun wenden wir uns der spezifischen Wärme zu, die sich aus dem folgenden Ausdruck für die Entropiedichte ergibt:

$$\begin{aligned} S &= -\frac{2k_B}{\Omega} \sum_{\vec{k}} \{ f(E_{\vec{k}}) \ln(f(E_{\vec{k}})) + (1 - f(E_{\vec{k}})) \ln(1 - f(E_{\vec{k}})) \} \Rightarrow \\ C &= T \frac{dS}{dT} = -\frac{2}{\Omega} \sum_{\vec{k}} E_{\vec{k}} \frac{df(E_{\vec{k}})}{dT} = -\frac{2N_0}{T} \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi \left\langle \frac{\partial f(E_{\vec{k}})}{\partial E_{\vec{k}}} E_{\vec{k}}^2 - \frac{T}{2} \frac{\partial |\Delta_m(T)|^2}{\partial T} |\tilde{g}_{\vec{k}}|^2 \right\rangle_{\vec{k},FS} \end{aligned} \quad (2.43)$$

Der erste Term geht für $\Delta_m \rightarrow 0$ kontinuierlich in die spezifische Wärme des normalen Metalls über

$$C_n = -\frac{2N_0}{T} \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi \frac{\partial f(\xi)}{\partial \xi} \xi^2 \approx \frac{2\pi^2 k_B^2}{3} N_0 T. \quad (2.44)$$

Der zweite Term ergibt eine Diskontinuität von C bei T_c , wie erwartet für einen Phasenübergang zweiter Ordnung.

$$\frac{\Delta C}{C_n} \Big|_{T=T_c} = \frac{C - C_n}{C_n} \Big|_{T=T_c} = \frac{3}{2\pi^2 k_B^2 T} \langle |\tilde{g}_{\vec{k}}|^2 \rangle_{\vec{k},FS} \frac{\partial |\Delta_m(T)|^2}{\partial T} \Big|_{T \rightarrow T_c} = 1.43 \frac{\langle |\tilde{g}_{\vec{k}}|^2 \rangle_{\vec{k},FS}^2}{\langle |\tilde{g}_{\vec{k}}|^4 \rangle_{\vec{k},FS}} \quad (2.45)$$

Die Diskontinuität ist also für anisotrope Gapfunktionen im allgemeinen kleiner als der universelle BCS-Wert 1.43.

2.4 Symmetrie-Eigenschaften

2.4.1 Paarungspartner

Metalle besitzen natürlich keine rotationssymmetrische Fermiflächen. Daher sollte man sich zunächst einmal klar darüber werden, welche Elektronen im allgemeinen Cooper-Paare bilden können. Paarung findet bevorzugt zwischen Elektronen in entarteten Zuständen mit verschwindenden Gesamtimpuls statt. Wie finden wir also den geeigneten Partner für das Elektron im Zustand $|\vec{k} \uparrow\rangle$?

Spin-Singulett:

$\widehat{K}|\vec{k} \uparrow\rangle = |-\vec{k}, \downarrow\rangle$, d.h. der Partner wird durch die Zeitumkehr-Operation \widehat{K} gefunden, die normalerweise eine Symmetrie des Systems ist.

Spin-Triplett:

$\widehat{K}|\vec{k} \uparrow\rangle = |-\vec{k}, \downarrow\rangle$; $\widehat{I}|\vec{k} \uparrow\rangle = |-\vec{k}, \uparrow\rangle$; $\widehat{I}\widehat{K}|\vec{k} \uparrow\rangle = |\vec{k}, \downarrow\rangle$, d.h. wir benötigen neben der Zeitumkehr auch die Inversion \widehat{I} , um alle Partner für Triplett-Paarung zu erzeugen. Falls das Metall kein Inversionszentrum hat, ist Spin-Triplett-Paarung benachteiligt. Die Diskussion dieses Punktes ist für konkrete Systeme relativ subtil und hängt mit Spin-Bahn-Kopplung zusammen, worauf wir hier nicht tiefer eingehen können.

2.4.2 Symmetrie-Operationen

Wie wir später sehen werden, ist das Verhalten der Gapfunktion unter Symmetrie-Operationen wichtig sowohl für die Klassifizierung der supraleitenden Zustände als auch für das Verständnis der physikalischen Eigenschaften des Supraleiters. Betrachten wir zunächst die *Rotationen im reellen Raum*, die eine Gruppe G bilden (G wird im Kristall auch Punktgruppe genannt). Ein Element $g \in G$ angewendet auf einen Elektronenzustand ergibt eine Transformation des Einteilchen-Wellenvektors \vec{k}

$$gc_{\vec{k},s} = c_{R(g)\vec{k},s} \quad gc_{\vec{k},s}^\dagger = c_{R(g)\vec{k},s}^\dagger \quad (2.46)$$

d.h. \vec{k} wird rotiert und zwar mit der Darstellung von g als Rotationsmatrix im dreidimensionalen Raum (beachte $R(g)$ ist nicht notwendigerweise irreduzibel). Für die Gapfunktion folgt dann

$$g\widehat{\Delta}_{\vec{k}} = \widehat{\Delta}_{R(g)\vec{k}} \quad (2.47)$$

Die *Spinrotationen* bilden die Gruppe \mathcal{S} . Das Element $g \in \mathcal{S}$ wirkt in folgender Weise auf die Elektron-Operatoren:

$$gc_{\vec{k},s} = \sum_{s'} D_{\mathcal{S}}(g)_{ss'} c_{\vec{k},s'} \quad \text{und} \quad gc_{\vec{k},s}^\dagger = \sum_{s'} D_{\mathcal{S}}(g)_{s's}^* c_{\vec{k},s'}^\dagger \quad (2.48)$$

wobei $\widehat{D}_{\mathcal{S}}(g) = \exp(i\vec{\theta}_g \cdot \hat{\vec{\sigma}})$ die zweidimensionale Darstellung der Spinrotation ist. Für die Gapfunktion ergibt sich dann:

$$g\widehat{\Delta}_{\vec{k}} = \widehat{D}_{\mathcal{S}}^\tau(g)\widehat{\Delta}_{\vec{k}}\widehat{D}_{\mathcal{S}}(g). \quad (2.49)$$

Die Spinrotation hat natürlich keinen Einfluss auf einen Spin-Singulett-Zustand, da kein totaler Spin vorhanden ist. Dagegen finden wir für den Spin-Triplett-Fall, dass die Spin-Rotation einer gewöhnlichen Rotation des \vec{d} -Vektors entspricht:

$$g\vec{d}(\vec{k}) = \tilde{R}_{\mathcal{S}}(g)\vec{d}(\vec{k}) \quad (2.50)$$

mit $\tilde{R}_S(g)$ die dreidimensionale Darstellung der entsprechenden Rotation. Beachte, dass für Spinkonfiguration eines Paarungszustandes gilt:

$$d_x\{-|\uparrow\uparrow\rangle + |\downarrow\downarrow\rangle\} - d_y i\{|\uparrow\uparrow\rangle + |\downarrow\downarrow\rangle\} + d_z\{|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle\} \quad (2.51)$$

d.h.: der \vec{d} -Vektor steht immer senkrecht auf der Richtung der parallelen Elektronen-Spins. Weiter betrachten wir noch die *Zeitumkehr-Operation*, die in folgender Weise auf die Elektron-Operatoren wirkt:

$$\hat{K}c_{\vec{k},s} = \sum_{s'} (-i\hat{\sigma}^y)_{ss'} c_{-\vec{k},s'}^\dagger \quad (2.52)$$

woraus für die Gapfunktion folgt:

$$\hat{K}\hat{\Delta}_{\vec{k}} = \hat{\sigma}^y \hat{\Delta}_{\vec{k}}^* \hat{\sigma}^y \quad (2.53)$$

Dabei haben wir verwendet, dass $\hat{K} = -i\hat{\sigma}^y \hat{C}$ für den Spinor mit \hat{C} als Komplexkonjugierungsoperator. Diese Operation ist antilinear.

Schliesslich finden wir für die *Inversion* \hat{I} , dass

$$\hat{I}c_{\vec{k},s} = c_{-\vec{k},s} \quad \Rightarrow \quad \hat{I}\hat{\Delta}_{\vec{k}} = \hat{\Delta}_{-\vec{k}} = \begin{cases} +\hat{\Delta}_{\vec{k}} & \text{Spin-Singulett} \\ -\hat{\Delta}_{\vec{k}} & \text{Spin-Triplett} \end{cases} \quad (2.54)$$

Damit ergibt sich für die skalare Gapfunktion des Singulett-Paares und den \vec{d} -Vektor des Spin-Triplets folgende Eigenschaften:

Operation	Singulett	Triplett
Fermion-Austausch	$\psi(\vec{k}) = \psi(-\vec{k})$	$\vec{d}(\vec{k}) = -\vec{d}(-\vec{k})$
Orbitale Rotation	$g\psi(\vec{k}) = \psi(R(g)\vec{k})$	$g\vec{d}(\vec{k}) = \vec{d}(R(g)\vec{k})$
Spin-Rotation	$g\psi(\vec{k}) = \psi(\vec{k})$	$g\vec{d}(\vec{k}) = \tilde{R}_S(g)\vec{d}(\vec{k})$
Zeitumkehr	$\hat{K}\psi(\vec{k}) = \psi^*(-\vec{k})$	$\hat{K}\vec{d}(\vec{k}) = -\vec{d}^*(-\vec{k})$

2.4.3 Beispiele für Gapfunktionen

Wir geben hier einige typische Beispiele für Gapfunktionen auf einer sphärischen Fermifläche an.

Isotrope Paarung: Wir betrachten den Fall, dass $|\Delta_{\vec{k}}|$ isotrop ist. Dafür gibt es bei Spin-Singulett-Paarung nur einen Fall, der der konventionellen Supraleitung entspricht:

$$\psi(\vec{k}) = \Delta_0 \quad (2.55)$$

Es gibt aber auch einen (unkonventionellen) isotropen Paarungszustand mit $S = 1$, der Balian-Werthammer-Zustand

$$\vec{d}(\vec{k}) = \frac{\Delta_0}{k_F} (\hat{x}k_x + \hat{y}k_y + \hat{z}k_z) = \frac{\Delta_0}{k_F} \begin{pmatrix} k_x \\ k_y \\ k_z \end{pmatrix}, \quad (2.56)$$

der auf einer sphärischen Fermifläche offensichtlich “isotrop” ist im Sinne dass

$$|\Delta_{\vec{k}}|^2 = \frac{1}{2} \text{tr}(\widehat{\Delta}_{\vec{k}}^\dagger \widehat{\Delta}_{\vec{k}}) = |\vec{d}(\vec{k})|^2 = |\Delta_0|^2 \frac{|\vec{k}|^2}{k_F^2} = |\Delta_0|^2, \quad (2.57)$$

so dass $\tilde{g}_{\vec{k}} = 1$ wie bei einem konventionellen Supraleiter. Wir werden später sehen, dass sich dieser Zustand nur bezüglich seiner Spin-Eigenschaften wesentlich von einem konventionellen Paarungszustand unterscheidet. Dieser Zustand wurde zuerst von Balian und Werthammer theoretisch als der im Schwachkopplungslimes stabilste Spin-Triplett-Paarungszustand vorgeschlagen. (Beachte, dass nach (2.36) und (2.38) eine isotrope Gapfunktion für gegebenes T_c die höchste Kondensationsenergie liefert.) Dieser Paarungszustand entspricht aber auch in der Realität der *B-Phase* von supraflüssigem ^3He und ist stabil unter Normaldruck.

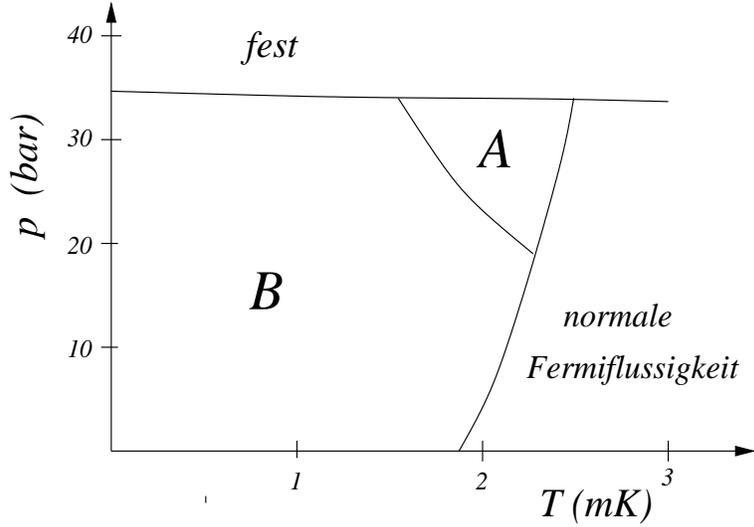


Abb. 1: Phasendiagramm für ^3He : Temperatur - Druck; wir unterscheiden die suprafluide A- und die B-Phase. Bei hohem Druck wird Helium fest.

Anisotroper Spin-Singulett-Zustand: Die natürlichsten unkonventionellen Spin-Singulett-Zustände leiten sich aus den $l = 2$ -Paarungszuständen her, d.h. *d-Wellen-Paarung*. Zum Beispiel

$$\psi(\vec{k}) = \frac{\Delta_0}{k_F} (k_x^2 - k_y^2) \quad (2.58)$$

ist der Paarungszustand, der in Hochtemperatur-Supraleitern realisiert ist, die jedoch wegen ihrer ausgeprägten Schichtstruktur quasizweidimensionale Systeme darstellen. Die Gapfunktion hat linienförmige Nullstellen für $(k_x, k_y) \parallel (\pm 1, \pm 1)$. Es gibt unter den Schweren-Elektronen-Systemen eine Reihe möglicher *d*-Wellen-Supraleiter, deren konkrete Form aber noch nicht bekannt ist (UPd_2Al_3 , CeIn_3 , CePd_2Si_2 , ...).

Anisotroper Spin-Triplett-Zustand: Ein weiterer wichtiger Spin-Triplett-Zustand hat die Form:

$$\vec{d}(\vec{k}) = \frac{\Delta_0}{k_F} \hat{z}(k_x \pm ik_y), \quad (2.59)$$

mit

$$|\Delta_{\vec{k}}|^2 = |\Delta_0|^2 \frac{k_x^2 + k_y^2}{k_F^2}. \quad (2.60)$$

Dieser Gap hat punktförmige Nullstellen für $\vec{k} \parallel (0, 0, \pm 1)$. Dieser Zustand hat zudem einen endlichen Drehimpuls entlang der z -Achse, $L_z = \pm 1$, und man nennt ihn *chiral* oder ABM-Phase (Anderson-Brinkmann-Morel). Diese Form der Cooper-Paarung ist in ${}^3\text{He}$ unter Druck als sogenannte *A-Phase* realisiert und im quasizweidimensionalen Metall Sr_2RuO_4 .²

Nicht-unitärer Zustand: Wir haben uns bisher auf unitäre Zustände beschränkt ($\widehat{\Delta}_{\vec{k}}^\dagger \widehat{\Delta}_{\vec{k}} \propto \sigma^0$), da die Behandlung der nicht-unitären Zustände im allgemeinen viel komplizierter ist. Nicht-unitäre Zustände gibt es nur für Spin-Triplett-Paarung. Ein bekanntes Beispiel ist

$$\vec{d}(\vec{k}) = \frac{\Delta_0}{k_F} (\hat{x} - i\hat{y})k_z \quad \Rightarrow \quad \widehat{\Delta}_{\vec{k}} = \begin{pmatrix} -k_z & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.61)$$

die A_1 -Phase von ${}^3\text{He}$. Dieser Zustand hat Paarung nur in einem Spinzustand, z.B. $|\uparrow\uparrow\rangle$, und nicht im anderen $|\downarrow\downarrow\rangle$.

$$i\vec{d}(\vec{k})^* \times \vec{d}(\vec{k}) = \hat{z} \frac{|\Delta_0|^2 k_z^2}{k_F^2} \quad (2.62)$$

gibt den Spinerwartungswert für die Cooper-Paare. Beachte, dass für unitäre Zustände $i\vec{d}(\vec{k})^* \times \vec{d}(\vec{k}) = 0$. Dieser Zustand lässt die Hälfte aller Elektronen ungepaart und ist folglich nicht stabil, ausser wenn wir ein Magnetfeld anlegen. Wegen des Meissnereffektes ist es jedoch schwierig, dies in einem Supraleiter zu realisieren. In ${}^3\text{He}$ wird diese Phase jedoch im Magnetfeld bei hohem Druck beobachtet. Im allgemeinen gilt jedoch, dass Supraleiter in beiden Spinkomponenten identische Paare bevorzugen. Die Ausnahme bilden wahrscheinlich Supraleitungsphasen in einem ferromagnetischen Metall. Beispiele sind UGe_2 und ZnZr_2 , wo eine gute Chance besteht, dass der Supraleitungszustand nicht-unitär ist.

2.5 Tieftemperatur-Eigenschaften

Wir untersuchen nun die Eigenschaften des Quasiteilchen-Spektrums, das besonders bei tiefen Temperaturen wichtig wird. Dabei spielt natürlich die Form der Energielücke eine wichtige Rolle, die durch die Gapfunktion beschrieben wird.

2.5.1 Zustandsdichten

Das Spektrum der Bogolyubov-Quasiteilchen ist gegeben durch

$$E_{\vec{k}} = \sqrt{\xi_{\vec{k}}^2 + |\Delta_{\vec{k}}|^2}. \quad (2.63)$$

Die Zustandsdichte in der Nähe der Fermifläche berechnet sich als

$$\begin{aligned} N(E) &= \frac{2}{\Omega} \sum_{\vec{k}} \delta(E_{\vec{k}} - E) = N_0 \int \frac{d\Omega_{\vec{k}}}{4\pi} \int d\xi \delta(\sqrt{\xi^2 + |\Delta_m \tilde{g}_{\vec{k}}|^2} - E) \\ &= N_0 \int \frac{d\Omega_{\vec{k}}}{4\pi} \frac{E}{\sqrt{E^2 - |\Delta_m \tilde{g}_{\vec{k}}|^2}}. \end{aligned} \quad (2.64)$$

²Bezüglich Nullstellen in der Gapfunktion von Spin-Triplett-Supraleitern gibt es die Blount'sche Regel, dass es nur Punkt- aber keine Linien-Nullstellen gibt, falls die Spin-Bahn-Kopplung stark ist.

Die Zustandsdichte eines Supraleiters mit isotroper Energielücke erhält man sofort mit $\tilde{g}_{\vec{k}} = 1$:

$$N(E) = N_0 \begin{cases} 0 & |E| < \Delta_m \\ \frac{E}{\sqrt{E^2 - |\Delta_m|^2}} & \Delta_m \geq |E|^2 \end{cases} \quad (2.65)$$

Es gibt keine Zustände unterhalb der Lücke und unmittelbar oberhalb von Δ_m ergibt sich eine Wurzelsingularität, worin sich die aus der Lücke verdrängten Zustände befinden. Für grössere Energien geht $N(E)$ allmählich in die Zustandsdichte des Normalzustandes über. Diese Form der Zustandsdichte findet man für konventionelle Supraleiter und für den Balian-Werthammer-Zustand.

Als nächstes betrachten wir eine Zustand mit linienförmiger Nullstelle: $\Delta_{\vec{k}} = \Delta_m \cos\theta$ (Knotenlinie am Äquator). Dieser Zustand wird auch *Polarzustand* genannt.

$$N(E) = N_0 \frac{E}{\Delta_m} \int dx \operatorname{Re} \left(\frac{1}{\sqrt{(E/\Delta_m)^2 - x^2}} \right) = N_0 \frac{E}{\Delta_m} \begin{cases} \frac{\pi}{2} & |E| < \Delta_m \\ \arcsin \left(\frac{\Delta_m}{E} \right) & \Delta_m \geq |E| \end{cases} \quad (2.66)$$

Offensichtlich gibt es Zustände bis zu verschwindender Energie. Ihre Dichte nimmt jedoch kontinuierlich ab für $E \rightarrow 0$. In diesem Fall wie $N(E) \propto E$. Dieses lineare Verhalten ist eine charakteristische Eigenschaft von Energielücken mit linienförmigen Nullstellen. Bei $E = \Delta_m$ (maximale Lücke) gibt es keine Singularität.

