

Quasiklassische Theorie des Vortexzustandes
in unkonventionellen Systemen:
Betrachtungen zu Magnesiumdiborid
und d -Wellen-Supraleitern

DISSERTATION

zur Erlangung des Grades eines Doktors
der Naturwissenschaften
der Fakultät für Mathematik und Physik
der Eberhard-Karls-Universität zu Tübingen

vorgelegt von
SIEGFRIED GRASER
aus Sindelfingen

2006

Tag der mündlichen Prüfung: 29.05.2006

Dekan: Prof. Dr. Peter Schmid

1. Berichterstatter: Prof. Dr. Nils Schopohl
2. Berichterstatter: Prof. Dr. Reinhold Kleiner

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung: Die unkonventionellen Eigenschaften von MgB_2	5
1.1	Kristallstruktur und Fermiflächengeometrie	6
1.2	Stabilisierung der Zweiband-Eigenschaften	7
1.3	Experimentelle Bestätigungen	8
2	Theoretische Grundlagen	11
2.1	Die Eilenberger-Gleichungen	11
2.1.1	Die Eilenberger-Gleichungen für einen Multiband-Supraleiter	12
2.1.2	Die Eilenberger-Gleichungen im sauberen Grenzfall	13
2.2	Die Näherung nach Pesch für mehrere Energiebänder	14
2.3	Die Riccati-Gleichungen	17
2.4	Der schmutzige Grenzfall: Die Usadel-Gleichungen	18
3	Der Vortexzustand im Grenzfall hoher Magnetfelder	23
3.1	Die Modellierung der Fermiflächen	24
3.2	Die räumlich gemittelte Zustandsdichte für verschiedene Fermiflächengeometrien	29
3.2.1	Magnetfeld in c -Achsen-Richtung	29
3.2.2	Magnetfeld in a - b -Ebenen-Richtung	35
3.2.3	Fermiflächen mit ausgeprägtem "nesting"	41
3.3	Die räumlich gemittelte Zustandsdichte für den Vortexzustand von MgB_2	44
3.4	Das obere kritische Magnetfeld im sauberen und im schmutzigen Grenzfall	49
4	Der einzelne Vortex als Modell niedriger Magnetfelder	59
4.1	Die Verallgemeinerung der Ginzburg-Landau-Theorie	60
4.2	Selbstkonsistente Berechnung des Paarpotentials und die lokale Zustandsdichte	65
4.2.1	Die Berechnung des Paarpotentials	66
4.2.2	Die Berechnung der Zustandsdichte	70
4.3	Der Kramer-Pesch-Effekt im sauberen Grenzfall	74
4.4	Induzierter Kramer-Pesch-Effekt in einem schmutzigen π -Band	80
5	Vortices und Grenzflächen in d-Wellen-Supraleitern	83
5.1	Konventionelle und unkonventionelle Paarungssymmetrie	84
5.2	Der Vortex-Schatten-Effekt	90

INHALTSVERZEICHNIS

6	Zusammenfassung und Ausblick	97
A	Ableitung des Druckfunktionals für mehrere Bänder	101
A.1	Druckfunktional, Gapgleichung und quasiklassischer Strom	101
A.2	Druckfunktional eines Multiband-Supraleiters	103
A.3	Gapgleichung und quasiklassischer Strom für einen Multiband-Supraleiter . .	104
B	Die Kopplungsmatrix $\lambda_{\alpha\alpha'}$ für den Multiband-Supraleiter	105
C	Die numerische Implementierung der Usadel-Gleichung	109
C.1	Die Parametrisierung des Usadel-Propagators für konkrete Beispiele	109
C.2	Das Relaxationsverfahren zur Lösung eines Randwertproblems	112
C.3	Die numerische Lösung der Usadel-Gleichung	114

Kapitel 1

Einleitung: Die unkonventionellen Eigenschaften von MgB_2

Seit der Entdeckung der supraleitenden Eigenschaften von Magnesiumdiborid durch Nagamatsu et al. [1] im Jahr 2001 ist diese rein optisch unscheinbare Verbindung eines der in den wissenschaftlichen Publikationen der letzten Jahre wohl am eifrigsten diskutierten supraleitenden Materialien. Auch nach fünf Jahren intensiver Forschung hat das Interesse der Wissenschaft an diesem neuen Supraleiter kaum nachgelassen. Bedenkt man, dass die kritische Temperatur dieses Materials mit etwa 40 K weit unterhalb der maximalen Sprungtemperatur in den seit 1986 bekannten Kupraten liegt – hier wird der Rekord bei einer kritischen Temperatur von 138 K von einem Thallium-dotierten Quecksilber-Kuprat gehalten – so scheint das, zumindest auf den ersten Blick, befremdlich zu sein. Es wird jedoch verständlich, wenn man bedenkt, dass Magnesiumdiborid zu den konventionellen Supraleitern mit einer von Phononen vermittelten Paarungswchselwirkung gehört und hier die bisher höchste Sprungtemperatur bei etwa 23 K für bestimmte Niob-Verbindungen lag, wohingegen die supraleitenden Keramiken wie die Kuprate eine unkonventionelle Paarungssymmetrie mit bisher noch weitgehend unverstandener mikroskopischer Herkunft besitzen. Ein weiteres, vor allem für die Theorie überaus interessantes Phänomen ist die Präsenz mehrerer supraleitender Fermiflächen mit zwei deutlich zu unterscheidenden Energielücken, deren Beträge etwa um den Faktor drei verschieden sind. Dabei treten diese zwei Gaps aufgrund der zwei- bzw. dreidimensionalen Struktur der zugehörigen Fermiflächen bei verschiedenen Experimenten unterschiedlich in Erscheinung und können zum Teil einzeln, aber auch gemeinsam beobachtet werden. Zudem sind die supraleitenden Eigenschaften von MgB_2 nicht nur für Theoretiker und Experimentatoren von großem Interesse. Sowohl die preisgünstige Herstellung als auch die einfache Handhabung lässt dieses neue supraleitende Material als eine für die Anwendung wertvolle Alternative zu den “klassischen” Hochtemperatur-Supraleitern sowie zu den bisher in der Praxis häufig eingesetzten Niob-Verbindungen erscheinen.

Im einleitenden Kapitel sollen zuerst die grundlegenden, für die Supraleitung relevanten Materialeigenschaften von MgB_2 diskutiert sowie die Herkunft des ausgeprägten Zweiband-Charakters der Supraleitung erklärt werden. Danach soll die Bedeutung der Zustandsdichte als Grundlage für die Berechnung der verschiedenen thermodynamischen Größen erläutert werden. Natürlich kann der aktuelle Stand der Forschung hier nur sehr grob skizziert werden, wobei der Schwerpunkt auf den für diese Arbeit relevanten Ergebnissen liegen wird. Eine detailliertere Aufstellung und Zusammenfassung der bisherigen Forschungsergebnisse findet sich in dem Überblicksartikel zu den theoretischen Aspekten der Supraleitung in Magnesiumdiborid von T. Dahm [2] oder in dem Überblicksartikel von Buzea und Yamashita [3], der

sowohl normalleitende als auch supraleitende Materialeigenschaften von Magnesiumdiborid – jedoch auf dem Kenntnisstand von 2001 – zusammenstellt.

1.1 Kristallstruktur und Fermiflächengeometrie

Im Vergleich zu den Kuprat-Keramiken wie BSCCO oder YBCO besitzt Magnesiumdiborid eine auffallend einfache Kristallstruktur (siehe Abbildung 1.1). Während die Bor-Atome Ebenen aus hexagonalen Ringen bilden, sind die dazwischenliegenden Magnesium-Atome in einem Dreiecksgitter angeordnet. (Man beachte hierbei, dass die in der Abbildung rot eingezeichneten Magnesium-Atome ein Drittel eines hexagonalen Rings beschreiben und nicht etwa ein Rechteck). Aus Bandstrukturechnungen geht nun hervor, dass allein die p -Orbitale der Bor-Atome Ladungsträger für die Supraleitung bereitstellen, da nur die Energiebänder dieser Orbitale die Fermienergie schneiden [4]. Für das Zustandekommen der Supraleitung von Bedeutung sind dabei sowohl die π -Bindungszustände, die die p_z -Orbitale des Bors eingehen und die parallel zur c -Achse (das ist die Hauptsymmetrieachse des Kristalls und im Fall von MgB_2 steht sie senkrecht auf den wabenförmigen Bor-Ebenen) ausgerichtet sind, als auch die σ -Bindungszustände der p_x - und p_y -Orbitale des Bors, die für die Ausbildung der Ringe innerhalb der a - b -Ebene des Kristalls verantwortlich sind. Auch die für die Vermittlung der supraleitenden Wechselwirkung verantwortlichen Gitterschwingungen finden allein im Untergitter der sehr leichten Bor-Atome statt, wie ein deutlicher Anstieg der kritischen Temperaturen um nahezu 1 K beim Ersetzen des Bor-11 durch das Bor-10 Isotop zeigt. Die Schwingungen der Bor-Atome innerhalb der a - b -Ebene, die zu einer Stauchung bzw. Streckung der σ -Bindungen führen, bezeichnet man dabei als die E_{2g} -Phononenmode. Ihre Energie liegt im Bereich von 70 meV und sie ist – nach Meinung verschiedener Autoren [5, 6, 7, 8] – maßgeblich für die Vermittlung der supraleitenden Wechselwirkung verantwortlich. Es wird somit klar, dass die Supraleitung an sich im Untergitter der Bor-Ringe stattfindet, während das schwerere Magnesium nur eine strukturbildende Funktion besitzt.

Neben der Kristallstruktur ist die Geometrie der Fermiflächen für die Berechnung der supraleitenden Eigenschaften von großer Bedeutung. Schon kurz nach der Entdeckung der supraleitenden Eigenschaften von Magnesiumdiborid wurde durch Bandstrukturechnungen von Kortus et al. [4] ein erstes Bild der Fermiflächenstruktur geliefert (skizziert in Abbildung 1.2). Neben einem tubusförmigen Netzwerk von elektronenartigen (rot) und lochartigen (blau) Fermiflächen, die sich aus den p_z -Orbitalen des Bors ergeben und als π -Bänder bezeichnet werden, spielen für die Supraleitung auch die lochartigen zylinderförmigen sogenannten σ -Bänder aus den p_x - und p_y -Orbitalen des Bors eine entscheidende Rolle (blau und grün). Dabei ist zu beachten, dass die Zylinder eine leichte Wölbung besitzen.

Ein wichtiges Indiz für das Verständnis der mikroskopischen Ursachen der supraleitenden Paarungswechselwirkung liefert nun die Migdal-Eliashberg-Theorie – eine Verallgemeinerung der BCS-Theorie unter Einbeziehung der speziellen Eigenschaften der für die Paarung relevanten Phononen. Die Rechnungen für Magnesiumdiborid von H. J. Choi et al. [8] ergaben eine starke Kopplung der zweidimensionalen E_{2g} -Phononenmode, die sich wie oben erwähnt als eine “Atmungsmode” der Bor-Atome in der a - b -Ebene beschreiben lässt, an die nahezu zweidimensionalen Elektronen des σ -Bandes. Diese starke Kopplung führt zu einem hohen Wert für die Paarungswechselwirkung zwischen zwei Ladungsträgern des σ -Bandes, ein Wert der deutlich größer ist als für zwei Ladungsträger des π -Bandes oder für Ladungsträger aus unterschiedlichen Bändern. Das Verhältnis der unterschiedlichen Paarungswechselwirkungen innerhalb und zwischen den Bändern wird einen wichtigen Einfluss auf die spätere Berechnung der Gapgleichung haben, in der die Wechselwirkungsmatrix als tragende Komponente eingeht.

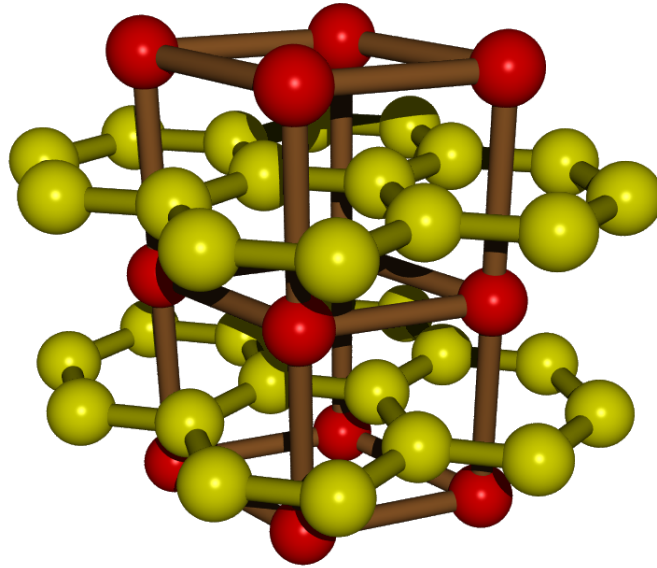


Abbildung 1.1: Die Kristallstruktur von Magnesiumdiborid. Die Bor-Atome (gelb) bilden wabenförmige Atomlagen, die von den Magnesiumatomen (rot) getrennt werden.

1.2 Stabilisierung der Zweiband-Eigenschaften

Die ersten Experimente zur Bestimmung des supraleitenden Gaps in Magnesiumdiborid führten zu widersprüchlichen Ergebnissen. Verschiedene experimentelle Techniken lieferten Gap-Werte zwischen 2 meV und 8 meV und trotz Verbesserung der Probenqualität verschwanden diese anfänglichen Widersprüche nicht. Erst die grundlegenden Berechnungen von Liu et al. [7] und Choi et al. [8] zeigten einen Ausweg. Unter Vernachlässigung von Streuung an Verunreinigungen fanden die Autoren Gap-Werte von 7 meV auf den σ -Bändern und Werte um 2 meV auf den π -Bändern. Diese Berechnungen zeigten zudem die entscheidende Rolle, die einerseits die Anisotropie und andererseits die anharmonische Schwingung der Phononen für die exakte, quantitative Bestimmung von T_c spielen. Nun stellt sich jedoch die Frage, welche Auswirkung die Streuung an Verunreinigungen oder Kristallfehlern bei der Berechnung der supraleitenden Energielücken hat, denn gewöhnlich führt schon eine kleine Rate von *Interband*-Streuung, d. h. Streuung zwischen den Bändern, zu einer Angleichung der Gapwerte und damit zu einer Reduktion von T_c (siehe [9, 10]). Im Vergleich dazu besitzt eine endliche *Intraband*-Streuung in einem *s*-Wellen-Supraleiter nur einen geringen Einfluss auf die kritische Temperatur, ein Phänomen das als Andersons Theorem bekannt ist [11]. Da in Magnesiumdiborid jedoch offensichtlich zwei unterschiedliche Gap-Werte gemessen werden, muss eine Erklärung für das Fehlen von Interband-Streuung gesucht werden. I. I. Mazin et al. [12] argumentierten, dass die unterschiedliche Parität der Wellenfunktionen auf den σ - bzw. den π -Bändern die Interband-Streuung im Vergleich zur Intraband-Streuung um etwa zwei Größenordnungen unterdrückt. Dieser Umstand führt bei einer geringen Verunreinigung zu einer Angleichung der Gaps innerhalb der Bänder mit gleicher Parität aber zu einer Stabilisierung der charakteristischen Zwei-Gap-Eigenschaften zwischen den Bändern mit unterschiedlicher Parität. Im Vergleich zu dem schon früher bekannten Zweiband-Supraleiter SrTiO_3 ist die

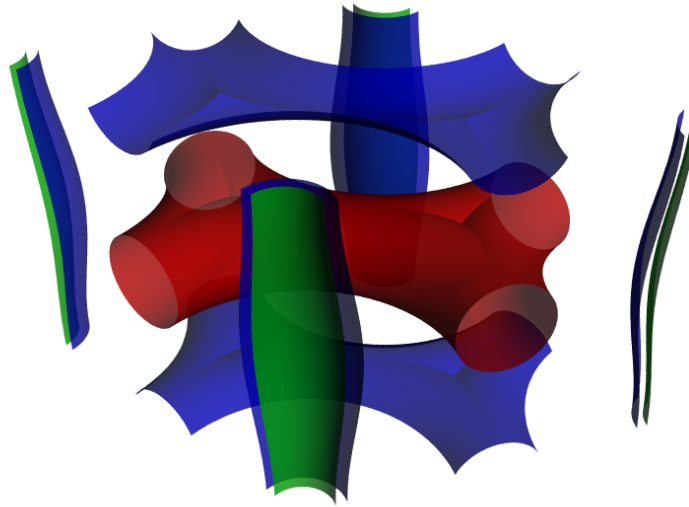


Abbildung 1.2: Skizze der Fermiflächenstruktur von Magnesiumdiborid nach den Bandstrukturechnungen in [4]. Man unterscheidet die dreidimensionalen π -Bänder (rot und blau) sowie die zylinderförmigen σ -Bänder (blau und grün).

Zwei-Gap-Struktur in MgB_2 weitaus deutlicher ausgeprägt [13]. Damit findet die schon in der Vergangenheit stattgefundene theoretische Diskussion von Zweiband-Supraleitern [14, 9] endlich einen auch für die Anwendung relevanten Kandidaten.

1.3 Experimentelle Bestätigungen

Neben der supraleitenden Energielücke ist die Quasiteilchen-Zustandsdichte eine weitere wichtige theoretische wie experimentelle Größe in einem Supraleiter. Sie kann für niedrige Temperaturen direkt als differentielle Leitfähigkeit aus Tunnelmessungen (STM bzw. STS) oder aus anderen spektroskopischen Messungen bestimmt werden, wobei hier verschiedene Verfahren wie Punkt-Kontakt-Spektroskopie oder Photoemissions-Spektroskopie in Frage kommen [15, 16]. Dabei ist jedoch zu berücksichtigen, dass die Zustandsdichte und damit auch das Paarpotential bei den verschiedenen Experimenten unterschiedlich gemessen wird und die Ergebnisse voneinander abweichen können. Zum einen ist die Zustandsdichte eine winkelabhängige Größe und kann in einem stark anisotropen Material wie Magnesiumdiborid für Quasiteilchen mit einem Impuls in c -Achsen-Richtung andere Werte annehmen als für Quasiteilchen, die sich innerhalb der Ebene bewegen. Zudem können so genannte Proximity-Effekte die Zustandsdichte an der Oberfläche verändern, so dass die bei Tunnelmessungen bestimmten Zustandsdichten nicht die Situation im Inneren des Kristalls wiedergeben. Jedoch lassen neben der direkten Messung auch verschiedene thermodynamische Größen Rückschlüsse auf die Quasiteilchen-Zustandsdichte eines Supraleiters zu. Einer der ersten Hinweise auf eine Anomalie der Supraleitung in Magnesiumdiborid war die Messung der spezifischen Wärme des elektronischen Systems als Funktion der Temperatur, die sich durch einen schnellen Anstieg und einen plötzlichen Knick im Bereich kleiner Temperaturen sowie durch eine Reduktion des Sprungs bei T_c von der spezifischen Wärme in einem klas-

sischen s -Wellen-Supraleiter unterscheidet [17]. Diese Anomalie kann durch Annahme einer Zweiband-Zustandsdichte sehr leicht erklärt werden und ist eine der wichtigsten experimentellen Hinweise für die Existenz von zwei unterschiedlichen Energielücken in Magnesiumdiborid (siehe Abbildung 1.3 a).

Einen weiteren wichtigen Hinweis auf das Zwei-Gap-Verhalten von Magnesiumdiborid lieferte die Temperaturabhängigkeit des Anisotropieverhältnisses der oberen kritischen Magnetfelder B_{c2}^{ab} zu B_{c2}^c . Da MgB_2 zu den Typ-II-Supraleitern gehört, zeigt es nur einen unvollständigen Meissner-Effekt. Das heißt beim Anlegen eines Magnetfelds dringt ab einem bestimmten unteren kritischen Feld B_{c1} magnetischer Fluss in Form von Vortices in das Material ein bis bei einem oberen kritischen Feld B_{c2} die Supraleitung vollständig zusammenbricht. Dieses obere kritische Feld ist bei Magnesiumdiborid abhängig von der Magnetfeldorientierung bezüglich der Kristallachsen. Dabei ist für niedrige Temperaturen das obere kritische Feld B_{c2}^{ab} um einen Faktor 5 größer als B_{c2}^c , während dieses Verhältnis für Temperaturen nahe der kritischen Temperatur nur noch etwa 2 beträgt [18]. Diese starke Anisotropie kann in einem Zweiband-Modell sinnvoll erklärt werden, wie T. Dahm und N. Schopohl zeigen konnten (siehe Abbildung 1.3 b) und [19]).

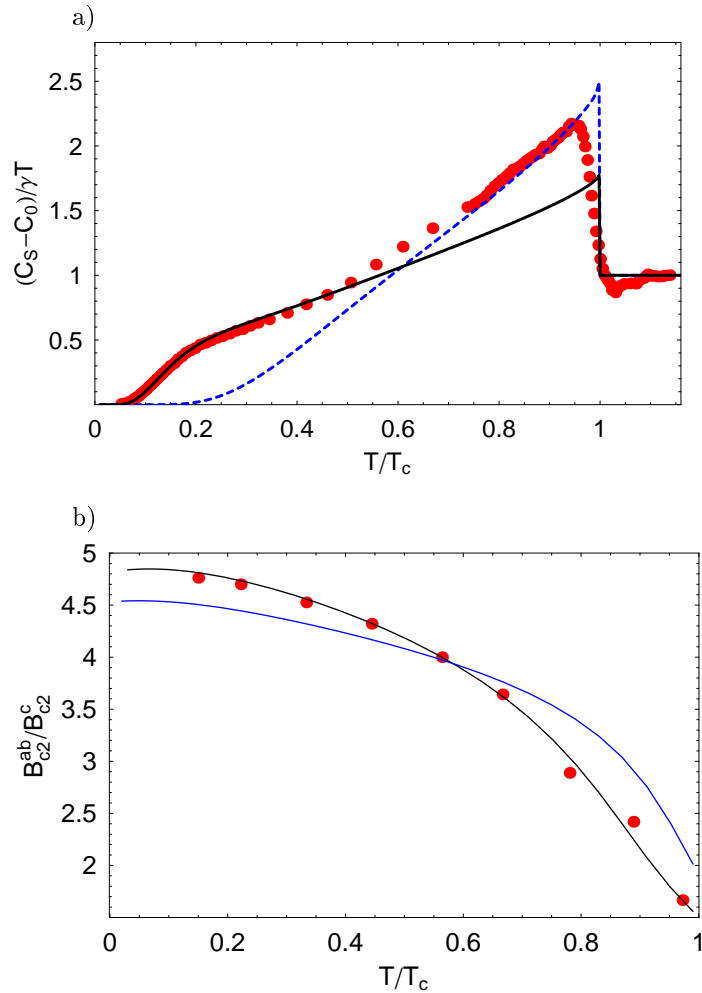


Abbildung 1.3: **a)** Die spezifische Wärme von MgB_2 als Funktion der Temperatur. Die Messpunkte (rot) von [17] und die berechnete Kurve (schwarz durchgezogen) für einen Zweiband-Supraleiter stimmen für kleine Temperaturen hervorragend überein. Blau gestrichelt gezeichnet ist zum Vergleich die Rechnung für einen Einband-Supraleiter. **b)** Die Anisotropie des oberen kritischen Felds als Funktion der Temperatur, berechnet von Dahm und Schopohl in [19] mit einer Interbandkopplungsstärke von $\eta = 0,064$ sowie einer c -Achsen-Dispersion des σ -Bandes von $\epsilon_c = 0,23$, wie sie durch Bandstrukturrechnungen nahe gelegt werden, (blau) und mit einem optimiert angepassten Datensatz mit $\eta = 0,121$ und $\epsilon_c = 0,182$ (schwarz). Die roten Kreise zeigen die Messdaten von Lyard et al. in [18].

Kapitel 2

Theoretische Grundlagen

In diesem Kapitel sollen die theoretischen Modelle vorgestellt werden, die bei der Berechnung der Ergebnisse dieser Dissertation verwendet wurden. Nahezu alle Gleichungen wurden im Rahmen der quasiklassischen Theorie abgeleitet, die die angemessenen Hilfsmittel bei der Bestimmung von räumlich veränderlichen thermodynamischen Größen bereitstellt. Aufgrund der Vernachlässigbarkeit von Interband-Streuung können die schon vorhandenen Bestimmungsgleichungen für den quasiklassischen Propagator problemlos auf das Vorhandensein mehrerer Bänder verallgemeinert werden, wie im folgenden gezeigt werden soll. Nur bei der Berechnung des Freien-Energie-Funktional – und damit auch in dessen Stationaritätsbedingung, der Gapgleichung –, tritt eine Kopplung der einzelnen Bänder auf. Ausgehend von den allgemeinen Gleichungen der quasiklassischen Theorie, die eine Betrachtung von Störstellenstreuung beliebiger Konzentration erlauben, soll sich diese Arbeit mit den zwei Spezialfällen beschäftigen, die eine vereinfachte Rechnung zulassen: Den “sauberen Grenzfall” mit verschwindender Störstellenkonzentration und den “schmutzigen Grenzfall”, bei dem der Diffusionsterm die Bestimmungsgleichungen des Propagators dominiert. Neben den auf mehrere Bänder verallgemeinerten Eilenberger-Gleichungen, die im ersten Abschnitt angegeben werden, soll im zweiten Abschnitt die Näherung nach Pesch zur Berechnung räumlich gemittelter thermodynamischer Größen im Vortexzustand skizziert werden, während im dritten Abschnitt die Riccati-Parametrisierung, die die Grundlage für eine stabile numerische Lösung der Eilenberger-Gleichungen im sauberen Grenzfall darstellt, vorgestellt wird. Der vierte Abschnitt befasst sich mit der Herleitung der Usadel-Gleichung im schmutzigen Grenzfall.

2.1 Die Eilenberger-Gleichungen

Grundlegend für die Betrachtung von allen räumlich inhomogenen Problemen in der Supraleitung für beliebige Temperaturen, die sich weder mit der Ginzburg-Landau-Theorie, die nur nahe der kritischen Temperatur gültig ist, noch mit der BCS-Theorie, die nur räumlich homogene Supraleiter beschreiben kann, erklären lassen, ist die Arbeit von Gorkov, in der Gleichungen für die normale und anomale Greensche Funktion aufgestellt werden [20]. Jedoch beinhaltet der allgemeine Matsubara-Propagator Informationen, die für die Berechnung grundlegender thermodynamischer Größen überflüssig sind, insbesondere enthält er die Abhängigkeit von dem vollen Fermi-Impuls $\vec{\hbar k}$. Nun konnten Eilenberger und gleichzeitig Larkin und Ovchinnikov zeigen, dass eine wesentlich einfachere Beschreibung des Problems im so genannten quasiklassischen Grenzfall für $k_F \xi \gg 1$ möglich ist, wenn die kinetische Energie der Quasiteilchen gleich zu Beginn der Rechnung ausintegriert und die elektronische Zu-

2. Theoretische Grundlagen

standsichte in der Umgebung der Fermikante als konstant angenommen wird [21, 22]. Für die Elemente des so erhaltenen quasiklassischen Propagators schreibt Eilenberger einen Satz von zwei linearen Differentialgleichungen auf, die durch eine Normierungsbedingung ergänzt werden. Aus dem Druckfunktional erhält er desweiteren zwei Selbstkonsistenzbedingungen für das Paarpotential und für das Vektorpotential des Magnetfelds, die die Beschreibung des Systems vervollständigen. Dabei sei angemerkt, dass in der vorliegenden Arbeit die allein für die Dimension relevanten Naturkonstanten – das durch 2π geteilte Plancksche Wirkungsquantum \hbar und die Boltzmann-Konstante k_B – gleich eins gesetzt wurden:

$$\hbar = k_B = 1$$

Diese Festlegung vereinfacht den Vergleich mit den Ausdrücken in den Originalarbeiten von Eilenberger und Usadel, die beide dieser Konvention gefolgt sind. Sowohl \hbar als auch k_B können durch eine einfache Dimensionsanalyse in den Ausdrücken ergänzt werden.

