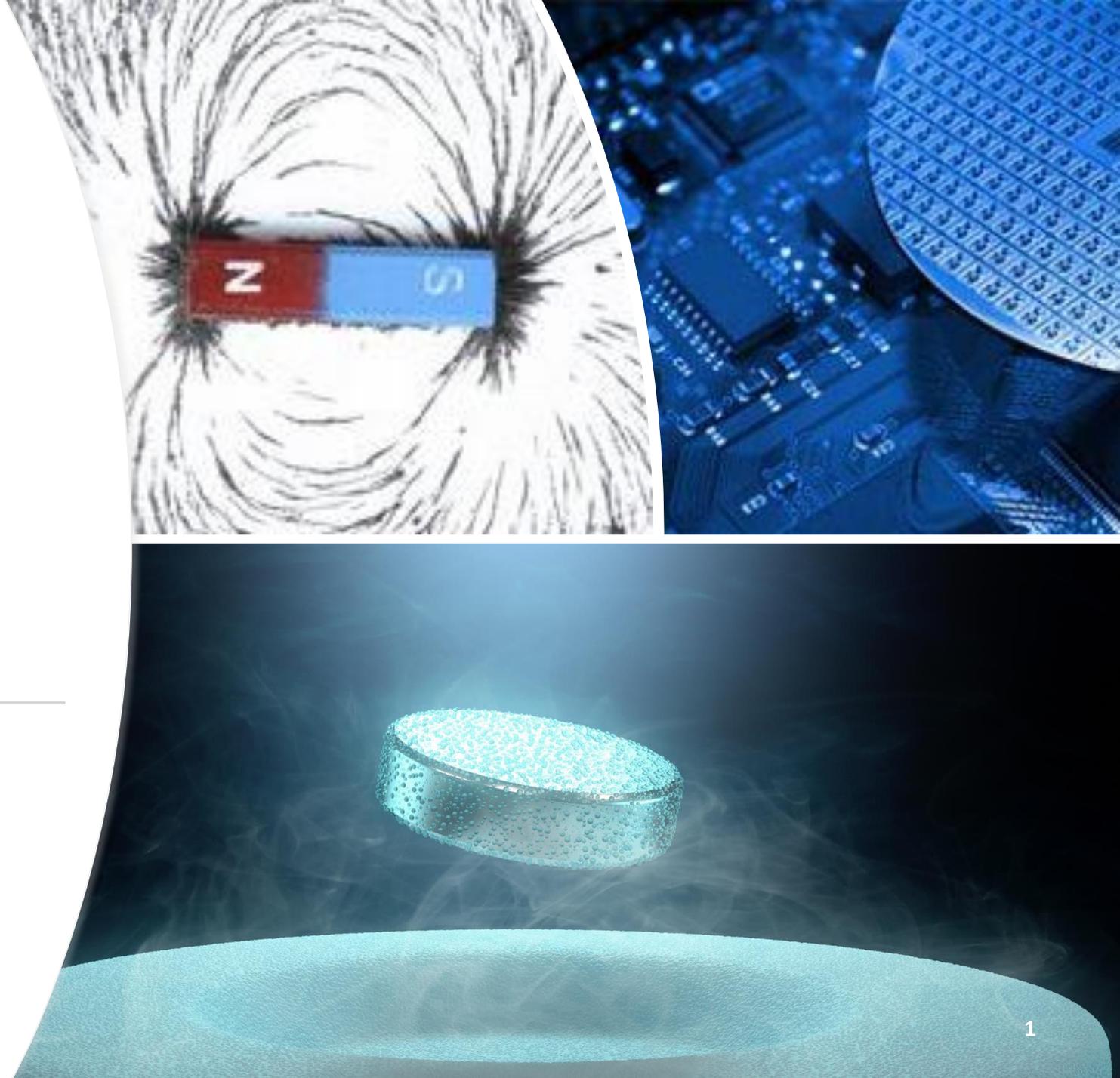




Moderne Experimentalphysik III

*Experimentelle
Festkörperphysik*

M-PHYS-106295, SoSe 2024



Wiederholung

■ London Gleichungen

1. London-Gleichung

$$\frac{m_s}{q_s^2 n_s} \frac{\partial \mathbf{J}_s}{\partial t} = \mathbf{E}$$

mit $\Lambda = m_s / n_s q_s^2$ = London-Koeffizient

→ beschreibt **widerstandslosen Stromtransport**

2. London-Gleichung

$$\nabla \times (\Lambda \mathbf{J}_s) + \mathbf{b} = \mathbf{0}$$

→ beschreibt **perfekte Feldverdrängung**

Wiederholung

■ Makroskopische Wellenfunktion

Grundhypothese: es existiert eine *makroskopische Wellenfunktion*

$$\psi_s(\mathbf{r}, t) = \psi_0(\mathbf{r}, t) e^{i\theta(\mathbf{r}, t)}$$

$$|\psi(\mathbf{r}, t)|^2 = \psi^*(\mathbf{r}, t) \psi(\mathbf{r}, t) = n_s(\mathbf{r}, t)$$



Strom-Phasen-Beziehung

$$\mathbf{J}_s(\mathbf{r}, t) = \frac{q_s n_s(\mathbf{r}, t) \hbar}{m_s} \left\{ \nabla \theta(\mathbf{r}, t) - \frac{q_s}{\hbar} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \right\}$$

\mathbf{v}



Energie-Phasen-Beziehung

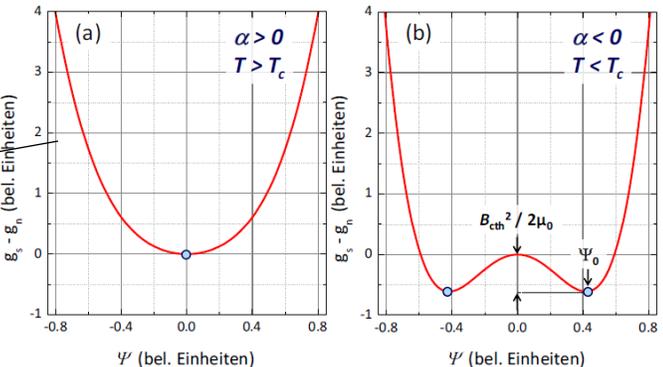
$$\hbar \frac{\partial \theta(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = - \left\{ \frac{1}{2n_s} \Lambda J_s^2(\mathbf{r}, t) + q_s \phi_{el}(\mathbf{r}, t) + \mu(\mathbf{r}, t) \right\}$$

Gesamtenergie



Wiederholung

Ginzburg-Landau Theorie



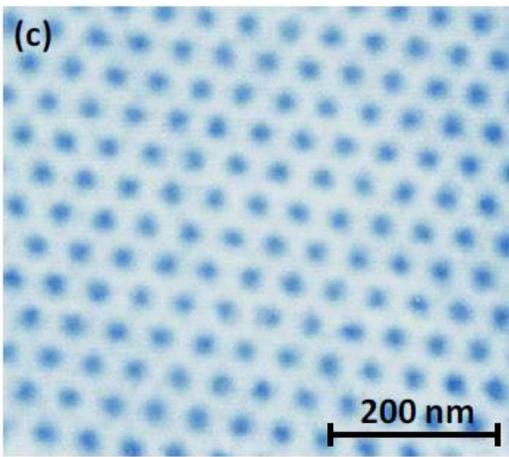
$$g_s = \underbrace{g_n + \alpha|\Psi|^2 + \frac{1}{2}\beta|\Psi|^4}_{(\mu_0 M)^2} + \frac{1}{2\mu_0} (\mathbf{B}_{\text{ext}} - \mathbf{b})^2 + \frac{1}{2m_s} \left| \left(\frac{\hbar}{i} \nabla - q_s \mathbf{A} \right) \Psi \right|^2 + \dots$$

1. Ginzburg-Landau Gleichung

$$0 = \frac{1}{2m_s} \left(\frac{\hbar}{i} \nabla - q_s \mathbf{A} \right)^2 \Psi + \alpha \Psi + \beta |\Psi|^2 \Psi$$