Schliesslich betrachten wir noch ein Beispiel mit punktförmigen Nullstellen, den sogenannten *Axialzustand*, der dem ABM-Zustand entspricht: $|\Delta_{\vec{k}}| = \Delta_m \sin\theta$:

$$N(E) = N_0 \frac{E}{\Delta_m} \int dx \operatorname{Re} \left(\frac{1}{\sqrt{x^2 + ((E/\Delta_m)^2 - 1)}} \right) = N_0 \frac{E}{\Delta_m} \ln \left| \frac{1 + \frac{E}{\Delta_m}}{1 - \frac{E}{\Delta_m}} \right| \quad (2.67)$$

Man sieht leicht, dass für $E \rightarrow 0$ ein quadratisches Verhalten auftaucht, $N(E) \propto E^2$. Auch dies ist bestimmt durch die Topologie der Nullstellen in der Lücke, den Punkten am Nord- und Südpol. Offensichtlich ist die Zahl der Niederenergie-Zustände unterdrückt, verglichen mit dem Fall der Polarzustände mit Linien-Nullstellen. Die Singularität bei $E = \Delta_m$ ist logarithmisch.

2.5.2 Thermodynamische Eigenschaften bei $T \rightarrow 0$

Wir beschränken uns hier auf die eingehende Behandlung der spezifische Wärme. Für die isotrope Lücke finden wir

$$\begin{aligned} C(T) &= \frac{2}{\Omega} \sum_{\vec{k}} E_{\vec{k}} \frac{df(E_{\vec{k}})}{dT} = \int dE N(E) E \frac{df(E)}{dT} = \int dE N(E) \frac{E^2}{k_B T^2} \frac{1}{4 \cosh^2(E/2k_B T)} \\ &\approx \frac{N_0}{4k_B T^2} \int_{\Delta_m}^{\infty} dE \frac{E^3}{\sqrt{E^2 - \Delta_m^2}} e^{-E/k_B T} \approx N_0 k_B \left(\frac{\Delta_m}{k_B T} \right)^2 \sqrt{2\pi k_B T \Delta_m} e^{-\Delta_m/k_B T} \end{aligned} \quad (2.68)$$

Die spezifische Wärme ist exponentiell unterdrückt mit der Energielücke als charakteristische Energieskala (thermisch aktiviert).

Wenden wir uns nun den Energielücken mit Nullstelle zu. Hier ist das Verhalten der Zustandsdichte für $E \rightarrow 0$ ausschlaggebend. Wir haben gesehen, dass $N(E) \propto E^n$ (Potenzverhalten). Daher gilt das einfache Skalierverhalten

$$C(T) = \int dE N(E) \frac{E^2}{k_B T^2} \frac{1}{4 \cosh^2(E/2k_B T)} \propto \int dE E^n \frac{E^2}{k_B T^2} \frac{1}{4 \cosh^2(E/2k_B T)} \propto T^{n+1} \quad (2.69)$$

Das bedeutet:

$$C(T) \propto \begin{cases} T & \text{ohne Lücke (auch Normalzustand)} \\ T^2 & \text{linienförmige Nullstellen} \\ T^3 & \text{punktförmige Nullstellen} \end{cases} \quad (2.70)$$

Dieses Verhalten ist jedoch nur sichtbar bei sehr tiefen Temperaturen $T \ll T_c$ in asymptotischer Näherung.

Auch andere thermodynamische Grössen haben Potenzverhalten:

Grösse	Linien-Nullstellen	Punkt-Nullstellen
spez. Wärme $C(T)$	T^2	T^3
London Eindringtiefe $\lambda(T) - \lambda(0)$	T (T^3)	T^2 (T^4)
NMR $1/T_1$	T^3	T^5
thermische Leitfähigkeit $\kappa(T)$	T^2	T^3
Ultraschallabsorption $\alpha(T)$	T (T^3)	T^2 (T^4)

Beachte, dass die Angaben mit T^a (T^b) Richtungsabhängigkeiten beinhalten.

Potenzverhalten kann ein Hinweis für unkonventionelle Supraleitung sein. Im allgemeinen ist jedoch die Interpretation von Tieftemperatur-Daten schwierig, da verschiedene Einflüsse zu tieferenergetischen Beiträgen führen können. Ferner werden wir sehen, dass die obigen thermodynamischen Eigenschaften nur für super-saubere Materialien gültig sind und durch Verunreinigungen stark beeinflusst werden können.

Kapitel 3

Zwei charakteristische Eigenschaften unkonventioneller Supraleiter

Es ist nicht einfach einem Supraleiter anzusehen, ob er konventionell oder unkonventionell ist. Die einfachsten Eigenschaften, wie der verschwindende elektrische Widerstand oder das Verhalten im magnetischen Feld (Meissner-Ochsenfeld-Effekt oder Vortex-Phase) ist beiden Typen gemeinsam. Da die Cooper-Paare nicht unmittelbar beobachtbar sind, bleiben auch ihre internen Strukturen schwer zugänglich. Es gibt jedoch eine Reihe von Indikatoren, die uns zeigen, ob ein Supraleiter unkonventionell ist. Manche “Tests” sind sehr aufwendig, andere hingegen relativ einfach. Wir werden hier zwei Eigenschaften betrachten, die sich als natürliche Tests anbieten: das Verhalten der Supraleitung für variable Konzentrationen nicht-magnetischer Verunreinigungen und die Spinsuszeptibilität der supraleitenden Phase.

3.1 Nicht-magnetische Verunreinigungen

3.1.1 Andersons Theorem

Anderson hat kurz nach der Publikation der BCS-Theorie gezeigt, dass ein Supraleiter durch Verunreinigungen, die gewöhnlichen Streupotentialen entsprechen, nicht beeinträchtigt wird (P.W. Anderson, J. Phys. Chem. Solids 11, 26 (1959)). Verunreinigungen von diesem Typ werden als “nicht-magnetisch” bezeichnet und lassen das System zeitumkehrinvariant.

Während in einem sauberen Metall die Elektronenzustände durch ihren Wellenvektor \vec{k} charakterisiert sind ($|\phi_{\vec{k}}\rangle$), führt das stationäre Störpotential U von Verunreinigungen auf neue Zustände $|\psi_n\rangle$.

$$\hat{H}|\phi_{\vec{k},s}\rangle = \xi_{\vec{k}}|\phi_{\vec{k},s}\rangle \quad \rightarrow \quad (\hat{H} + \hat{U})|\psi_{n,s}\rangle = \xi_n|\psi_{n,s}\rangle \quad (3.1)$$

Auch die Zustände $|\psi_{n,s}\rangle$ (adiabatisch verbunden mit $|\phi_{\vec{k},s}\rangle$) bilden ein vollständiges orthonormales Set von Basiszuständen der Elektronenzustände. Daher gilt

$$|\psi_{n,s}\rangle = \sum_{\vec{k}} |\phi_{\vec{k},s}\rangle \langle \vec{k} | n \rangle \quad \text{und} \quad |\phi_{\vec{k},s}\rangle = \sum_m |\psi_{m,s}\rangle \langle m | \vec{k} \rangle \quad (3.2)$$

Die entarteten Partner-Elektronenzustände für Cooper-Paare sind durch die Zeitumkehr-Operation verbunden:

$$\widehat{K}|\phi_{\vec{k},s}\rangle = -i \sum_{s'} \sigma_{ss'}^y |\phi_{-\vec{k},-s}\rangle = -i \sum_{n,s'} \sigma_{ss'} |\psi_{\bar{n},s'}\rangle \langle n|\vec{k}\rangle^* \quad (3.3)$$

und

$$\widehat{K}|\psi_{n,s}\rangle = -i \sum_{s'} \sigma_{ss'}^y |\psi_{\bar{n},s'}\rangle = -i \sum_{\vec{k},s'} |\phi_{-\vec{k},s'}\rangle \langle \vec{k}|n\rangle^* . \quad (3.4)$$

Es ist nun notwendig, die Paar-Wechselwirkung auch in den neuen Zuständen $|\psi_{n,s}\rangle$ auszudrücken.

$$\mathcal{H}_{Paar} = \frac{1}{2} \sum_{\vec{k},\vec{k}'} V_{\vec{k},\vec{k}'} c_{\vec{k}\uparrow}^\dagger c_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger c_{-\vec{k}'\downarrow} c_{\vec{k}'\uparrow} = \frac{1}{2} \sum_{n,n'} U_{n,n'} c_{n\uparrow}^\dagger c_{\bar{n}\downarrow}^\dagger c_{\bar{n}'\downarrow} c_{n'\uparrow} , \quad (3.5)$$

wobei das Wechselwirkungsmatrixelement sich ausdrücken lässt als

$$U_{n,n'} = \sum_{\vec{k},\vec{k}'} V_{\vec{k},\vec{k}'} |\langle n|\vec{k}\rangle|^2 |\langle n'|\vec{k}'\rangle|^2 = \sum_{\vec{k},\vec{k}'} V_0 g_{\vec{k}}^* g_{\vec{k}'} |\langle n|\vec{k}\rangle|^2 |\langle n'|\vec{k}'\rangle|^2 . \quad (3.6)$$

Es gilt die Vollständigkeitsrelation

$$\sum_{\vec{k}} |\langle n|\vec{k}\rangle|^2 = 1 . \quad (3.7)$$

Daraus folgt, dass für ein vollständig isotropes Potential, d.h. $g_{\vec{k}} = 1$ die Paarwechselwirkung auch im Raum der Quasiteilchen $|\psi_{n,s}\rangle$ unverändert bleibt und somit die kritische Temperatur wieder gegeben wird durch

$$k_B T_c = 1.13 \hbar \omega_D e^{-1/\lambda} \quad (3.8)$$

mit $\lambda = V_0 N_0$. Dann ist höchstens eine Änderung von T_c über die Zustandsdichte an der Fermienergie, N_0 , möglich.

Für konventionelle Supraleiter haben Verunreinigungen in vernünftiger Konzentration wenig Einfluss auf T_c . Diese Aussage wird als *Anderson Theorem* bezeichnet und basiert eben auf der Erhaltung der Zeitumkehr-Invarianz. Falls dies nicht mehr gewährleistet ist, bricht das Argument zusammen. So führen magnetische Verunreinigungen, d.h. Verunreinigungen die ein magnetisches Moment haben, zum Zusammenbruch der Supraleitung schon in geringen Konzentrationen (Abrikosov und Gorkov, Sov. Phys. JETP 12, 1243 (1961)), denn der Spin der Elektronen koppelt an das magnetische Moment

$$\mathcal{H}_{imp} = \sum_i \int d^3r J \vec{M}_i \cdot \widehat{\vec{S}}(\vec{r}) \delta(\vec{r} - \vec{R}_i) \quad (3.9)$$

wobei \vec{M}_i das statische magnetische Moment der Verunreinigung am Punkt \vec{R}_i ist, das mit der Kopplungskonstante J an die elektronische Spindichte $\widehat{\vec{S}}(\vec{r})$ koppelt. Offensichtlich bricht das statische Moment die Zeitumkehr-Symmetrie, und die Streuzustände $|\psi_{n\uparrow}\rangle$ und $|\psi_{\bar{n}\downarrow}\rangle$ sind nicht mehr entartet.

3.1.2 Nicht-magnetische Verunreinigungen in unkonventionellen Supraleitern

Nicht-magnetische Verunreinigungen haben jedoch einen starken Einfluss auf die Supraleitung, wenn anisotrope Paarung vorliegt. Dies wird sofort durch Betrachtung von (3.6) klar. Wenn $g_{\vec{k}}$ nicht mehr konstant ist, sondern anisotrope Paarung beschreibt (im Falle unkonventioneller Supraleitung sogar mit $\langle g_{\vec{k}} \rangle_{\vec{k},FS} = 0$) dann können wir nicht mehr von der Vollständigkeitsrelation (3.7) profitieren. Die effektive Wechselwirkung wird vermindert. Für die Beschreibung dieses Sachverhaltes ist unsere bisherige Formulierung unzureichend, und im Prinzip müssten wir auf eine quantenfeld-theoretische Sprache übergehen. Wir versuchen hier jedoch dies zu umgehen und eine plausible Formulierung des Sachverhaltes zu geben, die schliesslich zum bekannten Resultat für die kritische Temperatur führt.

Betrachten wir die linearisierte Selbstkonsistenzgleichung in der Basis des verunreinigten Metalls, der für einen Singulett-Zustand

$$\Delta_n = - \sum_{n'} U_{n,n'} \langle c_{n\uparrow} c_{\bar{n},\downarrow} \rangle = - \sum_{n'} U_{n,n'} \frac{\Delta_{n'}}{2\xi_{n'}} \tanh \left(\frac{\xi_{n'}}{2k_B T} \right). \quad (3.10)$$

Unter Verwendung der unitären Transformationen (3.2) schreiben wir die obige Gleichung um,

$$\Delta_n = - \sum_{n'} \sum_{\vec{k}, \vec{k}', \vec{k}''} |\langle n | \vec{k} \rangle|^2 V_{\vec{k}, \vec{k}'} |\langle n' | \vec{k}' \rangle|^2 |\langle n' | \vec{k}'' \rangle|^2 \Delta_{\vec{k}''} \frac{1}{2\xi_{n'}} \tanh \left(\frac{\xi_{n'}}{2k_B T} \right) \quad (3.11)$$

Während wir für isotrope Paarung, d.h. $V_{\vec{k}, \vec{k}'} = V_0 = \text{const.}$ und $\Delta_{\vec{k}} = \Delta_0 = \text{const.}$ (3.7) benützen können, gilt dies für anisotrope Paarung nicht mehr. Die Diskrepanz zwischen den Wellenvektoren \vec{k}' und \vec{k}'' ergibt offensichtlich eine Reduktion der effektiven Paarwechselwirkung. Dieser Effekt ist umso grösser, je weniger die Zustände $|\psi_n\rangle$ mit den Zuständen $|\phi_{\vec{k}}\rangle$ gemeinsam haben. Obwohl in dieser Formulierung die zerstörerische Wirkung der Potentialstreuung einigermaßen anschaulich wird, lässt sich damit das Verhalten von T_c nicht vernünftig beschreiben. Dies liegt daran, dass wir mit $|\psi_n\rangle$ stationäre Zustände betrachten. Die richtige Betrachtungsweise hängt jedoch mit der Frage zusammen, wie schnell ein Quasiteilchen-Zustand durch Streuung den Charakter einer ebenen Welle verliert. Dies erhält man innerhalb der Born'schen Näherung via der Golden Regel. Die Rate mit welcher der Zustand $|\phi_{\vec{k}}\rangle$ in irgendeine anderer Zustände gestreut wird ist gegeben durch

$$\Gamma_{\vec{k}} = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{1}{\Omega} \sum_{\vec{k}'} |\langle \phi_{\vec{k}} | \hat{U} | \phi_{\vec{k}'} \rangle|^2 \delta(\xi_{\vec{k}'} - \xi_{\vec{k}}) \approx \frac{2\pi}{\hbar} N_0 n_{imp} |\tilde{U}|^2, \quad (3.12)$$

wobei wir uns auf s -Wellenstreuung beschränken und annehmen, dass die Streuung an jeder Verunreinigung von den andern unabhängig ist, d.h. $\Gamma_{\vec{k}} \propto n_{imp}$, was bei nicht allzu grossen Verunreinigungskonzentrationen eine gute Näherung ist:

$$|\langle \phi_{\vec{k}} | \hat{U} | \phi_{\vec{k}'} \rangle|^2 \delta(\xi_{\vec{k}'} - \xi_{\vec{k}}) \approx N_0 n_{imp} |\tilde{U}|^2 \quad (3.13)$$

unabhängig vom Streuwinkel.

Wir gehen nun auf eine neue Formulierung über, in der wir den Aspekt der Lebenszeit des Zustandes $|\phi_{\vec{k}}\rangle$ einführen. Dazu benutzen wir die folgende Beziehung:

$$\frac{\tanh \xi / 2k_B T}{2\xi} = 2k_B T \sum_{m=1}^{\infty} \frac{1}{\omega_m^2 + \xi^2} \quad (3.14)$$

wobei $\omega_m = \pi k_B T (2m - 1)$ Matsubara-Frequenz genannt wird. Damit schreiben wir die linearisierte Gapgleichung um als

$$\begin{aligned}\Delta_{\vec{k}} &= - \sum_{\vec{k}'} V_{\vec{k}, \vec{k}'} \Delta_{\vec{k}'} \frac{1}{2\xi_{\vec{k}'}} \tanh\left(\frac{\xi_{\vec{k}'}}{2k_B T}\right) = - \sum_{\vec{k}'} V_{\vec{k}, \vec{k}'} \Delta_{\vec{k}'} 2k_B T \sum_{m=1}^{\infty} \frac{1}{\omega_m^2 + \xi_{\vec{k}'}} \\ &= - \sum_{\vec{k}'} V_{\vec{k}, \vec{k}'} \Delta_{\vec{k}'} 2k_B T \sum_{m=1}^{\infty} \frac{i}{2\xi_{\vec{k}'}} \int_0^{\infty} dt \left\{ e^{-(\omega_m + i\xi_{\vec{k}'})t/\hbar} - e^{-(\omega_m - i\xi_{\vec{k}'})t/\hbar} \right\}.\end{aligned}\quad (3.15)$$

Die letzte Zeile zeigt die Verbindung mit der zeitlichen Evolution der Quasiteilchenzustände auf. Um den Aspekt der Potentialstreuung einzubringen ergänzen wir die letzte Gleichung um die Lebenszeit des Zustandes $|\phi_{\vec{k}}\rangle$, $\Gamma_{\vec{k}'} = \hbar/\tau$.

$$\begin{aligned}\Delta_{\vec{k}} &= - \sum_{\vec{k}'} V_{\vec{k}, \vec{k}'} \Delta_{\vec{k}'} 2k_B T \sum_{m=1}^{\infty} \frac{i}{2\xi_{\vec{k}'}} \int_0^{\infty} dt \left\{ e^{-(\omega_m + i\xi_{\vec{k}'})t/\hbar} - e^{-(\omega_m - i\xi_{\vec{k}'})t/\hbar} \right\} e^{-t/\tau} \\ &= - \sum_{\vec{k}'} V_{\vec{k}, \vec{k}'} \Delta_{\vec{k}'} 2k_B T \sum_{m=1}^{\infty} \frac{1}{(\omega_m + \hbar/\tau)^2 + \xi_{\vec{k}'}} \\ &= -N_0 \langle V_{\vec{k}, \vec{k}'} \Delta_{\vec{k}'} \rangle_{\vec{k}', FS} 2k_B T \sum_{m=1}^{\infty} \int d\xi \frac{1}{(\omega_m + \hbar/\tau)^2 + \xi^2}.\end{aligned}\quad (3.16)$$

Damit ergibt sich mit der Lösung der linearisierten Gapgleichung:

$$\begin{aligned}1 &= -2\lambda k_B T \sum_{m=1}^{\infty} \int_0^{\epsilon_c} d\xi \frac{1}{(\omega_m + \hbar/\tau)^2 + \xi^2} = -2\pi\lambda k_B T \sum_{m=1}^{\epsilon_c} \frac{1}{\omega_m + \hbar/\tau} \\ &= -2\pi\lambda k_B T \sum_{m=1}^{\epsilon_c} \frac{1}{\omega_m + \hbar/\tau} = \lambda \ln\left(\frac{1.13\epsilon_c}{k_B T}\right) + \lambda \underbrace{\sum_{m=0}^{\infty} \left[\frac{1}{m + \rho + \frac{1}{2}} - \frac{1}{m + \frac{1}{2}} \right]}_{\psi(1/2) - \psi(\rho + 1/2)}\end{aligned}\quad (3.17)$$

wobei $\rho = \hbar/2\pi k_B T \tau$ und $\psi(x)$ die Digamma-Funktion ist, definiert durch die logarithmische Ableitung der Gamma-Funktion:

$$\psi(x) = \frac{\Gamma'(x)}{\Gamma(x)}\quad (3.18)$$

Schliesslich erhalten wir daraus die Gleichung, um T_c zu bestimmen:

$$\ln\left(\frac{T_{c0}}{T_c}\right) = \psi\left(\frac{1}{2} + \frac{\hbar}{2\pi\tau k_B T_c}\right) - \psi\left(\frac{1}{2}\right)\quad (3.19)$$

mit T_{c0} als kritische Temperatur bei $\tau \rightarrow \infty$. Die Abhängigkeit der kritischen Temperatur von τ ergibt sich aus folgenden Näherungen:

$$\psi\left(\frac{1}{2} + x\right) \approx \psi\left(\frac{1}{2}\right) + \frac{\pi^2}{2}x \quad x \rightarrow 0 \quad (3.20)$$

$$\psi(x) \approx \ln x - \frac{1}{2x} - \frac{1}{12x^2} \quad x \rightarrow \infty$$

wobei gilt $\psi(1/2) = -\ln(4 \times 1.13) \approx -1.5$. Für kleine Verunreinigungskonzentrationen gilt daher:

$$T_c \approx T_{c0} - \frac{\pi\hbar}{2\tau k_B} \approx T_{c0} - \frac{4\pi^2}{\hbar k_B} |\tilde{U}|^2 n_{imp} \quad (3.21)$$

Andererseits gibt es eine kritische Konzentration, bei der $T_c = 0$ ($\rho \rightarrow \infty$):

$$\frac{\hbar}{\tau} \approx \frac{\pi k_B T_{c0}}{2.26} \sim \pi \Delta_0 \quad \Rightarrow \quad \frac{1}{l} = \frac{1}{v_F \tau} \sim \frac{\pi \Delta_0}{\hbar v_F} = \frac{1}{\xi_0} \quad (3.22)$$

wobei l die mittlere freie Weglänge und ξ_0 die Kohärenzlänge bei $T = 0$ bezeichnet. Dies bedeutet, dass die Supraleitung ungefähr dann verschwindet, wenn die mittlere freie Weglänge kürzer wird als die Kohärenzlänge (siehe Abb. 30 in Kap. V).