2.1.1 Die Eilenberger-Gleichungen für einen Multiband-Supraleiter

Nun können die Bestimmungsgleichungen für den quasiklassischen Propagator unter Vernachlässigung von Interband-Streuung ohne weiteres auch auf mehrere Bänder übertragen werden. Im Hinblick auf die Anwendung auf Magnesiumdiborid, für das eine konventionelle Paarungssymmetrie (s -Welle) angenommen wird, soll im folgenden die Symmetriefunktion des Paarpotentials $\chi(\vec{k}_F) = 1$ als konstant vorausgesetzt werden. Hier erhält man mit dem quasiklassischen Propagator im Band α

$$\hat{g}^{(\alpha)}(\omega, \vec{k}_F, \vec{r}) = \begin{pmatrix} g^{(\alpha)}(\omega, \vec{k}_F, \vec{r}) & f^{(\alpha)}(\omega, \vec{k}_F, \vec{r}) \\ \bar{f}^{(\alpha)}(\omega, \vec{k}_F, \vec{r}) & -g^{(\alpha)}(\omega, \vec{k}_F, \vec{r}) \end{pmatrix}$$

für die normale Greensche Funktion $g^{(\alpha)}$ und die anomalen Greenschen Funktionen $f^{(\alpha)}$ und $\bar{f}^{(\alpha)}$ ohne Interband-Streuung die folgenden Gleichungen:

$$\begin{aligned} & \left[2\omega + \bar{v}_F^{(\alpha)}(\vec{k}_F) \left(\vec{\nabla} - i \frac{2e}{c} \vec{A}(\vec{r}) \right) \right] f^{(\alpha)}(\omega, \vec{k}_F, \vec{r}) \\ & = 2\Delta^{(\alpha)}(\vec{r}) g^{(\alpha)}(\omega, \vec{k}_F, \vec{r}) + \int_{FS^{(\alpha)}} d^2 q_F \rho^{(\alpha)}(\vec{q}_F) \mathcal{W}^{(\alpha)}(\vec{k}_F, \vec{q}_F) \\ & \cdot \left[g^{(\alpha)}(\omega, \vec{k}_F, \vec{r}) f^{(\alpha)}(\omega, \vec{q}_F, \vec{r}) - f^{(\alpha)}(\omega, \vec{k}_F, \vec{r}) g^{(\alpha)}(\omega, \vec{q}_F, \vec{r}) \right] \end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned} & \left[2\omega - \bar{v}_F^{(\alpha)}(\vec{k}_F) \left(\vec{\nabla} + i \frac{2e}{c} \vec{A}(\vec{r}) \right) \right] \bar{f}^{(\alpha)}(\omega, \vec{k}_F, \vec{r}) \\ & = 2\Delta^{*(\alpha)}(\vec{r}) g^{(\alpha)}(\omega, \vec{k}_F, \vec{r}) + \int_{FS^{(\alpha)}} d^2 q_F \rho^{(\alpha)}(\vec{q}_F) \mathcal{W}^{(\alpha)}(\vec{k}_F, \vec{q}_F) \\ & \cdot \left[g^{(\alpha)}(\omega, \vec{k}_F, \vec{r}) \bar{f}^{(\alpha)}(\omega, \vec{q}_F, \vec{r}) - \bar{f}^{(\alpha)}(\omega, \vec{k}_F, \vec{r}) g^{(\alpha)}(\omega, \vec{q}_F, \vec{r}) \right] \end{aligned}$$

wobei $\rho(\vec{k}_F) = \frac{1}{(2\pi)^3 N_0 |\bar{v}_F(\vec{k}_F)|}$ die normierte Zustandsdichte des normalleitenden Zustands mit Impuls \vec{k}_F bezeichnet und es gilt $\int_{FS} d^2 k_F \rho(\vec{k}_F) = 1$. Weiterhin gibt $\mathcal{W}(\vec{k}_F, \vec{q}_F)$ die Wahrscheinlichkeit für einen Streuprozess vom Zustand \vec{q}_F in den Zustand \vec{k}_F an. Durch diese Gleichungen ist der Propagator $\hat{g}^{(\alpha)}$ bis auf eine Normierungskonstante festgelegt. Diese erhält man für $\omega > 0$ aus der Bedingung

$$g^{(\alpha)}(\omega, \vec{k}_F, \vec{r}) = \sqrt{1 - f^{(\alpha)}(\omega, \vec{k}_F, \vec{r}) \bar{f}^{(\alpha)}(\omega, \vec{k}_F, \vec{r})}$$

wobei hier in der Wahl des positiven Vorzeichens von $g^{(\alpha)}(\omega, \vec{k}_F, \vec{r})$ für positive Frequenzen ω der Originalarbeit von Eilenberger gefolgt wird. Zur Herleitung der Multiband-Gapgleichung muss nun zuerst die korrekte Formulierung des Druckfunktionals für mehrere Bänder gefunden werden. Dies ist im Anhang A.2 unter Vernachlässigung von Interband-Streuung vorgeführt. Man erhält nun aus der Stationaritätsbedingung des Druckfunktionals durch Variation nach $\Delta^{*(\alpha)}$ und $\vec{A}(\vec{r})$ die folgenden Selbstkonsistenzbedingungen für das Paarpotential:

$$\begin{aligned} \Delta^{(\alpha)}(\vec{r}) &= \sum_{\alpha'} \lambda_{\alpha\alpha'} \left(\frac{1}{\lambda_+} - \ln \frac{T}{T_c} \right) \Delta^{(\alpha')}(\vec{r}) \\ &+ \sum_{\alpha'} \lambda_{\alpha\alpha'} 2\pi T \sum_{0 < \epsilon_n < \infty} \left[\int_{FS_{\alpha'}} d^2 k_F \rho^{(\alpha')}(\vec{k}_F) f^{(\alpha')}(\epsilon_n, \vec{k}_F, \vec{r}) - \frac{1}{\epsilon_n} \Delta^{(\alpha')}(\vec{r}) \right] \end{aligned} \quad (2.1)$$

und den quasiklassischen Strom

$$\vec{j}(\vec{r}) = -2ie \sum_{\alpha} N_0^{(\alpha)} 2\pi T \sum_{0 < \epsilon_n < \infty} \int_{FS_{\alpha}} d^2 k_F \rho^{(\alpha)}(\vec{k}_F) \vec{v}_F^{(\alpha)}(\vec{k}_F) g^{(\alpha)}(\epsilon_n, \vec{k}_F, \vec{r}) \quad (2.2)$$

In beiden Gleichungen wird über alle positiven fermionischen Matsubarafrequenzen summiert, die sich schreiben lassen als $\epsilon_n = (2n + 1)\pi T$. Dabei geht die Kopplung der beiden Bänder über die Kopplungsmatrix $\lambda_{\alpha\alpha'}$ nur in die selbstkonsistente Berechnung des Paarpotentials ein. Für Magnesiumdiborid ist dabei die Interband-Kopplung in den Außerdiagonalelementen von $\lambda_{\alpha\alpha'}$ um etwa einen Faktor 4 kleiner als die größere der beiden Intradband-Kopplungsterme, die in der Diagonalen von $\lambda_{\alpha\alpha'}$ stehen. Die Tatsache, dass die Differentialgleichungen im Falle verschwindender Interband-Streuung für jedes einzelne Band unabhängig voneinander gelöst werden können, vereinfacht das Problem bedeutend.

2.1.2 Die Eilenberger-Gleichungen im sauberen Grenzfall

Ein wichtiger Grenzfall, der im folgenden als sauberer Grenzfall ("clean limit") bezeichnet werden soll, beschreibt einen Supraleiter mit sehr geringer Störstellenstreuung. In diesem Fall ist die Streuwahrscheinlichkeit $\mathcal{W}(\vec{k}_F, \vec{q}_F) \ll 1$ und kann somit gegenüber den anderen Termen in den Eilenberger-Gleichungen vernachlässigt werden. Damit vereinfachen sich die Gleichungen erheblich und man erhält

$$\left[2\omega + \vec{v}_F^{(\alpha)}(\vec{k}_F) \left(\vec{\nabla} - i \frac{2e}{c} \vec{A}(\vec{r}) \right) \right] f^{(\alpha)}(\omega, \vec{k}_F, \vec{r}) = 2\Delta^{(\alpha)}(\vec{r}) g^{(\alpha)}(\omega, \vec{k}_F, \vec{r}) \quad (2.3)$$

und

$$\left[2\omega - \vec{v}_F^{(\alpha)}(\vec{k}_F) \left(\vec{\nabla} + i \frac{2e}{c} \vec{A}(\vec{r}) \right) \right] \bar{f}^{(\alpha)}(\omega, \vec{k}_F, \vec{r}) = 2\Delta^{*(\alpha)}(\vec{r}) g^{(\alpha)}(\omega, \vec{k}_F, \vec{r}) \quad (2.4)$$

zusammen mit der Normierungsbedingung

$$g^{(\alpha)}(\omega, \vec{k}_F, \vec{r}) = \sqrt{1 - f^{(\alpha)}(\omega, \vec{k}_F, \vec{r}) \bar{f}^{(\alpha)}(\omega, \vec{k}_F, \vec{r})} \quad (2.5)$$

Da in den zwei Selbstkonsistenzbedingungen (2.1) und (2.2) die Streuwahrscheinlichkeit nicht auftritt, können diese Gleichungen für den sauberen Grenzfall unverändert übernommen werden. Dieses Gleichungssystem bildet den Ausgangspunkt sowohl für die analytische Näherung, die im nächsten Abschnitt eingeführt werden soll, als auch für die im übernächsten Abschnitt skizzierte Riccati-Parametrisierung, die die Grundlage für eine effiziente numerische Berechnung von g und f liefert. Für den Fall eines Supraleiters mit unkonventioneller Paarungssymmetrie, wie er in Kapitel 5 behandelt wird, darf nicht vergessen werden, dass sowohl das Paarpotential als auch die Wechselwirkungskonstante V eine \vec{k}_F -Abhängigkeit besitzen, was besonders in der Formulierung der Gapgleichung berücksichtigt werden muss.

2.2 Die Näherung nach Pesch für mehrere Energiebänder

Wie in der Einleitung erwähnt, besitzen Typ-II-Supraleiter im Vergleich zu Supraleitern erster Art eine magnetische Mischphase, in der der magnetische Fluss nicht mehr vollständig abgeschirmt wird, sondern in Form von Flussschläuchen, so genannten Vortices, in den Supraleiter eindringen kann. Während nahe des unteren kritischen Felds B_{c1} die einzelnen Vortices als nahezu isolierte Objekte betrachtet werden können, deren magnetischer Fluss in der Größe eines Flussquants auf einer Fläche von der Größenordnung einer Eindringtiefe zum Quadrat λ_L^2 lokalisiert ist und der vom Rest des Supraleiters durch supraleitende Ringströme abgeschirmt ist, muss nahe des oberen kritischen Felds B_{c2} eine genauere Betrachtung des Vortexzustands erfolgen. Hier ordnen sich die Flussschläuche in einer räumlich homogenen supraleitenden Probe ohne nennenswerte Kristalldefekte in einem regelmäßigen Gitter an, wobei bei einer rotationssymmetrischen Fermifläche mit der Symmetrieachse parallel zur Magnetfeldrichtung ein hexagonales Gitter energetisch bevorzugt wird. In der Umgebung des oberen kritischen Felds überlappen die Vortices sehr stark und der Betrag des Paarpotentials erreicht auch zwischen den einzelnen Vortices nicht mehr den Bulk-Wert, während das magnetische Feld nun nahezu räumlich konstant in den Supraleiter eindringt. Abrikosov berechnete 1957 die makroskopische Wellenfunktion für einen Supraleiter im Vortexzustand in der Umgebung des oberen kritischen Felds B_{c2} . Er fand den folgenden Grundzustand als Lösung der linearisierten Ginzburg-Landau-Gleichung, der geschrieben werden kann als (siehe [23, 24, 25])

$$\psi_\Lambda(x, y) = \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_n \exp \left[\frac{\pi (ixy - y^2)}{\omega_1 \text{Im}\omega_2} + i\pi n + \frac{i\pi(2n+1)}{\omega_1} (x + iy) + i\pi \frac{\omega_2}{\omega_1} n(n+1) \right] \quad (2.6)$$

wobei für einen Supraleiter mit konventioneller Paarungssymmetrie gilt

$$\Delta^{(\alpha)}(\vec{r}) = \Delta^{(\alpha)} \psi_\Lambda(x, y)$$

und x, y die Koordinaten in der Ebene senkrecht zum magnetischen Feld beschreiben, während die komplexen Größen ω_1 und ω_2 das Vortextgitter Λ , das durch die Nullstellen des Paarpotentials gekennzeichnet ist, aufspannen. Der Normierungsfaktor \mathcal{N} muss dabei so gewählt werden, dass die Mittelung von $|\psi_\Lambda|^2$ über eine Einheitszelle des Vortextgitters ergibt. Diese Formulierung der Paarwellenfunktion ist streng genommen nur direkt unterhalb von B_{c2} gültig. Geht man zu niedrigeren Magnetfeldern über, müssen neben dem Grundzustand der Paarwellenfunktion noch höher angeregte Zustände mitberücksichtigt werden. In einer einfachen Näherung können jedoch sehr gute Ergebnisse durch eine reine Skalierung der Elementarzelle des Vortextgitters bis zu Magnetfeldern von der Größenordnung von 50% B_{c2} erzielt werden, wie wir in [24] zeigen konnten. Für den Fall eines Multiband-Supraleiters soll im folgenden von einer identischen räumlichen Variation des Paarpotentials für alle Energiebänder ausgegangen werden und für die Berechnung der gemittelten Greenschen Funktion der Herleitung in [25] und [26] gefolgt werden. Setzt man den Grundzustand der Paarwellenfunktion nun in die Eilenberger-Gleichungen aus Abschnitt 2.1.2 ein und nähert die normale Greensche Funktion auf der rechten Seite durch ihren räumlichen Mittelwert, so kann man unter Vernachlässigung der Mittelungsvarianz einen analytischen Ausdruck für die räumlich gemittelte Greensche Funktion finden, der nicht nur eine problemlose Berechnung der Zustandsdichte erlaubt, sondern auch die Bestimmung weiterer grundlegender thermodynamischer Größen für hohe magnetische Felder ermöglicht (siehe [27, 28]). Definiert man den Ableitungsoperator \hat{L} in der Eilenberger-Gleichung (2.3) als

$$\hat{L}^{(\alpha)} = 2\omega + \vec{v}_F^{(\alpha)}(\vec{k}_F) \left(\vec{\nabla} - i \frac{2e}{c} \vec{A}(\vec{r}) \right)$$

so kann man die Gleichung schreiben als

$$\hat{L}^{(\alpha)} f^{(\alpha)}(\omega, \vec{k}_F, \vec{r}) = 2\Delta^{(\alpha)} \psi_\Lambda(\vec{r}) g^{(\alpha)}(\omega, \vec{k}_F, \vec{r})$$

In der Umgebung des oberen kritischen Magnetfelds B_{c2} kann nun die normale Greensche Funktion $g^{(\alpha)}(\omega, \vec{k}_F, \vec{r})$ durch ihren räumlichen Mittelwert über eine Elementarzelle C_Λ des Gitters $g^{(\alpha)}(\omega, \vec{k}_F) = \langle g^{(\alpha)}(\omega, \vec{k}_F, \vec{r}) \rangle_{C_\Lambda}$ ersetzt und somit die anomale Greensche Funktion $f^{(\alpha)}(\omega, \vec{k}_F, \vec{r})$ durch Invertierung des Operators $\hat{L}^{(\alpha)}$ berechnet werden:

$$f^{(\alpha)}(\omega, \vec{k}_F, \vec{r}) = 2\Delta^{(\alpha)} g^{(\alpha)}(\omega, \vec{k}_F) \int_0^{\infty \text{sgn}(\omega)} ds e^{-s\hat{L}^{(\alpha)}} \psi_\Lambda(\vec{r})$$

Wählt man nun das Vektorpotential in der Eichung $\vec{A} = -\frac{1}{2}\vec{r} \times \vec{B}$, so kann unter Einführung von Auf- und Absteigeoperatoren b^\dagger und b , die den Anregungszustand der Paarwellenfunktion erhöhen bzw. erniedrigen (siehe dazu [25]),

$$b^\dagger = \sqrt{\frac{c}{eB}} \left(-\partial_z + \frac{eB}{2c} \bar{z} \right), \quad b = \sqrt{\frac{c}{eB}} \left(\partial_z + \frac{eB}{2c} z \right)$$

und mit den komplexen Koordinaten $z = x + iy$ in der Ebene senkrecht zum Magnetfeld der Ableitungsoperator $\hat{L}^{(\alpha)}$ geschrieben werden als:

$$\hat{L}^{(\alpha)} = 2\omega + \bar{\eta}_k^{(\alpha)} b - \eta_k^{(\alpha)} b^\dagger, \quad \eta_k^{(\alpha)} = \left(v_{F,1}^{(\alpha)} + i v_{F,2}^{(\alpha)} \right) \sqrt{\frac{eB}{c}}$$

Zur Bestimmung des gemittelten Propagators $g^{(\alpha)}(\omega, \vec{k}_F)$ muss nun zunächst das Produkt $f^{(\alpha)}(\omega, \vec{k}_F, \vec{r}) f^{*(\alpha)}(\omega, -\vec{k}_F, \vec{r})$ berechnet werden und man erhält (siehe [24])

$$f^{(\alpha)}(\omega, \vec{k}_F, \vec{r}) f^{*(\alpha)}(\omega, -\vec{k}_F, \vec{r}) = \left[g^{(\alpha)}(\omega, \vec{k}_F) \right]^2 P_\Lambda^{(\alpha)}(\omega, \vec{k}_F, \vec{r})$$

unter Einführung der charakteristischen Funktion $P_\Lambda^{(\alpha)}(\omega, \vec{k}_F, \vec{r})$, die gegeben ist als

$$\begin{aligned} P_\Lambda^{(\alpha)}(\omega, \vec{k}_F, \vec{r}) &= 4 \left| \Delta^{(\alpha)} \right|^2 \int_0^{\infty \text{sgn}(\omega)} ds_+ \int_0^{\infty \text{sgn}(\omega)} ds_- e^{-2\omega(s_+ + s_-)} \\ &\quad \times \left[T(s_- \eta_{-k}^{(\alpha)}) \psi_\Lambda(\vec{r}) \right]^\dagger T(s_+ \eta_k^{(\alpha)}) \psi_\Lambda(\vec{r}) \end{aligned}$$

wobei $T(q) = e^{qb^\dagger - q^*b}$ eine Translation des Vortextgitters um $q \in \mathbb{C}$ beschreibt. Zusammen mit der Normierungsbedingung kann so eine Selbstkonsistenzgleichung zur Bestimmung von $g^{(\alpha)}(\omega, \vec{k}_F)$ in der Form

$$g^{(\alpha)}(\omega, \vec{k}_F) = \left\langle \sqrt{1 - \left[g^{(\alpha)}(\omega, \vec{k}_F) \right]^2 P_\Lambda^{(\alpha)}(\omega, \vec{k}_F, \vec{r})} \right\rangle_{C_\Lambda}$$

hergeleitet werden. Vernachlässigt man in einer weiteren Näherung die Varianz der räumlichen Mittelung, d.h.

$$\left\langle \left[g^{(\alpha)}(\omega, \vec{k}_F, \vec{r}) \right]^2 \right\rangle_{C_\Lambda} \rightarrow \left\langle g^{(\alpha)}(\omega, \vec{k}_F, \vec{r}) \right\rangle_{C_\Lambda}^2$$

so kann man die Selbstkonsistenzbedingung schließlich schreiben als

$$\left[g^{(\alpha)}(\omega, \vec{k}_F) \right]^2 = 1 - \left[g^{(\alpha)}(\omega, \vec{k}_F) \right]^2 \left\langle P_\Lambda^{(\alpha)}(\omega, \vec{k}_F, \vec{r}) \right\rangle_{C_\Lambda}$$

2. Theoretische Grundlagen

und erhält somit einen Ausdruck für die räumlich gemittelte Greensche Funktion $g^{(\alpha)}(\omega, \vec{k}_F)$

$$g^{(\alpha)}(\omega, \vec{k}_F) = \frac{1}{\sqrt{1 + P_\Lambda^{(\alpha)}(\omega, |\eta_k|)}} \quad (2.7)$$

Dabei kann der räumliche Mittelwert der charakteristischen Funktion $P_\Lambda^{(\alpha)}$ berechnet werden als (siehe [24])

$$P_\Lambda^{(\alpha)}(\omega, |\eta_k|) = \left\langle P_\Lambda^{(\alpha)}(\omega, \vec{k}_F, \vec{r}) \right\rangle_{C_\Lambda} = \frac{4 |\Delta^{(\alpha)}|^2}{|\eta_k^{(\alpha)}|^2} \left[1 - \sqrt{\pi} z^{(\alpha)} w \left(iz^{(\alpha)} \right) \right] \quad (2.8)$$

wobei $z^{(\alpha)} = \frac{\sqrt{2}\omega}{|\eta_k^{(\alpha)}|}$ die normierte Frequenz ω und $w(iz)$ die w -Funktion bezeichnet, die auch als Dawsons Integral bekannt ist und folgendermaßen mit der komplementären Fehlerfunktion zusammenhängt:

$$w(iz) = \frac{1}{i\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-t^2}}{t - iz} dt = e^{z^2} \operatorname{erfc}(z)$$

Damit kann nun im Rahmen einer analytischen Näherung die gemittelte Zustandsdichte für einen Typ-II-Supraleiter in hohen magnetischen Feldern berechnet werden. Die Herleitung gilt streng genommen nur für supraleitende Materialien mit einer bezüglich der Richtung des angelegten Magnetfelds rotationsymmetrischen Fermifläche. Für den Fall einer nicht rotationsymmetrischen Fermifläche reagiert das Vortextgitter durch Stauchung oder Streckung auf die unterschiedlichen Komponenten der Fermigeschwindigkeit, wie in Abschnitt 3.2.2 näher beschrieben werden wird (siehe [19]). Neben der gemittelten Quasiteilchen-Zustandsdichte, die sich nach analytischer Fortsetzung als Realteil der normalen Greenschen Funktion $g^{(\alpha)}(\omega, \vec{k}_F)$ ergibt, kann auch die Freie Energie des supraleitenden Zustands (bzw. die Differenz der Freien Energie des supraleitenden und des normalleitenden Zustands) berechnet werden, sowie die Gapgleichung, die den Betrag des Paarpotentials für verschiedene Magnetfelder und Temperaturen festlegt. Für die Freie Energie erhält man den Ausdruck (siehe Anhang von [29])

$$\Omega_S - \Omega_N = - \sum_{\alpha} \left\langle \pi T \sum_{|\epsilon_n| < \omega_c} \frac{|\Delta^{(\alpha)}|^2}{\epsilon_n} \sqrt{\pi} z^{(\alpha)} w \left(iz^{(\alpha)} \right) \operatorname{Re} \left[\frac{P_\Lambda^{(\alpha)}(\epsilon_n, |\eta_k|)}{\sqrt{1 + P_\Lambda^{(\alpha)}(\epsilon_n, |\eta_k|)} \left(1 + \sqrt{1 + P_\Lambda^{(\alpha)}(\epsilon_n, |\eta_k|)} \right)^2} \right] \right\rangle_{FS_\alpha} \quad (2.9)$$

wobei man das Paarpotential $\Delta^{(\alpha)}$ als Lösung der Multiband-Gapgleichung erhält

$$\Delta^{(\alpha)} = \sum_{\alpha'} \lambda_{\alpha\alpha'} \left[\pi T \sum_{|\epsilon_n| < \omega_c} \frac{1}{\epsilon_n} \left(\left\langle g^{(\alpha')}(\epsilon_n, \vec{k}_F) \sqrt{\pi} z^{(\alpha')} w \left(iz^{(\alpha')} \right) \right\rangle_{FS_{\alpha'}} - 1 \right) + \frac{1}{\lambda_+} - \ln \frac{T}{T_c} \right] \Delta^{(\alpha')} \quad (2.10)$$

Dabei gilt in den letzten beiden Gleichungen $\omega = \epsilon_n$ und damit $z^{(\alpha)} = \frac{\sqrt{2}\epsilon_n}{|\eta_k^{(\alpha)}|}$. Sowohl in der Gleichung für die Freie Energie als auch in der Gapgleichung wurde die Summation über die Matsubarafrequenzen durch Subtraktion einer geeigneten Asymptotik in eine schnell konvergente Summe umgewandelt, so dass in beiden Gleichungen der “weak-coupling”-Grenzübergang $\omega_c \rightarrow \infty$ vorgenommen werden kann.

2.3 Die Riccati-Gleichungen

Da die analytische Näherung nach Pesch nur im Vortexzustand für große Magnetfelder korrekte Ergebnisse liefert, müssen für die Betrachtung kleiner Magnetfelder – insbesondere in der Umgebung des unteren kritischen Magnetfelds B_{c1} , in der die Vortices als nahezu isolierte Objekte betrachtet werden können – die Eilenberger-Gleichungen numerisch gelöst werden. Dafür bietet sich die Parametrisierung des quasiklassischen Propagators entlang charakteristischer Linien parallel zur Fermigeschwindigkeit unter Einführung der Riccati-Amplituden a und b als äußerst einfache und stabile Lösungsmöglichkeit an [30, 31]. Mit der Definition der Trajektorien als

$$\vec{r}(x) = \vec{r}_0 + x \hat{v}_F(\vec{k}_F)$$

können die Eilenberger-Gleichungen im sauberen Grenzfall umgeformt werden zu zwei entkoppelten Riccati-Differentialgleichungen für a und b

$$v_F \partial_x a(x) + [2\tilde{\epsilon}_n + \Delta^*(x)a(x)] a(x) - \Delta(x) = 0 \quad (2.11)$$

$$v_F \partial_x b(x) - [2\tilde{\epsilon}_n + \Delta(x)b(x)] b(x) + \Delta^*(x) = 0 \quad (2.12)$$

wobei der quasiklassische Propagator der Eilenberger-Gleichungen in der folgenden Form mit den Amplituden $a(x)$ und $b(x)$

$$\hat{g}(\omega, \vec{k}_F, \vec{r}(x)) = \frac{1}{1 + a(x)b(x)} \begin{pmatrix} 1 - a(x)b(x) & 2a(x) \\ 2b(x) & -1 + a(x)b(x) \end{pmatrix}$$

zusammenhängt. Dabei sind die modifizierten Matsubarafrequenzen $\tilde{\epsilon}_n$ definiert als

$$i\tilde{\epsilon}_n = i\epsilon_n + \frac{e}{c} \vec{v}_F \cdot \vec{A}(\vec{r}(x)) \quad (2.13)$$

Nun können die Differentialgleichungen für $a(x)$ und $b(x)$ entlang der oben definierten Trajektorien ausgehend von den folgenden Anfangswerten im Inneren des Supraleiters

$$a(-\infty) = \frac{\Delta(-\infty)}{\epsilon_n + \sqrt{\epsilon_n^2 + |\Delta(-\infty)|^2}} \quad (2.14)$$

$$b(+\infty) = \frac{\Delta^*(+\infty)}{\epsilon_n + \sqrt{\epsilon_n^2 + |\Delta(+\infty)|^2}} \quad (2.15)$$

bis zum gesuchten Wert $x = 0$ integriert werden. Mit Hilfe dieser Parametrisierung können nicht nur räumlich gemittelte und winkelgemittelte Propagatoren berechnet werden, wie dies innerhalb der analytischen Näherung nach Pesch möglich ist, sondern es können auch lokale oder winkelaufgelöste Informationen für die verschiedenen physikalischen Größen im Supraleiter gesammelt werden. Zudem ist es möglich, für bestimmte interessante Grenzfälle analytische Lösungen für die Amplituden a und b zu finden. Neben den Riccati-Gleichungen für a und b sollen nun auch noch die zwei Selbstkonsistenzgleichungen für $\Delta(\vec{r})$ und $\vec{j}(\vec{r})$ angegeben werden, die aus den Stationaritätsbedingungen für das Druckfunktional folgen:

$$\Delta(\vec{r}) \ln \frac{T}{T_c} = 2\pi T \sum_{0 < \epsilon_n < \infty} \left[\int_{FS} d^2 k_F \rho(\vec{k}_F) \frac{2a(x)}{1 + a(x)b(x)} - \frac{\Delta(\vec{r})}{\epsilon_n} \right]$$

und

$$\vec{j}(\vec{r}) = -2ieN_0 2\pi T \sum_{0 < \epsilon_n < \infty} \int_{FS} d^2 k_F \rho(\vec{k}_F) \vec{v}_F(\vec{k}_F) \frac{1 - a(x)b(x)}{1 + a(x)b(x)}$$

2. Theoretische Grundlagen

Die lokale Zustandsdichte berechnet sich durch analytische Fortsetzung der Matsubarafrequenzen $i\epsilon_n \rightarrow E + i\delta$ als

$$N_s(\vec{r}, E) = N_0 \int_{FS} d^2k_F \rho(\vec{k}_F) \text{Re} \left[\frac{1 - a(x)b(x)}{1 + a(x)b(x)} \right]_{i\epsilon_n \rightarrow E + i\delta}$$

Obwohl die Riccati-Gleichungen hier nur für ein einzelnes Energieband eines konventionellen Supraleiters angegeben wurden, ist es unschwer zu erkennen, dass für den Fall von mehreren unterschiedlichen Energiebändern ohne Interband-Streuung die Riccati-Gleichungen für jedes Band separat gelöst werden können. Eine Kopplung erfolgt wiederum erst über die Selbstkonsistenzbedingung für das Paarpotential in der in Abschnitt 2.1.1 angegebenen Weise. Für einen Supraleiter mit unkonventioneller Paarungssymmetrie muss bei der Berechnung der Riccati-Gleichungen die Symmetriefunktion des Paarpotentials natürlich korrekt mitberücksichtigt werden.