Ginzburg-Landau Kohärenzlänge

$$\xi_{\text{GL}} = \sqrt{-\frac{\hbar^2}{2m_s \alpha}}$$



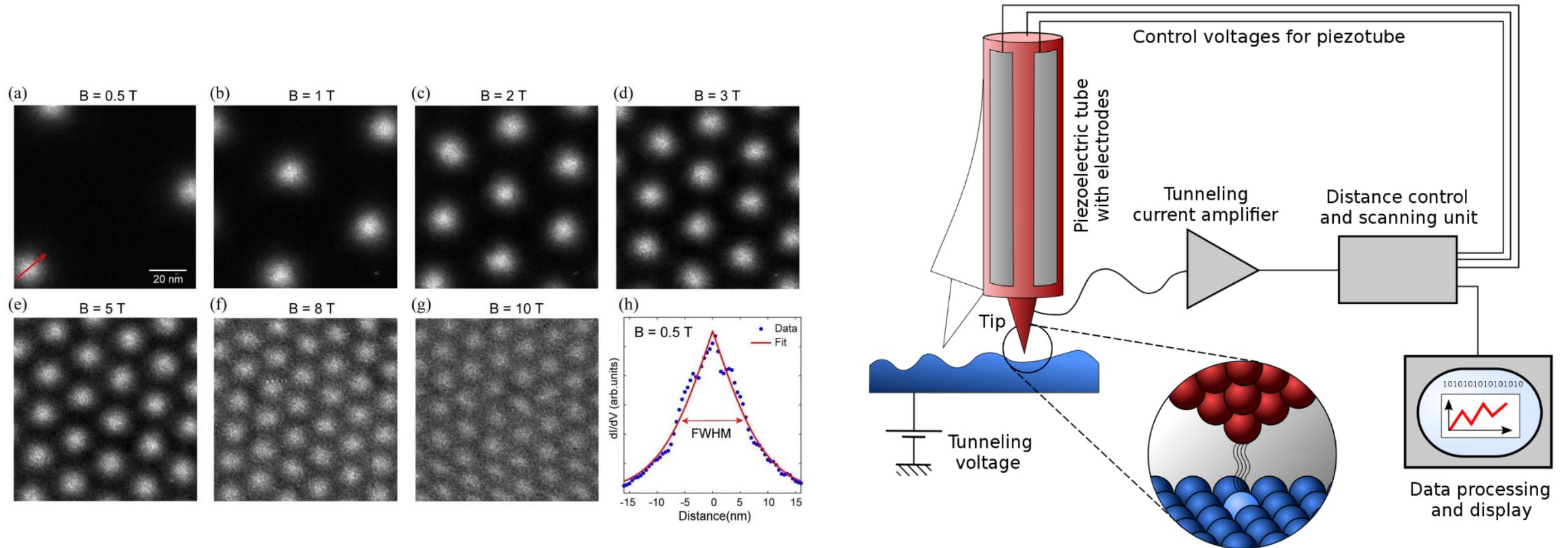
2. Ginzburg-Landau Gleichung

$$\mathbf{J}_s = \frac{q_s \hbar}{2m_s} \frac{1}{i} (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*) - \frac{q_s^2}{m_s} |\Psi|^2 \mathbf{A}$$

$\kappa \leq \frac{1}{\sqrt{2}}$	Typ-I Supraleiter
$\kappa \geq \frac{1}{\sqrt{2}}$	Typ-II Supraleiter

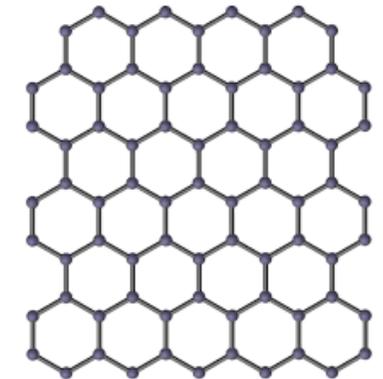
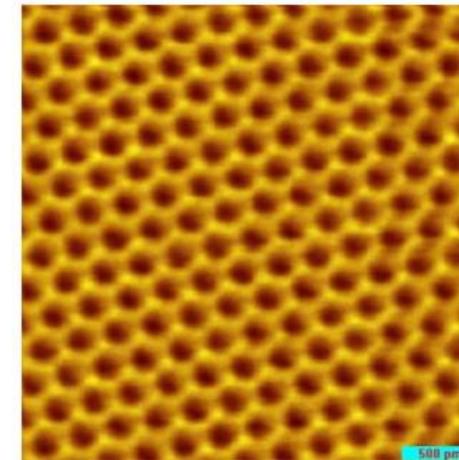
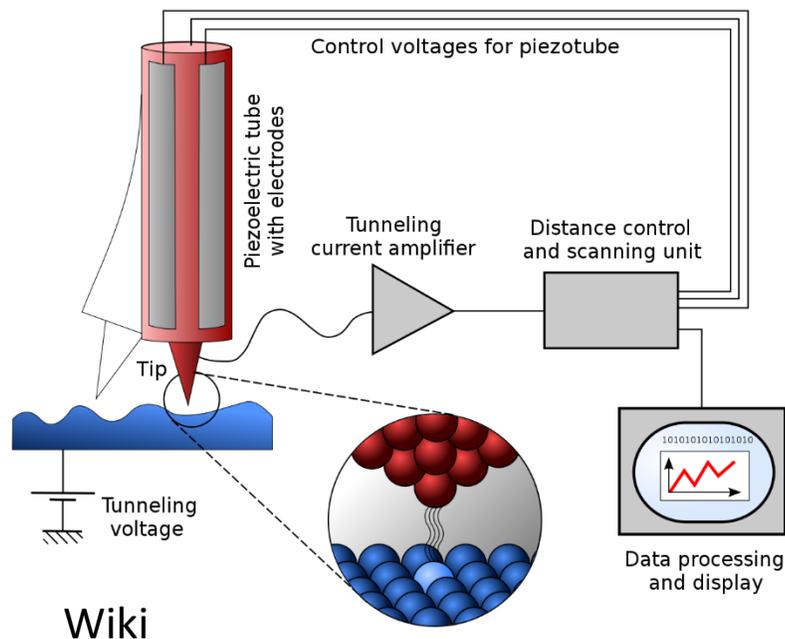
Rastertunnelmikroskop (Scanning Tunneling Microscope)

- Visualisierung des Flussgitters mittels Rastertunnelmikroskop möglich



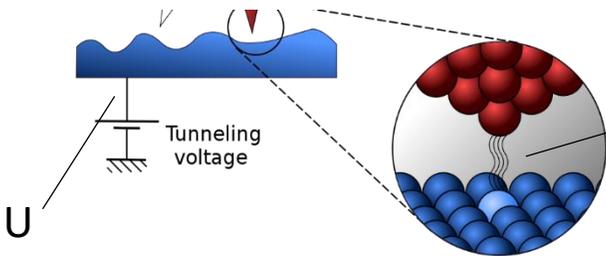
Rastertunnelmikroskop (Scanning Tunneling Microscope)

- Misst die atomare und elektronische Struktur der Probe
- Die Spitze wird nahe an die Oberfläche gebracht und scannt diese dann ab
- Die Wechselwirkung zwischen Probe und Spitze wird mithilfe eines Regelkreises (Tunnelstrom) konstant gehalten.
- Ein STM misst den quantenmechanischen Tunnelstrom



Rastertunnelmikroskop (Scanning Tunneling Microscope)

Signal des Tunnelstroms enthält Informationen über die lokale elektronische Struktur



- Ausdruck für den **Tunnelstrom**:

$$I(x,y,z,U) \propto \int_0^{eU} D_S(E - eU) \rho^*(x,y,E) \mathcal{T}(E,U,z) dE.$$

Zustandsdichte Spitze

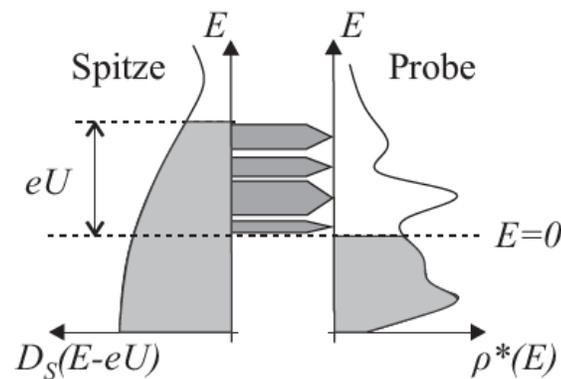
Zustandsdichte Probe

Transmissionsfunktion



- Ausdruck für dessen Ableitung, die **Leitfähigkeit**:

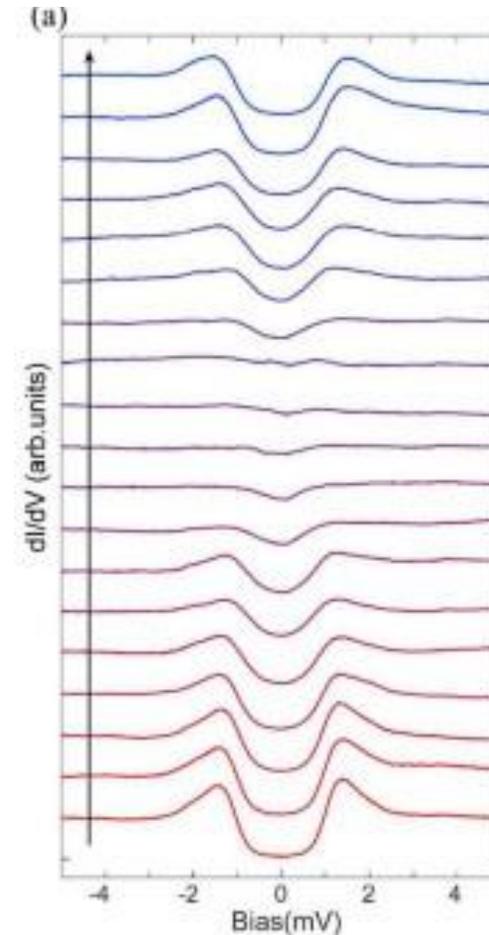
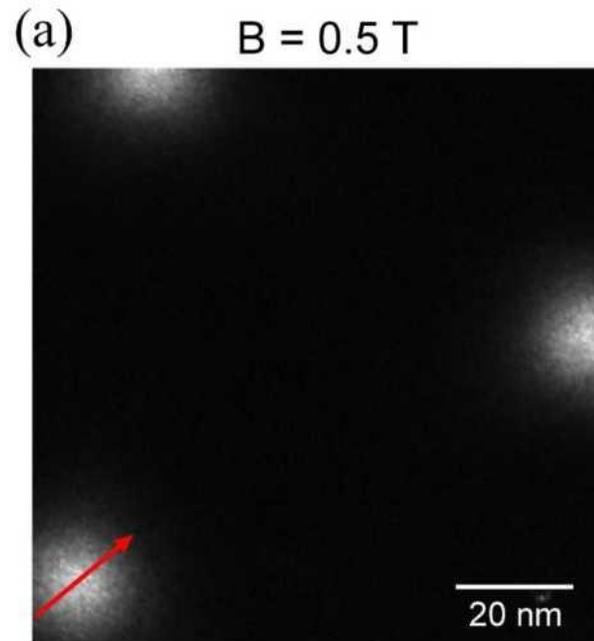
$$\frac{\partial}{\partial U} I(x,y,z_0,U) \propto e \mathcal{T}(eU,U,z_0) D_S(0) \rho^*(x,y,eU)$$