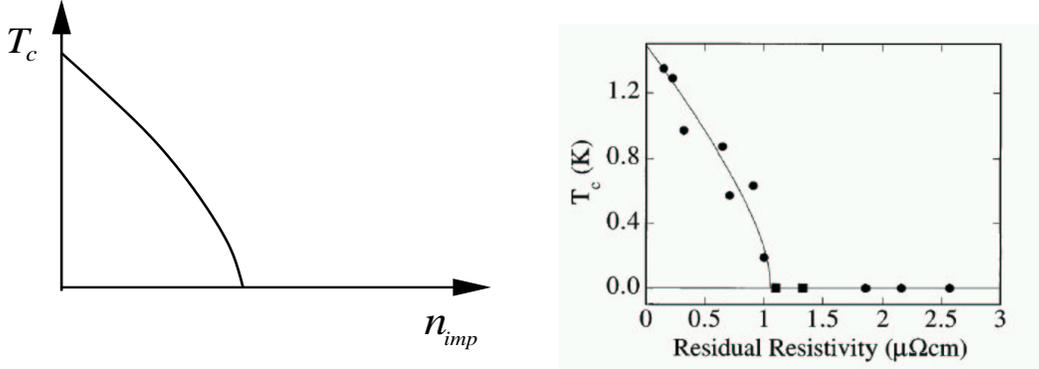


Abb. 1: T_c als Funktion der Verunreinigungsdichte n_{imp} ; rechtes Bild: Beispiel von Sr_2RuO_4 .

Beachte, dass das formal gleiche Verhalten der kritischen Temperatur in konventionellen Supraleitern im Falle von magnetischen Verunreinigungen erhalten wird.

3.1.3 Quasiteilchen-Zustände der verunreinigten Supraleiter

Um eine einzelne Verunreinigung in einem unkonventionellen Supraleiter findet man gebundene Quasiteilchen-Zustände, deren Energie innerhalb der Energielücke liegt - die sogenannten Shiba-Zustände. Ihre Präsenz verändert das Spektrum des Supraleiters bis hin zur Situation, dass die Energielücke verschwindet, ohne jedoch die Supraleitung vollständig zu zerstören. Die Lücke schliesst sich bevor T_c verschwindet (gapless superconductivity). Die theoretische Diskussion des Problems einer Verunreinigung wird im Rahmen der Bogolyubov-deGennes-Formulierung gemacht. Dies ist eine ortsabhängige Version der Bogolyubov-Transformation, die es erlaubt die inhomogene Supraleitung zu beschreiben. Im Fall vieler Verunreinigung geht man zur quantenfeldtheoretische Beschreibung mit Greensfunktionen über. Beide Methoden liegen ausserhalb des Programmes dieser Vorlesung. Wir werden jedoch hier das Resultat der Quantenfeld-Theorie kurz diskutieren, ohne auf die Herleitung einzugehen. Dabei soll die Potentialstreuung wiederum nur auf dem Niveau der Born-Näherung betrachtet werden.

Wir definieren $\tilde{\omega}$ durch die implizite Gleichung

$$\tilde{\omega} = \omega + \frac{\hbar}{2\tau} \frac{1}{\Omega} \sum_{\vec{k}} \frac{\tilde{\omega}}{\tilde{\omega}^2 + \xi_{\vec{k}}^2 + |\Delta_{\vec{k}}|^2} = \omega + \frac{\hbar}{2\tau} \int \frac{d\Omega_{\vec{k}}}{4\pi} \frac{\tilde{\omega}}{\sqrt{\tilde{\omega}^2 + |\Delta_{\vec{k}}|^2}}$$

$$\Rightarrow \tilde{\omega} = \omega + \frac{\hbar}{2\tau} \begin{cases} \frac{\tilde{\omega}}{\sqrt{\tilde{\omega}^2 + \Delta_m^2}} & \text{isotrope Phase} \\ \frac{i\tilde{\omega}}{2\Delta_m} \ln \frac{i\tilde{\omega} + \Delta_m}{i\tilde{\omega} - \Delta_m} & \text{axiale Phase} \\ \frac{\tilde{\omega}}{\Delta_m} \ln \frac{\Delta_m + \sqrt{\tilde{\omega}^2 + \Delta_m^2}}{\tilde{\omega}} & \text{polare Phase} \end{cases} \quad (3.23)$$

wobei wir $\tilde{\omega}$ für gegebenes ω bestimmen können. Die Zustandsdichte erhalten wir aus:

$$N(E) = \frac{2\tau N_0}{\hbar} \text{Im} [i\tilde{\omega}] |_{i\omega=E+i\delta} \quad (3.24)$$

In der niedrigsten Ordnung der Iteration der Gleichung (3.23) erhalten wir die Zustandsdichte des reinen Systems. Dabei ist Δ_m die maximale Energielücke für den gegebenen Verunreinigungsgrad, d.h. die entsprechende Selbstkonsistenzgleichung des Systems muss gelöst werden, was wir hier nicht zeigen wollen.

Offenbar verliert der Supraleiter bei genügend starker Verunreinigung seine Energielücke, und zwar in dem Sinne, dass die Zustandsdichte bei $E = 0$ endlich wird. Die Zustandsdichte bei $E = 0$ lässt sich relativ einfach aus den obigen Gleichungen herleiten, indem man $\omega = 0$ setzt. Man findet dann,

$$N(0) = N_0 \sqrt{1 - 4\tau^2 \Delta^2 / \hbar^2} \quad (3.25)$$

für die isotrope Phase, wenn $2\tau\Delta_m/\hbar < 1$,

$$N(0) = N_0 \frac{2\tau\Delta_m}{\hbar} \cot(2\tau\Delta_m/\hbar) \quad (3.26)$$

für die axiale Phase, wenn $2\tau\Delta_m/\hbar < \pi/2$ und

$$N(0) = N_0 \frac{2\tau\Delta_m}{\hbar \sinh(2\tau\Delta_m/\hbar)} \quad (3.27)$$

für die polare Phase, wenn $2\tau\Delta_m/\hbar < \infty$. Während wir für die isotrope Lücke und die Lücke mit Punktnullstellen eine endliche Konzentration von Verunreinigung benötigen, um die Energielücke des Quasiteilchen-Spektrums zu zerstören, zeigt der Zustand mit linienförmigen Nullstellen bei beliebig kleiner Konzentration schon einen endlichen Wert für $N(0)$. Supraleiter ohne Energielücke besitzen natürlich eine spezifische Wärme, die proportional zu T ist wie im Normalzustand.

In der Figur 29 des Kapitels V des experimentellen Teils der Vorlesung ist die Zustandsdichte für die drei verschiedenen Fälle aufgetragen für verschiedene Werte von Γ/Δ_m , wobei $\Gamma = \hbar/2\tau$. Beachte, dass die Diskussion für die isotrope Energielücke direkt übertragbar ist auf den Fall konventioneller Supraleitung mit magnetischen Verunreinigungen.

3.2 Spinsuszeptibilität

Ein äusseres Magnetfeld koppelt an einen Supraleiter via des orbitalen Stromes und die Zeeman-Kopplung an den Spin. Die Kopplung an den Strom führt zum Meissner-Ochsenfeld-Effekt, d.h. die Abschirmung kleiner Magnetfelder, und auch zur Unterdrückung der Supraleitung bei hohen Feldern. Wir beschränken uns hier jedoch auf die Kopplung an den Spin, was sich sehr gut für die Untersuchung der Spin-Konfiguration der Cooper-Paare eignet.

Einfachheitshalber nehmen wir ein externes Feld entlang der z -Achse an:

$$\hat{H}_Z = -\mu_B H_z \sum_{\vec{k}} \left\{ c_{\vec{k}\uparrow}^\dagger c_{\vec{k}\uparrow} - c_{\vec{k}\downarrow}^\dagger c_{\vec{k}\downarrow} \right\} \quad (3.28)$$

Nun betrachten wir zwei Fälle. Zuerst einen Supraleitungszustand mit off-diagonaler Gapmatrix, d.h. $\Delta_{\vec{k}\uparrow\uparrow} = \Delta_{\vec{k}\downarrow\downarrow} = 0$. Dies schliesst sowohl Singulett-Paarung ($\Delta_{\vec{k}\uparrow\downarrow} = -\Delta_{\vec{k}\downarrow\uparrow}$) als auch Triplett-Paarung ($\Delta_{\vec{k}\uparrow\downarrow} = \Delta_{\vec{k}\downarrow\uparrow}$ mit Parallel-Spinpaarung in der x - y -Ebene) ein. Hier wird der Hamilton-Operator in folgender Form diagonalisiert

$$\hat{H}_{qp} = \sum_{\vec{k}} \left\{ E_{\vec{k}\uparrow} a_{\vec{k}\uparrow}^\dagger a_{\vec{k}\uparrow} + E_{\vec{k}\downarrow} a_{\vec{k}\downarrow}^\dagger a_{\vec{k}\downarrow} \right\} \quad (3.29)$$

mit $E_{\vec{k}s} = \sqrt{\xi_{\vec{k}}^2 + |\Delta_{\vec{k}}|^2} - s\mu_B H_z$ ($s = \uparrow, \downarrow$ oder $+, -$). Die induzierte Spinmagnetisierung ist

$$M_z = \mu_B \sum_{\vec{k}} \langle c_{\vec{k}\uparrow}^\dagger c_{\vec{k}\uparrow} - c_{\vec{k}\downarrow}^\dagger c_{\vec{k}\downarrow} \rangle \quad (3.30)$$

mit

$$\langle c_{\vec{k}s}^\dagger c_{\vec{k}s'} \rangle = \sum_{s'=\pm} \left\{ |u_{\vec{k}ss'}|^2 f(E_{\vec{k}s'}) + |v_{\vec{k}ss'}|^2 (1 - f(E_{\vec{k}s'})) \right\} . \quad (3.31)$$

Beachte, dass $|u_{\vec{k}ss'}|^2 \propto \delta_{ss'}$ und $|v_{\vec{k}ss'}|^2 \propto |\Delta_{\vec{k}ss'}|^2$ und $|u_{\vec{k}\uparrow\uparrow}|^2 + |v_{\vec{k}\uparrow\downarrow}|^2 = 1$. Daraus folgt

$$M_z = \mu_B \sum_{\vec{k}} \left(f(E_{\vec{k}\uparrow}) - f(E_{\vec{k}\downarrow}) \right) \xrightarrow{H_z \rightarrow 0} -2\mu_B^2 H_z \sum_{\vec{k}} \frac{\partial f(E_{\vec{k}})}{\partial E_{\vec{k}}} \quad (3.32)$$

so dass die Spinsuszeptibilität durch

$$\chi_\perp = \frac{M_z}{H_z} = 2\mu_B^2 N_0 \int \frac{d\Omega_{\vec{k}}}{4\pi} \int d\xi \frac{1}{4k_B T \cosh^2(E_{\vec{k}}/2k_B T)} = \chi_P \int \frac{d\Omega_{\vec{k}}}{4\pi} Y(\hat{k}; T) \quad (3.33)$$

gegeben ist, mit $\chi_P = 2\mu_B^2 N_0$ als Pauli-Suszeptibilität des Normalzustandes. Die Funktion $Y(\hat{k}; T)$ ist die richtungsabhängige Yosida-Funktion, die bei $T = T_c$ den Wert 1 annimmt und für $T \rightarrow 0$ verschwindet und zwar mit einer Temperaturabhängigkeit, die der Topologie der Energielücke entspricht.

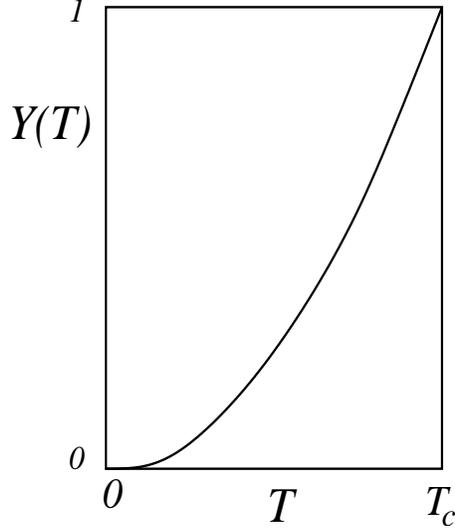


Abb. 6.1: Yosida-Funktion

Wir schliessen daraus, dass die Spinsuszeptibilität in der Supraleitungsphase sowohl für Spinsingulett-Paarung als auch Spintriplett-Paarung mit der Spinorientierung senkrecht zum Feld unterdrückt wird. Die Spinpolarization durch das Feld entspricht dem Aufbrechen von Cooperpaaren und ist daher auf die thermisch angeregten Quasiteilchen angewiesen. Der destruktive Einfluss des magnetischen Feldes hängt auch damit zusammen, dass die beiden Elektronenzustände, die das Cooperpaar bilden sollten im Feld nicht mehr dieselbe Energie haben.

Als nächstes untersuchen wir den Fall der diagonalen Gapmatrix, d.h. $\Delta_{\vec{k}\uparrow\downarrow} = \Delta_{\vec{k}\downarrow\uparrow} = 0$ und $\Delta_{\vec{k}\uparrow\uparrow} = \Delta_{\vec{k}\downarrow\downarrow}$. Dies entspricht Spintriplett-Paarung mit Spin parallel zur z -Achse. Das Quasiteilchen-Spektrum wird durch (3.29) ausgedrückt, wobei aber diesmal $E_{\vec{k}s} = \sqrt{\xi_{\vec{k}s}^2 + |\Delta_{\vec{k}ss}|^2}$ mit $\xi_{\vec{k}s} = \xi_{\vec{k}} - s\mu_B H_z$. In (3.31) gilt nun jedoch, dass $v_{\vec{k}ss'} \propto \delta_{ss'}$. Mit der Bogolyubov-Transformation, die im Kapitel 3 eingeführt wurde erhalten wir für die Magnetisierung (3.30)

$$M_z = \mu_B \sum_{\vec{k}} \left\{ \frac{\xi_{\vec{k}\uparrow}}{E_{\vec{k}\uparrow}} \tanh\left(\frac{E_{\vec{k}\uparrow}}{2k_B T}\right) - \frac{\xi_{\vec{k}\downarrow}}{E_{\vec{k}\downarrow}} \tanh\left(\frac{E_{\vec{k}\downarrow}}{2k_B T}\right) \right\}$$

$$\xrightarrow{H_z \rightarrow 0} -2\mu_B^2 H_z N_0 \int \frac{d\Omega_{\vec{k}}}{4\pi} \int d\xi \frac{d}{d\xi} \left\{ \frac{\xi}{E_{\vec{k}}} \tanh\left(\frac{E_{\vec{k}}}{2k_B T}\right) \right\} = 2\mu_B^2 N_0 H_z = \chi_P H_z \quad (3.34)$$

Offensichtlich gilt hier im Supraleitungszustand $\chi_{\parallel} = \chi_P$, d.h. die Spinsuszeptibilität bleibt unverändert. Wenn das magnetische Feld parallel zur Richtung der Spins der Cooperpaare liegt, ist es nicht nötig, die Cooperpaare aufzubrechen, um die Spins zu polarisieren. Auch im Feld haben die paarenden Elektronen noch dieselbe Energie, obwohl die Energie für Spins parallel und antiparallel zum Feld verschieden ist.

Für die Spin-Triplett-Supraleiter lässt sich nun die Regel ableiten, dass im Supraleitungszustand

$$\chi(T) = \chi_P \begin{cases} 1 & \vec{d}(\vec{k}) \perp \vec{H} \\ \int \frac{d\Omega_{\vec{k}}}{4\pi} Y(\hat{k}; T) & \vec{d}(\vec{k}) \parallel \vec{H} \end{cases}, \quad (3.35)$$

d.h. die Suszeptibilität bleibt unverändert, falls der \vec{d} -Vektor für alle \vec{k} senkrecht auf dem Feld steht, und verschwindet bei $T = 0$, wenn \vec{d} für alle \vec{k} parallel zum Feld liegt. Die Verallgemeinerung ergibt die folgende Form

$$\chi(T)_{\mu\nu} = \chi_P \int \frac{d\Omega_{\vec{k}}}{4\pi} \left\{ \delta_{\mu\nu} - \text{Re} \frac{d_\mu(\vec{k})^* d_\nu(\vec{k})}{|\vec{d}(\vec{k})|^2} (1 - Y(\hat{k}; T)) \right\} \quad (3.36)$$

wobei $M_\mu = \sum_\nu \chi_{\mu\nu} H_\nu$.

Betrachten wir als Beispiele zwei Triplet-Phasen, zuerst den isotropen BW-Zustand $\vec{d}(\vec{k}) = \Delta_0(\hat{x}k_x + \hat{y}k_y + \hat{z}k_z)$. Da ergibt eine einfache Rechnung, dass

$$\chi^{BW}(T)_{\mu\nu} = \chi_P \delta_{\mu\nu} \left(1 - \frac{1}{3}(1 - Y(T)) \right) \quad (3.37)$$

wobei $Y(T)$ die Yosida-Funktion für die isotrope Energielücke darstellt. Die Suszeptibilität ist isotrope und geht auf $2\chi_P/3$ für $T = 0$. Als nächstes Beispiel betrachten wir den ABM-Zustand, $\vec{d}(\vec{k}) = \Delta_0 \hat{z}(k_x + ik_y)$. Hier ist die Suszeptibilität gegeben durch

$$\chi(T) = \chi_P \begin{cases} \bar{Y}^{ABM}(T) & \vec{H} \parallel z \\ 1 & \vec{H} \perp z \end{cases}, \quad (3.38)$$

mit $\bar{Y}^{ABM}(T)$ die Yosida-Funktion für den ABM-Zustand gemittelt über die Fermifläche ist. Diese Phase ist wahrscheinlich in Sr_2RuO_4 realisiert, wie Suszeptibilitätsmessungen für Felder in der x - y -Ebene ergeben (K. Ishida et al., Nature 396, 658 (1998)).