2.4 Der schmutzige Grenzfall: Die Usadel-Gleichungen

Neben dem sauberen Grenzfall der quasiklassischen Theorie, der als Modell für die Beschreibung von Supraleitern mit einer großen mittleren freien Weglänge herangezogen werden muss, kann auch ein anderer Grenzfall numerisch einfach gehandhabt werden: Der so genannte schmutzige Grenzfall. Er beschreibt Supraleiter mit starker Störstellenstreuung, d.h. einer sehr kurzen mittleren freien Weglänge. Im folgenden soll die Herleitung der Usadel-Gleichungen für Multiband-Supraleiter *ohne* Interband-Streuung kurz skizziert werden, wobei die Vorgehensweise analog zur Originalarbeit in [32] und parallel zu [33] erfolgt. Für eine Ableitung der Multiband-Usadel-Gleichungen *mit* Interband-Streuung sei auf die Arbeit von Gurevich [34] verwiesen. Für eine hohe Streurrate kann man annehmen, dass die Funktionen $f^{(\alpha)}(\omega, \vec{k}_F, \vec{r})$ und $g^{(\alpha)}(\omega, \vec{k}_F, \vec{r})$ aufgrund der häufigen Streuprozesse bezüglich \vec{k}_F nahezu isotrop werden. Unter Vernachlässigung von Interband-Streuung können sie gemäß

$$f^{(\alpha)}(\omega, \vec{k}_F, \vec{r}) = f^{(\alpha,0)}(\omega, \vec{r}) + \vec{f}^{(\alpha,1)}(\omega, \vec{r}) \cdot \hat{v}_F^{(\alpha)}(\vec{k}_F)$$

und

$$g^{(\alpha)}(\omega, \vec{k}_F, \vec{r}) = g^{(\alpha,0)}(\omega, \vec{r}) + \vec{g}^{(\alpha,1)}(\omega, \vec{r}) \cdot \hat{v}_F^{(\alpha)}(\vec{k}_F)$$

bis zur ersten Ordnung in der jeweiligen Fermigeschwindigkeit $\hat{v}_F^{(\alpha)}$ entwickelt werden (siehe [32]). Dabei entsprechen $f^{(\alpha,0)}(\omega, \vec{r})$ und $g^{(\alpha,0)}(\omega, \vec{r})$ gerade den normalen und anomalen Komponenten des Usadel-Propagators für das Energieband mit Index α während $\hat{v}_F^{(\alpha)}(\vec{k}_F)$ die Richtung der Fermigeschwindigkeit am Punkt \vec{k}_F der Fermifläche bezeichnet. Dabei ist zu berücksichtigen, dass $\hat{v}_F^{(\alpha)}$ nur auf sphärischen Fermiflächen parallel zu $\vec{k}_F^{(\alpha)}$ ausgerichtet ist, bei jeder anderen Form der Fermifläche ist dies nur für ausgezeichnete Punkte gültig. Die Komponente $\vec{f}^{(\alpha)}(\omega, \vec{k}_F, \vec{r})$ ergibt sich als

$$\vec{f}^{(\alpha)}(\omega, \vec{k}_F, \vec{r}) = f^{*(\alpha)}(\omega, -\vec{k}_F, \vec{r})$$

(siehe [21]) und kann mit $\hat{v}_F^{(\alpha)}(-\vec{k}_F) = -\hat{v}_F^{(\alpha)}(\vec{k}_F)$ geschrieben werden als

$$\vec{f}^{(\alpha)}(\omega, \vec{k}_F, \vec{r}) = f^{*(\alpha,0)}(\omega, \vec{r}) - \vec{f}^{*(\alpha,1)}(\omega, \vec{r}) \cdot \hat{v}_F^{(\alpha)}(\vec{k}_F)$$

Eingesetzt in die Normierungsbedingung der quasiklassischen Gleichungen folgt nun weiter

$$\begin{aligned} & g^{(\alpha)}(\omega, \vec{k}_F, \vec{r}) \\ &= \sqrt{1 - \left(f^{(\alpha,0)}(\omega, \vec{r}) + \vec{f}^{(\alpha,1)}(\omega, \vec{r}) \cdot \hat{v}_F^{(\alpha)} \right) \left(f^{*(\alpha,0)}(\omega, \vec{r}) - \vec{f}^{*(\alpha,1)}(\omega, \vec{r}) \cdot \hat{v}_F^{(\alpha)} \right)} \\ &\approx \sqrt{1 - f^{(\alpha,0)}(\omega, \vec{r}) f^{*(\alpha,0)}(\omega, \vec{r})} - \frac{f^{*(\alpha,0)}(\omega, \vec{r}) \vec{f}^{(\alpha,1)}(\omega, \vec{r}) - f^{(\alpha,0)}(\omega, \vec{r}) \vec{f}^{*(\alpha,1)}(\omega, \vec{r})}{2\sqrt{1 - f^{(\alpha,0)}(\omega, \vec{r}) f^{*(\alpha,0)}(\omega, \vec{r})}} \cdot \hat{v}_F^{(\alpha)} \end{aligned}$$

und damit können die Terme nullter und erster Ordnung von $g^{(\alpha)}(\omega, \vec{k}_F, \vec{r})$ identifiziert werden als

$$g^{(\alpha,0)}(\omega, \vec{r}) = \sqrt{1 - f^{(\alpha,0)}(\omega, \vec{r}) f^{*(\alpha,0)}(\omega, \vec{r})}$$

und

$$\vec{g}^{(\alpha,1)}(\omega, \vec{r}) = \frac{f^{(\alpha,0)}(\omega, \vec{r}) \vec{f}^{*(\alpha,1)}(\omega, \vec{r}) - f^{*(\alpha,0)}(\omega, \vec{r}) \vec{f}^{(\alpha,1)}(\omega, \vec{r})}{2g^{(\alpha,0)}(\omega, \vec{r})}$$

Nun können die Ausdrücke in die Eilenberger-Gleichungen eingesetzt und diese dann über die gesamte Fermifläche integriert werden. Aufgrund der Antisymmetrie von $\hat{v}_F^{(\alpha)}$ bezüglich eines Vorzeichenwechsels von \vec{k}_F mitteln sich alle Terme, in denen $\hat{v}_F^{(\alpha)}$ linear auftaucht, bei dieser Integration weg. Nur Terme nullter Ordnung oder zweiter Ordnung in $\hat{v}_F^{(\alpha)}$ bleiben erhalten. Damit ergibt sich

$$2\omega f^{(\alpha,0)} + \sum_{l,m} \hat{\mathcal{D}}_{lm}^{(\alpha)} v_F^{(\alpha)} \left(\partial_m - i \frac{2e}{c} A_m \right) f_l^{(\alpha,1)} = 2\Delta^{(\alpha)} g^{(\alpha,0)} \quad (2.16)$$

wobei der Diffusionstensor $\hat{\mathcal{D}}_{lm}^{(\alpha)}$ als

$$\hat{\mathcal{D}}_{lm}^{(\alpha)} = \frac{1}{\left(v_F^{(\alpha)} \right)^2} \int_{FS_\alpha} d^2 k_F \rho^{(\alpha)}(\vec{k}_F) v_{F,l}^{(\alpha)}(\vec{k}_F) v_{F,m}^{(\alpha)}(\vec{k}_F)$$

berechnet wird und im Falle einer sphärischen Fermifläche die Form $\frac{1}{3} \delta_{lm}$ annimmt. (Zugunsten einer übersichtlicheren Darstellung soll im folgenden auf die Argumente \vec{r} und ω der Funktionen $f^{(\alpha)}$ und $g^{(\alpha)}$ verzichtet werden). Die Streuterme kürzen sich nach Integration über \vec{q}_F und \vec{k}_F für verschwindende Interband-Streuung vollständig. Eine zweite Beziehung erhält man, wenn man die Eilenberger-Gleichungen mit $\hat{v}_F^{(\alpha)}$ multipliziert und dann erst über die Fermifläche integriert. Hier erhält man aus den zwei Eilenberger-Gleichungen die folgenden Ausdrücke

$$\begin{aligned} & 2\omega \sum_l \hat{\mathcal{D}}_{lm}^{(\alpha)} f_l^{(\alpha,1)} + v_F^{(\alpha)} \sum_l \hat{\mathcal{D}}_{lm}^{(\alpha)} \left(\partial_l - i \frac{2e}{c} A_l \right) f^{(\alpha,0)} \\ &= 2\Delta^{(\alpha)} \sum_l \hat{\mathcal{D}}_{lm}^{(\alpha)} g_l^{(\alpha,1)} + \sum_l \Gamma_{lm}^{(\alpha)} \left\{ g_l^{(\alpha,1)} f^{(\alpha,0)} - f_l^{(\alpha,1)} g^{(\alpha,0)} \right\} \end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned} & -2\omega \sum_l \hat{\mathcal{D}}_{lm}^{(\alpha)} f_l^{*(\alpha,1)} - v_F^{(\alpha)} \sum_l \hat{\mathcal{D}}_{lm}^{(\alpha)} \left(\partial_l + i \frac{2e}{c} A_l \right) f^{*(\alpha,0)} \\ &= 2\Delta^{*(\alpha)} \sum_l \hat{\mathcal{D}}_{lm}^{(\alpha)} g_l^{(\alpha,1)} + \sum_l \Gamma_{lm}^{(\alpha)} \left\{ g_l^{(\alpha,1)} f^{*(\alpha,0)} + f_l^{*(\alpha,1)} g^{(\alpha,0)} \right\} \end{aligned}$$

2. Theoretische Grundlagen

wobei $\Gamma_{lm}^{(\alpha)}$ gegeben ist als

$$\Gamma_{lm}^{(\alpha)} = \frac{1}{\left(v_F^{(\alpha)}\right)^2} \int_{FS_\alpha} d^2 q_F \int_{FS_\alpha} d^2 k_F \rho^{(\alpha)}(\vec{q}_F) \rho^{(\alpha)}(\vec{k}_F) \mathcal{W}(\vec{k}_F, \vec{q}_F) v_{F,l}^{(\alpha)}(\vec{k}_F) v_{F,m}^{(\alpha)}(\vec{k}_F)$$

und im Falle einer einfachen isotropen Streuung $\mathcal{W}(\vec{k}_F, \vec{q}_F) = \mathcal{W}$ geschrieben werden kann als

$$\Gamma_{lm}^{(\alpha)} = \frac{1}{\tau_{tr}^{(\alpha)}} \hat{\mathcal{D}}_{lm}^{(\alpha)}, \quad \frac{1}{\tau_{tr}^{(\alpha)}} = \int_{FS_\alpha} d^2 q_F \rho^{(\alpha)}(\vec{q}_F) \mathcal{W}$$

Nun können im Grenzfall starker Störstellenstreuung, d.h. für $\tau_{tr} \ll \frac{1}{2\pi T_c}$ die folgenden Annahmen gerechtfertigt werden

$$g^{(\alpha,0)} \gg 2\tau_{tr}^{(\alpha)} \omega, \quad f^{(\alpha,0)} \gg 2\tau_{tr}^{(\alpha)} \Delta^{(\alpha)}$$

und somit vereinfachen sich die obigen Gleichungen und man erhält

$$\tau_{tr}^{(\alpha)} v_F^{(\alpha)} \sum_l \hat{\mathcal{D}}_{lm}^{(\alpha)} \left(\partial_l - i \frac{2e}{c} A_l \right) f^{(\alpha,0)} = \sum_l \hat{\mathcal{D}}_{lm}^{(\alpha)} \left\{ g_l^{(\alpha,1)} f^{(\alpha,0)} - f_l^{(\alpha,1)} g^{(\alpha,0)} \right\} \quad (2.17)$$

$$-\tau_{tr}^{(\alpha)} v_F^{(\alpha)} \sum_l \hat{\mathcal{D}}_{lm}^{(\alpha)} \left(\partial_l + i \frac{2e}{c} A_l \right) f^{*(\alpha,0)} = \sum_l \hat{\mathcal{D}}_{lm}^{(\alpha)} \left\{ g_l^{(\alpha,1)} f^{*(\alpha,0)} + f_l^{*(\alpha,1)} g^{(\alpha,0)} \right\} \quad (2.18)$$

Multiplikation der ersten Gleichung mit $f^{*(\alpha,0)}$ und der zweiten Gleichung mit $f^{(\alpha,0)}$ und Addition der resultierenden Ausdrücke führt auf

$$\begin{aligned} & \tau_{tr}^{(\alpha)} v_F^{(\alpha)} \sum_l \hat{\mathcal{D}}_{lm}^{(\alpha)} \left\{ f^{*(\alpha,0)} \left(\partial_l - i \frac{2e}{c} A_l \right) f^{(\alpha,0)} - f^{(\alpha,0)} \left(\partial_l + i \frac{2e}{c} A_l \right) f^{*(\alpha,0)} \right\} \\ &= \sum_l \hat{\mathcal{D}}_{lm}^{(\alpha)} \left\{ 2g_l^{(\alpha,1)} f^{(\alpha,0)} f^{*(\alpha,0)} - f_l^{(\alpha,1)} f^{*(\alpha,0)} g^{(\alpha,0)} + f_l^{*(\alpha,1)} g^{(\alpha,0)} f^{(\alpha,0)} \right\} \end{aligned}$$

und zusammen mit der Definition von $\vec{g}^{(\alpha,1)}$ ergibt sich

$$\begin{aligned} & \tau_{tr}^{(\alpha)} v_F^{(\alpha)} \sum_l \hat{\mathcal{D}}_{lm}^{(\alpha)} \left\{ f^{*(\alpha,0)} \left(\partial_l - i \frac{2e}{c} A_l \right) f^{(\alpha,0)} - f^{(\alpha,0)} \left(\partial_l + i \frac{2e}{c} A_l \right) f^{*(\alpha,0)} \right\} \\ &= \sum_l \hat{\mathcal{D}}_{lm}^{(\alpha)} \left\{ 2g_l^{(\alpha,1)} f^{(\alpha,0)} f^{*(\alpha,0)} + 2 \left(g^{(\alpha,0)} \right)^2 g_l^{(\alpha,1)} \right\} \end{aligned}$$

Mit Hilfe der Normierungsbedingung können noch die zwei Terme auf der rechten Seite der Gleichung zusammengefasst werden und man erhält

$$\tau_{tr}^{(\alpha)} v_F^{(\alpha)} \sum_l \hat{\mathcal{D}}_{lm}^{(\alpha)} \left\{ f^{*(\alpha,0)} \left(\partial_l - i \frac{2e}{c} A_l \right) f^{(\alpha,0)} - f^{(\alpha,0)} \left(\partial_l + i \frac{2e}{c} A_l \right) f^{*(\alpha,0)} \right\} = \sum_l \hat{\mathcal{D}}_{lm}^{(\alpha)} 2g_l^{(\alpha,1)}$$

Unter Verwendung dieses Ergebnisses kann schließlich der Term $\sum_l \hat{\mathcal{D}}_{lm}^{(\alpha)} g_l^{(\alpha,1)}$ aus Gleichung (2.17) entfernt und die resultierende Beziehung nach $f_l^{(\alpha,1)}$ aufgelöst werden:

$$\begin{aligned}
 & \sum_l \hat{\mathcal{D}}_{lm}^{(\alpha)} f_l^{(\alpha,1)} \\
 = & \sum_l \hat{\mathcal{D}}_{lm}^{(\alpha)} \frac{\tau_{tr}^{(\alpha)} v_F^{(\alpha)}}{2g^{(\alpha,0)}} \left\{ \begin{array}{l} |f^{(\alpha,0)}|^2 (\partial_l - i\frac{2e}{c} A_l) f^{(\alpha,0)} - (f^{(\alpha,0)})^2 (\partial_l + i\frac{2e}{c} A_l) f^{*(\alpha,0)} \\ - 2 (\partial_l - i\frac{2e}{c} A_l) f^{(\alpha,0)} \end{array} \right\} \\
 = & \sum_l \hat{\mathcal{D}}_{lm}^{(\alpha)} \frac{\tau_{tr}^{(\alpha)} v_F^{(\alpha)}}{2g^{(\alpha,0)}} \left\{ \begin{array}{l} - |f^{(\alpha,0)}|^2 \partial_l f^{(\alpha,0)} - (f^{(\alpha,0)})^2 \partial_l f^{*(\alpha,0)} \\ - 2 (g^{(\alpha,0)})^2 (\partial_l - i\frac{2e}{c} A_l) f^{(\alpha,0)} \end{array} \right\} \\
 = & \sum_l \hat{\mathcal{D}}_{lm}^{(\alpha)} \frac{\tau_{tr}^{(\alpha)} v_F^{(\alpha)}}{2} \left\{ -\frac{f^{(\alpha,0)}}{g^{(\alpha,0)}} \partial_l |f^{(\alpha,0)}|^2 - 2g^{(\alpha,0)} \left(\partial_l - i\frac{2e}{c} A_l \right) f^{(\alpha,0)} \right\} \\
 = & \sum_l \hat{\mathcal{D}}_{lm}^{(\alpha)} \tau_{tr}^{(\alpha)} v_F^{(\alpha)} \left\{ f^{(\alpha,0)} \partial_l g^{(\alpha,0)} - g^{(\alpha,0)} \left(\partial_l - i\frac{2e}{c} A_l \right) f^{(\alpha,0)} \right\}
 \end{aligned}$$

wobei in der dritten Zeile zum letzten Summanden die Normierungsbedingung $(g^{(\alpha,0)})^2 + |f^{(\alpha,0)}|^2 = 1$ hinzu multipliziert wurde. Die vierte Zeile eingesetzt in Gleichung (2.16) ergibt eine Diffusionsgleichung für $f^{(\alpha,0)}$, wobei $g^{(\alpha,0)}$ selbstkonsistent aus der Normierungsbedingung berechnet werden muss. Dieser Ausdruck entspricht gerade dem Ergebnis von Usadel, verallgemeinert für eine beliebige Fermifläche. In der letzten Zeile wurde der Ausdruck noch einmal mit Hilfe der Normierungsbedingung weiter vereinfacht und man erhält eingesetzt in Gleichung (2.16) und unter Verwendung der Symmetrie des Diffusionstensors $\hat{\mathcal{D}}_{lm}^{(\alpha)} = \hat{\mathcal{D}}_{ml}^{(\alpha)}$ die folgende Differentialgleichung zur Bestimmung von $f^{(\alpha,0)}$ und $g^{(\alpha,0)}$:

$$2\omega f^{(\alpha,0)} + \sum_{l,m} D_{lm}^{(\alpha)} \left\{ \begin{array}{l} f^{(\alpha,0)} \partial_l \partial_m g^{(\alpha,0)} \\ -g^{(\alpha,0)} (\partial_l - i\frac{2e}{c} A_l) (\partial_m - i\frac{2e}{c} A_m) f^{(\alpha,0)} \end{array} \right\} = 2\Delta^{(\alpha)} g^{(\alpha,0)}$$

wobei der Transportkoeffizient $\tau_{tr}^{(\alpha)}$, das Quadrat der Fermigeschwindigkeit $(v_F^{(\alpha)})^2$ und der Diffusionstensor $\hat{\mathcal{D}}_{lm}^{(\alpha)}$ zu einem effektiven Diffusionstensor $D_{lm}^{(\alpha)} = \tau_{tr}^{(\alpha)} (v_F^{(\alpha)})^2 \hat{\mathcal{D}}_{lm}^{(\alpha)}$ zusammengefasst wurden. Diese Gleichung soll im folgenden zusammen mit der Normierungsbedingung als Grundlage für die numerischen Berechnung von $g^{(\alpha,0)}$ und $f^{(\alpha,0)}$ im schmutzigen Grenzfall, d.h. im Limes hoher Störstellenstreuung, dienen. Auch kann aus dieser Gleichung – zusammen mit der Gapgleichung – das obere kritische Magnetfeld im Vortexzustand berechnet werden.

Kapitel 3

Der Vortexzustand im Grenzfall hoher Magnetfelder

Betrachtet man einen Supraleiter knapp unterhalb des oberen kritischen Magnetfelds, so beschreibt die Vortextgitter-Lösung von Abrikosov aus Gleichung (2.6) in guter Näherung die Paarwellenfunktion der supraleitenden Ladungsträger (siehe Abbildung 3.1). Dabei ist sowohl eine Anordnung in einem hexagonalen als auch in einem quadratischen Gitter denkbar, die sich energetisch in erster Ordnung Störungstheorie nicht unterscheiden. Erst bei Berücksichtigung höherer Ordnungen kann bei einer isotropen Fermifläche eine leichte energetische Bevorzugung des hexagonalen Vortextgitter-Zustands gegenüber dem quadratischen berechnet werden. Dieser Ansatz für die räumliche Variation der Paarwellenfunktion ist jedoch nur eine Lösung der linearisierten Ginzburg-Landau-Gleichungen bei B_{c2} und daher streng genommen nur in der Umgebung der kritischen Temperatur und für hohe Magnetfelder gültig. Jedoch kann durch eine Skalierung des Vortextgitters der Gültigkeitsbereich auch auf niedrigere Magnetfelder erweitert werden, wobei der Skalierungsfaktor aus der Flussquantisierungsbedingung berechnet werden kann. Erst für kleine Magnetfelder in der Umgebung des unteren kritischen Felds B_{c1} gewinnt neben der reinen Skalierung des Vortextgitters auch die räumliche Trennung der einzelnen Vortices an Bedeutung, hier ist die Betrachtung des Einzelsvortex eine bessere Alternative. Während die Quasiteilchen-Zustandsdichte im Inneren einer räumlich homogenen supraleitenden Probe mit konventioneller Paarungssymmetrie unabhängig von der jeweiligen Form der Fermifläche ist, kann sich durch eine Brechung der Translationsinvarianz, beispielsweise in einem Vortextgitter, die Form der Fermifläche sehr wohl in der Zustandsdichte widerspiegeln. Im folgenden Abschnitt sollen verschiedene für die Praxis relevante Fermiflächengeometrien diskutiert werden, insbesondere soll darauf eingegangen werden, wie die Fermigeschwindigkeit für die unterschiedlichen Geometrien parametrisiert werden kann. Im zweiten Abschnitt werden unter Einführung einer charakteristischen Funktion die Zustandsdichten für die verschiedenen Fermiflächengeometrien innerhalb der in Abschnitt 2.2 eingeführten Näherung untersucht und verglichen. Im dritten Abschnitt werden die Untersuchungen auf zwei Bänder erweitert und für den speziellen Fall von Magnesiumdiborid mit seinen zwei unabhängigen Fermiflächenstrukturen angewendet. Schließlich soll im letzten Abschnitt die Berechnung des oberen kritischen Magnetfelds erfolgen und hier die Resultate im sauberen und schmutzigen Grenzfall verglichen werden. Ein Teil der in diesem Kapitel vorgestellten Ergebnisse sind in [29] veröffentlicht worden.

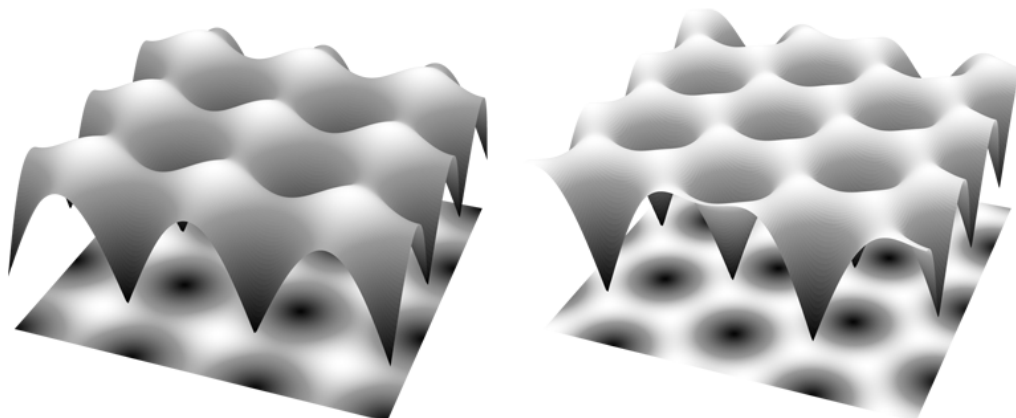


Abbildung 3.1: Zwei mögliche Ansätze zur Beschreibung des Abrikosov-Vortextgitters für hohe Magnetfelder: Links der Betrag der Paarwellenfunktion für ein quadratisches Vortextgitter, rechts für eine hexagonale Anordnung der Vortices.

3.1 Die Modellierung der Fermiflächen

Eine der charakteristischen Eigenschaften eines Supraleiters, bzw. eines Leiters im Allgemeinen, ist die Struktur seiner Fermifläche. In vielen theoretischen Arbeiten wird diese als kugelförmig angenommen, eine Approximation, die jedoch nur für wenige Metalle eine zutreffende Beschreibung darstellt. In den meisten Fällen besitzt die Fermifläche eine kompliziertere Struktur, die beispielsweise mit Hilfe von de Haas-van Alphen-Experimenten oder winkelaufgelöster Photoemissions-Spektroskopie (ARPES) ausgemessen werden kann. Im folgenden sollen neben kugelförmigen und elliptischen Fermiflächen, wie sie in Modellen mit einer anisotropen effektiven Masse verwendet werden, sowie den für die Praxis überaus wichtigen zylindrischen Fermiflächen, wie sie beispielsweise in den Kupraten mit ihrer ausgeprägt zweidimensionalen Supraleitung in den Kupferoxidebenen vorliegen, auch eine für die π -Bänder von Magnesiumdiborid modellierte halbtorusförmige Fermifläche betrachtet werden. Zusätzlich sollen Fermiflächen mit einem deutlichen “nesting” in zwei und drei Dimensionen diskutiert werden, wie man sie beispielsweise in NbSe_2 , Sr_2RuO_4 oder in BSCCO findet [35, 36, 37]. Dabei versteht man unter “nesting” das Vorhandensein größerer paralleler Bereiche der Fermifläche. Zur Illustration sind die verschiedenen Fermiflächengeometrien in Abbildung 3.2 zusammengestellt.