Rastertunnelmikroskop (Scanning Tunneling Microscope)

- Änderung der Leitfähigkeit zwischen normalleitenden und supraleitenden Bereich

$$\frac{\partial}{\partial U} I(x, y, z_0, U) \propto e \mathcal{T}(eU, U, z_0) D_S(0) \rho^*(x, y, eU)$$



Supraleiter

Normalleiter

Supraleiter

Lernziele

- Mikroskopische Theorie der Supraleitung
- Cooper Paare
- Grundlagen der BCS Theorie
- Energie-Lücke und Quasi-Teilchenanregung

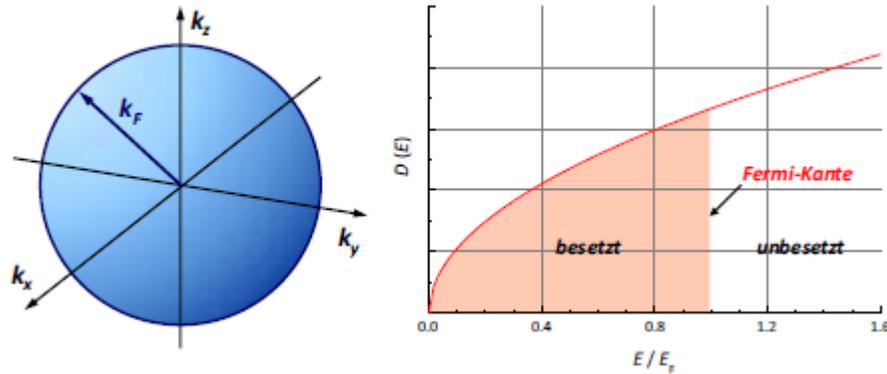
Mikroskopische Theorie (light)

- **intuitive Annahme:**

Supraleitung resultiert aus *Ordnungsphänomen der Leitungselektronen*

- **Problem:**

- Leitungselektronen haben **sehr große (Fermi) Geschwindigkeit** aufgrund von Pauli-Prinzip: $\simeq 10^6$ m/s $\simeq 0.01 c$
- die entsprechende (Fermi) Temperatur liegt oberhalb von 10 000 K, im Gegensatz dazu liegt die supraleitende Sprungtemperatur im Bereich von 1 – 10 K (\approx meV)



Fermi-Kugel und Zustandsdichte für ein 3D-Elektronengas

$E_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2 n)^{2/3}$	Fermi-Energie	$k_F \simeq 10^8 \text{ cm}^{-1}$
$T_F = \frac{E_F}{k_B}$	Fermi-Temperatur	$\lambda_F \simeq 1 \text{ \AA}$
$\lambda_F = \frac{2\pi}{k_F}$	Fermi-Wellenlänge	$v_F \simeq 10^8 \text{ cm/s}$
$v_F = \frac{p_F}{m} = \frac{\hbar k_F}{m}$	Fermi-Geschwindigkeit	$E_F \simeq 4 \text{ eV}$
		$T_F \simeq 50\,000 \text{ K}$

- **Aufgabe:**

- finde **Wechselwirkungsmechanismus**, der in Ordnung der Leitungselektronen trotz ihrer hohen kinetischen Energie resultiert

- **BCS-Theorie: Elektron-Elektron-Wechselwirkung durch Austausch virtueller Phononen**

Mikroskopische Theorie (light)

Wichtiger Hinweis auf Austauschboson folgt aus Messung des Isotopeneffekts für Sn

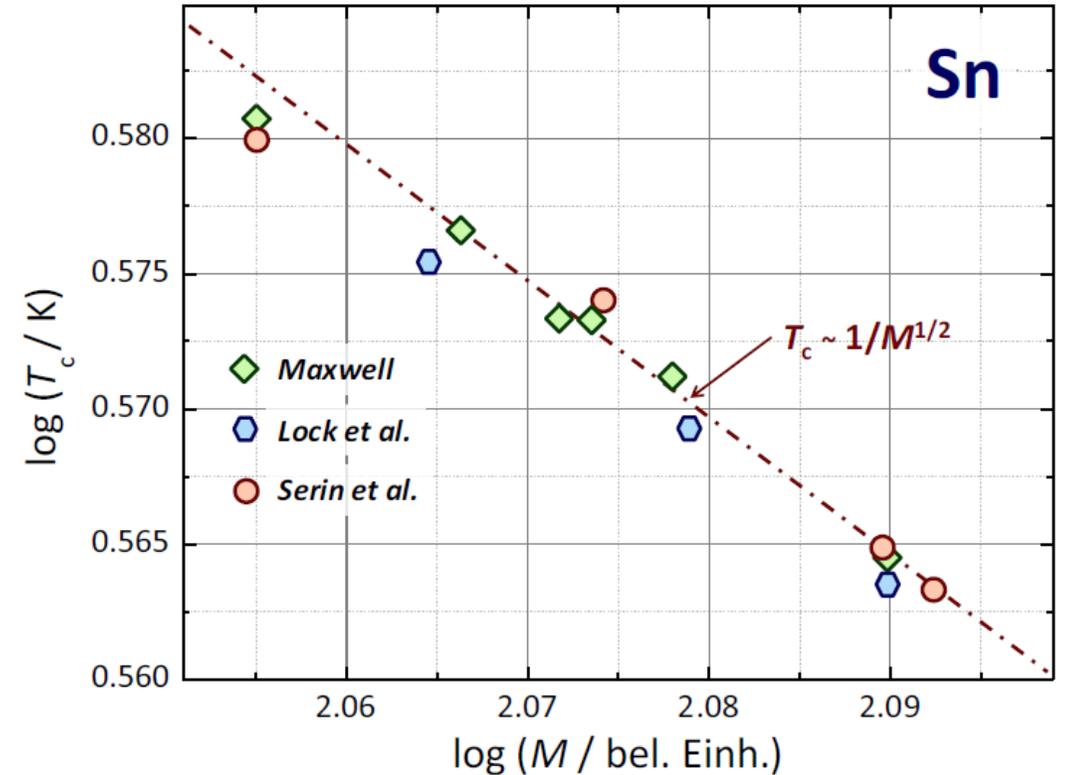
- Messung der Sprungtemperatur T_c verschiedener Isotope von Sn (1950/51 – Isotope: Sn^{112} – Sn^{124})
- Sprungtemperatur T_c skaliert proportional zu $1/M$

$$T_c \propto 1/\sqrt{M}$$

- da Phononenfrequenz $\omega_{ph} \propto 1/\sqrt{M}$ konnte man vermuten, dass

$$T_c \propto \omega_{ph}$$

- Phononen?

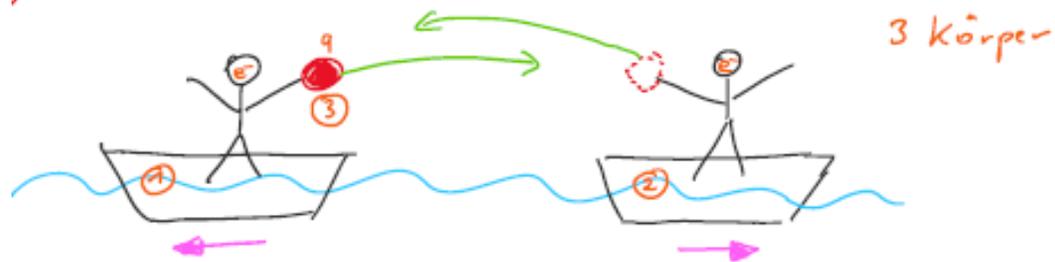


Mikroskopische Theorie (light)

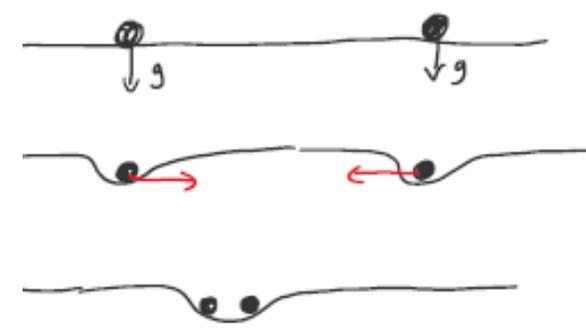
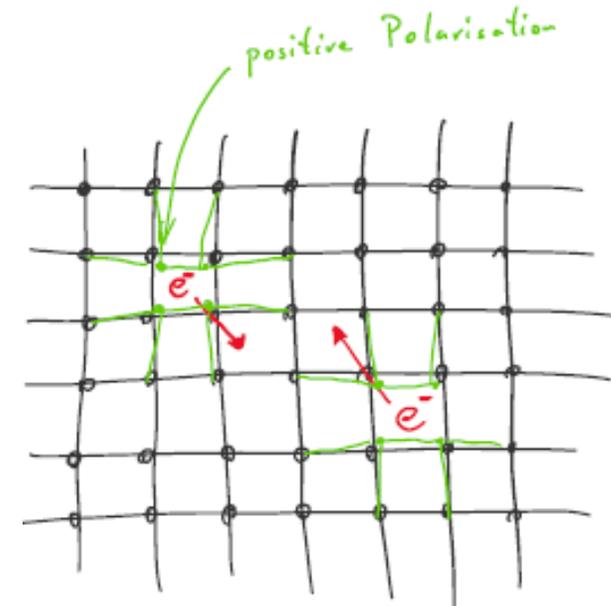
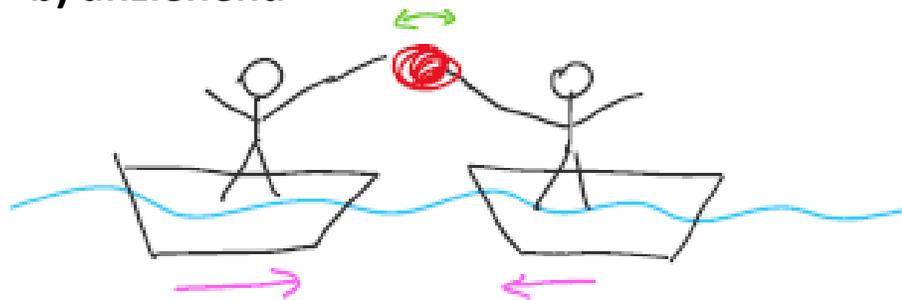
Austauschwechselwirkung