Für Supraleiter ist es natürlich wegen des Meissner-Ochsenfeld-Effektes nicht möglich, die Spinsuszeptibilität direkt zu messen. Im Falle von Typ-II-Supraleitern kann man jedoch in der gemischten Phase (Feld tritt in Form von Flusslinien ein) die Spinsuszeptibilität mit Hilfe von Kernspinresonanz-Experimenten messen. Kernspinresonanzlinien sind verglichen mit dem Wert, den man für das angelegte Feld erwarten würde, verschoben, da die Kerne ein effektives Magnetfeld sehen, welches die intern erzeugte Magnetisierung einschliesst. Diese wird durch die Suszeptibilität bestimmt, so dass die Resonanzverschiebung (Knight shift) proportional zur Suszeptibilität ist. Die Messung des Knight shift im gemischten Zustand des Supraleiters gibt so Einblick in die Spinsuszeptibilität, die nicht durch direkte Magnetisierungsmessung zugänglich ist. Alternative Methoden sind die analoge Messung für die Muon-Spin-Resonanz oder die Magnetisierungsmessung mit spinpolarisierten Neutronen, beide auch im gemischten Zustand. Je höher $\kappa = \lambda/\xi$, desto zuverlässiger sind die Resultate für die Spinsuszeptibilität, da die Vortizes die Supraleitung nur wenig unterdrücken, während das Magnetfeld den Supraleiter mehr oder weniger homogen durchdringt.

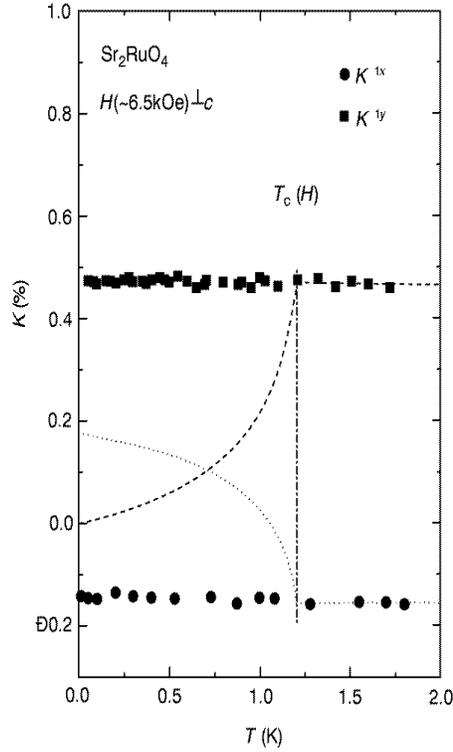


Abb. 6.2: Knight-Shift-Daten für Sr_2RuO_4 mit Magnetfeld in der Basalebene des Kristalles. Die beiden Datensets entsprechen zwei Resonanzen unterschiedlicher Sauerstoff-Positionen. Die gestrichelten Linien zeigen die Yosida-Funktionen, falls eine Unterdrückung der Spinsuszeptibilität stattfinden würde (K. Ishida et al., Nature 396, 658 (1998)).

3.2.1 Paramagnetische Limitierung

Abschliessend möchten wir uns noch mit einem Phänomen beschäftigen, das mit der Unterdrückung der Spinsuszeptibilität zusammenhängt. Da für endliches äusseres Feld die Spinsuszeptibilität im Normalzustand auch zur Energiesenkung beiträgt, ergibt sich eine Konkurrenz mit dem Kondensationsenergiegewinn des Supraleitungszustandes:

$$E_Z = -\frac{1}{2} \sum_{\mu,\nu} (\chi_P \delta_{\mu\nu} - \chi(T)_{\mu\nu}) H_\mu H_\nu \quad \Leftrightarrow \quad E_{\text{kond}} = -\frac{N_0}{2} |\Delta_m|^2 \langle |g_{\vec{k}}|^2 \rangle_{\vec{k},FS} \quad (3.39)$$

wobei wir uns auf $T = 0$ beschränken wollen. Für Spin-Singulett-Supraleiter finden wir sofort, dass das Grenzfeld durch

$$H_p = \frac{1}{\mu_B \sqrt{2}} |\Delta_m| \sqrt{\langle |g_{\vec{k}}|^2 \rangle_{\vec{k},FS}} \quad (3.40)$$

gegeben wird. Der paramagnetische Limit (auch Clogston-Chandrasekar-Limit oder Pauli-Limit genannt) wird experimentell nur erreicht, wenn $H_{c2} > H_p$ ist. Dies ist im allgemeinen nur sehr schwer erreichbar, obwohl man für unkonventionelle Supraleiter bessere Chancen hat.

Für Spin-Triplett-Supraleiter spielt die Feldrichtung eine wichtige Rolle. Die Kondensationsenergie wird hier nämlich verglichen mit

$$E_Z = -\frac{\chi_P}{2} \text{Re} \left\langle \frac{d_\mu(\vec{k})^* d_\nu(\vec{k})}{|\vec{d}(\vec{k})|^2} \right\rangle_{\vec{k}, FS} H_\mu H_\nu, \quad (3.41)$$

was bedeutet, dass für Feldrichtungen, für die die rechte Seite verschwindet, das limitierende Feld H_p innerhalb der Anwendbarkeit des linearen Response beliebig gross wird. Dies ist unter anderem der Fall für die ABM-Phase, wenn das Feld in der x - y -Ebene liegt. Wenn die Suszeptibilität in der Supraleitungsphase nicht unterdrückt wird, dann gibt es auch keinen paramagnetischen Limit, so lange kein stark nicht-linearer magnetischer Effekt auftritt.

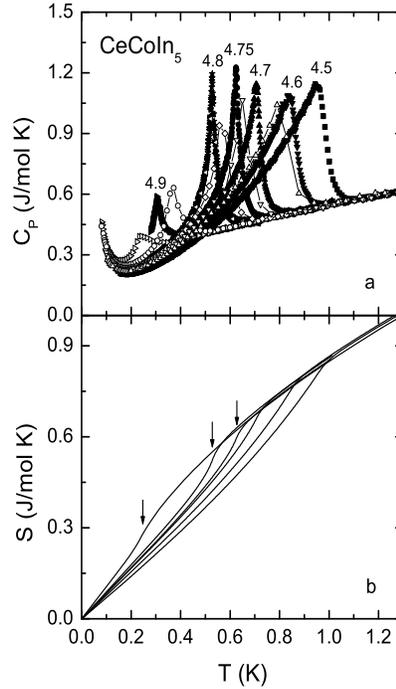


Abb. 6.3: Spezifische Wärme und Entropie von CeCoIn_5 im magnetischen Feld. Der Phaseübergang wird erster Ordnung für Felder grösser als 4.7 Tesla, was wahrscheinlich auf den paramagnetischen Limit zurückzuführen ist (A. Bianchi et al., Phys. Rev. Lett. 89, 137002 (2002); Phys. Rev. Lett. 91, 187004 (2003)).

Beachte, dass der paramagnetische Limit durch Konkurrenz zweier Energien zustande kommt. Daher ist der Phasenübergang bei endlichem magnetischen Feld für einen Typ-I-Supraleiter. Ein Beispiel, bei dem dieser Aspekt des paramagnetischen Limits wahrscheinlich beobachtet worden ist, ist CeCoIn_5 . Dieses Material gehört zur Klasse der Systeme schwerer Elektronen und ist möglicherweise ein d -Wellen-Supraleiter. In der Abbildung sehen wir, wie unter ansteigendem magnetischen Feld die Anomalie der spezifischen Wärme allmählich in eine enge Singularität deformiert wird, die schliesslich unbeobachtbar eng wird, wenn der Phasenübergang von erster Ordnung wird.

Kapitel 4

Verallgemeinerte Ginzburg-Landau Theorie

Die phänomenologische Beschreibung durch eine relativ einfache Theorie der Phasenübergänge ist einer der Eckpfeiler unseres Verständnisses der Supraleitung. Ihre Stärke liegt in ihrer Allgemeinheit basierend auf der Existenz eines Ordnungsparameters, der den Supraleitungszustand beschreibt, und der Kenntnisse von Symmetrieeigenschaften. In diesem Kapitel werden wir nur einige wenige Aspekte der immensen Möglichkeiten, die die Ginzburg-Landau-Formulierung bietet, behandeln können. Insbesondere stellt sich für die unkonventionelle Supraleitung immer die Frage nach den möglichen Phasen, die in einem gegebenen Material realisiert werden können, oder nach neuen topologischen Strukturen des Ordnungsparameters.

4.1 Ordnungsparameter und konventionelle Ginzburg-Landau-Theorie

Die Grundlage der Landau'schen Theorie der Phasenübergänge zweiter Ordnung ist die spontane Symmetriebrechung. Die Phase bei hoher Temperatur hat in den meisten Fällen eine höhere Symmetrie als diejenige bei tiefer Temperatur. In der Landau-Theorie wird dieser Aspekt mittels eines Ordnungsparameters beschrieben, der in der Tieftemperaturphase endlich ist und ihre reduzierte Symmetrie und physikalischen Eigenschaften beschreibt. Der Ordnungsparameter eines Ferromagneten beispielsweise ist die uniforme Magnetisierung, die eine leicht zugänglich Messgröße ist. In anderen Fällen sind die Ordnungsparameter weniger offensichtlich. In jedem Fall beschreibt der Ordnungsparameter eine Phase, die niedrigere Symmetrie hat als der Normalzustand. Ferner wächst der Ordnungsparameter unterhalb der kritischen Temperatur T_c kontinuierlich von Null an. Die Tatsache, dass der Ordnungsparameter nahe bei T_c klein ist wird benutzt, um die freie Energie, die die Thermodynamik des Phasenüberganges beschreibt, als "Potenzreihe" im Ordnungsparameter zu entwickeln. Die freie Energie kann in dieser Weise aus recht allgemeinen Bedingungen gewonnen werden, insbesondere durch die Symmetrieeigenschaft, dass sie ein Skalar unter allen Symmetrie-Operationen des Normalzustandes sein muss.

Für die Supraleitung bietet sich zum Beispiel die Energielücke $\hat{\Delta}_{\vec{k}}$ als Ordnungsparameter an, da sie eine am Übergangspunkt verschwindende Größe ist. Man kann jedoch auch aus der unitären Bogolyubov-Transformation einen Ordnungsparameter herleiten:

$$\hat{u}_{\vec{k}} \hat{v}_{\vec{k}} = \begin{cases} i\hat{\sigma}^y f_0(\vec{k}) & \text{für Spin-Singulett-Paarung} \\ i(\vec{f}(\vec{k}) \cdot \hat{\sigma})\hat{\sigma}^y & \text{für Spin-Triplett-Paarung} \end{cases}, \quad (4.1)$$

ein Mass für die Elektron-Loch-Mischung. Unabhängig von der Definition handelt es sich beim Ordnungsparameter in einem konventionellen Supraleiter im wesentlichen um eine komplexe Grösse η mit den folgenden Symmetrieeigenschaften.

$$\text{Zeitumkehr-Operation: } \hat{K}\eta = \eta^* \quad (4.2)$$

$$U(1)\text{-Eichtransformation: } \hat{\Phi}\eta = \eta e^{i\phi}$$

wobei letztere mit der Umeichung des Vektorpotentials zusammenhängt:

$$\hat{\Psi}(\vec{r}), \quad \vec{A}(\vec{r}) \quad \Leftrightarrow \quad \hat{\Psi}(\vec{r})e^{i\chi(\vec{r})/\hbar c}, \quad \vec{A}(\vec{r}) + \vec{\nabla}\chi(\vec{r}) \quad (4.3)$$

wobei $\phi = 2ie\chi/\hbar c$, da $\eta \propto \langle \hat{\Psi}\hat{\Psi} \rangle$. Es ist gerade diese Abhängigkeit von der Eichphase, die den Supraleitungsphasenübergang ausmacht. Der komplexe Ordnungsparameter η hat eine bestimmte Phase α , $\eta = |\eta|\exp(i\alpha)$ und bricht damit die $U(1)$ -Eichsymmetrie, denn jede Umeichung ändert den Ordnungsparameter.

Die Symmetriegruppe des Normalzustandes enthält also $\mathcal{G} = \mathcal{K} \times U(1)$ und die freie Energie muss folglich ein Skalar unter allen Operationen von \mathcal{G} sein. Im Falle eines uniformen Supraleiters gilt

$$F(T, \eta) = F_n + a(T)|\eta|^2 + b(T)|\eta|^4 + \dots \quad (4.4)$$

wobei die Symmetriebedingung die Einschränkung auf Terme mit $|\eta|^{2n}$ ergibt, die invariant unter Eichtransformation und Zeitumkehr sind. Bis zu dieser Ordnung gibt es keine weiteren symmetrie-erlaubten Term. Für die Koeffizienten trifft man die Annahme:

$$a(T) \approx a'(T - T_c) \quad \text{und} \quad b(T) = b(T_c) = b \quad (4.5)$$

so dass $a(T)$ bei $T = T_c$ das Vorzeichen wechselt. Der Gleichgewichtszustand für gegebene Temperatur T wird durch die Minimierung der freien Energie bezüglich η erreicht.

$$0 = \frac{\partial F}{\partial \eta^*} = a(T)\eta + 2b\eta|\eta|^2 \quad \Rightarrow \quad |\eta|^2 = \begin{cases} 0 & T > T_c \\ -\frac{a(T)}{2b} & T \leq T_c \end{cases} \quad (4.6)$$

Wir können die Koeffizienten a und b bestimmen, wenn wir die spezifische Wärme mit derjenigen aus Kap.3 in der Nähe von T_c vergleichen.

$$-S = \frac{dF}{dT} = -S_n + |\eta|^2 \frac{da}{dT} + \underbrace{\frac{\partial F}{\partial \eta} \frac{d\eta}{dT} + \frac{\partial F}{\partial \eta^*} \frac{d\eta^*}{dT}}_{=0},$$

$$C = T \frac{dS}{dT} \approx C_n + a'T \frac{d|\eta|^2}{dT} \quad \Rightarrow \quad \Delta C|_{T=T_c} = C - C_n|_{T=T_c} = \frac{a'^2}{2b} = \frac{8\pi^2 k_B^2 T_c N_0}{7\zeta(3)} \Omega. \quad (4.7)$$

Je nach Definition des Ordnungsparameters ergeben sich die einzelnen Koeffizienten. Falls wir $|\eta|^2$ als Energielücke betrachten, dann ist

$$a' = \Omega \frac{N_0}{T_c} \quad \text{und} \quad b = \Omega \frac{7\zeta(3)N_0}{16\pi^2 k_B^2 T_c^2}. \quad (4.8)$$

Eine Stärke der Ginzburg-Landau-Theorie ist es, dass sie auch die Diskussion eines inhomogenen Supraleiters zulässt. Wir können die freie Energie in ein Funktional des ortsabhängigen Ordnungsparameters $\eta(\vec{r}, T)$ erweitern:

$$F[\eta, \vec{A}; T] = \int_{\Omega} d^3r \left[a(T)|\eta|^2 + b|\eta|^4 + K|\vec{\Pi}\eta|^2 + \frac{1}{8\pi}(\vec{\nabla} \times \vec{A})^2 \right], \quad (4.9)$$

wobei

$$\vec{\Pi} = \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} + \frac{2e}{c} \vec{A} \quad (4.10)$$

dem eichinvarianten Impuls (Gradient) für Cooperpaare (Ladung: $-2e$) entspricht. Der Gradiententerm beschreibt die Steifigkeit des supraleitenden Kondensates gegenüber Deformationen und ist so angesetzt, dass er eichinvariant ist, d.h. jede lokale $U(1)$ -Umeichung von η wird in $\vec{\Pi}$ durch das Vektorpotential kompensiert. Dadurch wird gleichzeitig eine minimale Kopplung zwischen Vektorpotential und Ordnungsparameter hergestellt. Der letzte Term ist die Magnetfeld-Energie innerhalb des Supraleiters. In der Entwicklung bis zu dieser Ordnung geht wir davon aus, dass die räumlichen Modulationen von η auf Längen geschehen, die viel grösser sind als k_F^{-1} und ξ_0 , der Kohärenzlänge bei $T = 0$.

Die Struktur des Gradiententerms reflektiert die wichtigste Konsequenz der gebrochenen $U(1)$ -Eichsymmetrie, die Kopplung des Ordnungsparameter an das magnetische Feld. Die freie Energie ist auch ein Funktional des Vektorpotentials. Die variationelle Minimierung bezüglich des Ordnungsparameters und bezüglich des Vektorpotentials ergeben nun die Ginzburg-Landau-Gleichungen:

$$\begin{aligned} a\eta + 2b\eta|\eta|^2 - K\vec{\Pi}^* \cdot \vec{\Pi}\eta &= 0 \\ \frac{2e}{c}K \left\{ \eta^* \vec{\Pi}\eta + \eta \vec{\Pi}^* \eta^* \right\} - \frac{1}{4\pi} \vec{\nabla} \times (\vec{\nabla} \times \vec{A}) &= 0 \end{aligned} \quad (4.11)$$

Die zweite Gleichung kann umgeschrieben werden als stationäre Maxwell-Gleichung

$$\vec{\nabla} \times \vec{B} = \frac{4\pi}{c} 2eK \left\{ \eta^* \vec{\Pi}\eta + \eta \vec{\Pi}^* \eta^* \right\} = \frac{4\pi}{c} \vec{j}, \quad (4.12)$$

wodurch der Suprastrom \vec{j} definiert wird. Für einen konstanten Ordnungsparameter $|\eta|$ erhalten wir daraus die Gleichung:

$$\vec{\nabla} \times (\vec{\nabla} \times \vec{B}) = -\frac{4\pi}{c} \frac{8e^2}{c} K|\eta|^2 \vec{B} \quad \Rightarrow \quad \vec{\nabla}^2 \vec{B} = \frac{1}{\lambda_L^2} \vec{B}, \quad (4.13)$$

die der London-Gleichung entspricht, die die Abschirmung des Magnetfeldes beschreibt (Meissner-Ochsenfeld-Effekt). Beachte, dass dies massiven Photonen im Supraleiter entspricht ($m_{ph}^2 \propto \lambda_L^{-2}$) der Ordnungsparameter macht analog zum Higgs-Boson das $U(1)$ -Eichfeld massiv. Somit ist die $U(1)$ -Verletzung der Schlüsselpunkt für die Supraleitung.

Die London-Eindringtiefe ist definiert durch

$$\lambda_L^{-2} = \frac{32\pi e^2}{c^2} K|\eta|^2 = \frac{4\pi e^2 n_s}{mc^2} \quad (4.14)$$

wobei n_s die suprafluide Dichte darstellt, die bei $T = 0$ die Elektronendichte n_e ist. Nahe bei $T = T_c$ finden wir

$$n_s(T) = 2n_e \left(1 - \frac{T}{T_c}\right) = \frac{7\zeta(3)n_e}{8(\pi k_B T_c)^2} |\eta|^2, \quad (4.15)$$

wodurch der Koeffizient K bestimmt wird:

$$K = \frac{7\zeta(3)n_e}{64\pi m(\pi k_B T_c)^2}. \quad (4.16)$$

Die Kohärenzlänge ξ ist die andere wichtige Längenskala in der Ginzburg-Landau-Theorie und ergibt sich aus der ersten Gleichung von (4.11) unter Vernachlässigung des nicht-linearen Terms

$$\begin{aligned} \left(a(T) - K\hbar^2 \vec{\nabla}^2\right) \eta &= a(T) \left\{1 - \xi^2 \vec{\nabla}^2\right\} \eta \\ \Rightarrow \quad \xi(T)^2 &= -\frac{\hbar^2 K}{a(T)} = \frac{\hbar^2 K}{2b|\eta|^2} = \frac{\hbar^2 v_F^2}{8\pi|\eta|^2} \propto \frac{T_c}{T_c - T}, \end{aligned} \quad (4.17)$$

was man mit der Kohärenzlänge bei $T = 0$ vergleichen darf, $\xi_0 = \hbar v_F / \pi |\Delta|$.