Zur Berechnung der gemittelten Quasiteilchen-Zustandsdichten ist die in Abschnitt 2.2 eingeführte Funktion

$$\eta_k = (v_{F,1} + iv_{F,2}) \sqrt{\frac{eB}{c}}$$

von entscheidender Bedeutung. Sie enthält einerseits die Information über die Stärke des angelegten magnetischen Felds und andererseits geht in sie die Struktur der Fermifläche über die zwei Komponenten $v_{F,1}$ und $v_{F,2}$ der Fermigeschwindigkeit senkrecht zur Richtung des angelegten magnetischen Felds ein. Dabei kann verwendet werden, dass die Fermigeschwindigkeit immer in Richtung der Flächennormalen der jeweiligen Fermifläche zeigt. Sowohl bei der kugelförmigen als auch bei der zylindrischen und der halbtorusförmigen Fermifläche kann von einem konstanten Betrag der Fermigeschwindigkeit ausgegangen werden, wohingegen bei Modellen mit einer anisotropen effektiven Masse der Quasiteilchen der Betrag der

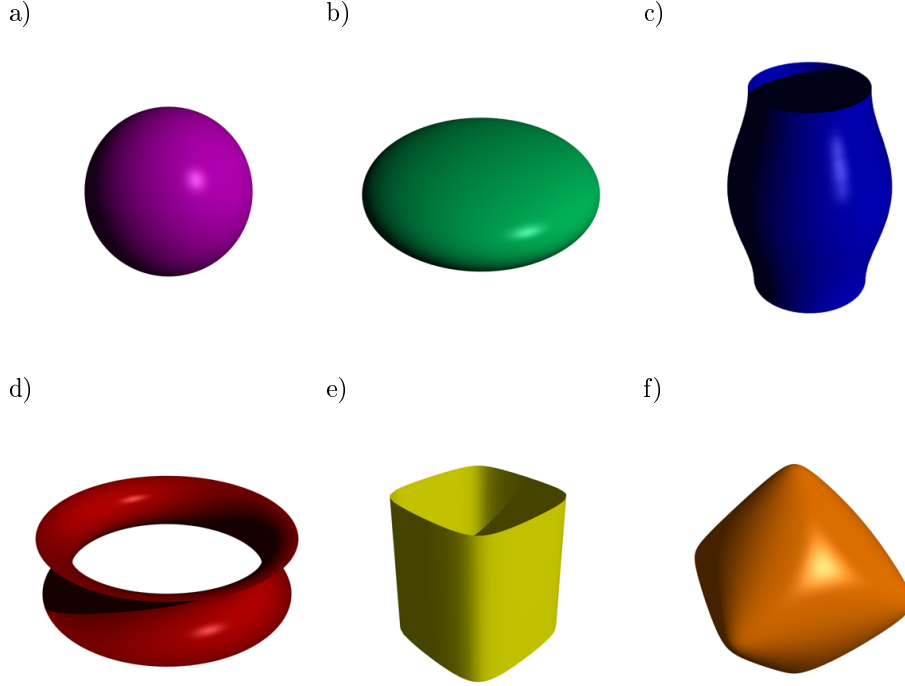


Abbildung 3.2: Die unterschiedlichen in diesem Abschnitt diskutierten Fermiflächengeometrien: **a)** Eine kugelförmige Fermifläche, **b)** eine elliptische Fermifläche, **c)** eine zylindrische Fermifläche mit schwacher c -Achsen-Dispersion, **d)** eine halbtorusförmige Fermifläche, **e)** eine in c -Achsen-Richtung isotrope Fermifläche mit ausgeprägtem “nesting” in der a - b -Ebene und **f)** eine Fermifläche, die in allen drei Dimensionen ein deutliches “nesting” aufweist.

Fermigeschwindigkeit auf der Fermifläche variiert. Ebenso führen einfache Hopping-Modelle, die Fermiflächen mit mehr oder weniger ausgeprägtem “nesting” ergeben, auf Fermigeschwindigkeiten, die im Betrag stark variieren können. Für eine einfache kugelförmige Fermifläche lässt sich eine Parametrisierung des Fermivektors leicht angeben:

$$\vec{k}_F = k_F \cos \vartheta \cos \varphi \vec{e}_x + k_F \cos \vartheta \sin \varphi \vec{e}_y + k_F \sin \vartheta \vec{e}_z$$

Für einen Kristall mit unterschiedlichen effektiven Massen m_c in c -Achsen-Richtung und m_{ab} innerhalb der a - b -Ebene erhält man eine veränderte Dispersionsrelation

$$\epsilon_k = \frac{1}{2m_{ab}} (k_a^2 + k_b^2) + \frac{1}{2m_c} k_c^2 - \epsilon_F$$

die in einer elliptisch verformten Fermifläche resultiert, wobei der Fermivektor angegeben werden kann als

$$\vec{k}_F = k_F \cos \vartheta \cos \varphi \vec{e}_x + k_F \cos \vartheta \sin \varphi \vec{e}_y + k_F \sqrt{\frac{m_c}{m_{ab}}} \sin \vartheta \vec{e}_z$$

Für eine Fermifläche in Form eines leicht deformierten Zylinders, die eine gute Beschreibung für geschichtete Systeme liefert, erhält man mit dem Dispersionsparameter $\epsilon_c \ll 1$ die folgende Parametrisierung des Fermivektors:

$$\vec{k}_F = \left(k_{ab} + \frac{\epsilon_c}{c} \cos(ck_c) \right) \cos \varphi \vec{e}_x + \left(k_{ab} + \frac{\epsilon_c}{c} \cos(ck_c) \right) \sin \varphi \vec{e}_y + k_c \vec{e}_z$$

3. Der Vortezzustand im Grenzfall hoher Magnetfelder

Für die π -Bänder von Magnesiumdiborid kann das röhrenförmige Netzwerk der Fermifläche durch einen entlang einer hexagonalen Grundzelle aufgeschnittenen Torus approximiert werden, der im folgenden als "Halbtorus" betrachtet werden soll (siehe dazu [19]). Bezeichnet man nun den longitudinalen Radius des Torus mit k_L und den meridialen Radius mit k_M , so kann der Fermivektor geschrieben werden als

$$\begin{aligned}\vec{k}_F &= (k_L + k_M \cos \vartheta) \cos \varphi \vec{e}_x + (k_L + k_M \cos \vartheta) \sin \varphi \vec{e}_y + k_M \sin \vartheta \vec{e}_z \\ &= k_M (\nu + \cos \vartheta) \cos \varphi \vec{e}_x + k_M (\nu + \cos \vartheta) \sin \varphi \vec{e}_y + k_M \sin \vartheta \vec{e}_z\end{aligned}$$

wobei $\nu = \frac{k_L}{k_M} > 1$ das Verhältnis der beiden Radien bezeichnet. Schließlich sollen noch Fermiflächen betrachtet werden, wie man sie aus einem einfachen zwei- bzw. dreidimensionalen "tight binding"-Modell mit "nearest-neighbor hopping" erhält und die ein mehr oder weniger starkes "nesting" der Fermiflächen aufweisen. Darunter versteht man eine parallele Ausrichtung verschiedener Teile der Fermifläche, die kollektive Phänomene wie beispielsweise Ladungsdichtewellen ermöglicht, da hier ein und derselbe Wellenzahlvektor \vec{q} große Bereiche der Fermiflächen verbindet. Zweidimensionale Modelle dieser Art liefern eine gute Beschreibung der elektronischen Struktur geschichteter Materialien wie beispielsweise der Kuprate oder Ruthenate. Man erhält für ein isotropes zweidimensionales Modell unter Vernachlässigung der gemischten $\cos(k_x a) \cos(k_y a)$ -Terme eine Dispersionsrelation der Art

$$\epsilon_k = 2t (\cos k_x a + \cos k_y a) - \epsilon_F$$

wobei der Hopping-Parameter mit t bezeichnet wird. Auch wenn hier eine einfache Parametrisierung des Fermivektors nicht möglich ist, kann eine implizite Gleichung zur Beschreibung der Fermifläche angegeben werden, wobei ein einzelner Parameter $A = \frac{\epsilon_F}{4t} < 1$ zur Beschreibung der Fermifläche genügt:

$$\cos k_x a + \cos k_y a = 2A$$

Für $A = 0$ erhält man mit $\cos k_x a = -\cos k_y a$, d.h. beispielsweise $k_x = \pi - k_y$, ein maximales "nesting" der Fermifläche, die sich in zwei gegenüberliegende, zueinander parallele Teilstücke aufspaltet. Für $1 - A \ll 1$ können die beiden Funktionen $\cos k_x a$ und $\cos k_y a$ in der Umgebung ihrer Maximalwerte entwickelt werden und man erhält mit $1 - \frac{1}{2}(k_x a)^2 + 1 - \frac{1}{2}(k_y a)^2 = 2A$ und daraus $(k_x a)^2 + (k_y a)^2 = 4(1 - A)$ wieder eine zylindrische Fermifläche (siehe Abbildung 3.3). Für ein dreidimensionales "tight binding"-Modell schreibt sich die Dispersionsrelation als

$$\epsilon_k = 2t (\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a) - \epsilon_F$$

und man erhält eine entsprechend dreidimensionale Fermifläche aus der impliziten Gleichung

$$\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a = 3A$$

wobei hier gilt $A = \frac{\epsilon_F}{6t} < 1$. Für $A = \frac{1}{3}$ nimmt die Fermifläche mit maximalem "nesting" die Form eines Oktaeders an, für $1 - A \ll 1$ wird sie isotrop (siehe Abbildung 3.3).

Um die Funktion η_k zu bestimmen, muss im folgenden zuerst der Vektor der Fermigeschwindigkeit berechnet werden. Für eine isotrope Fermifläche ist er parallel zum Fermivektor \vec{k}_F und kann geschrieben werden als

$$\vec{v}_F = v_F \hat{k}_F = v_F (\cos \vartheta \cos \varphi \vec{e}_x + \cos \vartheta \sin \varphi \vec{e}_y + \sin \vartheta \vec{e}_z)$$

Für ein Modell mit einer anisotropen effektiven Masse und einer elliptischen Fermifläche kann die Fermigeschwindigkeit direkt aus der Dispersionsrelation berechnet werden

$$\vec{v}_F = \vec{\nabla}_k \epsilon_k = \left(\frac{k_x}{m_{ab}} \vec{e}_x + \frac{k_y}{m_{ab}} \vec{e}_y + \frac{k_z}{m_c} \vec{e}_z \right) = v_{F,ab} (\cos \vartheta \cos \varphi \vec{e}_x + \cos \vartheta \sin \varphi \vec{e}_y) + v_{F,c} \sin \vartheta \vec{e}_z$$

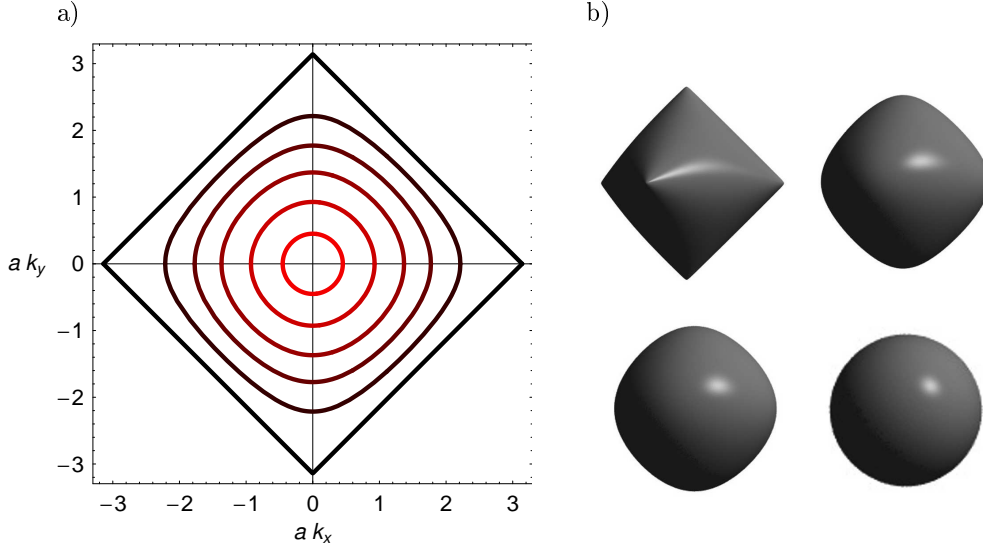


Abbildung 3.3: **a)** Skizze zum “nesting” der Fermiflächen in zwei Dimensionen für $A = 0.95$ (rot), $A = 0,8$, $A = 0,6$, $A = 0,4$, $A = 0,2$ und $A = 0$ (schwarz). Der rot gezeichnete Fermiflächenschnitt für $A = 0,95$ ist nahezu kreisförmig, der schwarz gezeichnete Fermiflächenschnitt für $A = 0$ besitzt eine Rautenform mit maximalem “nesting”. **b)** Skizzierte Fermiflächen mit einem dreidimensionalen “nesting” für $A = \frac{1}{3}$ (links oben), $A = \frac{1}{2}$ (rechts oben), $A = \frac{2}{3}$ (links unten) und $A = \frac{14}{15}$ (rechts unten).

wobei gelten soll $v_{F,ab} = \frac{k_F}{m_{ab}}$ und $v_{F,c} = \frac{k_F}{\sqrt{m_{ab}m_c}}$. Für die Fermifläche in Form eines deformierten Zylinders mit konstantem Betrag der Fermigeschwindigkeit kann \vec{v}_F geschrieben werden als $\vec{v}_F = v_F \hat{n}$, wobei der Normalenvektor \hat{n} , der senkrecht auf der Fermifläche steht, berechnet werden kann als Vektorprodukt der Tangentialvektoren \vec{t}_φ und \vec{t}_{k_c} an die Koordinatenlinien von φ und k_c :

$$\begin{aligned}
 \hat{n} &= \frac{\vec{t}_\varphi \times \vec{t}_{k_c}}{|\vec{t}_\varphi \times \vec{t}_{k_c}|} = \frac{\partial_\varphi \vec{k}_F \times \partial_{k_c} \vec{k}_F}{|\partial_\varphi \vec{k}_F \times \partial_{k_c} \vec{k}_F|} \\
 &= \frac{1}{|\partial_\varphi \vec{k}_F \times \partial_{k_c} \vec{k}_F|} \left(\begin{array}{l} \left(-\left(k_{ab} + \frac{\epsilon_c}{c} \cos(ck_c)\right) \sin \varphi \vec{e}_x + \left(k_{ab} + \frac{\epsilon_c}{c} \cos(ck_c)\right) \cos \varphi \vec{e}_y \right) \\ \times \left(-\epsilon_c \sin(ck_c) \cos \varphi \vec{e}_x - \epsilon_c \sin(ck_c) \sin \varphi \vec{e}_y + \vec{e}_z \right) \end{array} \right) \\
 &= \frac{1}{|1 + \epsilon_c^2 \sin^2(ck_c)|} (\cos \varphi \vec{e}_x + \sin \varphi \vec{e}_y + \epsilon_c \sin(ck_c) \vec{e}_z) \\
 &\approx (\cos \varphi \vec{e}_x + \sin \varphi \vec{e}_y + \epsilon_c \sin(ck_c) \vec{e}_z)
 \end{aligned}$$

Dabei wurde im letzten Schritt eine schwache c -Achsen Dispersion $\epsilon_c^2 \ll 1$ vorausgesetzt. Nun kann die Fermigeschwindigkeit angegeben werden als

$$\vec{v}_F = v_F (\cos \varphi \vec{e}_x + \sin \varphi \vec{e}_y + \epsilon_c \sin(ck_c) \vec{e}_z)$$

Für die halbtorusförmige Fermifläche, wie sie für die π -Bänder von Magnesiumdiborid relevant ist, berechnet sich die Fermigeschwindigkeit analog. Hier ergibt sich für den Normalen-

3. Der Vortexzustand im Grenzfall hoher Magnetfelder

vektor

$$\begin{aligned}\hat{n} &= \frac{1}{|\vec{t}_\varphi \times \vec{t}_\vartheta|} \left(\begin{array}{l} (-\nu + \cos \vartheta) \sin \varphi \vec{e}_x + (\nu + \cos \vartheta) \cos \varphi \vec{e}_y \\ \times (-\sin \vartheta \cos \varphi \vec{e}_x - \sin \vartheta \sin \varphi \vec{e}_y + \cos \vartheta \vec{e}_z) \end{array} \right) \\ &= \cos \varphi \cos \vartheta \vec{e}_x + \sin \varphi \cos \vartheta \vec{e}_y + \sin \vartheta \vec{e}_z\end{aligned}$$

und damit kann die Fermigeschwindigkeit berechnet werden als

$$\vec{v}_F = v_F (\cos \varphi \cos \vartheta \vec{e}_x + \sin \varphi \cos \vartheta \vec{e}_y + \sin \vartheta \vec{e}_z)$$

Schließlich sollen noch die Fermiflächen mit starkem "nesting" betrachtet werden. Hier erhält man wiederum direkt aus der Dispersionsrelation den folgenden Ausdruck für ein zweidimensionales

$$\vec{v}_F = \vec{\nabla}_k \epsilon_k = -2ta (\sin(k_x a) \vec{e}_x + \sin(k_y a) \vec{e}_y)$$

bzw. für ein dreidimensionales "nesting"

$$\vec{v}_F = \vec{\nabla}_k \epsilon_k = -2ta (\sin(k_x a) \vec{e}_x + \sin(k_y a) \vec{e}_y + \sin(k_z a) \vec{e}_z)$$

Dabei ist zu beachten, dass in diesem Fall durch die Annahme einer realen Bandstruktur der Betrag der Fermigeschwindigkeit auf der Fermifläche nicht konstant ist. Bei maximalem "nesting" mit $A = 0$ (in 2 Dimensionen) variiert der Betrag der Fermigeschwindigkeit beispielsweise von Null an den "Ecken" der Fermifläche bis zu einem Maximalwert von $2\sqrt{2}ta$ zwischen den Ecken.

Ist die Fermigeschwindigkeit bekannt, so kann die Funktion $|\eta_k|$ als Projektion der Fermigeschwindigkeit in die komplexe Ebene senkrecht zum angelegten magnetischen Feld berechnet werden. Dabei sind insbesondere zwei Sonderfälle von Interesse: Einerseits der Fall, bei dem das Magnetfeld parallel zur Hauptsymmetrieachse (c -Achse) des Kristalls angelegt wird, und andererseits der Fall, bei dem das Magnetfeld senkrecht zu dieser Achse angelegt wird (a - b -Ebene). Da im folgenden über die Fermifläche gemittelte thermodynamische Größen berechnet werden sollen, müssen nun die Fermiflächenmittelungen, die mit $\langle \dots \rangle_{FS}$ abgekürzt werden, für die unterschiedlichen Fermiflächengeometrien näher betrachtet werden. Dabei müssen beim Übergang von der Integration über die reziproken Gittervektoren $\frac{d^2 k}{(2\pi)^3}$ auf die Parameter φ und ϑ bzw. k_c die zugehörigen Oberflächenelemente korrekt mitberücksichtigt werden, und man erhält beispielsweise bei der Transformation auf eine Integration über ϑ und φ das Mittelungsintegral

$$\langle \dots \rangle_{FS} = \frac{1}{N_0} \int_{FS} \frac{d^2 k}{(2\pi)^3} \frac{1}{|\vec{v}_F|} \dots = \frac{1}{\mathcal{N}} \int d\varphi \int d\vartheta \frac{1}{|\vec{v}_F|} |\vec{t}_\varphi \times \vec{t}_\vartheta| \dots$$

mit der Normierungskonstanten $\mathcal{N} = \int d\varphi \int d\vartheta \frac{1}{|\vec{v}_F|} |\vec{t}_\varphi \times \vec{t}_\vartheta|$. Die Oberflächenelemente und die Normierungskonstanten müssen für jede Fermiflächengeometrie gesondert berechnet werden. Für die völlig isotrope und ebenso für die elliptische Fermifläche erhält man den Fermiflächenmittelwert als

$$\langle \dots \rangle_{FS} = \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_{-\pi/2}^{\pi/2} d\vartheta \cos \vartheta \dots$$

Für die elliptische Fermifläche kürzen sich dabei gerade die beiden Terme, die in $|\vec{t}_\varphi \times \vec{t}_\vartheta|$ und in $|\vec{v}_F|$ die Anisotropie beinhalten. Für die Fermifläche in Form eines leicht deformierten Zylinders kann der Fermiflächenmittelwert für $\epsilon_c^2 \ll 1$ berechnet werden als

$$\langle \dots \rangle_{FS} = \frac{c}{4\pi^2} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_{-\pi/c}^{\pi/c} dk_c \dots$$

Für die Fermifläche in Form eines Halbtorus kann die Fermiflächenmittelung mit Hilfe des folgenden Integrals berechnet werden

$$\langle \dots \rangle_{FS} = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_{\pi/2}^{3\pi/2} d\vartheta \frac{\nu + \cos \vartheta}{\pi\nu - 2} \dots$$

Man erkennt sofort, dass die Integration über eine kugelförmige Fermifläche in diesem Ausdruck für $\nu = 0$ schon enthalten ist. Schließlich soll noch die Fermiflächenmittelung für eine Fermifläche mit “nesting” angegeben werden. Da es hier schwierig ist, eine einfache Parametrisierung der Fermivektoren anzugeben, kann die Integration über die Fermifläche wie folgt geschrieben werden

$$\langle \dots \rangle_{FS} = \frac{1}{\mathcal{N}} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{1}{|\vec{v}_F|} \delta(\epsilon_k) \dots$$

wobei das Integral über eine Elementarzelle des reziproken Gitters ausgeführt werden soll und eine geeignete Normierungskonstante \mathcal{N} berechnet werden muss, die auch die korrekte Normierung der Diracschen Deltafunktion beinhaltet. Im folgenden Abschnitt soll nun gezeigt werden, wie für die oben angesprochenen Fermiflächengeometrien die über die Fermifläche gemittelte Zustandsdichte im Rahmen der Pesch-Näherung berechnet werden kann.

3.2 Die räumlich gemittelte Zustandsdichte für verschiedene Fermiflächengeometrien

Wie schon erwähnt benötigt man zur Berechnung der räumlich gemittelten Zustandsdichte im Rahmen der Pesch-Methode allein den Betrag der Funktion η_k , d.h. den Betrag der in die Ebene senkrecht zur Magnetfeldrichtung projizierten Fermigeschwindigkeit. Dafür sollen in den folgenden Abschnitten die zwei wichtigsten Fälle beschrieben werden: Im ersten Fall ist die Magnetfeldrichtung parallel zur Hauptsymmetrieachse des Kristalls (c -Achsen-Richtung), im zweiten Fall liegt das Magnetfeld senkrecht zur Hauptsymmetrieachse des Kristalls an (a - b -Ebenen-Richtung). Während für ein Magnetfeld in c -Achsen-Richtung und einer bezüglich der Magnetfeldrichtung rotationssymmetrischen Fermifläche die Zustandsdichte durch eine einfache Integration über die Fermifläche berechnet werden kann, wie in Abschnitt 3.2.1 beschrieben, muss im zweiten Fall berücksichtigt werden, dass das Vortextgitter aufgrund der unterschiedlichen Komponenten der Fermigeschwindigkeit innerhalb der Ebene senkrecht zum Magnetfeld deformiert sein kann. Dies soll in Abschnitt 3.2.2 durch einen einfachen Variationsansatz mit einem einzelnen Variationsparameter τ berücksichtigt werden, der in einer Reskalierung der Fermigeschwindigkeitskomponenten resultiert, wobei τ durch Minimierung der Freien Energie bestimmt werden kann (siehe auch [19]). Fermiflächen mit ausgeprägtem “nesting” sollen in Abschnitt 3.2.3 gesondert betrachtet werden.

3.2.1 Magnetfeld in c -Achsen-Richtung

Die räumlich gemittelte und normierte Quasiteilchen-Zustandsdichte für hohe Magnetfelder berechnet sich als Realteil der räumlich gemittelten normalen Greenschen Funktion $g(\omega, \vec{k}_F)$, die innerhalb der Pesch-Näherung gemäß den Gleichungen (2.7) und (2.8) gegeben ist. Damit erhält man nach analytischer Fortsetzung $\omega \rightarrow -iE + 0^+$ den folgenden Ausdruck für die Zustandsdichte

$$N(E) = N_0 \left\langle \text{Re} \left[g(-iE, \vec{k}_F) \right] \right\rangle_{FS} = N_0 \left\langle \text{Re} \left[\frac{1}{\sqrt{1 + P_\Lambda(-iE, |\eta_k|)}} \right] \right\rangle_{FS}$$

3. Der Vortexzustand im Grenzfall hoher Magnetfelder

Dabei geht die Geometrie der Fermifläche nur über $|\eta_k|$ in die Funktion $P_\Lambda(-iE, |\eta_k|)$ ein. Für den einfachsten Fall einer zylindrischen Fermifläche mit einem Magnetfeld, das parallel zur Symmetrieachse des Zylinders angelegt wurde, besitzt $|\eta_k|$ mit

$$|\eta_k| = \sqrt{\frac{eB}{c} (v_{F,1}^2 + v_{F,2}^2)} = v_F \sqrt{\frac{eB}{c} (\cos^2 \varphi + \sin^2 \varphi)} = v_F \sqrt{\frac{eB}{c}}$$

überhaupt keine Winkelabhängigkeit und damit gilt

$$N_{Zyl}(E) = N_0 \left\langle \operatorname{Re} \left[\frac{1}{\sqrt{1 + P_\Lambda(-iE, v_F \sqrt{\frac{eB}{c}})}} \right] \right\rangle_{FS} = N_0 \operatorname{Re} \left[\frac{1}{\sqrt{1 + P_\Lambda(-iE, v_F \sqrt{\frac{eB}{c}})}} \right]$$

Ist die Fermifläche anders strukturiert und soll nun das Quasiteilchenspektrum für verschiedene Magnetfelder berechnet werden, so ist es aufwändig, die Fermiflächenmittelung für jede Energie und jedes Magnetfeld neu durchzuführen. Um diesen Aufwand zu vermeiden, ist es sinnvoll, eine charakteristische Funktion einzuführen, die alle Informationen über die jeweilige Fermifläche enthält und nur einmal berechnet werden muss. Schreibt man die Funktion $|\eta_k|$ als

$$|\eta_k| = \sqrt{\frac{eB}{c} (v_{F,1}^2 + v_{F,2}^2)} = \alpha \sqrt{\left(\frac{v_{F,1}}{v_F}\right)^2 + \left(\frac{v_{F,2}}{v_F}\right)^2}$$

wobei der Parameter $\alpha = v_F \sqrt{\frac{eB}{c}}$ die Abhängigkeit vom Magnetfeld enthält, so kann die Mittelung über die Fermifläche unter Einführung einer Gewichtsfunktion $g_F(s)$ geschrieben werden als

$$\begin{aligned} N(E) &= \int_{FS} \frac{d^2 k_F}{(2\pi)^3} \frac{1}{|\vec{v}_F|} \operatorname{Re} \left[\frac{1}{\sqrt{1 + P_\Lambda(-iE, |\eta_k|)}} \right] \\ &= \int_0^\infty ds \int_{FS} \frac{d^2 k_F}{(2\pi)^3} \frac{1}{|\vec{v}_F|} \operatorname{Re} \left[\frac{1}{\sqrt{1 + P_\Lambda(-iE, \alpha s)}} \right] \delta\left(s - \frac{|\eta_k|}{\alpha}\right) \\ &= N_0 \int_0^\infty ds \operatorname{Re} \left[\frac{1}{\sqrt{1 + P_\Lambda(-iE, \alpha s)}} \right] g_F(s) \end{aligned}$$

wobei $g_F(s)$ gegeben ist als

$$g_F(s) = \frac{1}{N_0} \int_{FS} \frac{d^2 k_F}{(2\pi)^3} \frac{1}{|\vec{v}_F|} \delta\left(s - \frac{|\eta_k|}{\alpha}\right)$$

Ist die Gewichtsfunktion $g_F(s)$ für eine bestimmte Fermifläche und eine gegebene Magnetfeldrichtung einmal berechnet, so kann die Zustandsdichte für jedes Magnetfeld und jede Energie durch ein einfaches eindimensionales Integral über s gefunden werden. Insbesondere für eine Anordnung mit Magnetfeld in a - b -Ebenen Richtung, bei dem keine Rotationssymmetrie der Fermiflächen bezüglich der Magnetfeldrichtung mehr vorliegt und der Fermiflächenmittelwert durch ein zweidimensionales Integral berechnet werden muss, stellt dies eine bedeutende Vereinfachung dar. Zudem können anhand der Funktion $g_F(s)$, die für ein gegebenes s die winkelabhängigen Zustände an der Fermikante mit einer speziellen Projektion $|\eta_k|$ auf die Ebene senkrecht zum angelegten Feld misst, grundlegende Charakteristika der Zustandsdichte festgestellt werden, ohne dass diese überhaupt berechnet werden muss.