Mindestens ein 3-Körperproblem

a) abstoßend

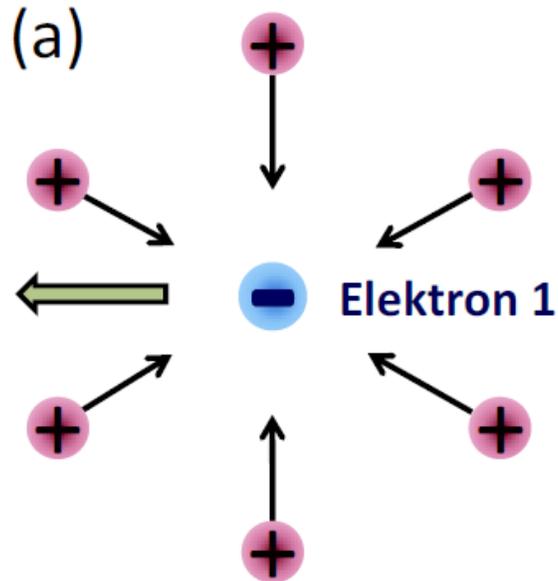


b) anziehend

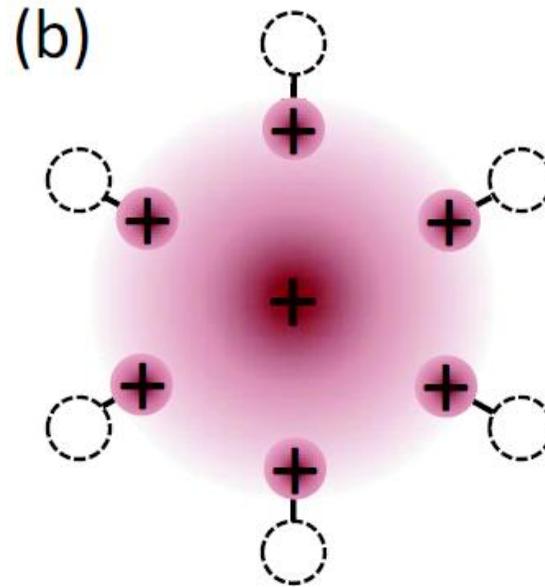


Mikroskopische Theorie (light)

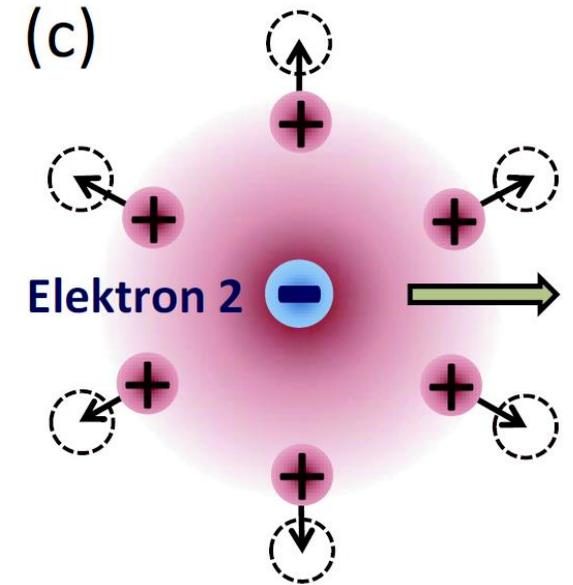
Physikalisches Bild der über Phononen vermittelten attraktiven Elektron-Elektron-Wechselwirkung



erstes Elektron verzerrt Ionengitter
→ positive Ladungsanhäufung

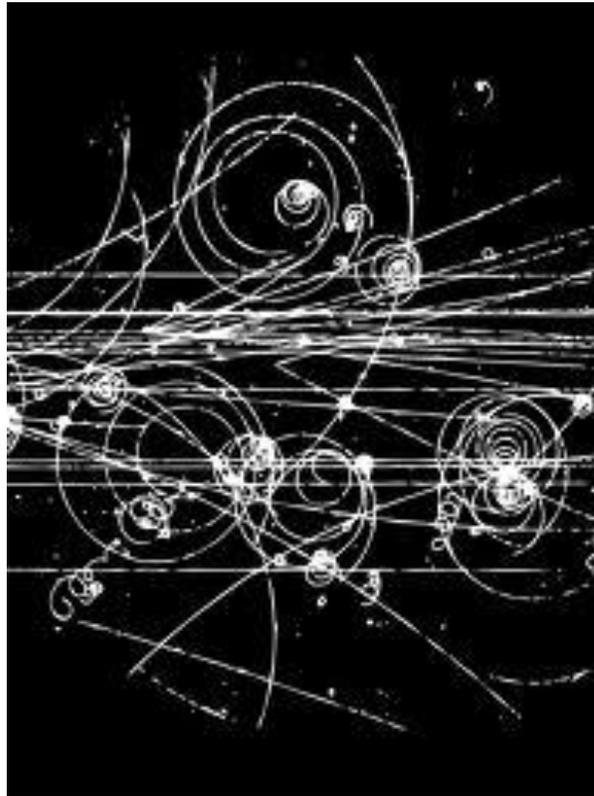


Elektron bewegt sich schnell weiter (v_F), Ionengitter relaxiert langsam ($\tau \sim 1/\omega_{ph}$), **Retardierung**
→ positive Ladungswolke bleibt zurück, nachdem El. längst weg ist:
→ **Überabschirmung**



zweites Elektron sieht positive Ladungswolke
→ attraktive WW
→ abstoßende WW mit erstem Elektron wird durch Retardierung umgangen

Mikroskopische Theorie (light)



<https://de.wikipedia.org/wiki/Nebelkammer>

Mikroskopische Theorie (light)

Zwischen welchen Elektronen wird die attraktive Wechselwirkung maximal?

Gedankenexperiment:

- wir addieren 2 zusätzliche Elektronen zu Fermi-Gas bei $T = 0$
- Elektronen können durch Austausch von Phononen wechselwirken

Streuprozesse:

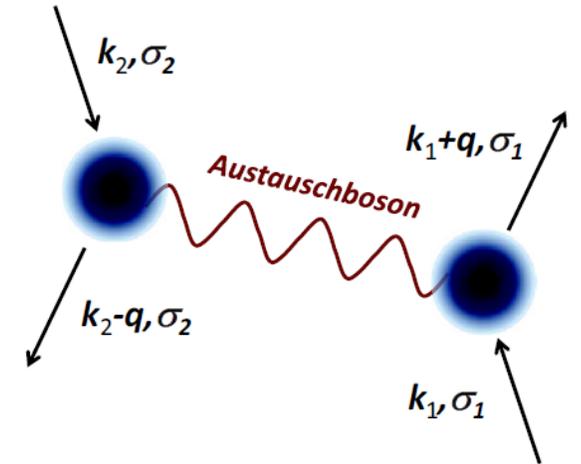
- Elektron 1: $\mathbf{k}_1 \rightarrow \mathbf{k}'_1 = \mathbf{k}_1 + \mathbf{q}$
- Elektron 2: $\mathbf{k}_2 \rightarrow \mathbf{k}'_2 = \mathbf{k}_2 - \mathbf{q}$
- Gesamtimpuls: $\mathbf{K} = \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 = \mathbf{k}'_1 + \mathbf{k}'_2 = \mathbf{K}'$

Fermi-Gas bei $T = 0$:

- nur Zustände mit $E > E_F$ sind zugänglich
- da $\omega_{ph} < \omega_D$, spielt sich WW in Energieintervall $E_F, E_F + \hbar\omega_D$ ab
- zugehöriger k -Raum-Bereich:

$$\frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} + \hbar\omega_D = \frac{\hbar^2 (k_F + \Delta k)^2}{2m} \simeq \frac{\hbar^2 (k_F^2 + 2k_F \Delta k)}{2m}$$