4.2 Ordnungsparameter für unkonventionelle Supraleiter

Für die Erweiterung zu beliebigen Typen von Supraleitern kommt ein weiterer Symmetrie-Aspekt der Landau-Theorie für Phasenübergänge zweiter Ordnung ins Spiel. Die Ordnungsparameter können innerhalb der Symmetrie-Gruppe \mathcal{G} des Normalzustandes in die irreduziblen Darstellungen von \mathcal{G} klassifiziert werden. Im Normalfall braucht man beim Phasenübergang nur eine Darstellung zu betrachten, die die Instabilität des Normalzustandes beschreibt.

Wir wenden daher folgendes Prinzip an. Zunächst bestimme den dominanten Ordnungsparameter. Dies kann grundsätzlich durch die Lösung der linearisierten Gapgleichung erfolgen:

$$\begin{aligned} \lambda \psi(\vec{k}) &= N_0 \langle v_{\vec{k}, \vec{k}'}^s \psi(\vec{k}') \rangle_{\vec{k}', FS} && \text{für Spin-Singulett-Paarung} \\ \lambda \vec{d}(\vec{k}) &= N_0 \langle v_{\vec{k}, \vec{k}'}^t \vec{d}(\vec{k}') \rangle_{\vec{k}', FS} && \text{für Spin-Triplett-Paarung} \end{aligned} \quad (4.18)$$

Die entarteten Lösungen dieser Eigenwertgleichung entsprechen Basisfunktionen der irreduziblen Darstellungen von \mathcal{G} . Die Symmetrioperationen der Gapfunktionen sind bereits in Kapitel 3 definiert worden.

Operation	Singulett	Triplett
Fermion-Austausch	$\psi(\vec{k}) = \psi(-\vec{k})$	$\vec{d}(\vec{k}) = -\vec{d}(-\vec{k})$
Orbitale Rotation	$g\psi(\vec{k}) = \psi(R(g)\vec{k})$	$g\vec{d}(\vec{k}) = \vec{d}(R(g)\vec{k})$
Spin-Rotation	$g\psi(\vec{k}) = \psi(\vec{k})$	$g\vec{d}(\vec{k}) = \tilde{R}_S(g)\vec{d}(\vec{k})$
Zeitumkehr	$\hat{K}\psi(\vec{k}) = \psi^*(-\vec{k})$	$\hat{K}\vec{d}(\vec{k}) = -\vec{d}^*(-\vec{k})$
$U(1)$	$\hat{\Phi}\psi(\vec{k}) = e^{i\phi}\psi(\vec{k})$	$\hat{\Phi}\vec{d}(\vec{k}) = e^{i\phi}\vec{d}(\vec{k})$

Die höchste Übergangstemperatur ist bestimmt durch den grössten Eigenwert λ mit den Eigenfunktionen $\{\psi_l(\vec{k})\}$ oder $\{\vec{d}_l(\vec{k})\}$, die den Vektorraum einer irreduziblen Darstellung \mathcal{D} aufspannen. Jede Linearkombination ist Lösung der Eigenwertgleichung mit gleichem Eigenwert. Wir können daher einen Ordnungsparameter in folgender Weise definieren:

$$\psi(\vec{k}) = \sum_l \eta_l \psi_l(\vec{k}) \quad \text{und} \quad \vec{d}(\vec{k}) = \sum_l \eta_l \vec{d}_l(\vec{k}). \quad (4.19)$$

Der Ordnungsparameter hat im allgemeinen mehrere komplexe Komponenten entsprechend der Dimension der Darstellung \mathcal{D} . Der Ordnungsparameter transformiert sich unter Symmetrie-Operationen wie die Komponenten eines Vektors im Vektorraum der Darstellung. Die Ginzburg-Landau-Theorie wird definiert durch die Entwicklung der freien Energie F nach dem Ordnungsparameter, wobei F ein *Skalar* sein muss: $F[\eta, \vec{A}; T]$. Für Ordnungsparameter mit mehreren Komponent wird im allgemeinen bei T_c nicht nur die $U(1)$ -Eichsymmetrie verletzt, sondern auch andere Symmetrien wie wir gleich sehen werden. Die Minimierung der freien Energie legt die möglichen Supraleitungsphasen fest. Da die freie Energie unterhalb von T_c auf nicht-lineare Gleichung führt, gibt es meistens nur eine beschränkte Zahl von stabilen “Richtungen” im Ordnungsparameter-Raum. Die relativ einfache, symmetrie-gebundene Formulierung der Ginzburg-Landau-Theorie ist eine ihrer grössten Stärken.

Wir werden nun ein einfaches Beispiel betrachten. Das Metall hat tetragonale Kristallsymmetrie; dies entspricht der Punktgruppe D_{4h} . Zusätzlich nehmen wir an, dass die Spin-Bahn-Kopplung stark ist, so dass Orbit- und Spin-Rotation immer zusammen geschehen, d.h. die Spins sind sozusagen an das Kristallgitter gefroren. Damit ist die Symmetriegruppe $\mathcal{G} = D_{4h} \times \mathcal{K} \times U(1)$. Die irreduziblen Darstellungen von \mathcal{G} entsprechen denjenigen von D_{4h} . In der Charaktertabelle

Γ	E	$2C_4$	C_2	$2C_2'$	$2C_2''$	I	$2S_4$	σ_h	$2\sigma_v$	$2\sigma_d$	Basisfunktionen
A_{1g}	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	$\psi = 1$
A_{2g}	1	1	1	-1	-1	1	1	1	-1	-1	$\psi = k_x k_y (k_x^2 - k_y^2)$
B_{1g}	1	-1	1	1	-1	1	-1	1	1	-1	$\psi = k_x^2 - k_y^2$
B_{2g}	1	-1	1	-1	1	1	-1	1	-1	1	$\psi = k_x k_y$
E_g	2	0	-2	0	0	2	0	-2	0	0	$\psi = \{k_x k_z, k_y k_z\}$
A_{1u}	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	$\vec{d} = \hat{x}k_x + \hat{y}k_y$
A_{2u}	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1	$\vec{d} = \hat{x}k_y - \hat{y}k_x$
B_{1u}	1	-1	1	1	-1	-1	1	-1	-1	1	$\vec{d} = \hat{x}k_x - \hat{y}k_y$
B_{2u}	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	$\vec{d} = \hat{x}k_y + \hat{y}k_x$
E_u	2	0	-2	0	0	-2	0	2	0	0	$\vec{d} = \{\hat{z}k_x, \hat{z}k_y\}$

finden wir Gapfunktionen gerader und ungerader Parität. Es gibt je 4 eindimensionale und 1 zweidimensionale Darstellungen. Die eindimensionalen Darstellungen entsprechen einer Ginzburg-Landau-Theorie mit einem einkomponentigen Ordnungsparameter, wie im Falle des konventionellen Supraleiters. Die Form der Ginzburg-Landau-Theorie der eindimensionalen Darstellungen ist identisch mit der konventionellen Theorie, die wir schon betrachtet haben.

4.3 Beispiel eines zwei-komponentigen Ordnungsparameters

Neu ist jedoch die Ginzburg-Landau-Theorie der zweidimensionalen Darstellung:

$$\psi(\vec{k}) = \eta_x k_x k_z + \eta_y k_y k_z \quad \text{oder} \quad \vec{d}(\vec{k}) = \eta_x \hat{z} k_x + \eta_y \hat{z} k_y \quad (4.20)$$

In beiden Fällen führt die Symmetrie des Ordnungsparameters $\vec{\eta} = (\eta_x, \eta_y)$ auf die gleiche Form der Ginzburg-Landau-Theorie. Aus der Bedingung, dass $F[\vec{\eta}, \vec{A}; T]$ ein Skalar ist, folgt:

$$\begin{aligned}
F[\vec{\eta}, \vec{A}; T] = \int d^3r \left[a(T)|\vec{\eta}|^2 + b_1|\vec{\eta}|^4 + \frac{b_2}{2}\{\eta_x^{*2}\eta_y^2 + \eta_x^2\eta_y^{*2}\} + b_3|\eta_x|^2|\eta_y|^2 \right. \\
+ K_1\{|\Pi_x\eta_x|^2 + |\Pi_y\eta_y|^2\} + K_2\{|\Pi_x\eta_y|^2 + |\Pi_y\eta_x|^2\} \\
+ K_3\{(\Pi_x\eta_x)^*(\Pi_y\eta_y) + c.c.\} + K_4\{(\Pi_x\eta_y)^*(\Pi_y\eta_x) + c.c.\} \\
\left. + K_5\{|\Pi_z\eta_x|^2 + |\Pi_z\eta_y|^2\} + \frac{1}{8\pi}(\vec{\nabla} \times \vec{A})^2 \right] \quad (4.21)
\end{aligned}$$

Die Koeffizienten $a(T)$, b_i und K_i sind reelle materialabhängige Parameter, die entweder durch eine mikroskopische Theorie oder durch das Experiment bestimmt werden sollten. Diese freie Energie ist offensichtlich einiges komplizierter als im Fall eines einkomponentigen Ordnungsparameters. Dies ist das einfachste nicht-triviale Beispiel eines unkonventionellen Supraleiters.

Wir betrachten zunächst die möglichen stabilen uniformen Phasen dieser Theorie. Wir ignorieren die Gradiententerme und suchen das Minimum der freien Energie. Der Term zweiter Ordnung zeigt, dass beide Komponenten η_x und η_y die gleiche kritische Temperatur besitzen. Die Terme vierter Ordnung definieren jedoch die Kombinationen welche die Kondensationsenergie maximieren. Sie haben die Form von Anisotropietermen im komplexen Ordnungsparameterraum. Es ist nicht schwierig, die möglichen Phasen in Abhängigkeit von b_i zu finden. Es ist zunächst wichtig, dass die Viertordnungsterme positiv-definit sind, was durch die Beziehungen

$$4b_1 - b_2 + b_3 > 0 \quad \text{und} \quad 4b_1 + b_2 + b_3 > 0 \quad (4.22)$$

sichergestellt wird. Wir erkennen drei grundsätzlich verschiedene Phasen, die wir im Phasendiagramm b_2/b_1 gegen b_3/b_1 auftragen.

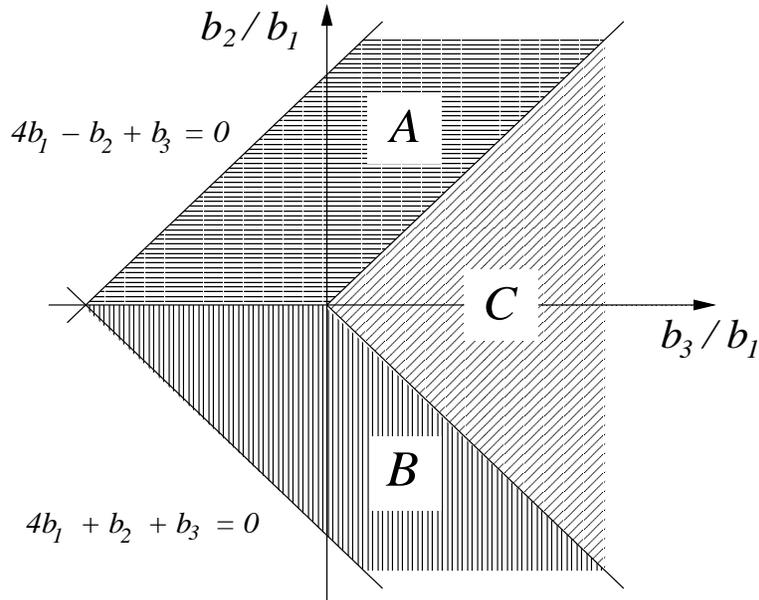


Abb. 7.1: Phasendiagramm der Ginzburg-Landau-Theorie für einen zweikomponentigen Ordnungsparameter.

Phase	$\psi(\vec{k})$	$\vec{d}(\vec{k})$	gebrochene Symmetrie
<i>A</i>	$k_z(k_x \pm ik_y)$	$\hat{z}(k_x \pm ik_y)$	$U(1), \mathcal{K}$
<i>B</i>	$k_z(k_x \pm k_y)$	$\hat{z}(k_x \pm k_y)$	$U(1), D_{4h} \rightarrow D_{2h}$
<i>C</i>	$k_z k_x, k_z k_y$	$\hat{z} k_x, \hat{z} k_y$	$U(1), D_{4h} \rightarrow D_{2h}$

Offensichtlich brechen diese Phasen mehr als die $U(1)$ -Symmetrie, deren Verletzung für die Supraleitung notwendig ist. Die *A*-Phase bricht die Zeitumkehr-Symmetrie und die *B*- und *C*-Phasen brechen die Kristallsymmetrie von tetragonal (D_{4h}) zu orthorhombisch (D_{2h}). Alle Phasen sind zweifach entartet, d.h. es können sich je zwei Typen von Domänen bilden. Dies bringt neue topologische Strukturen mit sich, wie Domänenwände, die die Domänen separieren (analog zu Blochwänden in Ferromagneten), oder neuartige Vortexstrukturen in der gemischten Phase. All dies ist nicht möglich für einkomponentige Ordnungsparameter. Im Falle schwacher Kopplung mit einer ellipsenförmigen Fermifläche ergibt sich aus der mikroskopischen Theorie, dass die *A*-Phase am stabilsten ist, wie man leicht daran sehen kann, dass diese Phase die kleinste Anzahl von Nullstellen in der Energielücke aufweist. Die anderen Phasen können durch Starkkopplungseffekte und starke Anisotropien der elektronischen Bandstruktur stabilisiert werden. Als nächstes betrachten wir die Supraströme, indem wir die Variation nach dem Vektorpotential berechnen und, analog zu oben die Ströme aus der Maxwell-Gleichung herleiten:

$$\begin{aligned}
j_x &= 8\pi e [K_1 \eta_x^* \Pi_x \eta_x + K_2 \eta_y^* \Pi_x \eta_y + K_3 \eta_x^* \Pi_y \eta_y + K_4 \eta_y^* \Pi_y \eta_x + c.c.] \\
j_y &= 8\pi e [K_1 \eta_y^* \Pi_y \eta_y + K_2 \eta_x^* \Pi_y \eta_x + K_3 \eta_y^* \Pi_x \eta_x + K_4 \eta_x^* \Pi_x \eta_y + c.c.] \\
j_z &= 8\pi e K_5 \{ \eta_x^* \Pi_z \eta_x + \eta_y^* \Pi_z \eta_y + c.c. \}.
\end{aligned} \tag{4.23}$$

Daraus ergibt sich folgende Form der Londongleichung für das Vektorpotential:

$$\begin{aligned}
\vec{\nabla}^2 A_x &= \lambda_1^{-2} A_x + \lambda_3^{-2} A_y \\
\vec{\nabla}^2 A_y &= \lambda_3^{-2} A_x + \lambda_2^{-2} A_y \\
\vec{\nabla}^2 A_z &= \lambda_4^{-2} A_z
\end{aligned} \tag{4.24}$$

mit

$$\begin{aligned}
\lambda_1^{-2} &= \frac{32\pi^2 e^2}{c^2} \{ K_1 |\eta_x|^2 + K_2 |\eta_y|^2 \}, & \lambda_2^{-2} &= \frac{32\pi^2 e^2}{c^2} \{ K_1 |\eta_y|^2 + K_2 |\eta_x|^2 \}, \\
\lambda_3^{-2} &= \frac{32\pi^2 e^2}{c^2} (K_3 + K_4) (\eta_x^* \eta_y + \eta_x \eta_y^*), & \lambda_4^{-2} &= \frac{32\pi^2 e^2}{c^2} K_5 |\vec{\eta}|^2.
\end{aligned} \tag{4.25}$$

Dies bedeutet, dass sowohl der Suprastrom als auch die London-Eindringtiefe tensorielle Struktur haben, die die Anisotropie des Kondensates berücksichtigen. Diese Anisotropien gehen für die *B*- und *C*-Phase über die Kristallsymmetrie hinaus, da diese dort gebrochen wird.

4.3.1 Zeitumkehr-Symmetrie-Verletzung und Magnetismus

Wir betrachten die zeitumkehrsymmetrie-verletzende Phase A in der Nähe der Materialoberfläche. Die Randbedingungen sind nicht trivial, da sie sich aus Interferenzeigenschaften der verschiedenen Paarungskanäle für die Oberflächen-Reflexion herleiten. Allgemein kann man davon ausgehen, dass Ordnungsparameter, die unter Spiegelung an der Oberfläche das Vorzeichen wechseln an der Oberfläche unterdrückt werden, während diejenigen, die das Vorzeichen behalten, unbeeinflusst bleiben. Nun betrachten wir eine Oberfläche mit Normalvektor $\vec{n} = (1, 0, 0)$ so dass η_x im Gegensatz zu η_y unterdrückt wird. Man kann die Ginzburg-Landau-Gleichungen lösen. Eine vereinfachende Lösung mit der Annahme, dass $\eta_x(x=0) = 0$ (Oberfläche bei $x=0$), hat die Form:

$$\eta_x(x) = \eta_0 \tanh\left(\frac{x}{\xi}\right) \quad \text{und} \quad \eta_y = \pm i\eta_0 \quad \text{für} \quad x \geq 0, \quad (4.26)$$

mit der Kohärenzlänge ξ und

$$\eta_0^2 = \frac{a'(T_c - T)}{4b_1 - b_2 + b_3}. \quad (4.27)$$

Obwohl diese Lösung stark vereinfacht ist, erlaubt sie uns, eine wichtige Entdeckung für die Ströme an der Oberfläche zu machen. Der Strom senkrecht zur Oberfläche muss verschwinden: $\vec{n} \cdot \vec{j} = j_x = 0$. Die z -Komponente verschwindet ebenfalls. Für die y -Komponenten finden wir jedoch (wir setzen zunächst $\vec{A} = 0$):

$$j_y = 16\pi e\hbar K_3 \eta_y \frac{\partial \eta_x}{\partial x} = -\frac{16\pi e\hbar}{\xi} \frac{i\eta_y \eta_0}{\cosh^2(x/\xi)}. \quad (4.28)$$

Dies ist ein spontaner Strom, der an der Oberfläche fließt und dessen Richtung davon abhängt, welches Vorzeichen η_y hat. Dies ist eine Konsequenz des intrinsischen Drehimpulses der Cooperpaare die sich in einem Oberflächenstrom ausdrückt. Im Innern des Supraleiters sind die orbitalen Ströme jedoch nicht sichtbar, wegen der Abschirmung und Kompensation. Sie tauchen nur an der Oberfläche auf. Natürlich erzeugt dieser Strom ein Magnetfeld, das abgeschirmt werden muss. Es fließen daher im Innern des Supraleiters antiparallel Abschirmströme auf der Längenskala der London-Eindringtiefe.