Für den einfachen Fall einer zylindrischen Fermifläche ergibt sich die Gewichtsfunktion als einfache Deltafunktion, so dass $P_\Lambda(-iE, \alpha s)$ bei $s = 1$ ausgewertet wird:

$$g_F(s) = \frac{c}{4\pi^2} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_{-\pi/c}^{\pi/c} dk_c \delta\left(s - \frac{|\eta_k|}{\alpha}\right) = \delta(s - 1)$$

Für eine isotrope Fermifläche bzw. für eine elliptische Fermifläche mit Magnetfeld parallel zur Hauptsymmetrieachse ist der Betrag der Funktion η_k gegeben als $|\eta_k| = \alpha|\cos\vartheta|$ und die Gewichtsfunktion berechnet sich unter Verwendung der Standardverfahren zur Vereinfachung von Distributionen dementsprechend als

$$\begin{aligned} g_F(s) &= \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_{-\pi/2}^{\pi/2} d\vartheta \cos\vartheta \delta(s - |\cos\vartheta|) \\ &= \int_0^{\pi/2} d\vartheta \cos\vartheta \delta(s - |\cos\vartheta|) \\ &= \int_0^{\pi/2} d\vartheta \cos\vartheta \frac{\delta(\vartheta - \arccos(s))}{|\sin(\arccos(s))|} \\ &= \frac{s}{\sqrt{1-s^2}} \end{aligned}$$

Da der Kosinus von ϑ zwischen 0 und $\frac{\pi}{2}$ auf positive Werte kleiner eins beschränkt ist, liefert das Mittelungsintegral auch nur für Werte von s im Intervall $[0, 1]$ ein von Null verschiedenes Ergebnis und damit gilt für kugelförmige, bzw. elliptische Fermiflächen

$$g_F(s) = \begin{cases} \frac{s}{\sqrt{1-s^2}} & \text{für } 0 \leq s \leq 1 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (3.1)$$

Die Gewichtsfunktion verschwindet hier also für $s = 0$ mit endlicher Steigung $g'_F(0) = 1$ und besitzt bei $s = 1$ eine Singularität. Für die Fermifläche in Form eines Halbtorus erhält man mit $|\eta_k| = \alpha|\cos\vartheta|$ durch Integration

$$\begin{aligned} g_F(s) &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_{\pi/2}^{3\pi/2} d\vartheta \frac{\nu + \cos\vartheta}{\pi\nu - 2} \delta(s - |\cos\vartheta|) \\ &= 2 \int_{\pi/2}^{\pi} d\vartheta \frac{\nu + \cos\vartheta}{\pi\nu - 2} \delta(s + \cos\vartheta) \\ &= 2 \int_{\pi/2}^{\pi} d\vartheta \frac{\nu + \cos\vartheta}{\pi\nu - 2} \frac{\delta(\vartheta - \arccos(-s))}{|\sin(\arccos(-s))|} \\ &= \frac{\nu - s}{\pi\nu - 2} \frac{2}{\sqrt{1-s^2}} \end{aligned}$$

und wiederum liefert das Mittelungsintegral nur für Werte von s kleiner als eins einen Beitrag. Damit kann die Gewichtsfunktionen für eine halbtorusförmige Fermifläche geschrieben werden als:

$$g_F(s) = \begin{cases} \frac{\nu-s}{\pi\nu-2} \frac{2}{\sqrt{1-s^2}} & \text{für } 0 \leq s \leq 1 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (3.2)$$

Man erkennt, dass im Vergleich zu der Gewichtsfunktion für die isotrope Fermifläche (die für $\nu = 0$ aus dem obigen Ausdruck folgt) für eine halbtorusförmige Fermifläche ($\nu > 0$) die Gewichtsfunktion auch für $s = 0$ einen endlichen Wert besitzt (siehe Abbildung 3.4). Dies hat einen bedeutenden Einfluss auf die Form der gemittelten Quasiteilchen-Zustandsdichte, wie im folgenden gezeigt werden soll.

3. Der Vortexzustand im Grenzfall hoher Magnetfelder

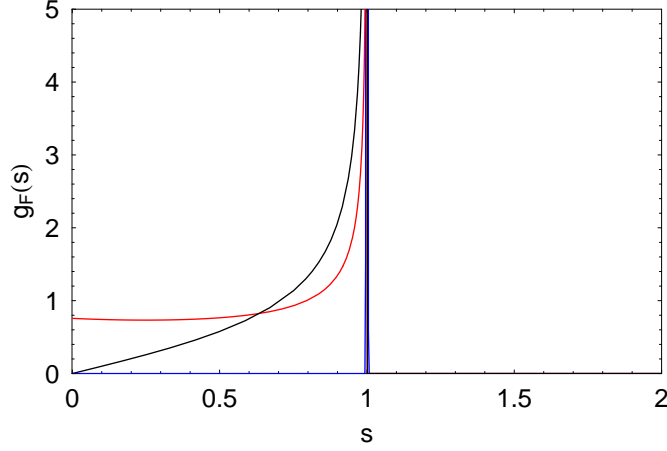


Abbildung 3.4: Die Gewichtsfunktion $g_F(s)$ für eine zylindrische Fermifläche (blau) – wobei die Diracsche Deltafunktion natürlich nur skizzenhaft visualisiert werden kann –, für eine elliptische bzw. isotrope Fermifläche (schwarz) und für eine halbtorusförmige Fermifläche mit einem Verhältnis der zwei charakteristischen Radien von $\nu = 4$ (rot). In allen drei Fällen soll das Magnetfeld parallel zur c -Achse des Kristalls anliegen.

Bezeichnet man nun die gemittelte Quasiteilchen-Zustandsdichte für eine zylindrische Fermifläche mit $N_{Zyl}(E, \alpha)$ so berechnet sich die Zustandsdichte für eine isotrope bzw. eine halbtorusförmige Fermifläche $N(E, \alpha)$ für ein gegebenes Magnetfeld (beschrieben durch $\alpha = v_F \sqrt{\frac{eB}{c}}$) als Mittelung über $N_{Zyl}(E, \alpha s)$ für verschiedene Magnetfeldstärken, von $\alpha s = 0$, d.h. der BCS-Zustandsdichte im Bulk, bis $\alpha s = \alpha$, der Zustandsdichte bei entsprechend angelegtem Magnetfeld in einem Supraleiter mit zylindrischer Fermifläche:

$$N(E, \alpha) = \int_0^1 ds N_{Zyl}(E, \alpha s) g_F(s)$$

Zur Berechnung der Zustandsdichten muss natürlich auch die Amplitude des Paarpotentials $|\Delta(B, T)|$ als Funktion des Magnetfelds und der Temperatur bekannt sein. Diese kann aus der Gapgleichung (2.10) bestimmt werden. Dabei kann die Magnetfeldabhängigkeit des Paarpotentials bei isotropen und zylindrischen Fermiflächen für kleine Temperaturen in guter Näherung wie folgt angenommen werden

$$\Delta(B) = \Delta(0) \sqrt{1 - B/B_{c2}}$$

was ein Vergleich mit der numerisch aus der Gapgleichung bestimmten Magnetfeldabhängigkeit belegt (siehe Abbildung 3.5). Für eine halbtorusförmige Fermifläche ist es sinnvoll, die Magnetfeldabhängigkeit der Paarpotentialamplitude numerisch zu bestimmen, da hier größere Abweichungen von der wurzelförmigen Näherung gefunden werden. Zudem muss für die unterschiedlichen Fermiflächengeometrien noch das obere kritische Magnetfeld berechnet werden. Um dieses zu erhalten, kann die Gapgleichung (2.10) nahe des oberen kritischen Magnetfelds in $\Delta(B, T)$ linearisiert werden und es ergibt sich mit $g(\omega, \vec{k}_F) \approx 1 + \mathcal{O}(\Delta^2)$ der Ausdruck

$$0 = \pi T \sum_{|\epsilon_n| < \omega_c} \frac{1}{\epsilon_n} (\langle \sqrt{\pi} z w(i z) \rangle_{FS} - 1) - \ln \frac{T}{T_c}$$

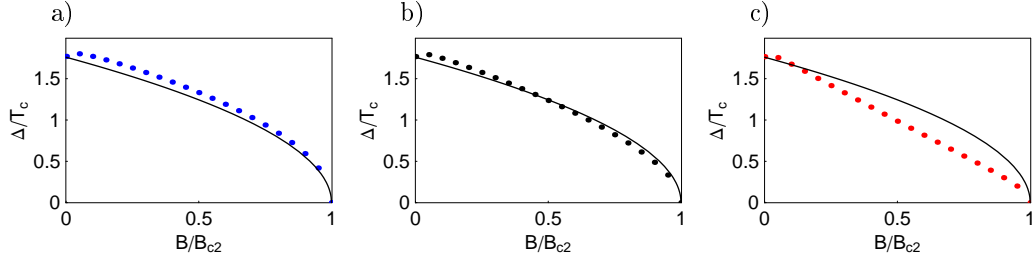


Abbildung 3.5: Die Magnetfeldabhängigkeit der Paarpotentialamplitude, berechnet im Rahmen der Pesch-Näherung für $T = 0,1T_c$. Während die numerisch berechneten Werte von $\Delta(B)$ für eine zylindrische Fermifläche **(a)** und für eine isotrope Fermifläche **(b)** sehr gut mit einer einfachen wurzelförmigen Näherung (durchgezogene Linie) übereinstimmen, kann diese Näherung für eine halbtorusförmige Fermifläche nicht mehr gerechtfertigt werden **(c)**.

der sich mit $z(\alpha s) = \frac{\sqrt{2}\epsilon_n}{\alpha s}$ und unter Verwendung von $g_F(s)$ berechnen lässt als:

$$0 = \pi T \sum_{|\epsilon_n| < \omega_c} \frac{1}{\epsilon_n} \left(\int_0^1 [\sqrt{\pi} z(\alpha s) w(iz(\alpha s)) g_F(s)] ds - 1 \right) - \ln \frac{T}{T_c}$$

Wie aus Abbildung 3.6 hervorgeht, führt die endliche Gewichtung der Zustandsdichte bei $\alpha s = 0$, d.h. der BCS-Zustandsdichte, bei einer halbtorusförmigen Fermifläche zu einer scharfen Gapkante bei $E = \pm\Delta(B, T)$. Dies unterscheidet die Zustandsdichte bei einer halbtorusförmigen Fermifläche wesentlich von den anderen betrachteten Geometrien. Zudem führt die nahezu gleichgewichtige Mittelung über Zustandsdichten, die bei anderen Geometrien zu niedrigeren Magnetfeldern korrespondieren, zu einer starken Reduktion der Peaks an der Gapkante und zu einem nahezu kastenförmigen Verhalten der Zustandsdichte. Bei der isotropen Fermifläche ist die Gapkante noch als Knick sichtbar, während bei einer zylindrischen Fermifläche die Peaks der Zustandsdichte schon für kleine Magnetfelder ab etwa $0,3B_{c2}$ stark auseinanderlaufen und keine Gapkante mehr erkennbar ist. Dies sollte insbesondere bei dem Versuch, die Größe des Paarpotentials aus dem Abstand der Peaks in der Zustandsdichte zu bestimmen, berücksichtigt werden.

Sehr anschaulich kann man sich den Einfluss der Fermiflächengeometrie auf das Verhalten der Gewichtsfunktion $g_F(s)$ für kleine Werte von s anhand der Bereiche auf der Fermifläche vorstellen, bei denen die Projektion der Fermigeschwindigkeit auf die Ebene senkrecht zum Magnetfeld klein wird, bzw. verschwindet. Für eine zylindrische Fermifläche mit Magnetfeld parallel zur c -Achsen-Richtung existiert kein Bereich, bei dem die Projektion der Fermigeschwindigkeit verschwindet, daher ist $g_F(s)$ für kleine Werte von s Null. Für eine elliptische, bzw. isotrope Fermifläche existieren nur zwei Punkte, die Pole, bei denen die Projektion der Fermigeschwindigkeit auf die Ebene senkrecht zum angelegten Magnetfeld verschwindet, hier erhält man für kleine Werte von s einen linearen Anstieg von $g_F(s)$. Bei einer halbtorusförmigen Fermifläche hingegen existieren zwei ganze Linien, entlang derer die Projektion verschwindet (für $\vartheta = \pi/2$ und $\vartheta = 3\pi/2$), hier nimmt $g_F(s)$ für niedrige Werte von s einen nahezu konstanten endlichen Wert an.

3. Der Vortexzustand im Grenzfall hoher Magnetfelder

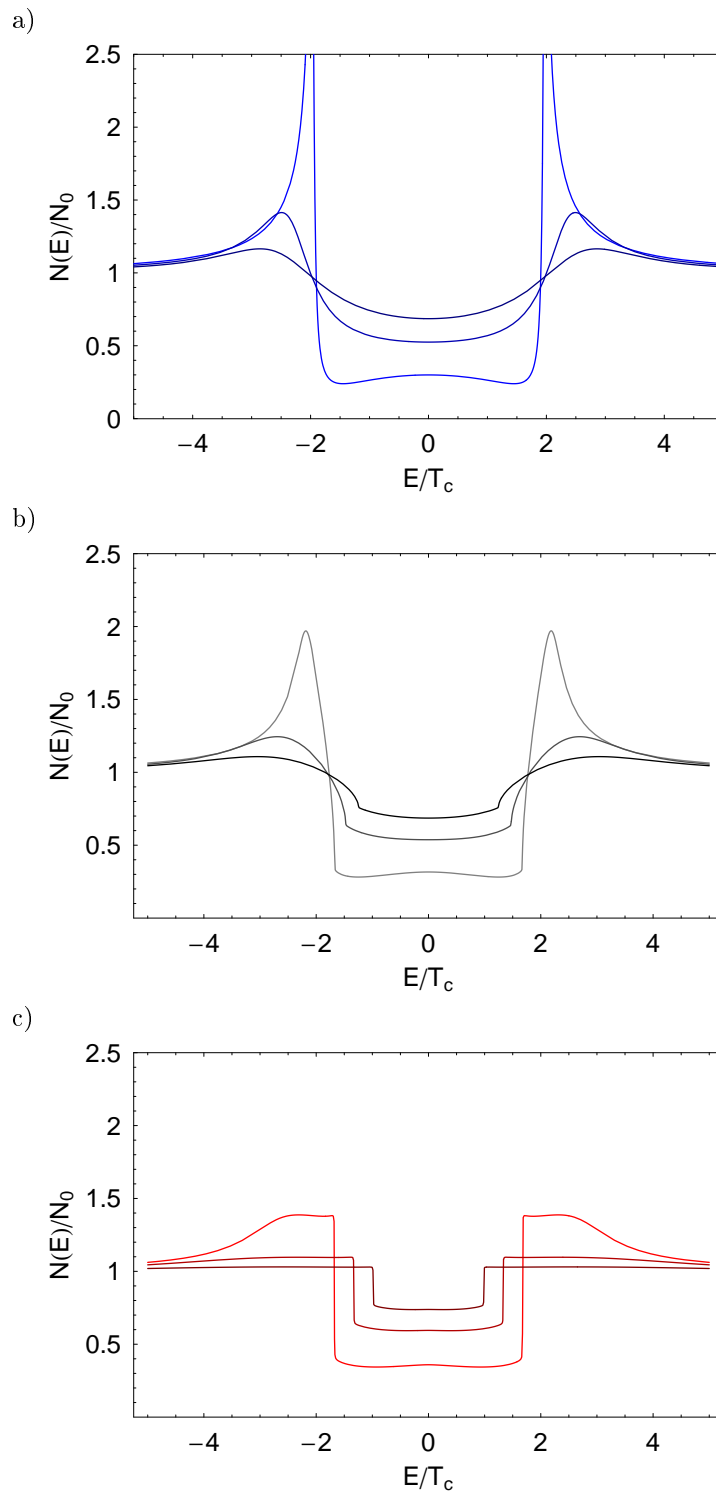


Abbildung 3.6: Die Zustandsdichte für verschiedene Fermiflächengeometrien: **a)** für eine zylindrische, **b)** für eine elliptische, bzw. isotrope und **c)** für eine halbtorusförmige Fermifläche mit Magnetfeld in c -Achsen-Richtung. In allen drei Figuren sind Kurven für Magnetfeldwerte $B = 0, 1B_{c2}^c$, $B = 0, 3B_{c2}^c$ und $B = 0, 5B_{c2}^c$ gezeigt.

3.2.2 Magnetfeld in a - b -Ebenen-Richtung

Liegt das Magnetfeld nicht parallel zur Hauptsymmetrieachse des Kristalls an, so muss die Anisotropie der Fermigeschwindigkeitskomponenten in der Ebene senkrecht zum Magnetfeld bei der Konstruktion eines Grundzustands für das Paarpotential berücksichtigt werden. Eine Möglichkeit besteht darin, das Abrikosov-Vortexgitter aus Gleichung (2.6) durch einen einfachen Variationsansatz zu reskalieren (siehe [19]). Die Idee soll im folgenden kurz skizziert werden. Ist das Abrikosov-Vortexgitter als Grundzustand des Operators $b = \sqrt{\frac{c}{eB}} (\partial_{\bar{z}} + \frac{eB}{2c} z)$ mit $z = x + iy$ und $\bar{z} = x - iy$ gegeben, d.h.

$$b \circ \psi_{\Lambda}(x, y) = 0$$

so soll nun der Grundzustand für einen modifizierten Operator γ gefunden werden, der sich allgemein unter Einführung der reellen Parameter u und v schreiben lässt als

$$\gamma = ub - vb^{\dagger}$$

Da der Operator γ in einem transformierten (gedrehten) Koordinatensystem die gleiche Form annehmen soll wie der Operator b , so folgt aus der Definition von b die Bedingung $u^2 - v^2 = 1$. Damit kann die Transformation durch einen einzigen Parameter τ beschrieben werden, wobei gelten soll

$$u = \cosh \tau, \quad v = \sinh \tau$$

Nun kann der Grundzustand des Paarpotentials geschrieben werden als (siehe dafür [19] und Abbildung 3.7):

$$\psi_{\Lambda}^{\tau}(x, y) = \psi_{\Lambda}(e^{-\tau}x, e^{\tau}y), \quad \gamma \circ \psi_{\Lambda}^{\tau}(x, y) = 0$$

Außerdem muss man berücksichtigen, dass der Übergang in ein neues gedrehtes Koordinatensystem auch mit einer Modifikation der Funktion $|\eta_k|$ verbunden ist. Der Operator \hat{L} aus Abschnitt 2.2 wird ersetzt durch

$$\hat{L} = 2\omega + \bar{\eta}'_k \gamma - \eta'_k \gamma^{\dagger}, \quad \eta'_k = (e^{\tau} v_{F,1} + i e^{-\tau} v_{F,2}) \sqrt{\frac{eB}{c}}$$

d.h. die Reskalierung des Vortexgitters wird durch eine Reskalierung der Fermigeschwindigkeitskomponenten kompensiert. Dabei muss der Variationsparameter τ für jedes Magnetfeld und jede Temperatur durch Minimierung der Freien Energie gefunden werden. In bestimmten Fällen kann diese aufwändige Minimierungsprozedur jedoch glücklicherweise vermieden und der Wert von τ analytisch bestimmt werden.

Um die Komponenten $v_{F,1}$ und $v_{F,2}$ in der Ebene senkrecht zum Magnetfeld zu finden, kann im allgemeinen Fall einer beliebigen Magnetfeldrichtung eine Rotation des "Kristall-Koordinatensystems", bezüglich dessen Achsen a , b und c die Fermiflächen ausgerichtet sind, durchgeführt werden. Bei einer Rotation um die a -Achse des Kristalls mit dem Winkel ρ erhält man beispielsweise

$$\vec{v}'_F = v_{F,a} \vec{e}_1 + (\cos \rho v_{F,b} - \sin \rho v_{F,c}) \vec{e}_2 + (\sin \rho v_{F,b} + \cos \rho v_{F,c}) \vec{e}_3$$

wobei der Vektor \vec{e}_3 in Richtung des Magnetfelds zeigt. Beschränkt man sich auf den Fall einer speziellen Rotation, bei der das Magnetfeld in der a - b -Ebene des Kristalls zu liegen kommt, so können mit $\rho = \pi/2$ die Fermigeschwindigkeitskomponenten in der Ebene senkrecht zum Magnetfeld gefunden werden als

$$v_{F,1} = v_{F,a}, \quad v_{F,2} = -v_{F,c}$$

3. Der Vortexzustand im Grenzfall hoher Magnetfelder

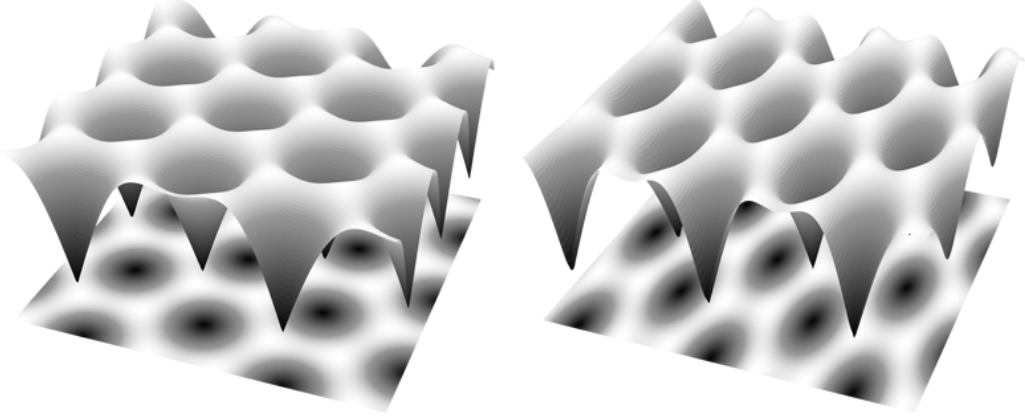


Abbildung 3.7: Der Variationsansatz zur Beschreibung eines verzerrten Vortexgitters für hohe Magnetfelder: Links das unverzerrte Vortexgitter für eine isotrope Fermigeschwindigkeit und rechts das verzerrte Vortexgitters mit einem Variationsparameter $\tau = 0,375$.

Unter Berücksichtigung einer möglichen Verzerrung des Vortexgitters erhält man dann für eine zylindrische Fermifläche mit schwacher c -Achsen-Dispersion die für die Berechnung der Zustandsdichte relevante Funktion $|\eta_k|$ als

$$|\eta_k| = \sqrt{\frac{eB}{c} \left(e^{2\tau} v_{F,1}^2 + e^{-2\tau} v_{F,2}^2 \right)} = \alpha \sqrt{e^{2\tau} \cos^2 \varphi + e^{-2\tau} \epsilon_c^2 \sin^2 \varphi}$$

Für eine halbtorusförmige und ebenso für eine isotrope Fermifläche schreibt sich der Betrag der Projektion der Fermigeschwindigkeit als

$$|\eta_k| = \sqrt{\frac{eB}{c} \left(e^{2\tau} v_{F,1}^2 + e^{-2\tau} v_{F,2}^2 \right)} = \alpha \sqrt{e^{2\tau} \cos^2 \varphi \cos^2 \vartheta + e^{-2\tau} \sin^2 \vartheta}$$

Für eine elliptische Fermifläche muss berücksichtigt werden, dass $v_{F,ab} \neq v_{F,c}$, und damit erhält man für $|\eta_k|$ den Ausdruck

$$\begin{aligned} |\eta_k| &= \sqrt{\frac{eB}{c} \left(e^{2\tau} v_{F,1}^2 + e^{-2\tau} v_{F,2}^2 \right)} = \sqrt{\frac{eB}{c}} \sqrt{e^{2\tau} v_{F,ab}^2 \cos^2 \varphi \cos^2 \vartheta + e^{-2\tau} v_{F,c}^2 \sin^2 \vartheta} \\ &= \sqrt{\frac{eB}{c}} \sqrt{v_{F,ab} v_{F,c}} \sqrt{e^{2\bar{\tau}} \cos^2 \varphi \cos^2 \vartheta + e^{-2\bar{\tau}} \sin^2 \vartheta} \\ &= \alpha \sqrt{e^{2\bar{\tau}} \cos^2 \varphi \cos^2 \vartheta + e^{-2\bar{\tau}} \sin^2 \vartheta} \end{aligned}$$

wobei in der unteren Zeile $\bar{\tau} = \tau + \frac{1}{2} \ln \frac{v_{F,ab}}{v_{F,c}}$ eingeführt und $\alpha = \sqrt{v_{F,ab} v_{F,c}} \sqrt{\frac{eB}{c}}$ definiert wurde. In diesem Fall nimmt $|\eta_k|$ für die elliptische Fermifläche mit Magnetfeld in a - b -Ebenen-Richtung die gleiche Form an wie $|\eta_k|$ für die isotrope bzw. halbtorusförmige Fermifläche. Ist $|\eta_k|$ nun bekannt, so kann die charakteristische Funktion $g_F(s)$ für die verschiedenen Fermiflächengeometrien berechnet werden. Da der Parameter τ jedoch nicht von vornherein bekannt ist, sondern erst durch Minimierung der Freien Energie bestimmt werden muss, wird die Berechnung etwas komplizierter als im vorangegangenen Abschnitt.

Ohne vorherige Kenntnis der Vortexgitterverzerrung τ können aber schon grundlegende Aussagen über $g_F(s)$ durch eine Analyse von $|\eta_k|$ getroffen werden. Wie aus der Berechnung

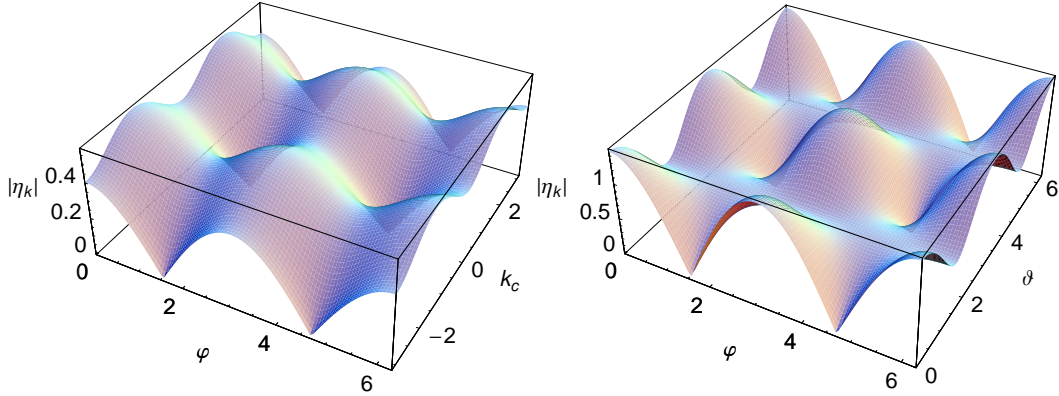


Abbildung 3.8: Die Funktion $|\eta_k|$ für eine zylindrische Fermifläche mit einer c -Achsen-Dispersion von $\epsilon_c = 0,163$ und einem Verzerrungsparameter des Vortexgitters von $\tau = \frac{1}{2} \ln \epsilon_c$ (links) und für eine halbtorusförmige Fermifläche mit $\nu = 4$ und $\tau = 0,375$ (rechts). Deutlich zu erkennen sind die unterschiedlichen Extrempunkte: Maxima, Minima, Sattelpunkte und ausgedehnte Sattelpunkte.

von Zustandsdichten bekannt ist, führen beispielsweise Sattelpunkte von $|\eta_k|$ zu Van Hove-Singularitäten in $g_F(s)$ wohingegen Extrema von $|\eta_k|$ zu Stufen in $g_F(s)$ korrespondieren. Betrachtet man zuerst $|\eta_k|$ für eine zylindrische Fermifläche mit c -Achsen-Dispersion, so findet man Extrema der Koordinatenlinien bei $\varphi = 0, \frac{\pi}{2}, \pi, \frac{3\pi}{2}, 2\pi$, bzw. $ck_c = -\pi, -\frac{\pi}{2}, 0, \frac{\pi}{2}, \pi$. Nun kann durch Berechnung der zweiten Ableitung der Typ der Extrema an den verschiedenen Punkten berechnet werden. Man findet für $|\eta_k|(\varphi = \pi/2, ck_c = 0) = 0$ ein Minimum, für $|\eta_k|(\varphi = 0, ck_c = \pi/2) = \alpha\sqrt{e^{2\tau} + e^{-2\tau}\epsilon_c^2}$ ein Maximum und zwei Sattelpunkte bei $|\eta_k|(\varphi = 0, ck_c = 0) = \alpha e^\tau$ und $|\eta_k|(\varphi = \pi/2, ck_c = \pi/2) = \alpha e^{-\tau}\epsilon_c$ (vgl. Abbildung 3.8 links). Nun kann durch Differenzieren von Gleichung (2.9) nach dem Verzerrungsparameter τ gezeigt werden, dass für eine zylindrische Fermifläche mit schwacher c -Achsen-Dispersion ein Minimum der Freien Energie für alle Temperaturen und Magnetfelder für $\tau = \frac{1}{2} \ln \epsilon_c$ vorliegt. In diesem Fall fallen die beiden Sattelpunkte von $|\eta_k|$ zusammen und man erhält bei $|\eta_k| = \alpha\sqrt{\epsilon_c}$ eine logarithmische Divergenz der Gewichtsfunktion $g_F(s)$ während sich aus dem Maximum von $|\eta_k|$ bei $\alpha\sqrt{2\epsilon_c}$ auf ein stufenförmiges Verschwinden der Funktion $g_F(s)$ schließen lässt. Eine ähnliche Analyse kann auch für eine halbtorusförmige, sowie eine isotrope und eine elliptische Fermifläche durchgeführt werden. Hier findet man Extrema der Koordinatenlinien von $|\eta_k|$ an den Punkten $\varphi = 0, \frac{\pi}{2}, \pi, \frac{3\pi}{2}, 2\pi$, bzw. $\vartheta = \frac{\pi}{2}, \pi, \frac{3\pi}{2}$. Nach Berechnung der zweiten Ableitungen lässt sich ein Minimum bei $|\eta_k|(\varphi = \pi/2, \vartheta = \pi) = 0$ sowie ein Maximum bei $|\eta_k|(\varphi = 0, \vartheta = \pi) = \alpha e^\tau$ identifizieren (siehe Abbildung 3.8 rechts). Letzteres führt zu einem stufenförmigen Verschwinden der Gewichtsfunktion $g_F(s)$ bei e^τ , während ein ausgedehnter Sattelpunkt bei $|\eta_k|(\vartheta = \pi/2, \varphi) = \alpha e^{-\tau}$ eine wurzelförmige Singularität zur Folge hat. Für die isotrope bzw. die elliptische Fermifläche findet man aus Symmetriegründen ein Minimum der Freien Energie bei $\tau = 0$ bzw. $\bar{\tau} = 0$ was bei einer elliptischen Fermifläche einer Verzerrung von $\tau = -\frac{1}{2} \ln \frac{v_{F,ab}}{v_{F,c}}$ entspricht. In diesem Fall verschwindet die Gewichtsfunktion $g_F(s)$ bei $s = 1$ mit einer wurzelförmigen Singularität. Für die halbtorusförmige Fermifläche findet man kein so einfaches Argument zur analytischen Bestimmung von τ , vielmehr ergibt eine numerische Analyse, dass die Verzerrung des Vortexgitters hier eine deutliche Abhängigkeit von der Stärke des angelegten Magnetfelds aufweist (siehe Abbildung 3.9 b). Für ein Magnetfeld, das in a - b -Ebenen-Richtung ange-