➔ $\Delta k = m\omega_D / \hbar k_F$

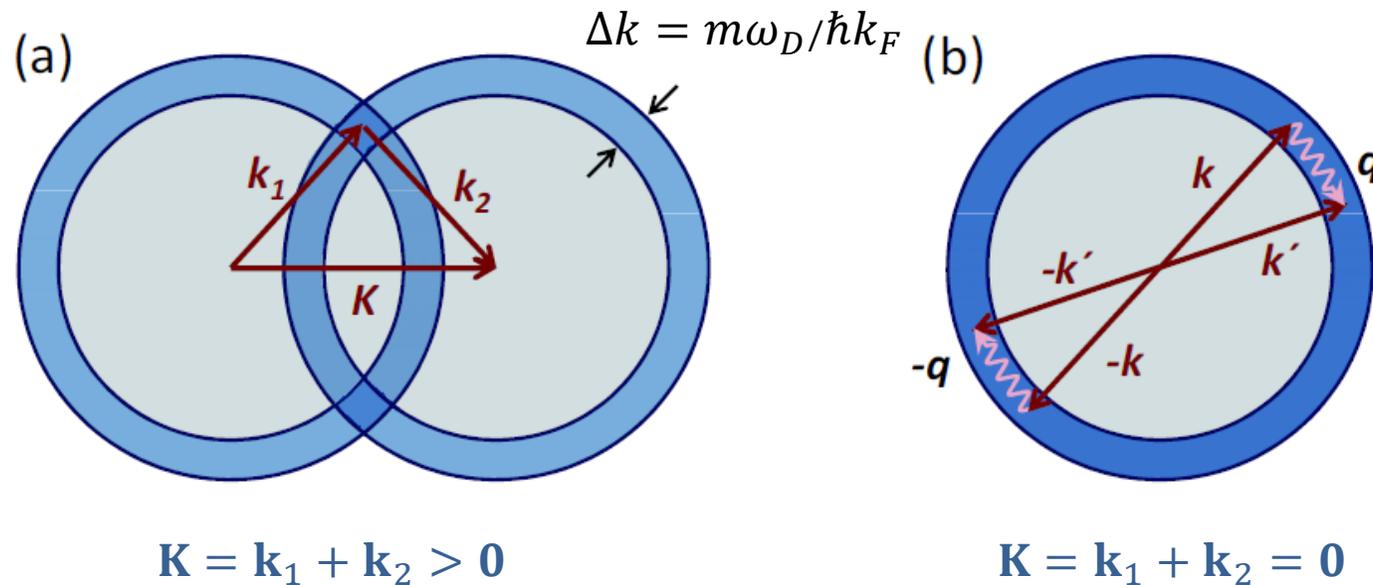


Mikroskopische Theorie (light)

Zwischen welchen Elektronen wird die attraktive Wechselwirkung maximal?

Erhaltung des Gesamtimpulses

- Wellenvektoren liegen in Schnittfläche von zwei Kreisscheiben der Dicke Δk
- maximale Schnittfläche für $K = 0$



*WW über Austausch virtueller Phononen ist für Elektronenpaare mit entgegengesetztem Impuls optimal:
Cooper-Paare ($\mathbf{k}, -\mathbf{k}$)*

Mikroskopische Theorie (light)

- **Ansatz** für Paarwellenfunktion: **Produkt von ebenen Wellen**

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = a \exp(i\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{r}_1) \exp(i\mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{r}_2) = a \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \quad \text{mit } \mathbf{k}_1 = -\mathbf{k}_2 \text{ oder } \mathbf{k}_1 = \mathbf{k}, \mathbf{k}_2 = -\mathbf{k} \quad \mathbf{r} = \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1$$

- wegen ständiger Streuung in neue Zustände aus Intervall $[k_F, k_F + \Delta k]$: Überlagerung von Produktwellenfunktionen

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \sum_{k=k_F}^{k_F+\Delta k} a_k \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \quad |a_k|^2 = \text{Wahrscheinlichkeit für Realisierung von Elektronenpaar } (\mathbf{k}, -\mathbf{k})$$

- **Annahme:** Wechselwirkungspotenzial $V(\mathbf{r})$ hängt nur von Relativkoordinate ab \rightarrow **Schrödinger-Gleichung**

$$-\frac{\hbar^2}{2m} (\nabla_1^2 + \nabla_2^2) \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) + V(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = E \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$$

$$\left(E - \frac{\hbar^2 k^2}{m} \right) a_k = \sum_{k'=k_F}^{k_F+\Delta k} a_{k'} V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}$$

Mikroskopische Theorie (light)

Anziehende Wechselwirkung durch Austausch virtueller Phononen: Wie sieht Matrixelement $V_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} = V_{\mathbf{k}1,\mathbf{k}2,\mathbf{q}}$ aus?
reine Coulomb-Wechselwirkung:

$$V(\mathbf{q}) = \frac{e^2}{\epsilon_0 q^2}$$

positives Matrixelement \rightarrow rein repulsive Wechselwirkung

abgeschirmte Coulomb-Wechselwirkung:

$$V(\mathbf{q}, \omega) = \frac{e^2}{\epsilon(\mathbf{q}, \omega) \epsilon_0 q^2}$$

negatives Matrixelement falls $\epsilon(\mathbf{q}, \omega) < 0$
 \rightarrow attraktive Wechselwirkung

abgeschirmte Coulomb-Wechselwirkung in Metallen:

q -abh. Plasmafrequenz der abgeschirmten Ionen in Metall

$$\tilde{\Omega}_p^2(\mathbf{q}) = \Omega_p^2(\mathbf{q}) \left[1 + \frac{k_s^2}{q^2} \right]$$

$$V(\mathbf{q}, \omega) = \frac{e^2}{\epsilon(\mathbf{q}, \omega) \epsilon_0 q^2} = \left(\frac{e^2}{k_s^2 + q^2} \right) \left(1 + \frac{\omega^2}{\omega^2 - \tilde{\Omega}^2(\mathbf{q})} \right)$$

Thomas-Fermi-Wellenvektor
($1/k_s$: Skala der Abschirmung durch e-gas)

für kleine Energiedifferenz $(E_k - E_{k'})/\hbar = \omega < \tilde{\Omega}_p(\mathbf{q})$
der beteiligten Elektronen

- \rightarrow Nenner wird negativ
- \rightarrow attraktive Wechselwirkung
- \rightarrow Abschneidefrequenz: $\omega < \tilde{\Omega}_p \approx \omega_D$ (Debye-Frequenz)

Mikroskopische Theorie (light)

- Vereinfachende Annahme:

$$V_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} = \begin{cases} -V_0 & \text{für } k' > k_F, k < k_F + \Delta k \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

$$\text{mit } \Delta k = \frac{m\omega_D}{\hbar k_F}$$

Nach etwas Rechnung...

- **Gesamtenergie:** $E \simeq 2E_F - 2\hbar\omega_D e^{-4/D(E_F)V_0}$ für schwache WW ($V_0 D(E_F) \ll 1$)
- Energieabsenkung proportional zu Phononenenergie $\hbar\omega_D$
- da $\hbar\omega_D \ll E_F$ und $\exp\left(-\frac{4}{V_0 D(E_F)}\right) \ll 1$, ist Paarbindungsenergie sehr klein

Typische Debye-Temperaturen

Material	Θ_D in K
Diamant	1860
Si	645
Cr	610
Fe	470
Mo	450
Al	428
Ge	374
Cu	345
Ag	215
Au	165
Na	160
Pb	95
Ar	92
Se	90
Rb	56

Mikroskopische Theorie (light)

Hinweis:

- Elektronen mit $k < k_F$ können nicht an Wechselwirkung teilnehmen, da alle Zustände für $E < E_F$ besetzt sind (keine freien Streuzustände)
- Supraleiter löst dieses Problem dadurch, indem er die Fermi-Verteilung selbst bei $T = 0$ aufweicht
- ➔ Supraleiter muss zunächst **kinetische Energie bezahlen**, um energetisch höher liegende Zustände zu besetzen und damit Zustände unterhalb von E_F freizumachen
- ➔ Energieaufwand wird durch **gewonnene Paar-Wechselwirkungsenergie** (potentielle Energie) überkompensiert
- ➔ Gesamtenergie wird **insgesamt abgesenkt**

Mikroskopische Theorie (light)

Grobe Abschätzung der Reichweite der über Phononen vermittelten attraktiven Elektron-Elektron-Wechselwirkung

- Geschwindigkeit der Elektronen:

$$v_F \approx 10^6 \text{ m/s}$$

- Relaxationszeit der Ionen:

$$\tau \approx \frac{1}{\omega_{ph}} \approx \frac{1}{\omega_D} \approx 10^{-13} \text{ s}$$

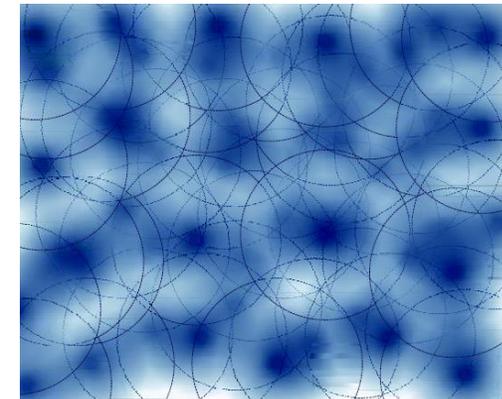
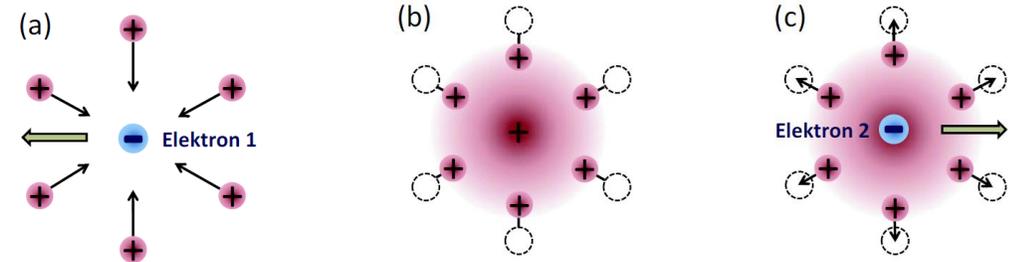
- Reichweite (via Unschärferelation):

$$v_F/\tau \approx 100 \text{ nm}$$

(>1 Mio Cooper-Paare in diesem Volumen)

$$\Delta k = \frac{m\omega_D}{\hbar k_F} = \frac{\omega_D}{v_F} \Rightarrow \Delta x = \frac{1}{\Delta k} = \frac{v_F}{\omega_D}$$