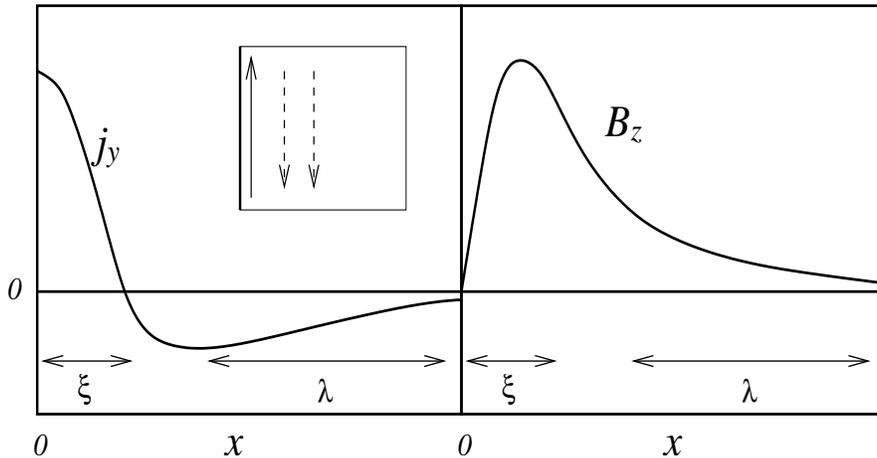


Abb. 7.2: Spontaner Oberflächen-Strom und Magnetfeld.

Ähnliche spontane Ströme tauchen auch um Verunreinigungen und Inhomogenitäten des Supraleiters auf. Mit einer lokalen Probe des Magnetfeldes können diese gemessen werden. Die einzige Methode, die bisher solche Felder sichtbar gemacht hat, ist die Nullfeld-Müon-Spinrelaxation, die sich eignet, schwache lokale Felder ($\sim 0.1 - 1G$) sichtbar zu machen. Spontane interne Felder sind in der supraleitenden Phase von Sr_2RuO_4 und unterhalb des zweiten Phasenübergangs in $\text{U}_{1-x}\text{Th}_x\text{Be}_{13}$ ($0.018 < x < 0.45$) beobachtet worden und als Anzeichen gebrochener Zeitumkehrsymmetrie interpretiert worden.

4.3.2 Mehrfache Phasenübergänge

Wir betrachten nun den Fall eines Systems, in dem es zwei Ordnungsparameter gibt, die nahezu die gleiche kritische Temperatur besitzen. Dazu verwenden wir wieder das Beispiel des zweikomponentigen Ordnungsparameters. Wir nehmen nun jedoch an, dass die tetragonale Symmetrie von aussen her gebrochen wurden, so dass die x - und y -Richtung nicht mehr äquivalent sind ($D_{4h} \rightarrow D_{2h}$). Damit wird der Term zweiter Ordnung eine Korrektur erfahren:

$$a'(T - T_c)|\vec{\eta}|^2 \quad \longrightarrow \quad a'(T - T_{cx})|\eta_x|^2 + a'(T - T_{cy})|\eta_y|^2 \quad (4.29)$$

Durch diese Ersetzung in der freien Energie $F[\vec{\eta}, T]$ erhalten wir die neue Situation, in der eine der beiden Ordnungsparameter-Komponenten bei einer höheren Übergangstemperatur endlich wird; wir nehmen an, dass $T_{cx} > T_{cy}$. Dann ergibt die Minimierung der freien Energie sofort:

$$\vec{\eta}(T) = \begin{pmatrix} \frac{a'(T_{cx} - T)}{2b_1} \\ 0 \end{pmatrix} \quad (4.30)$$

unmittelbar unterhalb von T_{cx} . Bei welcher Temperatur tritt nun die η_y -Komponenten auf? Die Instabilitätsbedingung kann durch die Betrachtung der effektiven Terme zweiter Ordnung in η_y gefunden werden.

$$\{a'(T - T_{cy}) + (2b_1 + b_3)|\eta_x(T)|^2\} |\eta_y|^2 + \frac{b_2}{2}\eta_x^2(T)(\eta_y^{*2} + \eta_y^2) \quad (4.31)$$

wobei wir η_x so eichen, dass es reell ist. Dies ist eine Bilinearform in (η_y, η_y^*) ,

$$(\eta_y^*, \eta_y) \begin{pmatrix} a'(T - T_{cy}) + (2b_1 + b_3)|\eta_x(T)|^2 & \frac{1}{2}b_2\eta_x^2(T) \\ \frac{1}{2}b_2\eta_x^2(T) & a'(T - T_{cy}) + (2b_1 + b_3)|\eta_x(T)|^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \eta_y \\ \eta_y^* \end{pmatrix} \quad (4.32)$$

die zwei Eigenwerte besitzt. Die Instabilitätstemperatur ergibt sich durch den Vorzeichenwechsel einer der beiden. Der Eigenwert der bei höherer Temperatur verschwindet, definiert die kritische Temperatur T'_{cy} , bei der der Zustand Eq.(4.30) instabil wird.

$$a'(T - T_{cy}) + (2b_1 - b_2 + b_3)|\eta_x(T)|^2 = 0 \quad \Rightarrow \quad \eta_y^* + \eta_y = 0, \quad (4.33)$$

$$a'(T - T_{cy}) + (2b_1 + b_2 + b_3)|\eta_x(T)|^2 = 0 \quad \Rightarrow \quad \eta_y^* - \eta_y = 0. \quad (4.34)$$

Dies ergibt folgende mögliche Übergangstemperaturen:

$$T'_{cy} = T_{cy} \frac{1 - R_{\pm}T_{cx}/T_{cy}}{1 - R_{\pm}} \quad \text{mit} \quad R_{\pm} = \frac{2b_1 \pm b_2 + b_3}{2b_1}. \quad (4.35)$$

Es gibt eine weitere Instabilität zu einer Phase, in der beide Ordnungsparameter-Komponenten verschieden von Null sind. Die Übergangstemperatur ist nicht T_{cy} , sondern eine renormierte Temperatur T'_{cy} , der höchste Wert, der aus (4.35) erhalten werden kann. Falls die Lösung aus (4.33) herrührt, ist η_y rein imaginär. Falls sie durch (4.34) bestimmt wird, ist η_y rein reell. Es zeigt sich, dass gemäss dem Phasendiagramm in Abb.7.1, ein zweiter Phasenübergang möglich ist für die Bereiche A und B , aber nicht für den Bereich C . Die beiden Phasenübergänge entsprechen einer Sequenz von Symmetriebrechungen:

$$\mathcal{G} = D_{2h} \times \mathcal{K} \times U(1) \xrightarrow{T_{cx}} D_{2h} \times \mathcal{K} \xrightarrow{T'_{cy}} \begin{cases} D_{2h} & \text{Bereich } A \\ \mathcal{K} & \text{Bereich } B \end{cases} \quad (4.36)$$

Dies bedeutet, dass beim ersten Phasenübergang “nur” die $U(1)$ -Eichsymmetrie gebrochen wird und beim zweiten Phasenübergang je nach Bereich entweder die Zeitumkehr- oder die Kristallsymmetrie. Beachte, dass im Normalzustand, wegen der Ungleichheit von T_{cx} und T_{cy} die Kristallsymmetrie von tetragonal (D_{4h}) auf orthorhombisch (D_{2h}) reduziert worden ist. Dies könnte zum Beispiel durch uniaxialen Druck entlang der x - oder y -Achse erreicht werden, oder durch intrinsische kristallsymmetrie-brechende Ordnung. Die Sequenz von Supraleitungsphasenübergängen ist eines der offensichtlichsten Zeichen unkonventioneller Supraleitung. Konventionelle Supraleitung hat nur eine Symmetrie, die gebrochen werden kann: $U(1)$, so dass nur ein Phasenübergang möglich ist. Ferner bedingen Mehrfachphasenübergängen einen Ordnungsparameter mit mindestens zwei Komponenten.

Der Doppelübergang kann am “einfachsten” mit Hilfe der spezifischen Wärme beobachtet werden, die zwei aufeinander folgende Sprünge aufweist. Dies kann innerhalb der Ginzburg-Landau-Theorie auch einfach berechnet werden. Es gibt aber auch andere beobachtbare Hinweise auf solche Doppelübergänge, wie Anomalien in den kritischen Feldern H_{c1} und H_{c2} , oder in kollektiven Moden die Kopplung an den Ultraschall. Doppelübergänge wurden bisher in zwei Supraleitern beobachtet: $U_{1-x}Th_xBe_{13}$ und UPt_3 . In beiden Fällen scheint der zweite Phasenübergang die Zeitumkehrsymmetrie zu brechen. Während man glaubt, dass in UPt_3 eine Situation vorliegt, wie wir sie oben diskutiert haben, nämlich eine Aufspaltung der Entartung einer zweidimensionalen Darstellung unter einer symmetrierniedrigenden antiferromagnetischen Ordnung, scheint es sich bei $U_{1-x}Th_xBe_{13}$ eher um eine zufällige Fast-Entartung zweier Darstellung zu handeln. Ein weiterer Kandidat für einen Doppelübergang wurde kürzlich gefunden: $PrOs_4Sb_{12}$ ein sogenannter Skutterudit (K. Izawa et al., cond-mat/0209553).

Kapitel 5

Theoretische Aspekte der Hochtemperatur-Supraleiter

Seit ihrer Entdeckung 1986 ist die Erklärung und Beschreibung der Hochtemperatur-Supraleiter ein zentrales Thema der theoretischen Festkörperphysik. Trotz der grossen Zahl von Arbeiten zu diesem Gebiet, gibt es immer noch keinen Konsens in wichtigen Aspekten der Physik dieser Systeme. Dieses Kapitel soll dazu dienen, den ersten Kontakt mit der Theorie zu schaffen und zwei der wichtigsten Konzepte kurz zu beleuchten.

5.1 Grundlagen des elektronischen Systems

5.1.1 Wo sind die wichtigen Elektronen?

Wie schon im experimentellen Teil gezeigt, haben alle Hochtemperatur-Supraleiter im wesentlichen dieselbe Struktur. Sie bestehen aus gestapelten Kupfer-Oxid-Schichten, die durch "Füllmaterial" von einander separiert sind. Es ist allgemein akzeptiert, dass die Niederenergiephysik der Elektronen von diesen Kupfer-Oxid-Schichten herrührt. Als einfachstes Beispiel betrachten wir $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$. Für $x = 0$ finden wir die Ionisationskonfiguration:



Damit gehen dem Kupfer zwei Elektronen verloren, und die äusseren Elektronschalen sind in der Konfiguration $3d^9$ (hervorgehend aus $3d^{10}4s^1$), so dass ein Loch in der $3d$ -Schale bleibt. Das Kupfer-Ion ist von Sauerstoff-Ionen umgeben, die ein leicht deformiertes Oktahedron bilden, also im Wesentlichen ein kubisches Kristallfeld erzeugen. Darin spaltet das Orbital in zwei Unterniveaux auf:

$$e_g : \begin{cases} 3d_{x^2-y^2} \\ 3d_{3z^2-r^2} \end{cases} \qquad t_{2g} : \begin{cases} 3d_{yz} \\ 3d_{zx} \\ 3d_{xy} \end{cases} \qquad (5.1)$$

Eine leichte tetragonale Deformation der Octaheder führt zu einer weiteren leichten Aufspaltung, so dass das einzelne Loch im e_g -Orbital $3d_{x^2-y^2}$ angesiedelt ist (Abb.1). Diese Löcher können im Prinzip von einem Cu-Ion zum anderen wandern, via der σ -Hybridisierung ihrer Wellenfunktion mit denjenigen der $2p$ -Orbitale der dazwischen liegenden Sauerstoff-Ionen. Diese Loch-Bewegung findet fast ausschliesslich in den CuO_2 -Ebenen statt und ist schwach zwischen den Ebenen. Damit

ist die Elektronenstruktur quasizweidimensional und wir werden uns auf die zwei Dimensionen einer Ebenen beschränken. Obwohl drei verschiedene Orbitale involviert sind ($2p_x, 2p_y, 3d_{x^2-y^2}$) und eigentlich die grundlegende Beschreibung auf drei Bändern basiert, zeigt sich, dass für die elektronischen Eigenschaften eine Einband-Theorie ausreichend ist. Diese Theorie betrachtet die Elektronen in den Cu- $3d_{x^2-y^2}$ -Orbitalen und ihr Hüpfen zu Nachbar-Cu-Plätzen, durch ein Tight-binding-Modell:

$$\mathcal{H}_t = -t \sum_{\langle i,j \rangle_{nn}} \sum_s \hat{c}_{is}^\dagger \hat{c}_{js} + h.c. - \mu \sum_{i,s} \hat{c}_{is}^\dagger \hat{c}_{is} , \quad (5.2)$$

wobei \hat{c}_{is}^\dagger (\hat{c}_{is}) ein Elektron im $3d_{x^2-y^2}$ -Orbital erzeugt (vernichtet). Die resultierende Bandenergie ist dann

$$\xi_{\vec{k}} = -2t(\cos k_x + \cos k_y) - \mu , \quad (5.3)$$

mit Minimum bei $\vec{k} = 0$ und Maximim bei $\vec{k} = (\pi/a, \pi/a)$ wobei die Gitterkonstante a ist.

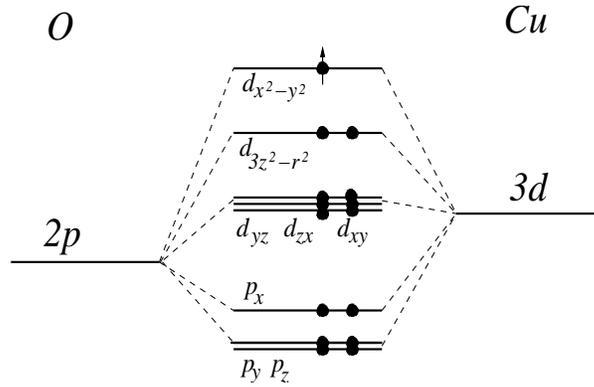


Abb. 1: Orbitale Energieniveaus für eine Cu-O-Bindung (x -Achse) im tetragonalen Kristallfeld.

Falls das chemische Potential $\mu = 0$, ist die Fermifläche ein Quadrat, wie im letzten Kapitel gezeigt wurde, und wir haben im Mittel pro Cu-Ion ein Elektron. Die Zustandsdichte hat bei dieser Energie eine sogenannte van Hove-Singularität, da das Energieband dort Sattelpunkte bei $\vec{k} = (\pm\pi/a, 0), (0, \pm\pi/a)$ besitzt.

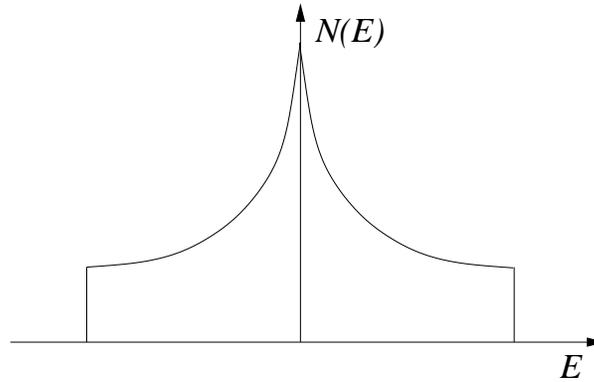


Abb. 2: Zustandsdichte des tight-binding Modells mit Hüpfen zwischen nächsten Nachbarn auf einem Quadratgitter. Im Zentrum gibt es eine van Hove Singularität.

Dazu kommt nun die Coulomb-Abstoßung, die wir wegen der Thomas-Fermi-Abschirmung als lokal annehmen dürfen:

$$\mathcal{H}_U = \sum_i U \widehat{n}_{i\uparrow} \widehat{n}_{i\downarrow}, \quad (5.4)$$

mit U als Energieaufwand zwei Elektronen (unterschiedlichen Spins) auf dasselbe Cu-Atom zu setzen. Zusammen mit dem Hüpf-Hamilton-Operator bildet dies das sogenannte Hubbard-Modell. Dieses Modell wird hier auf einem quadratischen Gitter angenommen, welches einer Schicht im Material entspricht. Aufgrund der schwachen Kopplung zwischen den Schichten hat das Material tetragonale Symmetrie (abgesehen von leichten orthorhombischen Deformationen). Wenn wir also zum Beispiel das Material La_2CuO_4 betrachten, dann gibt es ein Elektron pro Cu- $3d_{x^2-y^2}$ -Orbital. Dies entspricht dem Fall eines halbgefüllten Bandes. In der einfachen Bandtheorie würde man erwarten, dass es sich hierbei um ein perfektes Metall handelt. Die grosse Coulomb-Abstossung führt jedoch dazu, dass die Elektronen sich nicht bewegen können, da sie die Konfiguration von nur einem Elektron auf jedem Cu-Ion bevorzugen. Daher ist dieses System ein Isolator, ein sogenannter Mott-Isolator, wobei jedes Cu-Ion einen Spin-1/2 Freiheitsgrad besitzt.

Das resultierende System ist ein Quanten-Spin-1/2-Gitter. Die effektive Wechselwirkung zwischen den Spins wird durch das Heisenberg-Modell beschrieben:

$$\mathcal{H}_H = J \sum_{\langle i,j \rangle_{nn}} \widehat{\vec{S}}_i \cdot \widehat{\vec{S}}_j, \quad (5.5)$$

das sich aus dem obigen Hubbard-Modell herleiten lässt. J ist die Austauschwechselwirkung zwischen benachbarten Spins und ergibt sich aus dem virtuellen Hüpfen von Elektronen auf ihre benachbarten Gitterpunkte. Da ein solcher Hüpfprozess beim benachbarten Gitterpunkt ein Elektron mit umgekehrtem Spin voraussetzt, ergibt sich eine effektiv antiferromagnetische Wechselwirkung:

$$J = \frac{4t^2}{U}, \quad (5.6)$$

wie sich einfach aus der Rayleigh-Schrödinger-Störungsrechnung in zweiter Ordnung ausrechnen lässt, wenn $|t| \ll U$ angenommen wird. Die für die Kuprate angenommenen Werte sind:

$$U \sim 5 \text{ eV}, \quad t \sim 0.4 \text{ eV}, \quad \rightarrow \quad J \sim 0.12 \text{ eV}. \quad (5.7)$$

Es zeigt sich, dass dieses Spingitter einen antiferromagnetisch geordneten Grundzustand hat (nicht exakt beweisbar in zwei Dimensionen). In diesem System sind natürlich die Ladungsfluktuationen, d.h. die Änderung der Elektronenzahl auf jedem Cu-Ion, unterdrückt. Hier kann sicher keine Supraleitung auftreten.

Um ein metallisches und schliesslich supraleitendes Material zu erhalten, müssen die Elektronen wieder beweglich werden. Dies geschieht durch Dotieren, was der Entnahme von Spins entspricht (Loch-Dotierung). Dieses Dotieren geschieht in La_2RuO_4 dadurch, dass ein kleiner Teil des La durch Sr ersetzt wird. Die optimale Oxidierung von Sr ist $2+$. Somit führt Sr^{2+} ein zusätzliches Loch ein, das es der CuO_2 -Ebene abgibt. Beachte, dass diese chemische Änderung der Ladungskonzentration eine Modifikation zwischen den CuO_2 -Ebenen bedeutet, ohne die Ebenen selbst zu zerstören.