3. Der Vortexzustand im Grenzfall hoher Magnetfelder

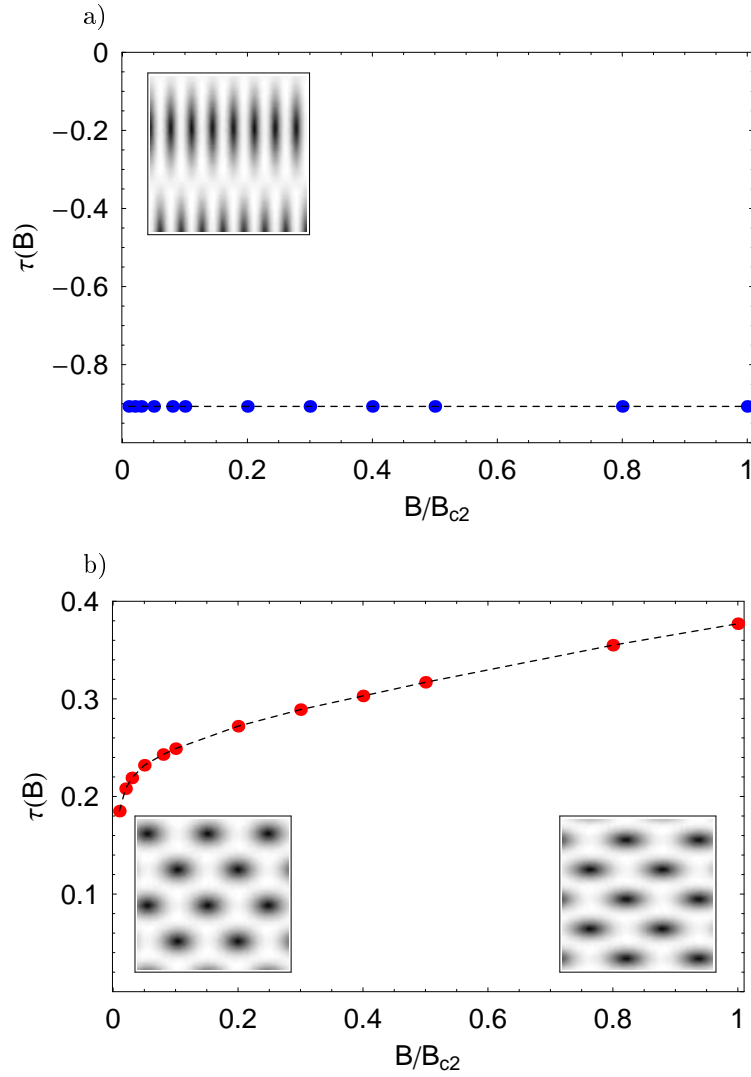


Abbildung 3.9: Die Abhängigkeit der Vortextgitter-Verzerrung vom Magnetfeld, beschrieben durch den Parameter τ : **a)** für eine zylindrische Fermifläche mit einer c -Achsen-Dispersion von $\epsilon_c = 0,163$ und **b)** für eine halbtorusförmige Fermifläche mit $\nu = 4$. In den Insets ist die von der Stärke des Magnetfelds unabhängige Vortextgitterverzerrung, bzw. die Vortextgitterverzerrung für $B \rightarrow 0$ und $B \rightarrow B_{c2}$ skizziert. Während der konstante Wert von $\tau = \frac{1}{2} \ln \epsilon_c \approx -0,907$ für die zylindrische Fermifläche analytisch berechnet werden kann, muss τ für die halbtorusförmige Fermifläche durch Minimierung der Freien Energie für jedes Magnetfeld numerisch bestimmt werden.

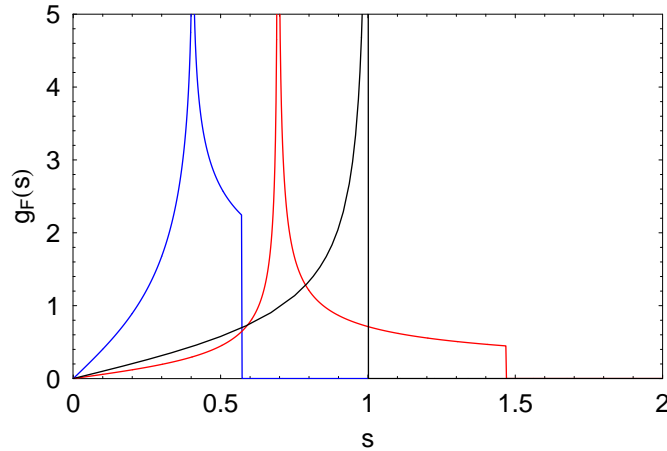


Abbildung 3.10: Die Gewichtsfunktion $g_F(s)$ für eine zylindrische Fermifläche mit $\tau = \frac{1}{2} \ln \epsilon_c$ und $\epsilon_c = 0,163$ (blau), für eine elliptische bzw. isotrope Fermifläche (schwarz) und für eine halbtorusförmige Fermifläche mit einem Verhältnis der zwei charakteristischen Radien von $\nu = 4$ (rot). Für den Torus wurde ein Verzerrungsparameter von $\tau = 0,375$ gewählt, wie er aus einer Maximierung des oberen kritischen Magnetfelds B_{c2} , bzw. einer Minimierung der Freien Energie in der Umgebung von B_{c2} folgt. In allen drei Fällen soll das Magnetfeld parallel zur a - b -Ebene des Kristalls anliegen.

legt wurde, müssen die Funktionen $g_F(s)$, wie schon erwähnt, numerisch berechnet werden. Eine Ausnahme bildet die elliptische Fermifläche. Hier kann durch Anpassung der Verzerrung τ das Ergebnis der isotropen Fermifläche reproduziert werden, die natürlich keinerlei ausgezeichnete Achse besitzt und – wie im vorangegangenen Abschnitt beschrieben – analytisch berechnet werden kann. Die Ergebnisse für die Gewichtsfunktionen sind in Abbildung 3.10 zusammengestellt. Es fällt auf, dass alle Gewichtsfunktionen ähnliche Charakteristika besitzen: Ein linearer Anstieg von $g_F(s)$ bei $s = 0$ sowie eine Singularität bei höheren, wengleich unterschiedlichen Werten von s . Diese Ähnlichkeit für kleine Werte von s kann man sich leicht erklären, denn für alle drei Fermiflächen existieren genau zwei Punkte, an denen die Projektion der Fermigeschwindigkeit auf die Ebene senkrecht zum Magnetfeld verschwindet. Dabei resultiert der lineare Anstieg von $g_F(s)$ für kleine s in dem charakteristischen Knick der Zustandsdichte an der Gapkante, der schon bei der isotropen Fermifläche im vorangegangenen Abschnitt diskutiert wurde. Es wird damit jedoch deutlich, dass die klare Unterscheidung zwischen einer zylindrischen, isotropen oder halbtorusförmigen Fermiflächengeometrie anhand der Quasiteilchen-Spektren im Vortexzustand, wie sie für ein in c -Achsen-Richtung angelegtes Magnetfeld möglich war, für ein Magnetfeld, das parallel zur a - b -Ebenen-Richtung des Kristalls anliegt, nicht möglich ist (vgl. Abbildung 3.11). Bei der Betrachtung des oberen kritischen Magnetfelds B_{c2}^{ab} für eine zylindrische Fermifläche ist dabei zu berücksichtigen, dass dieses für eine verschwindende c -Achsen-Dispersion divergiert (siehe [19]).

3. Der Vortexzustand im Grenzfall hoher Magnetfelder

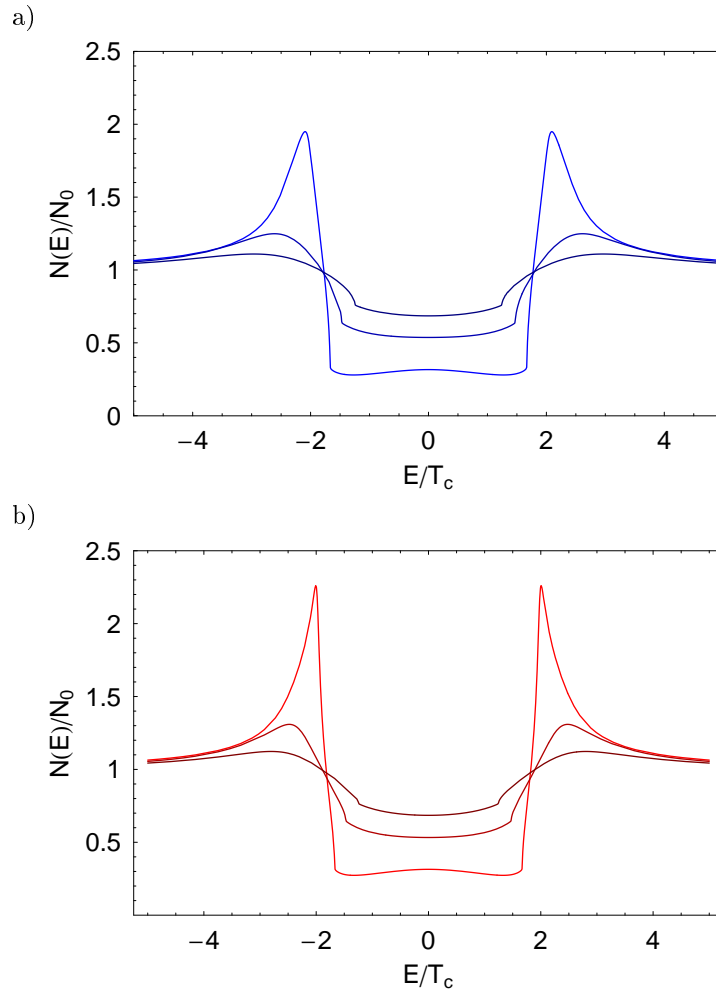


Abbildung 3.11: Die Zustandsdichte für verschiedene Fermiflächen mit Magnetfeld in a - b -Ebenen-Richtung: **a)** für eine zylindrische und **b)** für eine halbtorusförmige Fermifläche. Für die zylindrische Fermifläche wurde eine schwache c -Achsen-Dispersion von $\epsilon_c = 0,163$ angenommen, die eine Divergenz des oberen kritischen Magnetfelds B_{c2} verhindert, und die Anisotropie des Vortexgitters mit $\tau = \frac{1}{2} \ln \epsilon_c$ angepasst. Für die halbtorusförmige Fermifläche wurde der Verzerrungsparameter τ durch Minimierung der Freien Energie für jeden Magnetfeldwert passend bestimmt (siehe Abbildung 3.9 b). In allen drei Figuren sind Kurven für Magnetfelder von $B = 0, 1B_{c2}^{ab}, B = 0, 3B_{c2}^{ab}$ und $B = 0, 5B_{c2}^{ab}$ gezeigt.

3.2.3 Fermiflächen mit ausgeprägtem “nesting”

Um die räumlich gemittelten Zustandsdichten für eine einfaches “tight binding”-Modell zu berechnen, muss zuerst die passende charakteristische Funktion $g_F(s)$ gefunden werden. Diese kann für eine Dispersionsrelation der folgenden Art $\epsilon_k = 2t(\cos k_x a + \cos k_y a) - \epsilon_F$ durch eine kurze Rechnung bestimmt werden. Betrachtet man die Fermiflächenmittelung aus Abschnitt 3.1:

$$\langle \dots \rangle_{FS} = \frac{1}{\mathcal{N}} \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \frac{1}{|\vec{v}_F|} \delta(\epsilon_k) \dots$$

und verwendet die Definition der Gewichtsfunktion $g_F(s)$, so erhält man

$$\begin{aligned} g_F(s) &= \frac{1}{\mathcal{N}} \int_{BZ} \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \frac{1}{|\vec{v}_F|} \delta(\epsilon_k) \delta\left(s - \frac{|\eta_k|}{\alpha}\right) \\ &= \frac{4}{\mathcal{N}} \int_{-\pi/a}^0 dk_x \int_{-\pi/a}^0 dk_y \frac{1}{(2\pi)^2 a} \frac{1}{\bar{v}_F \sqrt{\sin^2 k_x a + \sin^2 k_y a}} \\ &\quad \times \delta(\cos k_x a + \cos k_y a - 2A) \delta\left(s - \sqrt{\sin^2 k_x a + \sin^2 k_y a}\right) \end{aligned}$$

wobei mit $\bar{v}_F = 2ta$ eine mittlere Fermigeschwindigkeit eingeführt und $\alpha = \bar{v}_F \sqrt{\frac{eB}{c}}$ gewählt wurde. Dabei kann die Integration über die gesamte Brillouinzone durch eine Integration über k_x und k_y von $-\frac{\pi}{a}$ bis 0 ersetzt werden, da alle Funktionen symmetrisch bezüglich des Integrationszentrums sind. Nun soll weiterhin die Integration durch Einführung von $x = \cos k_x a$ und $y = \cos k_y a$ vereinfacht werden. Die Differentiale schreiben sich damit als $dk_x = -\frac{dx}{a\sqrt{1-x^2}}$ sowie $dk_y = -\frac{dy}{a\sqrt{1-y^2}}$ und man erhält

$$\begin{aligned} g_F(s) &= \frac{4}{\mathcal{N}} \int_{-1}^1 \frac{dx}{\sqrt{1-x^2}} \int_{-1}^1 \frac{dy}{\sqrt{1-y^2}} \frac{\delta(x+y-2A)}{(2\pi)^2 a^3} \frac{\delta\left(s - \sqrt{2-x^2-y^2}\right)}{\bar{v}_F s} \\ &= \frac{1}{\mathcal{N}} \frac{4}{(2\pi)^2 a^3 \bar{v}_F s} \int_{-1}^1 \frac{dx}{\sqrt{1-x^2}} \frac{\Theta(1+x-2A)}{\sqrt{1-(2A-x)^2}} \delta\left(s - \sqrt{2-x^2-(2A-x)^2}\right) \\ &= \frac{1}{\mathcal{N}} \frac{4}{(2\pi)^2 a^3 \bar{v}_F s} \int_{-1}^1 \frac{dx}{\sqrt{1-x^2}} \frac{\Theta(1+x-2A)}{\sqrt{1-(2A-x)^2}} \frac{s}{2|A-x|} \{\delta(x-x_1) + \delta(x-x_2)\} \end{aligned}$$

mit $x_1 = A + \sqrt{1 - \frac{s^2}{2} - A^2}$ und $x_2 = A - \sqrt{1 - \frac{s^2}{2} - A^2}$. Nun kann auch das Integral über x ausgeführt werden, wobei man verwenden kann, dass gilt

$$1 - x_1^2 = 1 - (2A - x_2)^2, \quad 1 - x_2^2 = 1 - (2A - x_1)^2$$

und

$$|A - x_1| = |A - x_2| = \sqrt{1 - \frac{s^2}{2} - A^2}$$

so dass sich die zwei Diracschen Deltafunktionen wieder zusammenfassen lassen und man für die Gewichtsfunktion $g_F(s)$ nach einigen weiteren algebraischen Umformungen den folgenden Ausdruck erhält:

$$g_F(s) = \frac{1}{\mathcal{N}} \frac{4}{(2\pi)^2 a^3 \bar{v}_F} \frac{\Theta\left(1 - A^2 - \frac{s^2}{2}\right) \Theta\left(\left(\frac{s^2}{2} + 2A^2\right)^2 - 4A^2\right)}{\sqrt{\left(\frac{s^2}{2} + 2A^2\right)^2 - 4A^2} \sqrt{1 - A^2 - \frac{s^2}{2}}}$$

3. Der Vortexzustand im Grenzfall hoher Magnetfelder

mit einer jeweils zu bestimmenden Normierungskonstanten \mathcal{N} . Die Gewichtsfunktion für ein zweidimensionales “tight binding“-Modell mit “nearest-neighbor hopping” besitzt somit zwei Singularitäten bei $s = \sqrt{4A(1-A)}$ und $s = \sqrt{2-2A^2}$, die durch die Nullstellen des Nenners bestimmt sind und die gleichzeitig den von Null verschiedenen Wertebereich von $g_F(s)$ begrenzen. Für $A \rightarrow 1$ nähert sich die Form der Fermifläche einem Zylinder und folglich rücken die zwei Singularitäten zusammen (siehe Abbildung 3.12). Die Zustandsdichte berechnet sich wie im vorangegangenen Abschnitt als Integral über die Zustandsdichte einer zylindrischen Fermifläche für verschiedene effektive Magnetfelder, jeweils gewichtet mit $g_F(s)$. Während sich die Zustandsdichten im Vortexzustand für ein schwaches “nesting” der Fermiflächen und eine nahezu zylindrische Fermifläche kaum von der Zustandsdichte einer zylindrischen Fermifläche unterscheiden, beobachtet man für ein sehr starkes “nesting” der Fermifläche (Abbildung 3.12 a) ein breiteres Aufspalten der zwei Peaks in der charakteristischen Funktion $g_F(s)$ und daraus resultierend auch für höhere Magnetfelder eine schärfere Gapkante und ein schwächeres “Auseinanderlaufen” der Peaks in der Quasiteilchen-Zustandsdichte. Für ein Magnetfeld parallel zur a - b -Ebenen-Richtung des Kristalls muss zur Begrenzung des oberen kritischen Felds wiederum eine kleine c -Achsen-Dispersion eingeführt werden. Da in diesem Fall jedoch die “nesting“-Eigenschaften der Fermifläche nur eine untergeordnete Rolle spielen, ist ein ähnliches Ergebnis zu erwarten wie für die zylindrische Fermifläche mit entsprechender c -Achsen-Dispersion, und es soll hier auf die aufwändige Herleitung einer Gewichtsfunktion für diesen Fall verzichtet werden.

Schließlich soll noch die Zustandsdichte für ein dreidimensionales “tight binding“-Modell mit einer Energiedispersion der Form $\epsilon_k = 2t(\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a) - \epsilon_F$ berechnet werden. Dabei soll ein Fall betrachtet werden, bei dem das Magnetfeld parallel zur k_z -Achse der Fermifläche anliegt. Die Gewichtsfunktion berechnet sich dann analog zum zweidimensionalen “tight binding“-Modell als

$$\begin{aligned} g_F(s) &= \frac{1}{\mathcal{N}} \int_{BZ} \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \frac{1}{|\vec{v}_F|} \delta(\epsilon_k) \delta\left(s - \frac{|\eta_k|}{\alpha}\right) \\ &= \frac{8}{\mathcal{N}} \int_{-\pi/a}^0 dk_x \int_{-\pi/a}^0 dk_y \int_0^{\pi/a} dk_z \frac{1}{(2\pi)^2 a} \frac{1}{\bar{v}_F \sqrt{\sin^2 k_x a + \sin^2 k_y a + \sin^2 k_z a}} \\ &\quad \times \delta(\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a - 3A) \delta\left(s - \sqrt{\sin^2 k_x a + \sin^2 k_y a}\right) \end{aligned}$$

Wiederum kann die Integration unter Einführung von $x = \cos k_x a$, $y = \cos k_y a$ und $z = \cos k_z a$ vereinfacht werden und man erhält

$$\begin{aligned} g_F(s) &= \frac{1}{\mathcal{N}} \frac{8}{(2\pi)^3 a^3} \int_{-1}^1 \frac{dx}{\sqrt{1-x^2}} \int_{-1}^1 \frac{dy}{\sqrt{1-y^2}} \int_{-1}^1 \frac{dz}{\sqrt{1-z^2}} \frac{1}{\bar{v}_F \sqrt{3-x^2-y^2-z^2}} \\ &\quad \times \delta(x+y+z-3A) \delta\left(s - \sqrt{2-x^2-y^2}\right) \\ &= \frac{1}{\mathcal{N}} \frac{8}{(2\pi)^3 a^3 \bar{v}_F} \int_{-1}^1 \frac{dx}{\sqrt{1-x^2}} \int_{-1}^1 \frac{dy}{\sqrt{1-y^2}} \frac{\Theta(1-3A+x+y)}{\sqrt{1-(3A-x-y)^2}} \frac{\delta\left(s - \sqrt{2-x^2-y^2}\right)}{\sqrt{3-x^2-y^2-(3A-x-y)^2}} \\ &= \frac{1}{\mathcal{N}} \frac{8}{(2\pi)^3 a^3 \bar{v}_F} \int_{-1}^1 \frac{dx}{\sqrt{1-x^2}} \int_{-1}^1 \frac{dy}{\sqrt{1-y^2}} \frac{\Theta(1-3A+x+y)}{\sqrt{1-(3A-x-y)^2}} \frac{\Theta(2-x^2-s^2)}{\sqrt{s^2+1-(3A-x-y)^2}} \\ &\quad \times \frac{s}{|y|} [\delta(y-y_0) + \delta(y+y_0)] \end{aligned}$$

mit $y_0 = \sqrt{2-x^2-s^2}$. Führt man nun noch die Integration über y aus, so schreibt sich die

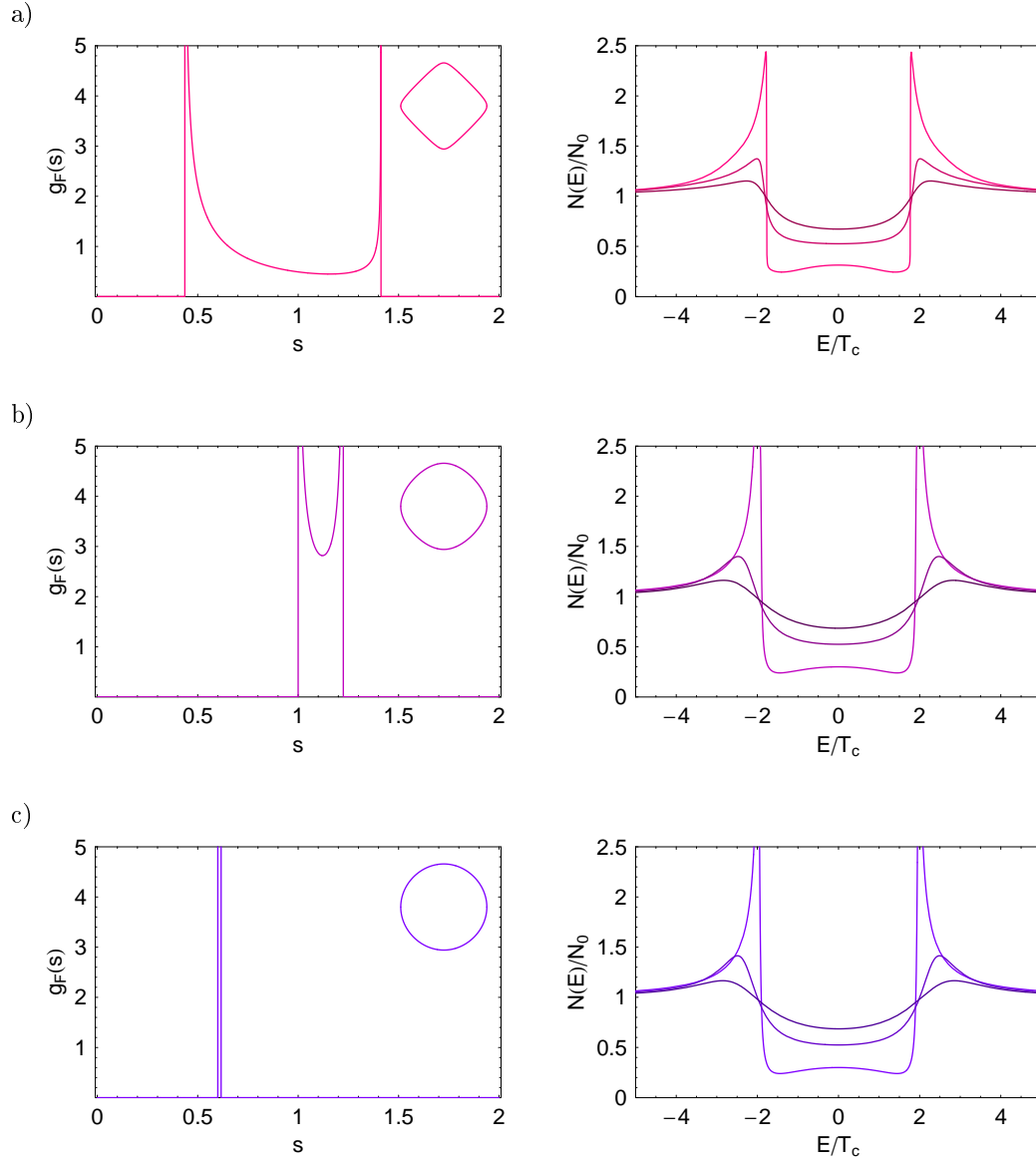


Abbildung 3.12: Die Gewichtsfunction und die Quasiteilchen-Zustandsdichte für ein zwei-dimensionales “tight binding”-Modell mit unterschiedlich starkem “nesting” der Fermifläche. Von oben nach unten wurde der Parameter $A = \frac{\epsilon_F}{4t}$ zu $A = 0,05$ (**a**), $A = 0,5$ (**b**) und $A = 0,9$ (**c**) gewählt, der Inset zeigt jeweils die zugehörige Form des Fermiflächenschnitts. Rechts sind jeweils die zugehörigen Quasiteilchen-Zustandsdichten für Magnetfelder von $B = 0, 1B_{c2}, B = 0,3B_{c2}$ und $B = 0,5B_{c2}$ gezeigt.