- ➔ starker räumlicher Überlapp der Cooper-Paare
- ➔ Ausbildung von **kohärentem Vielteilchenzustand**



Mikroskopische Theorie

Hamilton-Operator und BCS-Wellenfunktion

– Hamilton Operator:

$$\mathcal{H}_{\text{BCS}} = \sum_{k,\sigma} \xi_k n_{k,\sigma} + \sum_{k,k'} V_{k,k'} c_{k\uparrow}^\dagger c_{-k\downarrow}^\dagger c_{-k'\downarrow} c_{k'\uparrow}$$

Einteilchenenergie

mit $\xi_k = \varepsilon_k - \mu = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \mu$

$n_{k,\sigma} = c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} =$ Teilchenzahl-Operator

Schwache, isotrope WW:

$$V_{k,k'} = \begin{cases} -V_0 & \text{für } k' > k_F, k < k_F + \Delta k \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad \text{mit } \Delta k = \frac{m\omega_D}{\hbar k_F}, \quad V_0 D(E_F) \ll 1$$

Paar- (Gorkov) Amplitude

$$g_{k\sigma_1\sigma_2} \equiv \langle c_{-k\sigma_1} c_{k\sigma_2} \rangle \neq 0$$

$$g_{k\sigma_1\sigma_2}^\dagger \equiv \langle c_{-k\sigma_2}^\dagger c_{k\sigma_1}^\dagger \rangle \neq 0$$

(kann als OP betrachtet werden)

Paar-Potential

$$\Delta_{k\sigma_1\sigma_2} \equiv - \sum_{k'} V_{k,k'} g_{k'\sigma_1\sigma_2}$$

$$\Delta_{k'\sigma_1\sigma_2}^\dagger \equiv - \sum_k V_{k,k'} g_{k\sigma_1\sigma_2}^\dagger$$

Mikroskopische Theorie

- *Bardeen, Cooper* und *Schrieffer* benutzten folgenden Ansatz:

$$\psi_{\text{BCS}} = \prod_{k=k_1, k_2, \dots, k_M} (u_k + v_k c_{k\uparrow}^\dagger c_{-k\downarrow}^\dagger) |0\rangle$$

$|u_k|^2$ = Wahrscheinlichkeit, dass Paarzustand $(\mathbf{k} \uparrow, -\mathbf{k} \downarrow)$ nicht besetzt ist

$|v_k|^2$ = Wahrscheinlichkeit, dass Paarzustand $(\mathbf{k} \uparrow, -\mathbf{k} \downarrow)$ besetzt ist

$$|u_k|^2 + |v_k|^2 = 1$$

(„Kohärenz-Faktoren“, komplexe Wahrscheinlichkeitsamplituden)

- ➔ Wir machen die Annahme, dass die makroskopische Wellenfunktion $\psi(\mathbf{r}, t) = \psi_0(\mathbf{r}, t) e^{i\theta(\mathbf{r}, t)}$ durch einen **kohärenten Vielteilchen-Zustand von Fermionen** beschrieben werden kann

Mikroskopische Theorie

Bestimmung der Wahrscheinlichkeitsamplituden

- **Aufgabe:** bestimme die Wahrscheinlichkeitsamplituden u_k und v_k in selbstkonsistenter Weise durch Minimierung von

$$\langle E_{\text{BCS}} \rangle = \langle \psi_{\text{BCS}} | \underbrace{\mathcal{H}_{\text{BCS}} - \mu \mathcal{N}_p}_{\text{„Mean-Field“ BCS Hamiltonian}} | \psi_{\text{BCS}} \rangle \quad \text{mit } \langle \mathcal{N}_p \rangle = \langle \sum_{k,\sigma} n_{k\sigma} \rangle = \bar{N}$$

- Minimierung des Erwartungswerts mittels **Variationsrechnung**:

$$\delta \left\langle \psi_{\text{BCS}} \left| \underbrace{\sum_{k,\sigma} \xi_k n_{k,\sigma}}_{\text{kinetische Energie}} + \underbrace{\sum_{k,k'} V_{k,k'} c_{k\uparrow}^\dagger c_{-k\downarrow}^\dagger c_{-k'\downarrow} c_{k'\uparrow}}_{\text{Wechselwirkungsenergie}} \right| \psi_{\text{BCS}} \right\rangle = 0$$

Mikroskopische Theorie

Fermi-level

$$|v_k|^2 = \frac{1}{2} \left[1 - \frac{\xi_k}{E_k} \right]$$

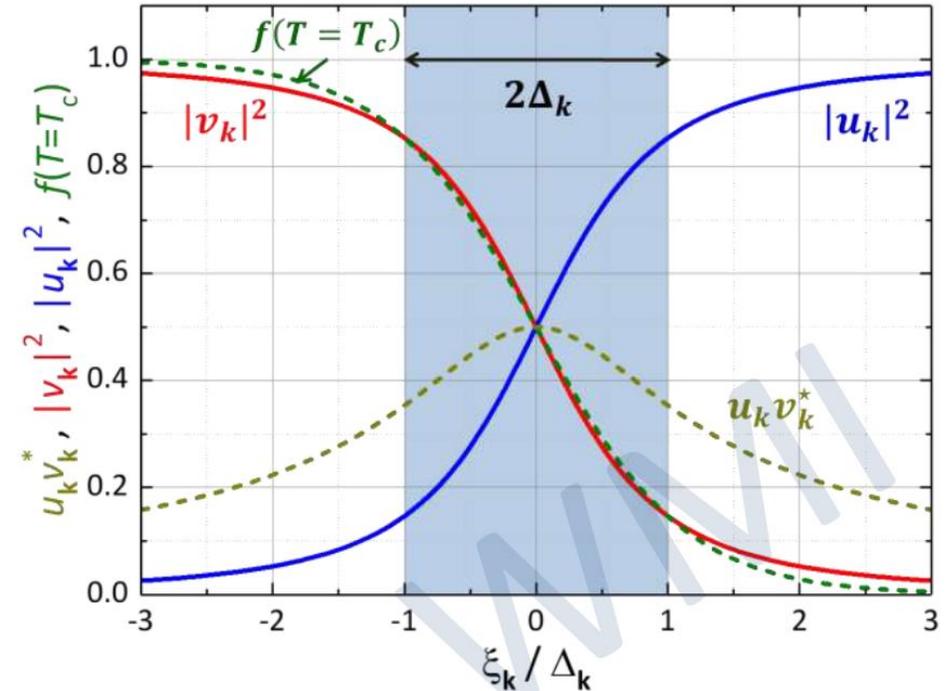
$$|u_k|^2 = \frac{1}{2} \left[1 + \frac{\xi_k}{E_k} \right]$$

$$u_k v_k^* = g_k = \frac{\Delta_k^\dagger}{2E_k}$$

$$u_k^* v_k = g_k^\dagger = \frac{\Delta_k}{2E_k}$$

mit $E_k = \sqrt{\xi_k^2 + |\Delta_k|^2}$

Paaramplitude



- $|v_k|^2$: Wahrscheinlichkeit, dass Paarzustand ($\mathbf{k} \uparrow, -\mathbf{k} \downarrow$) besetzt ist, ist auch bei $T = 0$ um E_F ausgeschmiert
- ➔ Erhöhung der kinetischen Energie (interessant: $|v_k|^2(\xi_k) \simeq f(\xi_k, T = T_c)$)

- Verschmierung ist notwendig, um Paarwechselwirkung zu ermöglichen
- ➔ Reduktion der potenziellen Energie > Erhöhung der kinetischen Energie

Mikroskopische Theorie

Umschreiben des BCS-Hamiltonian mit Hilfe von Ausdrücken für u_k, v_k, E_k

$$\mathcal{H}_{\text{BCS}} = \sum_{k,\sigma} \xi_k n_{k,\sigma} + \sum_{k,k'} V_{k,k'} c_{k\uparrow}^\dagger c_{-k\downarrow}^\dagger c_{-k'\downarrow} c_{k'\uparrow}$$

$$\mathcal{H}_{\text{BCS}} = \sum_k [\xi_k - E_k + g_k^\dagger \Delta_k] + \sum_k E_k [\alpha_k^\dagger \alpha_k - \beta_k^\dagger \beta_k]$$