5.1.2 Das t - J -Modell

Durch diese Dotierung werden die verbleibenden Spins beweglich, weil sich auf einigen Cu-Plätzen kein Spin mehr befindet. Das einfachste Modell, das diesen Umstand beschreibt, ist das

sogenannte t - J -Modell. Es handelt sich dabei um eine “einfache” Erweiterung des Heisenberg-Modells:

$$\mathcal{H}_{tJ} = -t \sum_{\langle i,j \rangle_{nn,s}} \left[\hat{c}_{is}^\dagger (1 - \hat{n}_{i,-s}) (1 - \hat{n}_{j,-s}) \hat{c}_{js} + \text{h.c.} \right] + J \sum_{\langle i,j \rangle_{nn}} \widehat{\vec{S}}_i \cdot \widehat{\vec{S}}_j. \quad (5.8)$$

Es fällt sofort auf, dass der Hüpfterm, den wir hier einführen, um die Bewegung der Spins zu beschreiben, nicht die einfache Form des Tight-Binding-Modells hat. Man muss hier sicherstellen, dass sich nie mehr als ein Elektron auf einem Gitterpunkt befindet. Ansonsten würde das System mit einem Energieaufwand von U pro doppelt besetztem Punkt bestraft. Das bedeutet, dass man alle Doppelbesetzungen vollständig unterdrückt. Was zunächst einfach anmutet, entpuppt sich aber als äusserst schwieriges mathematisches Problem, wenn man die Dynamik dieses Modells untersuchen möchte. Selbst nach vielen Jahren und hunderten von theoretischen Arbeiten gibt es immer noch keine allgemein akzeptierte Lösung dieses Modells, so dass wir nicht wissen, was seine tatsächlichen Niederenergie-Eigenschaften sind. Nichtsdestoweniger gibt es einfache qualitative Betrachtungen, die gewisse Trends einleuchtend zu erklären vermögen.

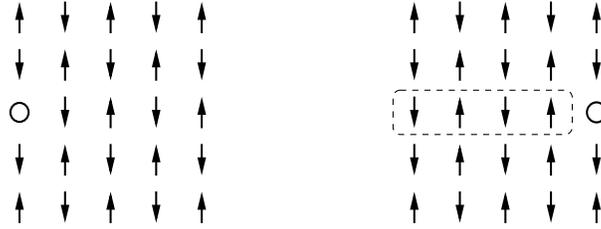


Abb. 2: Ein Loch in der antiferromagnetischen Anordnung von Spins hinterlässt einen “String” von nicht antiferromagnetisch korrelierten Spin-Bonds (gestrichelte Linie schneidet die ungünstigen Bonds).

Ein Beispiel ist die “String-Betrachtung”, die eine plausible Erklärung für die Tendenz zur Paarung ist: Wir nehmen an, dass wir einen geordneten Antiferromagneten haben. Wenn wir einen Spin entnehmen, und das resultierende Loch sich bewegt, hinterlässt es auf seinem Pfad der “Unordnung”; die Spinkonfiguration ist lokal nicht mehr antiferromagnetisch geordnet. Die Bewegung des Lochs bedeutet einen Energieaufwand proportional zum Weg, den das Loch zurücklegt. Es scheint daher an seinen Ursprungspunkt gekettet zu sein (elastische Kette oder String). Wenn nun ein zweites Loch dazugegeben wird, kann dieses die Unordnung wieder in Ordnung bringen, indem es dem ersten Loch auf seinem Pfad folgt. Zusammen können die beiden Löcher sich einfach bewegen und gewinnen so kinetische Energie. Separat sind sie jedoch angekettet. Zwischen den Löchern herrscht damit eine Anziehung, die einer elastischen Feder gleicht. Dieses sehr starke Potential wäre in gewissem Sinne optimal, um Paare zu bilden. Dieses Bild ist jedoch nur bedingt richtig. Der antiferromagnetische Zustand ist in keiner Weise so starr gefroren, sondern enthält starke Quantenfluktuationen. Dies bedeutet, dass die Unordnung eines Lochs nach einer gewissen Zeit ausgeheilt wird. Damit existiert die Anziehung zwischen den Löchern nur auf sehr kurzen Zeitskalen $\sim \hbar/J$. Es gilt daher subtilere Betrachtungen anzustellen.

Ein wichtiger Punkt, dem man Beachtung schenken sollte, ist die Möglichkeit der Phasenseparierung, d.h. die Löcher formen Klumpen separat von den antiferromagnetisch geordneten Spins. Damit würden auch die Ladungsbewegungen unterdrückt. Es gibt Vorschläge, dass sich alternierende Streifen von Spins und Löchern bilden. Solche Konfigurationen sind tatsächlich in einigen Experimenten beobachtet worden und sind dort der Supraleitung abträglich. Es gibt noch viele andere mögliche Zustände in diesem Modell und es ist schwierig mit Sicherheit zu sagen, welcher energetisch gewinnt. Die Aufgabe des Modells ist es zu erklären, wie das Phasendiagramm

der Hochtemperatur-Supraleiter (Abb.3) zustande kommt. Dieses Phasendiagramm beinhaltet die Unterdrückung des Antiferromagnetismus, wenn Löcher dotiert werden. Gleichzeitig taucht eine neue Phase auf, die Pseudogap-Phase genannt wird (nicht so klar charakterisiert). Dort sind vor allem die Spinanregungen mit kleinen Energien unterdrückt. Schliesslich taucht noch der “Hügel” der Supraleitung auf. Die Normalphase ist nur wirklich “normal” bei sehr hoher Lochdotierung, wo sich das System wie eine Fermiflüssigkeit verhält. Bei schwacher Dotierung (oder bezüglich T_c optimaler Dotierung) hingegen findet man ein sogenanntes seltsames Metall, das in vielen Aspekten von den Eigenschaften der Fermiflüssigkeit abweicht, unter anderem in der linearen Temperaturabhängigkeit des elektrischen Widerstandes. Wir werden hier zwei Betrachtungsweisen diskutieren, die einige wichtige Eigenschaften des Systems wiedergeben.

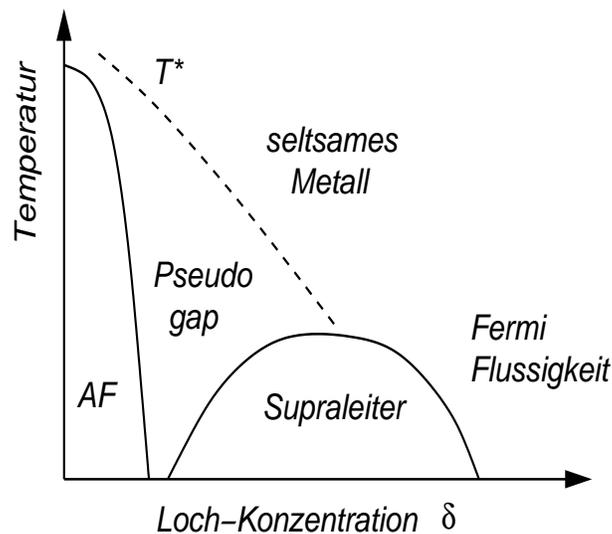


Abb. 3: Schematisches Phasendiagramm der Kuprate (Temperatur - Lochkonzentration δ): Bei sehr kleinen Dotierungen ist das System antiferromagnetisch geordnet, bei grösseren Dotierungen ist es supraleitend, wenn die Temperatur genügend tief ist. Wir unterscheiden “unterdotierte” und “überdotierte” Systeme, je nachdem ob δ kleiner bzw. grösser als δ_{opt} ist, das zum höchsten supraleitenden T_c führt. Im unterdotierten Bereich findet man eine sogenannte Pseudogap-Phase. Im überdotierten Bereich nähert sich das System einer Fermiflüssigkeit an. Oberhalb des optimalen T_c zeigt das Material “seltsame” metallische Eigenschaften.

5.2 Antiferromagnetische Spinfluktuationen und die Supraleitung

Die Eigenschaften des Materials mit kleiner Loch-Dotierung (Pseudogap-Bereich) sind schwierig zu beschreiben. Wir werden uns daher zunächst darauf einschränken, den stark dotierten Fall zu betrachten. Bei grosser Lochkonzentration verhält sich das System fast wie ein normales Metall (Fermiflüssigkeit). Nichtsdestoweniger liegt eine antiferromagnetische Phase in der Nähe, die sich durch verstärkte Spinfluktuationen bemerkbar macht. Wir wollen, einem einfachen Modell folgend, die Cooper-Paarung untersuchen, die durch antiferromagnetische Spinfluktuationen in einem Elektronensystem (z.B. beschrieben durch das 2D Hubbard-Modell) erzeugt wird. Dieses Modell basiert auf dem Bild, das wir in Kapitel 2 für die Paarung mittels Spinfluktuationen schon eingeführt hatten.

5.2.1 Einfaches Modell und Paarungszustände

Wir stellen daher das folgende Modell auf, welches Elektronen auf einem Quadratgitter beschreibt mit einer effektiven Wechselwirkung:

$$\mathcal{H}_{sf} = \sum_{\vec{k}, s} \xi_{\vec{k}} \hat{c}_{\vec{k} s}^\dagger c_{\vec{k} s} - \frac{1}{2N^2} \sum_{\vec{k}, \vec{k}', \vec{q}} \sum_{s_1, s_2, s_3, s_4} v(\vec{q}) \vec{\sigma}_{s_1 s_2} \cdot \vec{\sigma}_{s_3 s_4} \hat{c}_{\vec{k} + \vec{q}, s_1}^\dagger \hat{c}_{\vec{k} s_2} \hat{c}_{\vec{k}' - \vec{q}, s_3}^\dagger \hat{c}_{\vec{k}', s_4}, \quad (5.9)$$

wobei $\xi_{\vec{k}} = -2t(\cos k_x + \cos k_y) - \mu$ für das Tight-binding Modell mit Nachbarhüpfen zwischen Gitterpunkten (N : Anzahl Gitterplätze). Die effektive Wechselwirkung ist gegeben durch

$$v(\vec{q}) = U + U^2 \chi(\vec{q}) \quad \text{mit} \quad \chi(\vec{q}) = \frac{\chi_0(\vec{q})}{1 - U \chi_0(\vec{q})}, \quad (5.10)$$

mit $\chi(\vec{q})$ als statische Spinsuszeptibilität (in RPA-Form mit der unrenormierten Suszeptibilität $\chi_0(\vec{q})$). Wir konzentrieren uns nun auf die Cooperpaarung und ignorieren alle irrelevanten Paarstreuungsprozesse, so dass die Paarwechselwirkung sich auf folgende Terme reduziert:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{Paar} = \frac{1}{N^2} \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} \sum_s \left\{ V_{\vec{k}, \vec{k}'}^t (\hat{c}_{\vec{k}, s}^\dagger \hat{c}_{-\vec{k}, s}^\dagger \hat{c}_{-\vec{k}', s} \hat{c}_{\vec{k}', s} + \hat{c}_{\vec{k}, s}^\dagger \hat{c}_{-\vec{k}, -s}^\dagger \hat{c}_{-\vec{k}', -s} \hat{c}_{\vec{k}', s}) \right. \\ \left. + V_{\vec{k}, \vec{k}'}^s \hat{c}_{\vec{k}, s}^\dagger \hat{c}_{-\vec{k}, -s}^\dagger \hat{c}_{-\vec{k}', -s} \hat{c}_{\vec{k}', s} \right\}, \quad (5.11) \end{aligned}$$

mit den Spin-Triplett- und Spin-Singulett-Paarwechselwirkungen:

$$V_{\vec{k}, \vec{k}'}^t = -\frac{1}{4} \left[v(\vec{k} - \vec{k}') - v(\vec{k} + \vec{k}') \right] \quad \text{bzw.} \quad V_{\vec{k}, \vec{k}'}^s = \frac{3}{4} \left[v(\vec{k} - \vec{k}') + v(\vec{k} + \vec{k}') \right], \quad (5.12)$$

die in einem gewissen Energiebereich der Breite $2\epsilon_c$ um die Fermienergie herum wirksam ist. Welche Paarungszustände kommen in Frage? Wir haben bereits früher für Systeme mit tetragonaler Kristallsymmetrie die möglichen Paarungszustände klassifiziert. Betrachten wir die Form der Wechselwirkung. Zunächst haben wir eine starke lokale Abstossung U , die den konventionellen s -Wellenkanal (A_{1g}) unterdrückt. Die Suszeptibilität im zweiten Term von $v(\vec{q})$ weist wie oben erwähnt die Tendenz zu antiferromagnetischer Ordnung auf. Als einfaches Modell setzen wir an

$$\chi(\vec{q}) = \frac{\chi_0}{1 + b f(\vec{q})} \quad \text{mit} \quad f = \cos q_x + \cos q_y, \quad (5.13)$$

so dass $\chi(\vec{q})$ maximal wird für $\vec{q} = \vec{Q} = (\pi/a, \pi/a)$ (a : Gitterkonstante), wenn wir $1/2 > b > 0$ wählen ($-1/2 < b < 0$ entspricht ferromagnetischen Fluktuationen). Dabei entspricht \vec{Q} gerade dem Wellenvektor der Spinkorrelation des antiferromagnetischen Zustandes auf dem Quadratgitter. Um die wesentlichen Eigenschaften der resultierenden Paarwechselwirkung zu diskutieren, verwenden wir für die Suszeptibilität nun die etwas grobe Näherung

$$\chi(\vec{q}) \approx \chi_0 [1 - \tilde{b} f(\vec{q})], \quad (5.14)$$

die qualitativ die gleichen Eigenschaften hat, wobei \tilde{b} das gleiche Vorzeichen hat wie b . Daraus leiten wir nun für den Singulett-Kanal her,

$$\begin{aligned}
V_{\vec{k}, \vec{k}'}^s &= \frac{3U}{2} - \frac{3U^2 \chi_0}{4} \tilde{b} \left\{ f(\vec{k} - \vec{k}') + f(\vec{k} + \vec{k}') \right\} \\
&= \frac{3U}{2} - \frac{3U^2 \chi_0}{4} \tilde{b} \left\{ (\cos k_x + \cos k_y)(\cos k'_x + \cos k'_y) + (\cos k_x - \cos k_y)(\cos k'_x - \cos k'_y) \right\}
\end{aligned} \tag{5.15}$$

und analog für den Triplet-Kanal,

$$\begin{aligned}
V_{\vec{k}, \vec{k}'}^t &= \frac{\chi_0 U^2}{4} \tilde{b} \left\{ f(\vec{k} - \vec{k}') + f(\vec{k} + \vec{k}') \right\} \\
&= \frac{\chi_0 U^2}{2} \tilde{b} \left\{ \sin k_x \sin k'_x + \sin k_y \sin k'_y \right\} .
\end{aligned} \tag{5.16}$$

Mit diesem Ansatz haben wir Paarungszustände, die zu den Darstellungen A_{1g} , B_{1g} und E_u gehören. Für weitere Zustände müssten wir die Näherung von $\chi(\vec{q})$ in (5.14) etwas erweitern.

Γ	Gap-Funktion	Name	in unserem Modell
A_{1g}	1	s-wave	repulsiv
A_{1g}	$\cos k_x + \cos k_y$	extended s-wave	attraktiv
A_{2g}	$\sin k_x \sin k_y (\cos k_x - \cos k_y)$	–	nicht vorhanden
B_{1g}	$\cos k_x - \cos k_y$	$d_{x^2-y^2}$ -wave	attraktiv
B_{2g}	$\sin k_x \sin k_y$	d_{xy} -wave	nicht vorhanden
E_u	$\{\sin k_x, \sin k_y\}$	p-wave	repulsiv

Beachte, dass der Zustand mit Namen “extended s-wave” ist nicht ein richtiger s-Wellen-Zustand, obwohl er zur Darstellung A_{1g} gehört. Dieser Zustand hat keine Amplitude für beide Elektronen auf demselben Gitterpunkt, d.h.:

$$\frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} (\cos k_x + \cos k_y) = 0 . \tag{5.17}$$

Für antiferromagnetische Spinfluktuationen sind die A_{1g} - und der B_{1g} -Zustände die einzigen, die eine attraktive Wechselwirkung erzeugt. Die führende Paarungsinstabilität wird nun in der linearisierten Gapgleichung

$$-\lambda \psi(\vec{k}) = -\langle N(\vec{k}') V_{\vec{k}, \vec{k}'}^s \psi(\vec{k}') \rangle_{\vec{k}', FS} \tag{5.18}$$

ermittelt und entspricht dem grössten Eigenwert λ . Der extended s-wave-Zustand hat einen kleineren Eigenwert als der $d_{x^2-y^2}$ -Wellenzustand. Dies hat mit der Verteilung der Nullstellen des Gaps in den beiden Zuständen zu tun. Während für den d-Wellen-Zustand die Nullstellen in Richtung $(\pm 1, \pm 1)$ auf vier Punkten auf der Fermifläche konzentriert sind, liegen für den extended s-wave Zustand die Nullstellen in allen Richtungen sehr nahe bei der Fermifläche.

5.2.2 Bildliches Verständnis

Wodurch wird der $d_{x^2-y^2}$ -Wellen-Zustand zum stabilsten Paarungszustand? Um dies zu verstehen müssen wir zunächst die Eigenschaft der Paarstreuung und ihren Einfluss auf die Elektronen auf der Fermifläche betrachten. Die grösste Streuamplitude resultiert aus $v(\vec{q})$ für Impulsüberträge $\vec{q} = \vec{Q}$. Das Matrixelement ist offensichtlich positiv, also abstossend.

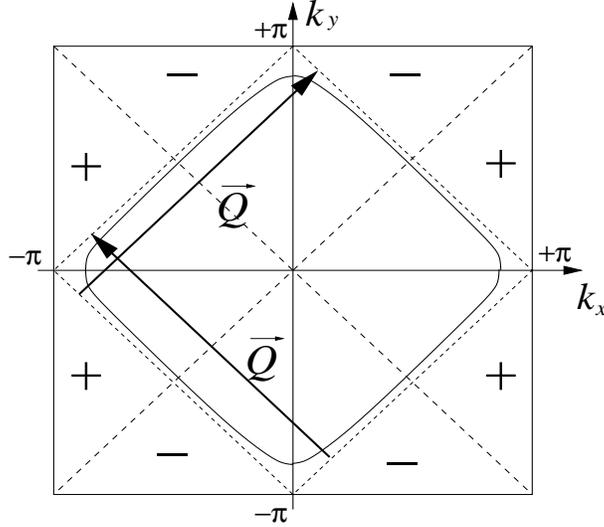


Abb. 1: Brillouin-Zone des tight-binding Modells.

In der Figur 1 können wir sehen, welche Punkte auf der Fermifläche durch diese Wechselwirkung verknüpft werden. Wenn wir die linearisierte Gapgleichung nun sehr stark vereinfachen, springt das Prinzip sofort ins Auge. Wegen der erhöhten Zustandsdichte um $(\pm\pi/a, 0)$ und $(0, \pm\pi/a)$ nehmen wir an, dass die Gapgleichung durch die Gaps in diese Richtungen dominiert wird. Wir definieren $\psi_x = \psi(\pm 1, 0)$ und $\psi_y = \psi(0, \pm 1)$, so dass die Gapgleichung die Form erhält,

$$\lambda\psi_x = -2NV_0\psi_y \quad \text{und} \quad \lambda\psi_y = -2NV_0\psi_x \quad (5.19)$$

wobei $NV_0 > 0$. Diese Gleichung hat den höchsten Eigenwert $\lambda = 2NV_0$ mit $\psi_x = -\psi_y$, was einem $d_{x^2-y^2}$ -Wellen-Zustand entspricht. Das ist der Trick, um aus einer abstossenden Wechselwirkung eine effektiv attraktive Wechselwirkung zu erzeugen. Das negative Vorzeichen kommt von der Paarwellenfunktion. Es ist ferner wichtig zu sehen, dass der $d_{x^2-y^2}$ -Wellen-Zustand gerade an den Stellen die grösste Energielücke erzeugt, wo die Zustandsdichte am grössten ist, d.h. entlang der Richtungen $(\pm 1, 0)$ und $(0, \pm 1)$. Wir erinnern uns daran, dass die Kondensationsenergie durch

$$E_{kond} = -\frac{1}{2} \langle N(\vec{k}) | \Delta_{\vec{k}}|^2 \rangle_{\vec{k}, FS} \quad (5.20)$$

gegeben ist.