3. Der Vortexzustand im Grenzfall hoher Magnetfelder

Gewichtsfunktion schließlich in integraler Form als

$$g_F(s) = \frac{1}{\mathcal{N}} \frac{8s}{(2\pi)^3 a^3 \bar{v}_F} \int_{-1}^1 dx \frac{\Theta(x^2 + s^2 - 1) \Theta(2 - x^2 - s^2)}{\sqrt{x^2 + s^2 - 1} \sqrt{1 - x^2} \sqrt{2 - x^2 - s^2}} \\ \times \left[\frac{\Theta(1 - 3A + x + \sqrt{2 - x^2 - s^2})}{\sqrt{1 - (3A - x - \sqrt{2 - x^2 - s^2})^2} \sqrt{s^2 + 1 - (3A - x - \sqrt{2 - x^2 - s^2})^2}} \right. \\ \left. + \frac{\Theta(1 - 3A + x - \sqrt{2 - x^2 - s^2})}{\sqrt{1 - (3A - x + \sqrt{2 - x^2 - s^2})^2} \sqrt{s^2 + 1 - (3A - x + \sqrt{2 - x^2 - s^2})^2}} \right]$$

mit einer jeweils zu bestimmenden Normierungskonstanten \mathcal{N} . Die Ergebnisse für dieses Modell sind in Abbildung 3.13 zusammengestellt. Deutlich zu erkennen ist, dass für einen “nesting”-Parameter von $A \approx \frac{1}{3}$ die Divergenz der Gewichtsfunktion bei $s = 0$ zu einer Zustandsdichte führt, die nahezu der Bulk-Zustandsdichte entspricht, da bei einer Mittelung die Gewichtung der Zustandsdichte mit $B = 0$ (entsprechend $s = 0$) überwiegt. Diese Divergenz lässt sich aus dem Verschwinden der Fermigeschwindigkeit am “Äquator” der Fermifläche erklären, was natürlich auch ein Verschwinden der Projektion der Fermigeschwindigkeit $|\eta_k|$ in der Ebene senkrecht zum Magnetfeld zur Folge hat. Dies ist ein Effekt, der zu einer Divergenz des oberen kritischen Felds führt – vergleichbar mit einer zylindrischen Fermifläche ohne c -Achsen Dispersion und einem in a - b -Ebenen-Richtung angelegten Magnetfeld. Für Werte von $A > \frac{1}{3}$ führt dagegen der lineare Anstieg von $g_F(s)$ für kleine s zu Zustandsdichten, die sich mehr und mehr der Zustandsdichte einer isotropen Fermifläche annähern, die im Grenzfall $A \rightarrow 1$ in dem Modell enthalten ist (siehe Abbildung 3.13 c). Dass in diesem Fall Divergenz und Abbruch der Gewichtsfunktion nicht bei $s = 1$ erfolgt, wie dies bei der isotropen Fermifläche der Fall war, liegt an der etwas anders erfolgten Definition der Fermigeschwindigkeit \bar{v}_F und damit einem anders normierten Parameter $\alpha = \bar{v}_F \sqrt{\frac{eB}{c}}$. Da die Magnetfeldstärke aber jeweils auf das obere kritische Feld B_{c2} bezogen ist, kann die Normierung von α bei der Berechnung der gemittelten Quasiteilchen-Zustandsdichte beliebig gewählt werden – insofern die Wahl mit derjenigen konsistent ist, die bei der Berechnung der Gapgleichung getroffen wurde.

3.3 Die räumlich gemittelte Zustandsdichte für den Vortexzustand von MgB₂

Um die räumlich gemittelte Zustandsdichte für den Vortexzustand von Magnesiumdiborid zu berechnen, muss zuerst die Zweiband-Gapgleichung im Vortexzustand gelöst werden. Liegt das Magnetfeld nicht parallel zur Hauptsymmetrieachse des Kristalls an, so muss desweiteren die korrekte Form des Vortexgitters durch Minimierung der Freien Energie gefunden werden. Ebenso wie im Einband-Fall kann jedoch auch hier für kleine Temperaturen die Magnetfeldabhängigkeit des Paarpotentials annähernd durch ein wurzelförmiges Verhalten beschrieben werden. Erst bei höheren Temperaturen findet man deutliche Abweichungen. Hier steht insbesondere das Verhalten des kleinen Gaps im π -Band sehr stark unter dem Einfluss der Interband-Paarungswechselwirkung, die in die Außerdiagonaleinträge der Kopplungsmatrix $\lambda_{\alpha\alpha'}$ eingeht. Daher ist es sinnvoll, mit $\eta = \frac{\lambda_{\pi\pi} - \lambda_{-}}{\lambda_{+} - \lambda_{-}}$ ein Maß für die Kopplungsstärke einzuführen, wie es die Autoren von [19] nahe legen. Dabei entspricht $\eta = 0$ einem Verschwinden der Interbandkopplung, während $\eta = 0,5$ eine maximale Interbandkopplung beschreibt. Ganz ohne Interbandkopplung ($\eta = 0$) würde das kleinere Gap bei einer entsprechend niedrigeren Übergangstemperatur $T_c^{(\pi)} = 2\Delta_0^{(\pi)}/3,53$ verschwinden als das größere Gap. Daraus resultiert, dass bei einer nur sehr schwachen Interbandkopplung das kleinere Gap zwischen der kritischen Temperatur des Gesamtsystems und der zu seinem Wert korrespondierenden kritischen Temperatur mehr oder weniger stark unterdrückt ist und es damit

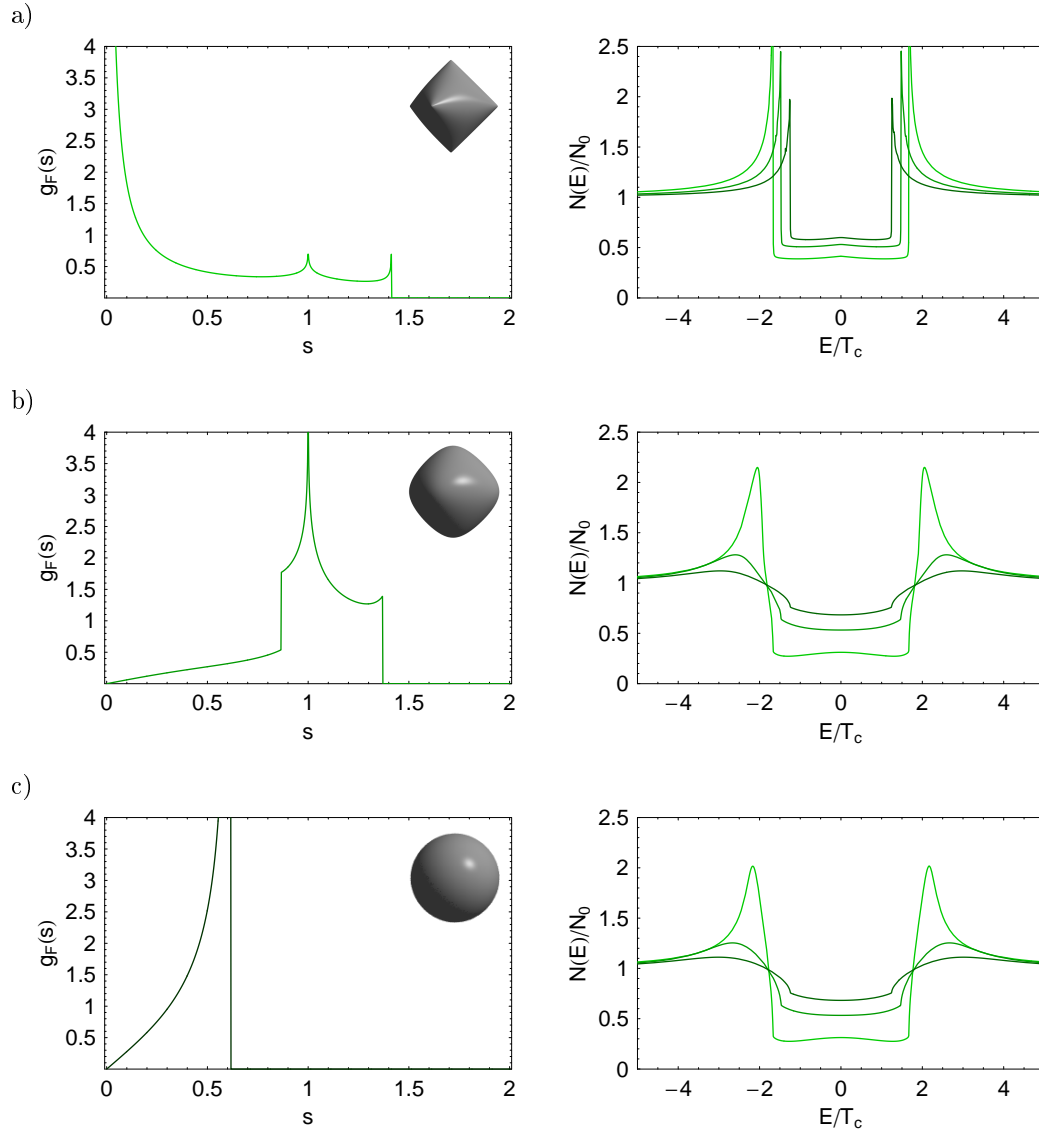


Abbildung 3.13: Die Gewichtsfunction und die Quasiteilchen-Zustandsdichte für ein dreidimensionales "tight binding"-Modell mit unterschiedlich starkem "nesting" der Fermiflächen. Der "nesting"-Parameter $A = \frac{\epsilon F}{6t}$ wurde von $A = \frac{1}{3}$ (a) über $A = \frac{1}{2}$ (b) bis $A = \frac{14}{15}$ (c) variiert, der Inset zeigt jeweils die zugehörige Form der Fermifläche. Rechts sind die Quasiteilchen-Zustandsdichten für die links angegebenen Fermiflächen für Magnetfelder von $B = 0, 1B_{c2}$, $B = 0, 3B_{c2}$ und $B = 0, 5B_{c2}$ berechnet.

3. Der Vortexzustand im Grenzfall hoher Magnetfelder

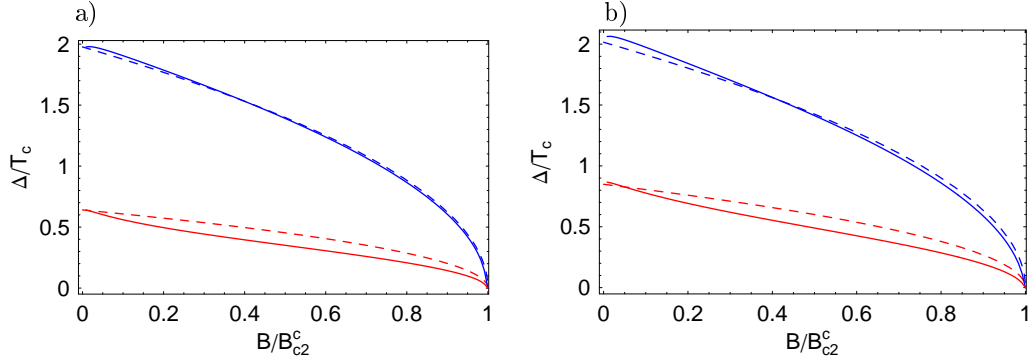


Abbildung 3.14: Die Magnetfeldabhängigkeit der Paarpotentialamplituden im σ -Band (blau) und im π -Band (rot) von Magnesiumdiborid, berechnet mit unterschiedlichen Interbandkopplungsstärken: Für (a) wurde eine schwache Interbandkopplungsstärke von $\eta = 0,064$ angenommen (siehe [7]), für (b) eine stärkere Interbandkopplungsstärke von $\eta = 0,121$ (siehe [19]). Ein deutlicher Unterschied ist bei dem Verhältnis der zwei Paarpotentialamplituden bei $B = 0$ erkennbar, im ersten Fall ist $c_0(\eta = 0,064) = \frac{\Delta^{(\sigma)}}{\Delta^{(\pi)}} = 3,05$ gegeben, im zweiten Fall ergibt sich $c_0(\eta = 0,121) = 2,37$. In beiden Fällen ist eine wurzelförmige Näherung der Magnetfeldabhängigkeit des Paarpotentials (gestrichelt) angegeben.

starke Abweichungen von der “klassischen” Temperaturabhängigkeit aufweist. Für niedrige Temperaturen sind diese Abweichungen jedoch nur gering und hier liefert eine wurzelförmige Näherung der Magnetfeldabhängigkeit hinreichend gute Ergebnisse (siehe Abbildung 3.14). Die Matrix $\lambda_{\alpha\alpha'}$ ist aus Bandstrukturrechnungen bekannt und wurde von Liu et al. in [7] zu $\lambda_{\sigma\sigma} = 0,959$, $\lambda_{\sigma\pi} = 0,222$, $\lambda_{\pi\sigma} = 0,163$ und $\lambda_{\pi\pi} = 0,278$ berechnet. Daraus ergeben sich die Eigenwerte der Matrix zu $\lambda_+ = 1,008$ und $\lambda_- = 0,228$ sowie eine Interbandkopplungsstärke von $\eta = 0,064$. Für die Berechnung der Paarpotentialamplituden sowie der Zustandsdichten in dieser Arbeit wurde neben der von Liu et al. vorgeschlagenen Kopplungsmatrix jedoch noch eine weitere Kopplungsmatrix berücksichtigt, die unter Beibehaltung der Eigenwerte von $\lambda_{\alpha\alpha'}$ und durch eine höhere Interbandkopplungsstärke von $\eta = 0,121$ gewonnen wurde. Diese $\lambda_{\alpha\alpha'}$ -Matrix erhalten Dahm und Schopohl in [19] durch eine Anpassung ihrer Theorie an die gemessene Anisotropie des oberen kritischen Felds durch Lyard et al. [18] (vergleiche Abbildung 1.3). Die Kopplungsmatrix schreibt sich in diesem Fall als

$$\lambda_{\alpha\alpha'} = \begin{pmatrix} 0,914 & 0,297 \\ 0,218 & 0,322 \end{pmatrix}$$

In den Abbildungen 3.15 a) bis f) sind die Ergebnisse, die mit den beiden Modellannahmen berechnet wurden, gegenübergestellt. Dabei muss bei der Berechnung der Zustandsdichte und der Gapamplitude im Vortexzustand für den Zweiband-Fall berücksichtigt werden, dass die Fermigeschwindigkeiten in den unterschiedlichen Bändern verschieden sein können. Für den vorliegenden Fall von Magnesiumdiborid wurde die Fermigeschwindigkeit im σ -Band als $v_F^{(\sigma)} = 4,4 \cdot 10^5 \frac{\text{m}}{\text{s}}$ und im π -Band als $v_F^{(\pi)} = 8,2 \cdot 10^5 \frac{\text{m}}{\text{s}}$ angesetzt (siehe [7]). Für ein Magnetfeld in c -Achsen-Richtung des Kristalls genügt das unverzerrte Abrikosov-Vortexgitter zur Beschreibung des Grundzustands des Paarpotentials, und die Zustandsdichte berechnet sich als

$$N(E, B) = N_0^{(\sigma)} \text{Re} \left[\left\langle g^{(\sigma)}(-iE, \vec{k}_F) \right\rangle_{\sigma} \right] + N_0^{(\pi)} \text{Re} \left[\left\langle g^{(\pi)}(-iE, \vec{k}_F) \right\rangle_{\pi} \right]$$

wobei $g^{(\sigma)}(-iE, \vec{k}_F)$ und $g^{(\pi)}(-iE, \vec{k}_F)$ gemäß Gleichung (2.7) analytisch berechnet werden können. Dabei kann die Fermiflächenmittelung im π -Band unter Verwendung der Gewichtsfunktion (3.2) erfolgen, wobei die Magnetfeldabhängigkeit über $\alpha^{(\sigma)} = v_F^{(\sigma)} \sqrt{\frac{eB}{c}}$ und $\alpha^{(\pi)} = v_F^{(\pi)} \sqrt{\frac{eB}{c}}$ mit $v_F^{(\sigma)} \neq v_F^{(\pi)}$ in die Berechnung eingeht. In Abbildung 3.15 a) und b) ist das Quasiteilchenspektrum für Magnesiumdiborid, normiert auf $N_0 = N_0^{(\sigma)} + N_0^{(\pi)}$, gezeigt. Dabei berechnet sich das Gewicht der Zustandsdichte des π -Bandes als $w_\pi = \frac{N_0^{(\pi)}}{N_0^{(\sigma)} + N_0^{(\pi)}} = \frac{1}{\zeta+1} = 0,577$ und das der Zustandsdichte des σ -Bandes als $w_\sigma = 1 - w_\pi = 0,423$. Sofort zu erkennen ist das deutlich raschere Verschwinden des Peaks an der Gapkante im π -Band im Vergleich zum Peak an der Gapkante im σ -Band, ein Effekt, der auf die unterschiedliche topologische Struktur der zwei Fermiflächen zurückzuführen ist. Ein Vergleich der Zustandsdichte bei $E = 0$ als Funktion des Magnetfelds mit gemessenen Werten durch Bouquet et al. zeigt, dass die Annahme einer stärkeren Interbandkopplung $\eta = 0,121$ zu einer besseren Übereinstimmung führt als die Berechnungen mit einer niedrigeren Interbandkopplungsstärke von $\eta = 0,064$, wie sie aus den Bandstrukturrechnungen vorausgesagt wurde. Ist die Temperatur- und Magnetfeldabhängigkeit der Paarpotentialamplituden sowie der Quasiteilchenzustandsdichten bekannt, so kann zudem die spezifische Wärme des elektronischen Systems im Rahmen der analytischen Näherung berechnet werden als

$$C_s - C_n = -T \sum_{\alpha} \int_0^{\omega_c} \left\{ -\frac{E^2}{2T^3} \frac{1}{\cosh^2\left(\frac{E}{2T}\right)} N^{(\alpha)}(E) + \left[\frac{E}{T} \tanh \frac{E}{2T} - 2 \ln \left(2 \cosh \frac{E}{2T} \right) \right] \partial_T N^{(\alpha)}(E) \right\} dE$$

wobei $\partial_T N^{(\alpha)}(E)$ gegeben ist als

$$\partial_T N^{(\alpha)}(E) = \left\langle -\frac{P_{\Lambda}^{(\alpha)}(-iE, |\eta_k|)}{\sqrt{1 + P_{\Lambda}^{(\alpha)}(-iE, |\eta_k|)}} \frac{\partial_T \Delta^{(\alpha)}}{\Delta^{(\alpha)}} \right\rangle_{\alpha}$$

Die Tatsache, dass allein die Paarpotentialamplitude eine Temperaturabhängigkeit aufweist, sowie die Verwendung der Stationaritätsbedingung des Druckfunktional führt zu einem Verschwinden aller gekoppelter Terme und zu einer einfachen additiven Überlagerung der Anteile der spezifischen Wärme für Teilchen aus dem σ -Band und Teilchen aus dem π -Band. Die Ergebnisse dieser Rechnungen sind in Abbildung 3.15 e) und f) für die zwei verschiedenen Interbandkopplungsstärken $\eta = 0,064$ und $\eta = 0,121$ einander gegenübergestellt.

Gleichermaßen können die Paarpotentialamplituden und die Quasiteilchenzustandsdichten auch für ein Magnetfeld in der a - b -Ebene des Kristalls berechnet werden. Hierbei ist zu beachten, dass das Vortextgitter aufgrund der Anisotropie der Fermigeschwindigkeitskomponente in der Ebene senkrecht zum Magnetfeld seine Form ändert. Dabei muss der Verzerrungsparameter τ als Funktion des Magnetfelds aus der Minimierung der Freien Energie – wie im vorangegangenen Abschnitt beschrieben – berechnet werden. Der Wert für τ bei $B = B_{c2}$ wurde schon von Dahm und Schopohl in [19] durch Maximierung von B_{c2} zu $\tau = \frac{1}{2} \ln \epsilon_c$ abgeschätzt, da hier eine Dominanz des σ -Bandes vermutet wurde. Diese Vermutung bestätigt sich, jedoch wächst für sehr niedrige Magnetfelder der Einfluss des π -Bandes zusehends und der Verzerrungsparameter τ ändert – im Rahmen der analytischen Näherung nach Pesch berechnet – für $B \rightarrow 0$ sogar sein Vorzeichen (siehe Abbildung 3.16 a) und vergleiche mit Abbildung 3.9). Die Magnetfeldabhängigkeiten der Paarpotentialamplituden im σ - und im π -Band weisen eine starke Abweichung von dem einfachen wurzelförmigen Verhalten auf. Man findet für kleine Magnetfelder eine rasche Unterdrückung der Gapamplituden von den Maximalwerten bei $B = 0$, die auf ein weit niedrigeres B_{c2} – korrespondierend zur halbtorusförmigen Fermifläche – hindeutet (Abbildung 3.16 b). Für größere Magnetfelder

3. Der Vortexzustand im Grenzfall hoher Magnetfelder

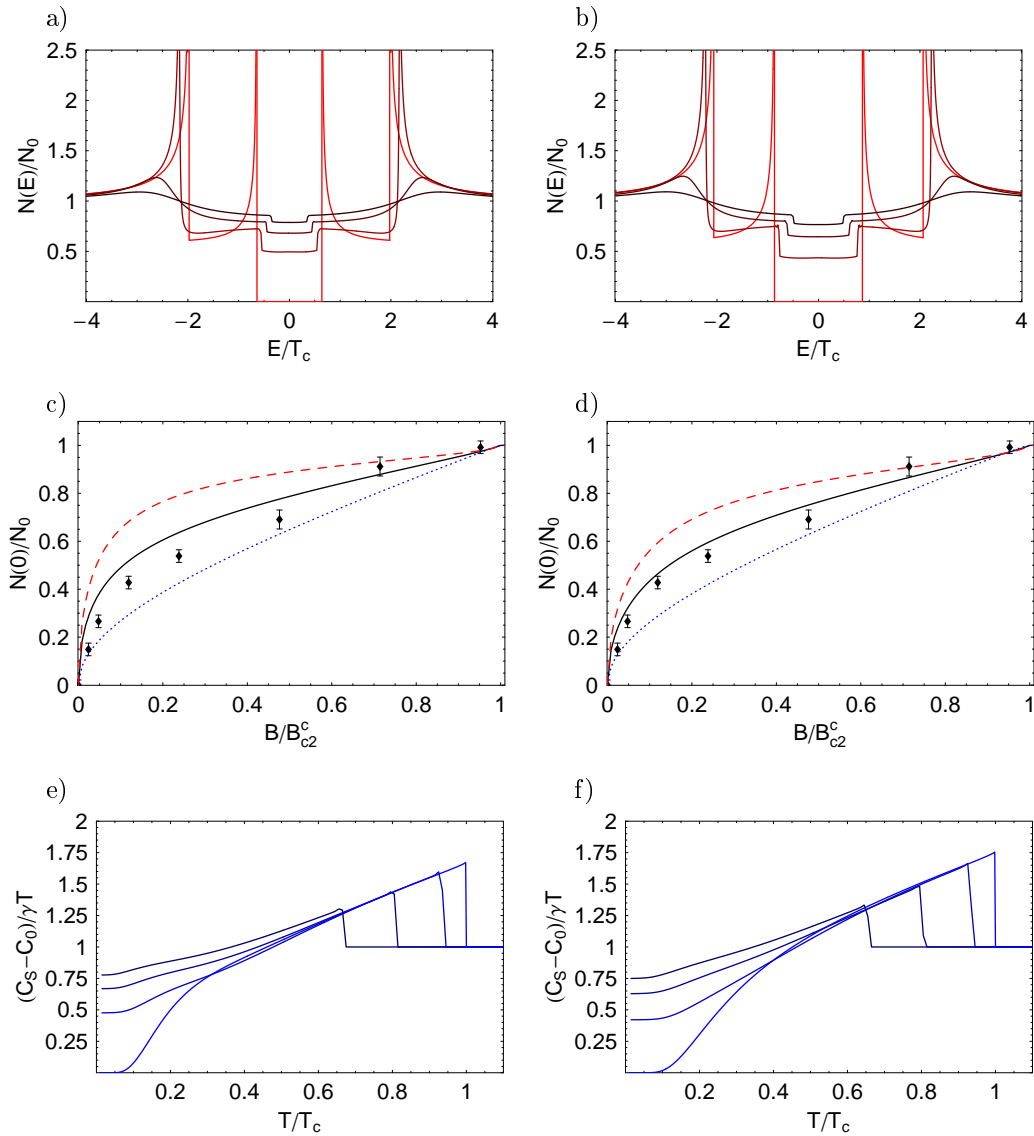


Abbildung 3.15: Verschiedene Ergebnisse der analytischen Näherung für unterschiedliche Kopplungsstärken: links für $\eta = 0,064$ und rechts für $\eta = 0,121$. In (a) und (b) ist das gemittelte Quasiteilchenspektrum für $B = 0$ sowie im Vortexzustand von Magnesiumdiborid für drei verschiedene Magnetfelder $B = 0,1B_{c2}^c$, $B = 0,3B_{c2}^c$ und $B = 0,5B_{c2}^c$ gezeigt. In (c) und (d) ist die gemittelte Quasiteilchen-Zustandsdichte bei $E = 0$ als Funktion des Magnetfelds aufgetragen, wobei die Ergebnisse der Rechnungen mit den Messungen von Bouquet et al. [38] verglichen werden und hierfür das obere kritische Magnetfeld zu $B_{c2}^c = 4,2\text{T}$ angenommen wurde (siehe auch [39]). In (e) und (f) ist schließlich die spezifische Wärme des elektronischen Systems für $B = 0$ gezeigt, sowie im Vortexzustand für $B = 0,1B_{c2}^c$, $B = 0,3B_{c2}^c$ und $B = 0,5B_{c2}^c$.

erkennt man jedoch, dass das σ -Band mit seinem sehr hohen B_{c2} das Verhalten der Paarpotentialamplituden dominiert. Der Vergleich der Zustandsdichte bei $E = 0$ als Funktion des Magnetfelds (Abbildung 3.17 b) zeigt im Vergleich zu den gemessenen Werten einen deutlich steileren Anstieg, der durch das rasche Verschwinden der Gapstruktur im π -Band-Spektrum zu erklären ist (vgl. Abbildung 3.17 a). Dies kann durch die unzulängliche Beschreibung der gemittelten Zustandsdichte für kleine Magnetfelder im Rahmen der hier verwendete Näherung erklärt werden, da diese per Konstruktion natürlich nur für hohe Magnetfelder Gültigkeit besitzt. Für niedrige Magnetfelder spielt neben der Reskalierung des Vortexgitters auch das Schrumpfen des Vortexcores relativ zum Vortexabstand eine bedeutende Rolle, was zu einer höheren Gewichtung der Bulk-Zustandsdichte im Außenraum des Vortex führt und damit das rasche Verschwinden der Gapstruktur im Quasiteilchenspektrum begrenzt.

3.4 Das obere kritische Magnetfeld im sauberen und im schmutzigen Grenzfall

Eine der im Experiment am einfachsten zugänglichen charakteristischen Größen eines Supraleiters im Magnetfeld ist das obere kritische Magnetfeld, bei dem ein Übergang des elektronischen Systems von der supraleitenden in die normaleleitende Phase stattfindet. Schon ein Jahr nach der Entdeckung der supraleitenden Eigenschaften von Magnesiumdiborid wurden an den ersten einkristallinen Proben dieses Materials Messungen des oberen kritischen Magnetfelds vorgenommen, die eine stark temperaturabhängige Anisotropie von B_{c2} bezüglich der Richtung des angelegten magnetischen Felds aufwiesen [18, 40]. Diese Temperaturabhängigkeit der Anisotropie kann im Rahmen eines Zweiband-Modells unter Berücksichtigung der entsprechenden Fermiflächengeometrien schlüssig erklärt werden, wie Dahm und Schopohl für den sauberen Grenzfall in [19] und Golubov und Koshelev für den schmutzigen Grenzfall in [41] zeigen konnten. Da die Größe des oberen kritischen Felds als Funktion der Temperatur eine Schlüsselfunktion beim Verständnis des Vortexzustands von MgB_2 spielt, soll im folgenden die Herleitung der Ausdrücke für den sauberen wie den schmutzigen Grenzfall kurz skizziert werden, wie sie in [19] bzw. ausführlicher im Anhang von [2] (für den sauberen Grenzfall) und in [33] (für den schmutzigen Grenzfall) berechnet wurden. Beide können aus der linearisierten Selbstkonsistenzgleichung für das Paarpotentials berechnet werden. Für den sauberen Grenzfall kann die Gapgleichung (2.10) in der Umgebung des Phasenübergangs bei B_{c2} unter Vernachlässigung quadratischer Terme in $\Delta^{(\alpha)}$, d.h mit $g^{(\alpha)}(\omega, \vec{k}_F) \approx 1$, folgendermaßen geschrieben werden:

$$\Delta^{(\alpha)} = \sum_{\alpha'} \lambda_{\alpha\alpha'} \left[\frac{1}{\lambda_+} - \ln \frac{T}{T_c} - l_{\alpha'}(B_{c2}, T) \right] \Delta^{(\alpha')} \quad (3.3)$$

wobei l_α unabhängig von $\Delta^{(\alpha)}$ nur noch eine Funktion des oberen kritischen Felds und der Temperatur ist:

$$l_\alpha(B_{c2}, T) = 2\pi T \sum_{0 < \epsilon_n < \infty} \frac{1}{\epsilon_n} \left(1 - \left\langle \sqrt{\pi} z^{(\alpha)} w \left(iz^{(\alpha)} \right) \right\rangle_{FS_\alpha} \right)$$

Unter Verwendung der folgenden Identitäten, die für $\epsilon_n > 0$ gelten

$$\frac{1}{\epsilon_n} = \int_0^\infty e^{-s\epsilon_n} ds, \quad \frac{\sqrt{\pi}}{\epsilon_n} zw(iz) = \int_0^\infty e^{-\frac{1}{8}|\eta_k|^2 s^2 - \epsilon_n s} ds, \quad \text{mit } z = \frac{\sqrt{2}\epsilon_n}{|\eta_k|}$$

3. Der Vortezzustand im Grenzfall hoher Magnetfelder

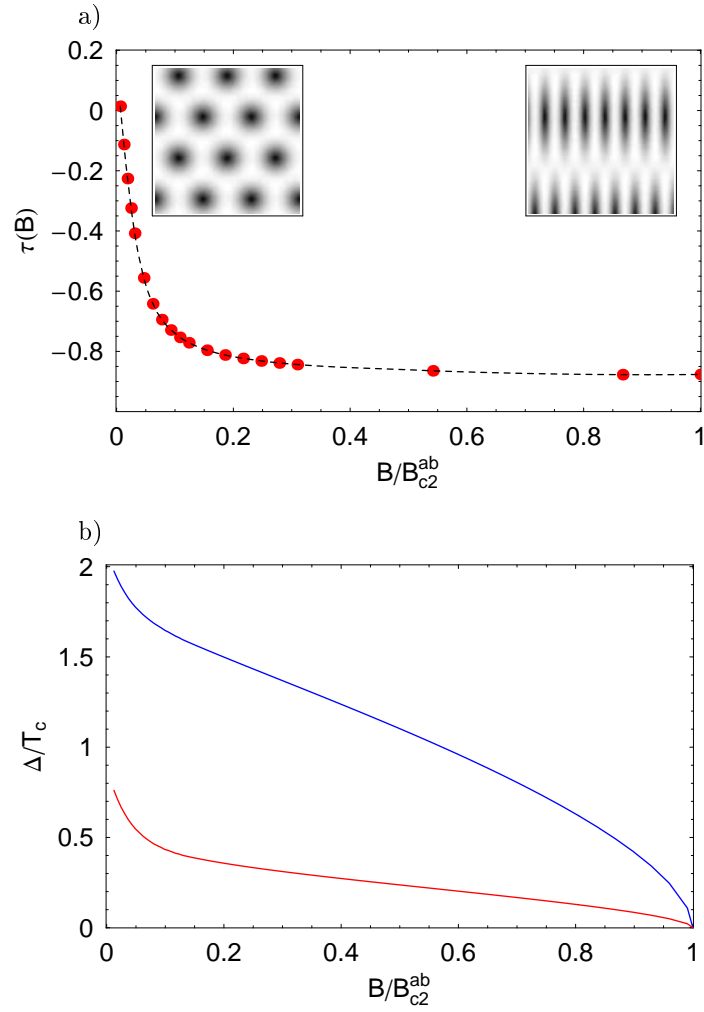


Abbildung 3.16: **a)** Der Verzerrungsparameter τ des Vortextgitters als Funktion des Magnetfelds für Magnesiumdiborid. Die Insets zeigen das verzerrte Vortextgitter für $B \rightarrow 0$ und $B \rightarrow B_{c2}$. **b)** Die Paarpotentialamplituden im σ -Band (blau) und im π -Band (rot) als Funktion von B für den Vortextzustand von MgB₂ für ein Magnetfeld in Richtung der a - b -Ebene des Kristalls.