Bogoliubov-Transformation

$$\alpha_k = u_k^* c_{k\uparrow} - v_k^* c_{-k\downarrow}^\dagger$$

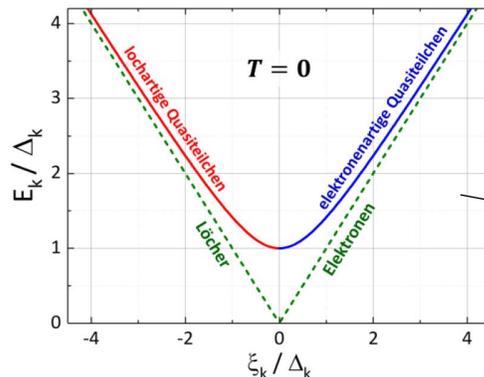
$$\beta_k = v_k^* c_{k\uparrow}^\dagger + u_k^* c_{-k\downarrow}$$

$$\alpha_k^\dagger = u_k c_{k\uparrow}^\dagger - v_k c_{-k\downarrow}$$

$$\beta_k^\dagger = v_k c_{k\uparrow} + u_k c_{-k\downarrow}^\dagger$$

- **Grundzustandsenergie**
- weicht von derjenigen des Normalzustands um Kondensationsenergie ab

- **spinlose Anregungen** aus dem Grundzustand mit Teilchenzahloperatoren $\alpha_k^\dagger \alpha_k$ und $\beta_k^\dagger \beta_k$ und Energien E_k und $-E_k$
- Anregungen (Quasiteilchen) sind spinlos, da sie Linearkombinationen von Elektronen und Löchern mit entgegengesetztem Spin sind



- 2 Spin-Freiheitsgrade \rightarrow 2 Linearkombinationen von Elektron-Loch-Spin-Singulett

- $E_k = \sqrt{\xi_k^2 + |\Delta_k|^2}$ ist **Anregungsenergie von Quasiteilchen**
 $|\Delta_k|$ ist Lücke im Anregungsspektrum

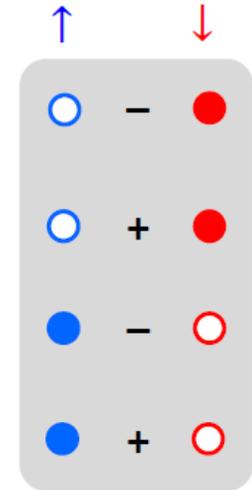
Mikroskopische Theorie

Quasiteilchenanregungen

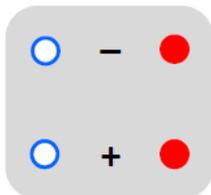
$$\begin{aligned}\alpha_k &= u_k^* c_{k\uparrow} - v_k^* c_{-k\downarrow}^\dagger \\ \beta_k^\dagger &= v_k c_{k\uparrow} + u_k c_{-k\downarrow}^\dagger \\ \alpha_k^\dagger &= u_k c_{k\uparrow}^\dagger - v_k c_{-k\downarrow} \\ \beta_k &= v_k^* c_{k\uparrow}^\dagger + u_k^* c_{-k\downarrow}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\xi_k &= 0 \\ |u_k|^2 &= |v_k|^2 = \frac{1}{2}\end{aligned}$$

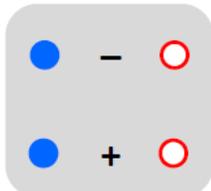

$$\begin{aligned}\alpha_k &= 1/\sqrt{2} (c_{k\uparrow} - c_{-k\downarrow}^\dagger) \\ \beta_k^\dagger &= 1/\sqrt{2} (c_{k\uparrow} + c_{-k\downarrow}^\dagger) \\ \alpha_k^\dagger &= 1/\sqrt{2} (c_{k\uparrow}^\dagger - c_{-k\downarrow}) \\ \beta_k &= 1/\sqrt{2} (c_{k\uparrow}^\dagger + c_{-k\downarrow})\end{aligned}$$



→ symmetrische und anti-symmetrische Superposition von Elektron- und Lochzuständen mit entgegengesetzter Spin-Richtung



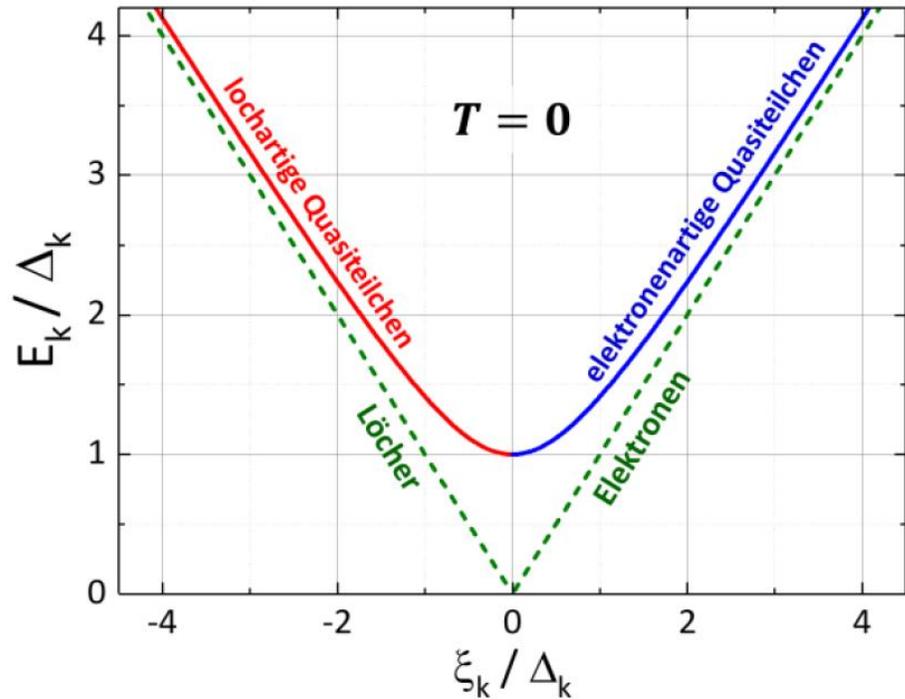
→ **reduziert** Gesamtimpuls um k und Gesamtspin um $\hbar/2$
lochartige Anregung



→ **erhöht** Gesamtimpuls um k und Gesamtspin um $\hbar/2$
teilchenartige Anregung

Mikroskopische Theorie

Anregungsspektrum der Quasiteilchen und Energielücke



Anregungsenergie

$$E_{\mathbf{k}} = E_{-\mathbf{k}} = \sqrt{\xi_{\mathbf{k}}^2 + \Delta_{\mathbf{k}}^2}$$

Energielücke $|\Delta_{\mathbf{k}}|$ muss durch Minimierung der freien Energie hinsichtlich Variation von $\Delta_{\mathbf{k}}$ bestimmt werden:

$$\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \Delta_{\mathbf{k}}} = 0 \quad \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \Delta_{\mathbf{k}}^\dagger} = 0$$

Energielückengleichung

$$\Delta_{\mathbf{k}} = - \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \Delta_{\mathbf{k}'} \frac{\tanh(E_{\mathbf{k}'}/2k_{\text{B}}T)}{2E_{\mathbf{k}'}}$$

Paarsuszeptibilität

Quasiteilchenanregung: Superposition von Elektron- und Loch-Zuständen

Grund: Einteilchenanregung mit \mathbf{k} kann nur dann existieren, wenn gleichzeitig ein Loch mit $-\mathbf{k}$ existiert, ansonsten würde Paarzustand vorliegen

Mikroskopische Theorie

- Ziel: Lösen der Energielückengleichung

Energielückengleichung

$$\Delta_{\mathbf{k}} = - \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \Delta_{\mathbf{k}'} \frac{\tanh(E_{\mathbf{k}'} / 2k_B T)}{2E_{\mathbf{k}'}}$$

- Betrachte Grenzfälle $T = 0$ und $T = T_C$
- Dazwischen: Numerische Lösung

Annahmen

- Isotrope Wechselwirkung

$$V_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} = -V_0 \quad \Delta_{\mathbf{k}} = \Delta$$

- Schwache Kopplung

$$V_0 D(E_F) \ll 1$$

Mikroskopische Theorie

Verhältnis von Energielücke und Sprungtemperatur

Löse Energielückengleichung (last Slide)

– für $V_{k,k'} = -V_0$, $\Delta_k = \Delta$:

Energielücke bei $T = 0$ ($V_0 D(E_F) \ll 1$)

$$\Delta(0) \approx 2\hbar\omega_D e^{-2/V_0 D(E_F)}$$

große Ähnlichkeit mit
vorheriger Gleichung
(Folie 16)

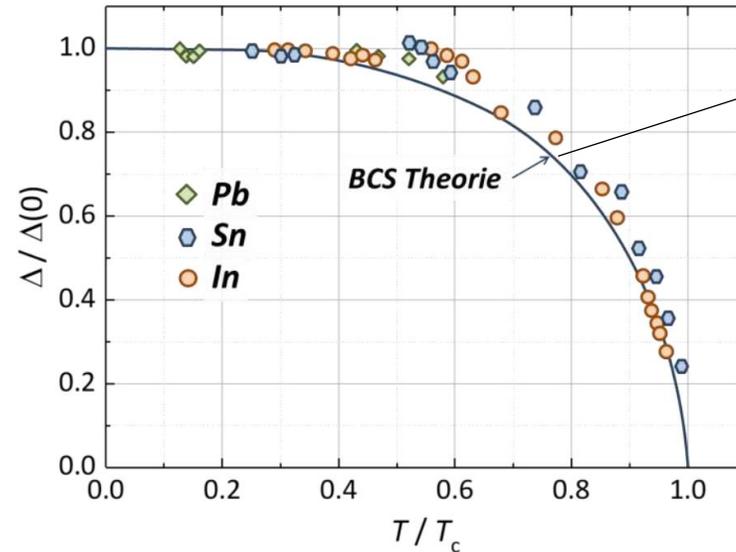
Sprungtemperatur T_c ($V_0 D(E_F) \ll 1$)

$$k_B T_c = 1.13\hbar\omega_D e^{-2/D(E_F)V_0}$$

Erklärt qualitativ den
Isotopeneffekt

Verhältnis:

$$\frac{\Delta(0)}{k_B T_c} = \frac{\pi}{e^\gamma} = 1.764$$



$$\Delta_k = - \sum_{k'} V_{k,k'} \Delta_{k'} \frac{\tanh(E_{k'}/2k_B T)}{2E_{k'}}$$

$$1 = \frac{D(E_F) V_0}{2} \int_{-\hbar\omega_D}^{\hbar\omega_D} \frac{\tanh(E_k/2k_B T)}{2E_k} d\xi_k$$

Aus Energielückengleichung

	T_c (K)	$2\Delta(0)$ (meV)	$2\Delta(0)/k_B T_c$
Al	1.19	0.36	3.5 ± 0.1
Nb	9.2	2.90	3.6
Pb	7.2	2.70	4.3 ± 0.05
Ta	4.29	1.30	3.5 ± 0.1
NbN	15	4.65	3.6
NbSe ₂	7	2.2	3.7

Mikroskopische Theorie

- Wieviel Energie gewinne ich beim Übergang in den SL Grundzustand?