5.3 Der Resonating-Valence-Bond (RVB) Zustand

Für $S=1/2$ -Quantenspins ist der antiferromagnetisch geordnete Zustand sehr verletzlich gegen Quantenfluktuationen, und andere, ungeordnete und stark fluktuierende Spinzustände liegen energetisch möglicherweise sehr nahe beieinander. Solche Zustände können durch äussere Störungen, wie etwa das Dotieren mit Löchern, stabilisiert werden. Einer der wichtigsten Zustände ist der Resonating-Valence-Bond- oder kurz RVB-Zustand. Dabei handelt es sich um einen Spinzustand von stark fluktuierenden kurzreichweitigen Spinsingulett-Paaren. Dies entspricht einer kurzreichweitigen antiferromagnetischen Korrelationen, deren Korrelationslänge von der Grössenordnung, die der Ausdehnung der Singulett-Paare ist. Um eine Spinanregung zu erhalten, muss ein solches Singulett zerstört und durch ein Triplet ersetzt werden. Dazu muss eine gewisse Energie aufgebracht werden. Der RVB-Zustand hat daher eine Energielücke für magnetische Anregungen. Man beachte, dass in einem gewissen Sinne hier unterschwellig ein ähnliches

Konzept vorhanden ist wie beim Spin-Singulett BCS-Zustand. Die Frage ist nun, was geschieht, wenn Spins aus einem solchen System entfernt und durch bewegliche Löcher ersetzt werden. Die populäre Sichtweise ist, dass sich Löcher paarweise binden werden, um den RVB-Hintergrund möglichst wenig zu stören, d.h. nur ein Singulett-Paar und nicht etwa zwei zu zerstören, was unweigerlich geschieht, wenn die zwei Löcher zuweit auseinander liegen würden.

Dieses Konzept des dotierten RVB-Zustandes wollen wir nun innerhalb des t - J -Modells betrachten, das wir in (5.8) eingeführt haben. Wie damals schon erwähnt, liegt die Schwierigkeit darin, dass *höchstens* ein Elektron pro Gitterplatz vorhanden sein darf - in Operatorform

$$\sum_s \hat{c}_{is}^\dagger \hat{c}_{is} \leq 1, \quad (5.21)$$

für jeden Gitterpunkt. Ungleichungen dieser Art sind analytisch sehr schwierig zu behandeln. Man greift daher zu folgendem Trick: auf jedem Gitterpunkt gibt es entweder einen Spin oder ein Loch. Dies kann durch folgende Komposition des Elektronoperators beschrieben werden:

$$\hat{c}_{is}^\dagger = \hat{f}_{is}^\dagger \hat{b}_i \quad \text{und} \quad \hat{c}_{is} = \hat{b}_i^\dagger \hat{f}_{is}, \quad (5.22)$$

wobei $\hat{f}_{is}^{(\uparrow)}$ den Spinanteil durch einen fermionischen Operator und $\hat{b}_i^{(\uparrow)}$ den Lochanteil durch einen bosonischen Operator darstellt. Der erste trägt den Spin- und der zweite den Ladungsfreiheitsgrad. Man sieht nun sofort, dass die Ungleichung (5.21) durch die Gleichung

$$\sum_s \hat{f}_{is}^\dagger \hat{f}_{is} + \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_i = 1 \quad (5.23)$$

ersetzt wird. Man beachte, dass durch diese Kombination die Antikommutationsrelation von \hat{c}_{is} auf verschiedenen Gitterpunkten erhalten bleibt. Was hier auf den ersten Blick bloss wie eine Spitzfindigkeit aussieht, enthält in Wahrheit ein tieferes Konzept: die Spin-Ladungsseparation und f und b bezeichnen einen ‘‘Spinon’’ bzw. ‘‘Holon’’-Teilchen analog zu korrelierten eindimensionalen Elektronensystemen (sogenannte Tomonaga-Luttinger-Flüssigkeiten). Dies bedeutet, dass in einem RVB-System sich im Prinzip der Spin-1/2 von der Ladung räumlich trennen kann, d.h. das Elektron zerfällt in zwei Komponenten und kann nicht mehr als einzelnes Quasiteilchen aufgefasst werden. Damit wird die Fermiflüssigkeitsbeschreibung unanwendbar. Ferner beachte man, dass die Holon als Bosonen kondensieren können. Inwiefern diese Eigenschaft im zwei-dimensionalen t - J -Modell realisiert ist, ist noch unklar. Es gibt jedoch Hinweise, dass die Spin-Ladungsseparation nur in einem Zwischenbereich der Energie oder Temperatur wirklich Sinn macht.

5.3.1 Molekularfeld-Analyse

Nachdem die lokale Einschränkung der Operatoren nun durch die Gleichung (5.23) ausgedrückt wird, erhält auch der Hamilton-Operator eine neue Form:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}'_{tJ} = & -t \sum_{\langle i,j \rangle_{nn,s}} \left\{ \hat{f}_{is}^\dagger \hat{b}_i \hat{b}_j^\dagger \hat{f}_{js} + h.c. \right\} - \mu \sum_{i,s} \hat{f}_{is}^\dagger \hat{b}_i \hat{b}_i^\dagger \hat{f}_{is} + \sum_i \lambda_i \left\{ \sum_s \hat{f}_{is}^\dagger \hat{f}_{is} + \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_i - 1 \right\} \\ & + J \sum_{\langle i,j \rangle_{nn}} (\hat{b}_i \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j \hat{b}_j^\dagger) \sum_{s_1, s_2, s_3, s_4} (\hat{f}_{is_1}^\dagger \vec{\sigma}_{s_1 s_2} \hat{f}_{is_2}) \cdot (\hat{f}_{js_3}^\dagger \vec{\sigma}_{s_3 s_4} \hat{f}_{js_4}). \end{aligned} \quad (5.24)$$

Der dritte Term entspricht der Einfügung von Lagrange-Multiplikatoren λ_i , um die Bedingung (5.23) auf jedem Gitterpunkt zu behandeln. Dieser Term hat die Struktur eines lokalen chemischen Potentialterms. Wir führen nun folgende vereinfachenden Näherungen ein:

$$\widehat{b}_i \widehat{b}_i^\dagger \widehat{b}_j \widehat{b}_j^\dagger \approx 1 \quad \text{für kleine Dotierungen} \quad (5.25)$$

$$\lambda_i = \lambda \quad (5.23) \text{ ist nur global erfüllt}$$

Nun definieren wir folgende Molekularfelder:

$$\begin{aligned} \chi_{ij} &= \langle \widehat{f}_{i\uparrow}^\dagger \widehat{f}_{j\uparrow} + \widehat{f}_{i\downarrow}^\dagger \widehat{f}_{j\downarrow} \rangle, \\ \Delta_{ij} &= \langle \widehat{f}_{j\uparrow} \widehat{f}_{i\downarrow} - \widehat{f}_{j\downarrow} \widehat{f}_{i\uparrow} \rangle, \\ B_i &= \langle \widehat{b}_i^\dagger \rangle = \langle \widehat{b}_i \rangle. \end{aligned} \quad (5.26)$$

Dabei entsprechen χ_{ij} einer Hybridisierung der Spinonen auf benachbarten Punkten, Δ_{ij} einem BCS-Paar-Feld der Spinonen und B_i dem Gewicht der Bose-kondensierten Holonen. Nach etwas Rechnung lässt sich nun der entkoppelte Hamilton-Operator für das effektive Einteilchen-Problem hinschreiben.

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{MF} &= \sum_{\langle i,j \rangle} \left[(-tB^2 - \frac{3}{8}\chi_{ij}) \sum_s \widehat{f}_{is}^\dagger \widehat{f}_{js} - \frac{3}{8}\Delta_{ij} (\widehat{f}_{i\uparrow}^\dagger \widehat{f}_{j,\downarrow} - \widehat{f}_{i\downarrow}^\dagger \widehat{f}_{j,\uparrow}) + h.c. \right] - (\mu - \lambda) \sum_{i,s} \widehat{f}_{is}^\dagger \widehat{f}_{is} \\ &\quad - t \sum_{\langle i,j \rangle} (\chi_{ij} \widehat{b}_i^\dagger \widehat{b}_j + h.c.) - \lambda \sum_i \widehat{b}_i^\dagger \widehat{b}_i. \end{aligned} \quad (5.27)$$

Wir führen diesen Hamilton-Operator in die Impulsraum-Formulierung über, indem wir uniforme Molekular-Felder, mit möglicherweise unterschiedlichen Werten entlang der x - und y -Richtung, annehmen:

$$\chi_x = \chi_{i,i+\hat{x}}, \chi_y = \chi_{i,i+\hat{y}}, \quad \Delta_x = \Delta_{i,i+\hat{x}}, \Delta_y = \Delta_{i,i+\hat{y}} \quad (5.28)$$

und

$$\widehat{f}_{is} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} \widehat{f}_{\vec{k},s} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_i} \quad \text{und} \quad \widehat{b}_i = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} \widehat{b}_{\vec{k}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_i}. \quad (5.29)$$

Eingesetzt in den Hamilton-Operator ergibt dies

$$\mathcal{H}_{MF} = \sum_{\vec{k},s} \epsilon_{\vec{k}} \widehat{f}_{\vec{k},s}^\dagger \widehat{f}_{\vec{k},s} + \sum_{\vec{k}} \left\{ \Delta_{\vec{k}} (\widehat{f}_{\vec{k}\uparrow}^\dagger \widehat{f}_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger + h.c.) \right\} + \sum_{\vec{k}} \omega_{\vec{k}} \widehat{b}_{\vec{k}}^\dagger \widehat{b}_{\vec{k}}, \quad (5.30)$$

mit

$$\begin{aligned} \epsilon_{\vec{k}} &= -2 \sum_{r=x,y} (tB^2 + \frac{3}{8}\chi_r) \cos k_r - \mu + \lambda, \\ \Delta_{\vec{k}} &= -\frac{3J}{4} \sum_r \Delta_r \cos k_r, \\ \omega_{\vec{k}} &= -2t \sum_r \chi_r \cos k_r + \lambda. \end{aligned} \quad (5.31)$$

Daraus ergeben sich folgende Spektren für die Spinonen und Holonen:

$$E_{\vec{k}}^f = \sqrt{\epsilon_{\vec{k}}^2 + \Delta_{\vec{k}}^2} \quad \text{und} \quad E_{\vec{k}}^b = \omega_{\vec{k}} \quad (5.32)$$

und die Selbstkonsistenzgleichungen

$$\begin{aligned} \Delta_r^* &= \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \langle \hat{f}_{\vec{k}\uparrow}^\dagger \hat{f}_{\vec{k}\downarrow}^\dagger \rangle \cos k_r = \frac{3J}{4N} \sum_{\vec{k}} \frac{(\Delta_x \cos k_x + \Delta_y \cos k_y) \cos k_r}{E_{\vec{k}}^f} \tanh \left(\frac{E_{\vec{k}}}{2k_B T} \right) \\ \chi_r &= \frac{1}{N} \sum_{\vec{k},s} \langle \hat{f}_{\vec{k}s}^\dagger \hat{f}_{\vec{k}s} \rangle \cos k_r = \frac{1}{2N} \sum_{\vec{k}} \cos k_r \left[1 - \frac{\epsilon_{\vec{k}}}{E_{\vec{k}}^f} \tanh \left(\frac{E_{\vec{k}}}{2k_B T} \right) \right] \\ B^2 &= \frac{1}{4N} \sum_{\vec{k}} \frac{\cos k_x + \cos k_y}{e^{\omega_{\vec{k}}/k_B T} - 1} \end{aligned} \quad (5.33)$$

$$1 - \delta = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \left[1 - \frac{\epsilon_{\vec{k}}}{E_{\vec{k}}^f} \tanh \left(\frac{E_{\vec{k}}}{2k_B T} \right) \right]$$

$$\delta = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \frac{1}{e^{\omega_{\vec{k}}/k_B T} - 1}$$

wobei die letzten beiden Gleichung das chemische Potential und λ festlegen sollen, wenn die Lochkonzentration δ gegeben ist. Wir erhalten $\chi_x = \chi_y$ und $\Delta_x = -\Delta_y$. Die letztere Beziehung besagt, dass die Spinon-Gapfunktion die $d_{x^2-y^2}$ -Symmetrie besitzt. Daraus lässt sich ein Phasendiagramm erstellen.

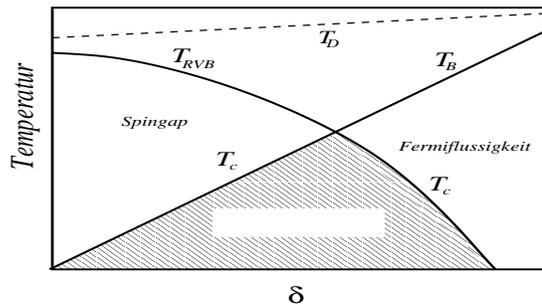


Abb. 3: Schematisches Phasendiagramm des t - J -Modells basierend auf der Spinon-Holon-Entkopplung:

Der Übergangspunkt zu einem endlichen Molekularfeld χ wird durch die Temperatur T_D gegeben. Unterhalb der Temperatur T_{RVB} wird auch Δ endlich, und die Spinonen erhalten eine

Energielücke. Dies entspricht dem obengenannten RVB-Zustand, da die Spinonen fluktuierende Singulett-Paare bilden und somit eine kurzreichweitig antiferromagnetische Ordnung erzeugen (BCS-“Kohärenzlänge” wird antiferromagnetische Korrelationslänge). Das Spektrum der Spinon hat eine anisotrope Energielücke, die $d_{x^2-y^2}$ -Symmetrie hat. Dies wird tatsächlich im Experiment in der Pseudogap-Phase beobachtet (Angle-Resolved-Photo-Emission-Spectroscopy=ARPES). Unterhalb von T_B haben wir Bose-Kondensation der Holonen. Wie ist nun die Supraleitung definiert? Diese ist realisiert, wenn das BCS-Molekularfeld

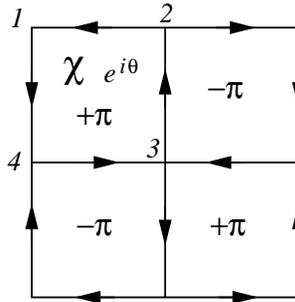
$$\Delta_{\vec{k}}^{(BCS)} = \langle \hat{c}_{\vec{k}\uparrow} \hat{c}_{-\vec{k}\downarrow} \rangle = \langle \hat{f}_{\vec{k}\uparrow} \hat{f}_{-\vec{k}\downarrow} \rangle \langle \hat{b}_{\vec{k}}^\dagger \hat{b}_{-\vec{k}}^\dagger \rangle = \Delta_{\vec{k}} B^2 \quad (5.34)$$

endlich wird, d.h. in der Spingap-Phase mit Bose-Kondensation der Holonen.¹ Die Symmetrie der Paarung ist für die Spinonen eine $d_{x^2-y^2}$ -Welle (B_{1g}).

Abgesehen von der antiferromagnetischen Phase in der Nähe von $\delta = 0$, die wir in unseren Molekularfeldern unterschlagen haben, hat das resultierende Phasendiagramm sehr grosse Ähnlichkeit mit dem experimentellen. Die Supraleitungsphase hat eine klare optimale Dotierung. In der unterdotierten Region gibt es eine Phase mit Spingap, die mit der Pseudogap-Phase identifiziert werden kann. In der überdotierten Phase finden wir eine Region, wo die Holonen Bose-kondensiert sind, aber kein Spingap vorhanden ist. Hier kann man ein klares Quasiteilchenbild aufbauen und bedingt von einer Fermiflüssigkeit reden. Oberhalb von T_c um die optimale Dotierung herum haben wir Spinon und Holonen völlig entkoppelt, wodurch sich eine “seltsame” metallische Phase ergibt.

Quasiteilchen: Im Bereich oberhalb von T_B können wir über Elektronen nicht als richtige Quasiteilchen sprechen. Wir haben keine eindeutige Beziehung zwischen Impuls und Anregungsenergie. Vielmehr sind die elektronischen Anregungen aus zwei Teilchen zusammengesetzt, aus einem Spinon und einem Holon: $E_{\vec{q}} = E_{\vec{k}}^f + E_{-\vec{k}+\vec{q}}^b$ für alle möglichen Impulse \vec{k} . Wenn wir ein Kondensat von Holonen besitzen, dann gibt es Elektronanregungen bestehend aus einem kondensierten Holon mit Impuls 0 und dem Spinon mit Impuls \vec{q} , so dass sich ein wirkliches Quasiteilchen ergibt: $E_{\vec{q}} = E_{\vec{q}}^f + E_0^b$. Damit haben wir in der supraleitenden Phase wie auch in der “Fermiflüssigkeitsphase” Quasiteilchen. Dies entspricht qualitativ den Experimenten.

Flux-Phase: Bei halber Füllung, wenn man den antiferromagnetischen Zustand vernachlässigt, ergibt die Molekularfeldtheorie eine kontinuierliche Entartung des RVB-Zustandes mit einem Zustand den man Flux phase (oder d-density wave) nennt. In diesem Zustand besitzen die Matrixelemente $\chi_{ij} = |\chi_{ij}| e^{i\theta_{ij}}$ in jeder Quadratplakete des Gitters eine Windung, d.h. $\theta_{12} + \theta_{23} + \theta_{34} + \theta_{41} = \pm\pi$. Diese Windung ist alternierend zwischen benachbarten Plaketen und stellt eine Brechung der Zeitumkehrsymmetrie dar.



¹Beachte, dass dieses vereinfachte Konzept der Holon-Kondensation die Paarung der Holonen nicht einschliesst. Dies würde grundsätzlich zu Problemen mit der Flussquantisierung führen. Es gibt jedoch Arbeiten, die auch die Paarung mit in die Diskussion einschliessen und ein qualitativ sehr ähnliches Phasendiagramm erhalten (z.B.: S.S. Lee and S.H.S. Salk, Phys. Rev. B 66, 054427 (2002)).

Abb. 3: Struktur der Flux phase auf den Plaketen: analog zu einem orbitalen Antiferromagneten.

Dieser Zustand wird als makroskopische Phase instabil, wenn wir von halber Füllung abweichen. Trotzdem findet man in der Theorie, dass dieser Zustand möglicherweise durch Störung induziert werden kann und als Fluktuation auftritt. Inwiefern dies experimentell relevante Konsequenzen hat ist noch nicht klar. Es handelt sich hier aber um eine mögliche exotische Eigenschaft der Pseudogap-Phase.

Trotz dieses Erfolges ergibt sich das schwerwiegende Problem der Separation des Elektrons in Spin- und Ladungsfreiheitsgrade (spin-charge separation). Ist dies ein Artefakt der Näherung oder steht etwas tieferes dahinter? Dies ist ein stark debattierter Punkt, denn die Separierung in Spinonen und Holonen ist keine exakt nachweisbare Eigenschaft, und komplexe Eichfeldtheorien, die auf dieser Separierung basieren, offenbaren Schwierigkeiten dieses Bildes, die sich leider nur schwer beheben lassen. Nichtsdestoweniger lassen sich einige Aspekte der Hochtemperatur-Supraleiter durchaus erfolgreich diskutieren. Ferner zeigen numerische Simulationen, dass die charakteristischen Eigenschaften des t - J -Modells wahrscheinlich nicht so weit von der Molekularfeld-Lösung liegen.

Zusätzliche Literatur:

1. *The underdoped phase of cuprate superconductors*, B. Batlogg and C. Varma, Physics World, Feb. 2000, p. 33. (<http://physicsweb.org/article/world/13/2/8>).
2. *Spin fluctuations and high-temperature superconductivity*, T. Moriya and K. Ueda, Adv. Phys. 49, 555 (2000).
3. *Magnetic properties of extended t - J model*, T. Tanamoto, H Kohno and H. Fukuyama, J. Phys. Soc. Jpn. 63, 2739 (1994).
4. *$SU(2)$ gauge symmetry of the large- U limit of the Hubbard model*, I. Affleck, Z. Zou, T. Hsu, and P. W. Anderson, Phys. Rev. B 38, 745 (1988).
5. *Vortex structure in underdoped cuprates*, P.A. Lee and X.G. Wen, Phys. Rev. B 63, 224517 (2001).