Grundzustandsenergie

$$E_{\text{Kond}}(0) = \langle \mathcal{H}_{\text{BCS}} \rangle - \langle \mathcal{H}_{\text{n}} \rangle = -\frac{1}{4} D(E_{\text{F}}) \Delta^2(0) .$$

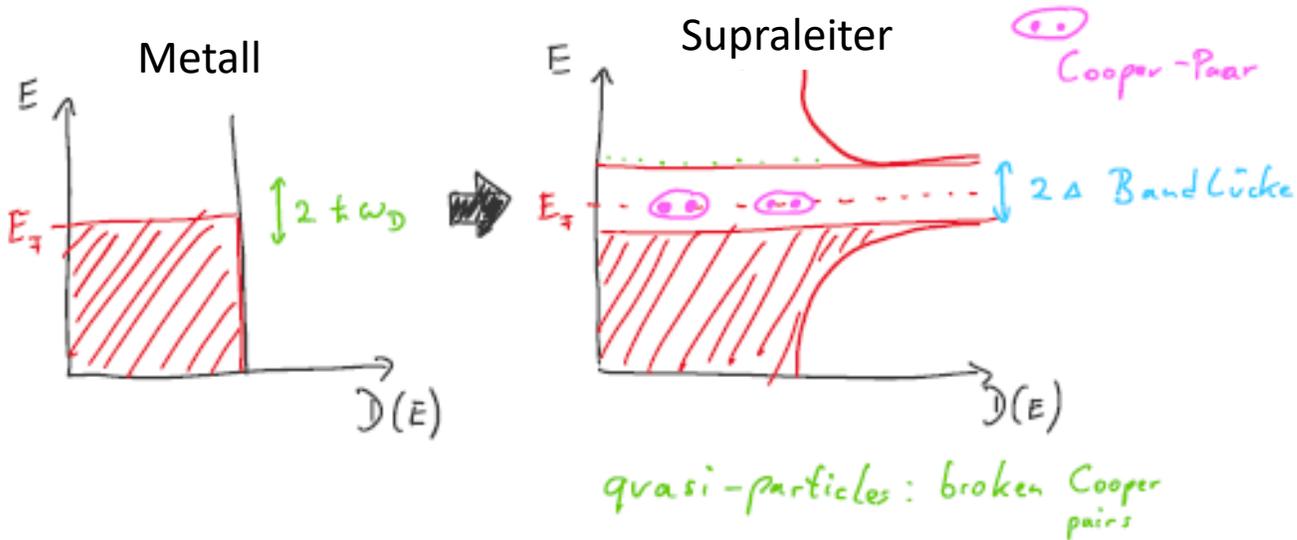
- Zahl der Cooper-Paare: $\frac{D(E_{\text{F}})}{2} \Delta(0)$
- mittlerer Energiegewinn pro Cooper-Paar: $-\frac{\Delta(0)}{2}$
- Vergleich mit der Thermodynamik $\mathcal{G}_{\text{s}} - \mathcal{G}_{\text{n}} = B_{\text{cth}}^2(0)/2\mu_0$

➔ $B_{\text{cth}}(0) = \sqrt{\frac{\mu_0 D(E_{\text{F}}) \Delta^2(0)}{2V}}$

BCS

Kondensierung von Cooper-Paaren

Zustandsdichte:

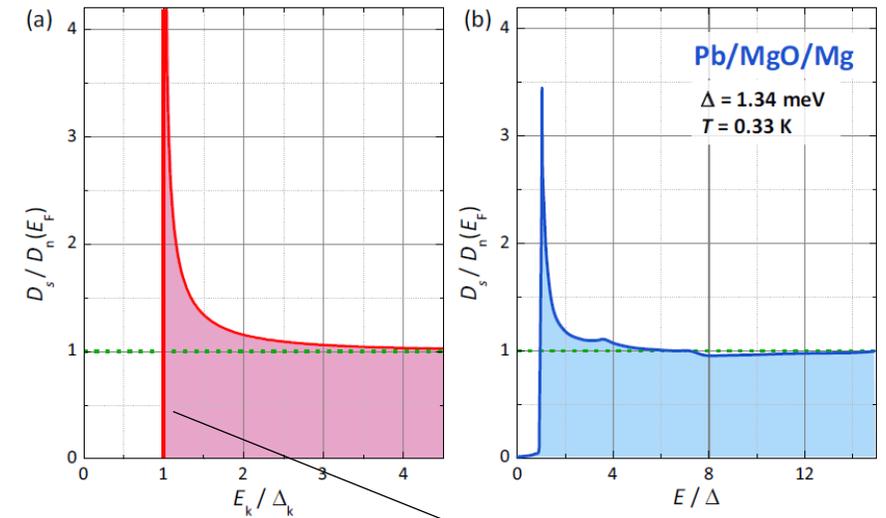


$$D_s(E_k) = D_n(\xi_k) \frac{d\xi_k}{dE_k} = \begin{cases} D_n(E_F) \frac{E_k}{\sqrt{E_k^2 - \Delta^2}} & \text{für } E_k > \Delta \\ 0 & \text{für } E_k < \Delta \end{cases}$$

Elektronen in der Bandbreite $\hbar\omega_D$ kondensieren zu Cooper-Paaren

→ Bosonen → können alle in den selben Energiezustand

→ Kondensat wird beschrieben durch eine makroskopische Wellenfunktion



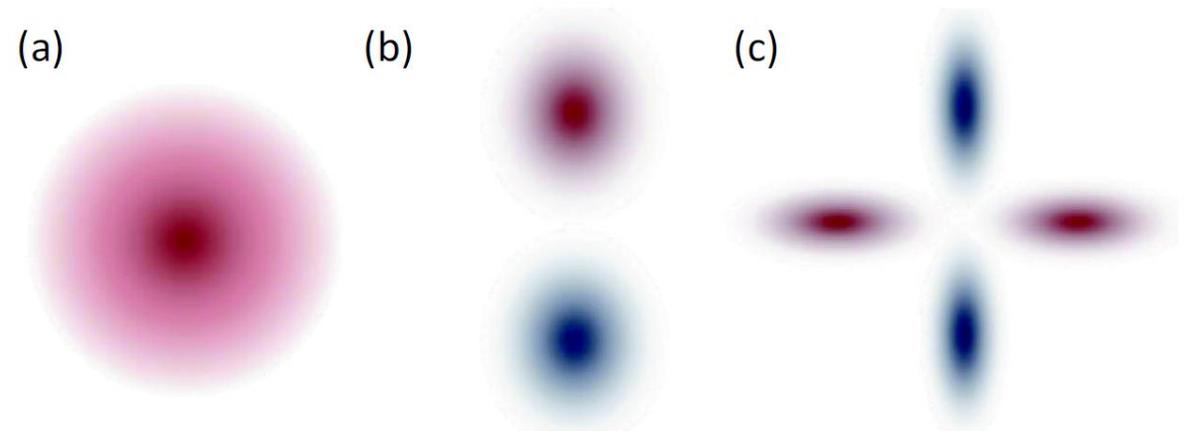
Symmetrie der Paarwellenfunktion

- Zu einer symmetrischen Orbitalfunktion gehört eine antisymmetrische Spin-Funktion und umgekehrt.

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \sigma_1, \mathbf{r}_2, \sigma_2) = e^{i\mathbf{K}_S \cdot \mathbf{R}} f(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \chi(\sigma_1, \sigma_2) = -\Psi(\mathbf{r}_2, \sigma_2, \mathbf{r}_1, \sigma_1).$$

$$\mathbf{S} = \begin{cases} 0, m_s = 0 & \frac{1}{\sqrt{2}}(\uparrow\downarrow - \downarrow\uparrow) & \text{(Singulett-Paarung)} \\ 1, m_s = \begin{cases} -1 & \downarrow\downarrow \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}}(\uparrow\downarrow + \downarrow\uparrow) & \text{(Triplett-Paarung)} \\ +1 & \uparrow\uparrow \end{cases} \end{cases}$$

Singulett-Paarung: $S = 0$ $L = 0, L = 2 L = 4 \dots$
 Triplett-Paarung: $S = 1$ $L = 1, L = 3 L = 5 \dots$



Schematische Darstellung der Symmetrie des Orbitalanteils verschiedener Paarwellenfunktionen: **(a)** s-Wellensymmetrie (L = 0), **(b)** p-Wellensymmetrie (L = 1) und **(c)** d-Wellensymmetrie (L = 2).