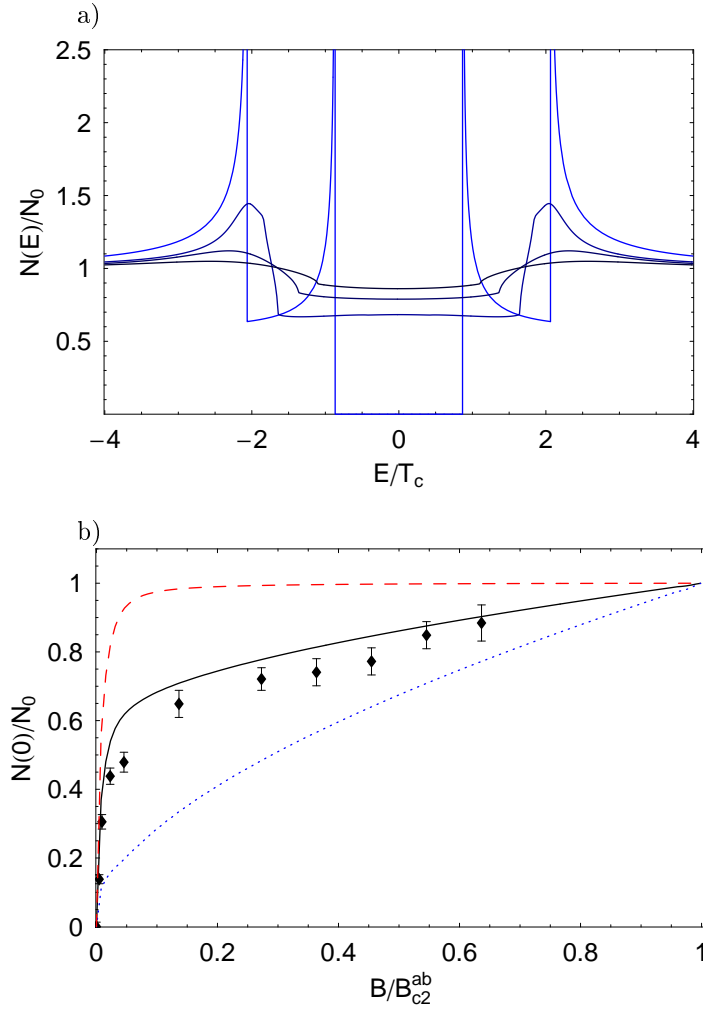


Abbildung 3.17: **a)** Das Quasiteilchenspektrum im Vortexzustand von Magnesiumdiborid für $B = 0$ sowie für $B = 0, 1B_{c2}^{ab}$, $B = 0, 3B_{c2}^{ab}$ und $B = 0, 5B_{c2}^{ab}$ für ein Magnetfeld parallel zur a - b -Ebene des Kristalls. **b)** Die für $E = 0$ als Funktion des Magnetfelds berechnete Zustandsdichte im Vergleich zu den Messungen von Bouquet et al. [38]. Dabei wurde das obere kritische Magnetfeld zu $B_{c2}^{ab} = 22\text{T}$ angenommen. Die Rechnungen wurden für eine c -Achsen-Dispersion von $\epsilon_c = 0,163$ und eine Interbandkopplungsstärke von $\eta = 0,121$ durchgeführt.

3. Der Vortezzustand im Grenzfall hoher Magnetfelder

kann die Summation über ϵ_n in ein schnell konvergentes Integral umgewandelt werden und man erhält mit $u = \pi T s$

$$\begin{aligned} l_\alpha(B_{c2}, T) &= \int_0^\infty 2\pi T \sum_{0 < \epsilon_n < \infty} \left(e^{-s\epsilon_n} - \left\langle e^{-\frac{1}{8}|\eta_k^{(\alpha)}|^2 s^2 - \epsilon_n s} \right\rangle_{FS_\alpha} \right) ds \\ &= \int_0^\infty \left\langle 1 - e^{-\frac{1}{8}|\eta_k^{(\alpha)}|^2 s^2} \right\rangle_{FS_\alpha} 2\pi T \sum_{0 < \epsilon_n < \infty} e^{-s\epsilon_n} ds \\ &= \int_0^\infty \left\langle 1 - e^{-\frac{1}{8\pi^2 T^2}|\eta_k^{(\alpha)}|^2 u^2} \right\rangle_{FS_\alpha} \frac{2e^{-u}}{1 - e^{-2u}} du \end{aligned}$$

und damit den Ausdruck von Dahm und Schopohl in [19]:

$$l_\alpha(B_{c2}, T) = \int_0^\infty \frac{du}{\sinh u} \left\langle 1 - e^{-\frac{u^2}{8\pi^2 T^2}|\eta_k^{(\alpha)}|^2} \right\rangle_{FS_\alpha}$$

Für ein Magnetfeld parallel zur a - b -Ebenen Richtung des Kristalls muss bei der Festlegung von $|\eta_k^{(\alpha)}|$ auch der Verzerrungsparameter τ berücksichtigt werden, der, wie in den vorangegangenen Abschnitten erklärt wurde, die zwei Komponenten der Fermigeschwindigkeit in $|\eta_k^{(\alpha)}|$ skaliert. Dabei kann τ hier aus einer Maximierungsbedingung des oberen kritischen Felds bestimmt werden, und es muss nicht die Differenz der Freien Energie berechnet werden – die hier obendrein zusammen mit Δ verschwindet. Das obere kritische Magnetfeld findet man nun aus der Bedingung, dass der größte Eigenwert von Gleichung (3.3) gleich eins wird. Dies führt auf die folgende Bestimmungsgleichung von B_{c2} :

$$(1 - \eta)l_\sigma + \eta l_\pi + \ln \frac{T}{T_c} = -\frac{\lambda_+ \lambda_-}{\lambda_+ - \lambda_-} \left[\ln \frac{T}{T_c} + l_\sigma \right] \left[\ln \frac{T}{T_c} + l_\pi \right] \quad (3.4)$$

In Abbildung 3.18 sind die Ergebnisse der Berechnung des oberen kritischen Magnetfelds in c -Achsen-Richtung und in a - b -Ebenen-Richtung für zwei unterschiedliche Interbandkoppelungsstärken η gegenübergestellt (vgl. [19]).

Gleichermaßen kann auch ein Ausdruck für das obere kritische Feld im schmutzigen Grenzfall berechnet werden (siehe [33]). Hier muss von der linearisierten Usadel-Gleichung ausgegangen werden, die sich mit $g^{(\alpha,0)} \approx \text{sign}(\epsilon_n)$ und für $\epsilon_n > 0$ folgendermaßen schreiben lässt

$$\left[\epsilon_n - \frac{1}{2} \sum_{l,m} D_{lm}^{(\alpha)} \left(\partial_l - i \frac{2e}{c} A_l \right) \left(\partial_m - i \frac{2e}{c} A_m \right) \right] f^{(\alpha,0)} = \Delta^{(\alpha)}$$

Aufgelöst nach $f^{(\alpha,0)}$ kann dieser Ausdruck in die Gapgleichung eingesetzt werden, und man erhält

$$\Delta^{(\alpha)}(\vec{r}) = \sum_{\alpha'} \lambda_{\alpha\alpha'} \left[\left(\frac{1}{\lambda_+} - \ln \frac{T}{T_c} \right) \Delta^{(\alpha')}(\vec{r}) + 2\pi T \sum_{0 < \epsilon_n < \infty} f^{(\alpha',0)}(\vec{r}) - \frac{\Delta^{(\alpha')}(\vec{r})}{\epsilon_n} \right]$$

Mit dem Abrikosov-Vortezgitter als Ansatz für die räumliche Variation des Paarpotentials $\Delta^{(\alpha)}(\vec{r}) = \Delta^{(\alpha)} \psi_\Lambda^\tau(\vec{r})$ und nach Multiplikation mit ψ_Λ^τ unter Verwendung des Skalarprodukts $\langle \dots, \dots \rangle_{C_\Lambda}$ nimmt die Gapgleichung die folgende Form an

$$\Delta^{(\alpha)} = \sum_{\alpha'} \lambda_{\alpha\alpha'} \left[\left(\frac{1}{\lambda_+} - \ln \frac{T}{T_c} \right) \Delta^{(\alpha')} + 2\pi T \sum_{0 < \epsilon_n < \infty} \left\langle \psi_\Lambda^\tau, f^{(\alpha',0)} \right\rangle_{C_\Lambda} - \frac{\Delta^{(\alpha')}}{\epsilon_n} \right]$$

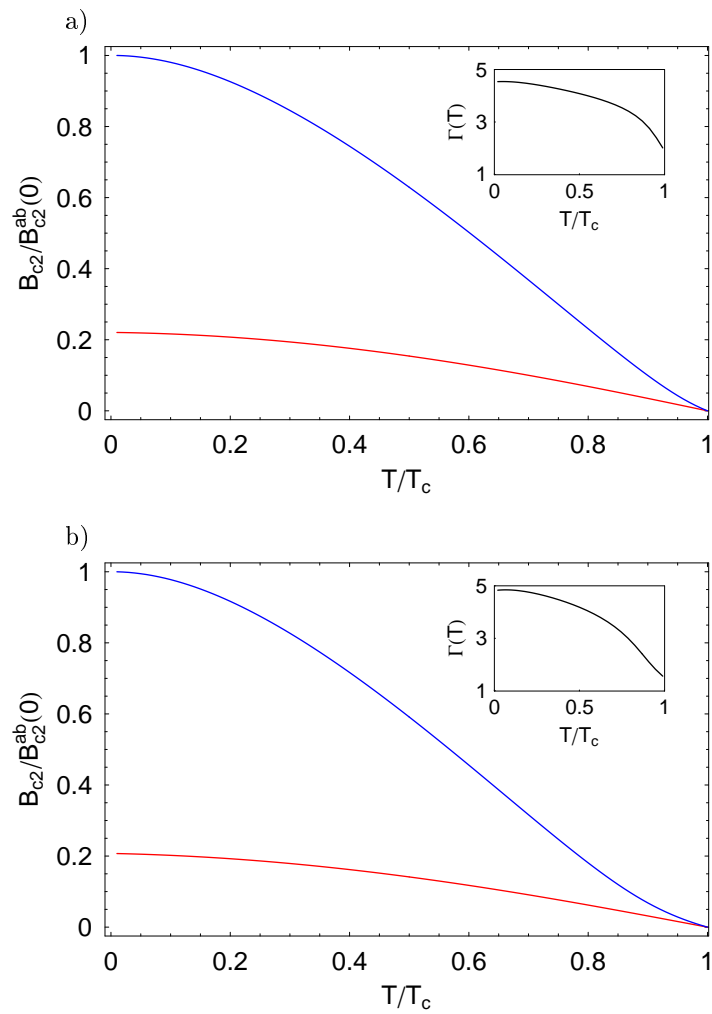


Abbildung 3.18: Das obere kritische Magnetfeld als Funktion der Temperatur, berechnet im sauberen Grenzfall für zwei verschiedene Parametersätze mit $\eta = 0,064$ (a) und $\eta = 0,121$ (b). Gezeigt ist das obere kritische Magnetfeld in a - b -Ebenen-Richtung (blau) und in c -Achsen-Richtung (rot). Der Inset zeigt jeweils das Anisotropieverhältnis $\Gamma(T) = \frac{B_{c2}^{ab}(T)}{B_{c2}^c(T)}$.

3. Der Vortezzustand im Grenzfall hoher Magnetfelder

wobei verwendet wurde, dass nach Definition gilt $\langle \psi_\Lambda^\tau, \psi_\Lambda^\tau \rangle_{C_\Lambda} = \langle \psi_\Lambda^{\tau\dagger}(\vec{r}) \psi_\Lambda^\tau(\vec{r}) \rangle_{C_\Lambda} = 1$. Unter Einführung von

$$l_\alpha(B_{c2}, T) = 2\pi T \sum_{0 < \epsilon_n < \infty} \frac{1}{\epsilon_n} \left(1 - \frac{\epsilon_n}{\Delta(\alpha)} \langle \psi_\Lambda^\tau, f^{(\alpha,0)} \rangle_{C_\Lambda} \right)$$

kann die Gleichung auf die gleiche Form gebracht werden wie die Gapgleichung im sauberen Grenzfall (3.3). Jedoch muss noch der obige Ausdruck $l_\alpha(B_{c2}, T)$ unter Verwendung der linearisierten Usadel-Gleichung berechnet werden. Dafür soll der Operator

$$\hat{L}^{(\alpha)} = \epsilon_n - \frac{1}{2} \sum_{l,m} D_{lm}^{(\alpha)} \left(\partial_l - i \frac{2e}{c} A_l \right) \left(\partial_m - i \frac{2e}{c} A_m \right)$$

unter Verwendung der schon in Abschnitt 2.2 eingeführten Auf- und Absteigeoperatoren b und b^\dagger bzw. der in Abschnitt 3.2.2 definierten modifizierten Operatoren γ und γ^\dagger geschrieben werden. Zuerst kann die eichinvariante Ableitung $\partial_l - i \frac{2e}{c} A_l$ durch die Operatoren b und b^\dagger ausgedrückt werden. Hier erhält man

$$\partial_1 - i \frac{2e}{c} A_1 = \sqrt{\frac{eB}{c}} (b - b^\dagger), \quad \partial_2 - i \frac{2e}{c} A_2 = -i \sqrt{\frac{eB}{c}} (b + b^\dagger), \quad \partial_3 - i \frac{2e}{c} A_3 = 0$$

was unter Verwendung von $b = u\gamma + v\gamma^\dagger$ und $b^\dagger = u\gamma^\dagger + v\gamma$ sowie $u + v = e^\tau$ und $u - v = e^{-\tau}$ geschrieben werden kann als

$$\partial_1 - i \frac{2e}{c} A_1 = \sqrt{\frac{eB}{c}} e^{-\tau} (\gamma - \gamma^\dagger), \quad \partial_2 - i \frac{2e}{c} A_2 = -i \sqrt{\frac{eB}{c}} e^\tau (\gamma + \gamma^\dagger), \quad \partial_3 - i \frac{2e}{c} A_3 = 0$$

Damit lässt sich der Operator $\hat{L}^{(\alpha)}$ in die folgende Form bringen

$$\hat{L}^{(\alpha)} = \epsilon_n - \frac{eB}{2c} \left[\begin{array}{c} D_{11}^{(\alpha)} e^{-2\tau} (\gamma - \gamma^\dagger)^2 - D_{22}^{(\alpha)} e^{2\tau} (\gamma + \gamma^\dagger)^2 \\ -2i D_{12}^{(\alpha)} (\gamma^2 - (\gamma^\dagger)^2) \end{array} \right]$$

Nun kann das Quadrat $(\gamma \pm \gamma^\dagger)^2$ unter Verwendung der Kommutatorrelation $[\gamma, \gamma^\dagger] = 1$ als

$$(\gamma \pm \gamma^\dagger)^2 = \gamma^2 \pm \gamma\gamma^\dagger \pm \gamma^\dagger\gamma + (\gamma^\dagger)^2 = \gamma^2 + (\gamma^\dagger)^2 \pm (1 + 2\gamma^\dagger\gamma)$$

berechnet werden. Nach Ordnungen von γ und γ^\dagger sortiert und zusammengefasst ergibt sich daraus für $\hat{L}^{(\alpha)}$

$$\hat{L}^{(\alpha)} = \epsilon_n + \frac{eB}{2c} \left[\nu_\alpha^2 (2\gamma^\dagger\gamma + 1) + \xi_\alpha^2 (\gamma^\dagger)^2 + \bar{\xi}_\alpha^2 \gamma^2 \right]$$

wobei ν_α^2 und ξ_α^2 gegeben sind als

$$\nu_\alpha^2 = D_{11}^{(\alpha)} e^{-2\tau} + D_{22}^{(\alpha)} e^{2\tau}, \quad \xi_\alpha^2 = D_{22}^{(\alpha)} e^{2\tau} - D_{11}^{(\alpha)} e^{-2\tau} - 2i D_{12}^{(\alpha)}$$

Nun kann die anomale Greensche Funktion $f^{(\alpha,0)}$ durch Invertierung des Operators $\hat{L}^{(\alpha)}$ berechnet werden als

$$f^{(\alpha,0)}(\vec{r}) = \int_0^\infty ds e^{-s\hat{L}^{(\alpha)}} \Delta^{(\alpha)}(\vec{r})$$

und daraus ergibt sich der für die Berechnung von B_{c2} im schmutzigen Limes relevante räumliche Mittelwert als

$$\begin{aligned} \frac{1}{\Delta(\alpha)} \langle \psi_\Lambda^\tau, f^{(\alpha,0)} \rangle_{C_\Lambda} &= \int_0^\infty ds \langle \psi_\Lambda^\tau, e^{-s\hat{L}^{(\alpha)}} \psi_\Lambda^\tau \rangle_{C_\Lambda} \\ &= \int_0^\infty ds e^{-s\epsilon_n} \langle \psi_\Lambda^\tau, e^{s(a_+ K_+ + a_0 K_0 + a_- K_-)} \psi_\Lambda^\tau \rangle_{C_\Lambda} \end{aligned} \quad (3.5)$$

mit

$$a_+ = -\frac{eB}{c}\xi_\alpha^2, \quad a_0 = -2\frac{eB}{c}\nu_\alpha^2, \quad a_- = -\frac{eB}{c}\xi_\alpha^2$$

und unter Einführung der Operatoren K_+ , K_0 und K_- als

$$K_+ = \frac{1}{2}(\gamma^\dagger)^2, \quad K_0 = \frac{1}{4}(2\gamma^\dagger\gamma + 1), \quad K_- = \frac{1}{2}\gamma^2$$

Um die Wirkung des Operators $\exp[s(a_+K_+ + a_0K_0 + a_-K_-)]$ auf den Grundzustand des Abrikosovgitters berechnen zu können, ist es sinnvoll, die Summe im Argument des Exponentialoperators in ein Produkt aus einzelnen Exponentialoperatoren zu zerlegen und diese einzeln anzuwenden. Dafür kann verwendet werden, dass die so definierten Operatoren K_+ , K_0 und K_- die Kommutatoreigenschaften der Lie-Gruppe $SU(1, 1)$ erfüllen (siehe [33]), d.h.

$$[K_-, K_+] = 2K_0, \quad [K_0, K_+] = K_+, \quad [K_0, K_-] = -K_-$$

was unter Verwendung der Kommutatoreigenschaft $[\gamma, \gamma^\dagger] = 1$ leicht nachgerechnet werden kann. Unter Einführung von drei noch unbekanntem Funktion $b_+(s)$, $b_0(s)$ und $b_-(s)$ kann der Exponentialoperator formal zerlegt werden in

$$e^{s(a_+K_+ + a_0K_0 + a_-K_-)} = e^{b_+(s)K_+} e^{b_0(s)K_0} e^{b_-(s)K_-} \quad (3.6)$$

Die Ableitung der obigen Gleichung nach s und die Multiplikation des inversen Exponentialoperators von rechts führt unter Verwendung von Standardtechniken der Operatoralgebra auf die folgenden drei gekoppelten Differentialgleichungen für $b_+(s)$, $b_0(s)$ und $b_-(s)$ (siehe [33]):

$$\begin{aligned} a_- - e^{-b_0(s)}b'_-(s) &= 0 \\ a_0 - b'_0(s) + 2b_+(s)e^{-b_0(s)}b'_-(s) &= 0 \\ a_+ - b'_+(s) + b_+(s)b'_0(s) - [b_+(s)]^2 e^{-b_0(s)}b'_-(s) &= 0 \end{aligned}$$

mit den aus der Operatoridentität (3.6) folgenden Randbedingungen

$$\lim_{s \rightarrow 0} a_+(s) = \lim_{s \rightarrow 0} a_0(s) = \lim_{s \rightarrow 0} a_-(s) = 0$$

Unter Verwendung der ersten zwei Gleichungen können in der dritten Gleichung $b_-(s)$ und $b_0(s)$ eliminiert werden und man erhält eine Differentialgleichung vom Riccati-Typ für $b_+(s)$ als

$$b'_+(s) - a_0b_+(s) - a_- [b_+(s)]^2 = a_+$$

Diese Differentialgleichung besitzt für die oben angegebenen Randbedingungen die Lösung

$$b_+(s) = \frac{a_+}{W} \frac{1}{\coth(Ws) - \frac{a_0}{2W}}$$

mit dem Parameter $W = \sqrt{a_0^2/4 - a_+a_-}$. Nun können auch die Lösungen für $b_0(s)$ und $b_-(s)$ unter Verwendung von $b_+(s)$ durch einfache Integration gewonnen werden und man erhält

$$b_0(s) = 2Ws - 2 \ln \left[\left(1 - \frac{a_0}{2W}\right) \frac{e^{2Ws} - 1}{2} + 1 \right]$$

und weiter

$$b_-(s) = \frac{a_-}{W} \frac{1}{\coth(Ws) - \frac{a_0}{2W}}$$

3. Der Vortezzustand im Grenzfall hoher Magnetfelder

Damit kann nun der räumliche Mittelwert in Gleichung (3.5) unter Verwendung von $\gamma\psi_\Lambda^\tau = 0$ berechnet werden als

$$\begin{aligned} \left\langle \psi_\Lambda^\tau, e^{b_+(s)K_+} e^{b_0(s)K_0} e^{b_-(s)K_-} \psi_\Lambda^\tau \right\rangle_{C_\Lambda} &= \left\langle e^{\bar{b}_+(s)K_-} \psi_\Lambda^\tau, e^{b_0(s)K_0} \left[e^{b_-(s)K_-} \psi_\Lambda^\tau \right] \right\rangle_{C_\Lambda} \\ &= \left\langle \psi_\Lambda^\tau, e^{b_0(s)K_0} \psi_\Lambda^\tau \right\rangle_{C_\Lambda} = e^{\frac{1}{4}b_0(s)} \langle \psi_\Lambda^\tau, \psi_\Lambda^\tau \rangle_{C_\Lambda} \\ &= e^{\frac{1}{4}b_0(s)} \end{aligned}$$

wobei gilt

$$e^{\frac{1}{4}b_0(s)} = e^{Ws/2 - \ln\left[\left(1 - \frac{a_0}{2W}\right) \frac{e^{2Ws} - 1}{2} + 1\right]/2} = \frac{1}{\sqrt{\frac{1}{2}\left(1 - \frac{a_0}{2W}\right) e^{Ws} + \frac{1}{2}\left(1 + \frac{a_0}{2W}\right) e^{-Ws}}}$$

Nun kann mit a_0 und W sowie unter Verwendung der Identität $\frac{1}{\epsilon_n} = \int_0^\infty e^{-s\epsilon_n} ds$ die Lösung für $l_\alpha(B_{c2}, T)$ im schmutzigen Grenzfall angegeben werden als

$$l_\alpha(B_{c2}, T) = 2\pi T \sum_{0 < \epsilon_n < \infty} \int_0^\infty ds e^{-s\epsilon_n} \left(1 - \frac{1}{\sqrt{\frac{1}{2}\left(1 - \frac{a_0}{2W}\right) e^{Ws} + \frac{1}{2}\left(1 + \frac{a_0}{2W}\right) e^{-Ws}}} \right)$$

und nach Ausführung der Summation über ϵ_n und mit $u = \pi Ts$ erhält man:

$$l_\alpha(B_{c2}, T) = \int_0^\infty \frac{du}{\sinh u} \left(1 - \frac{1}{\sqrt{\frac{1}{2}\left(1 - \frac{a_0}{2W}\right) e^{\frac{W}{\pi T}u} + \frac{1}{2}\left(1 + \frac{a_0}{2W}\right) e^{-\frac{W}{\pi T}u}}} \right)$$

wobei a_0 gegeben ist als

$$a_0 = -2 \frac{eB}{c} \left(D_{11}^{(\alpha)} e^{-2\tau} + D_{22}^{(\alpha)} e^{2\tau} \right)$$

und W sich schreiben lässt als

$$\begin{aligned} W &= \frac{eB}{c} \sqrt{\left(D_{11}^{(\alpha)} e^{-2\tau} + D_{22}^{(\alpha)} e^{2\tau} \right)^2 - \left| D_{22}^{(\alpha)} e^{2\tau} - D_{11}^{(\alpha)} e^{-2\tau} - 2i D_{12}^{(\alpha)} \right|^2} \\ &= 2 \frac{eB}{c} \sqrt{D_{11}^{(\alpha)} D_{22}^{(\alpha)} - \left| D_{12}^{(\alpha)} \right|^2} \end{aligned}$$

Eingesetzt in Gleichung (3.4) kann so das obere kritische Feld im schmutzigen Grenzfall berechnet werden. Für Magnesiumdiborid können die normierten Diffusionskonstanten $\hat{D}_{lm}^{(\alpha)}$ unter Berücksichtigung der korrekten Fermiflächengeometrie bestimmt werden zu:

$$\begin{aligned} \hat{D}_{xx}^{(\sigma)} = \hat{D}_{yy}^{(\sigma)} &= \frac{c}{4\pi^2} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_{-\pi/c}^{\pi/c} dk_c \cos^2 \varphi = \frac{1}{2} \\ \hat{D}_{xx}^{(\pi)} = \hat{D}_{yy}^{(\pi)} &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_{\pi/2}^{3\pi/2} d\vartheta \frac{\nu + \cos \vartheta}{\pi\nu - 2} \cos^2 \vartheta \cos^2 \varphi = \frac{1}{4} + \frac{1}{12 - 6\pi\nu} = 0,23 \\ \hat{D}_{zz}^{(\sigma)} &= \frac{c}{4\pi^2} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_{-\pi/c}^{\pi/c} dk_c \epsilon_c^2 \sin^2 \varphi = \frac{1}{2} \epsilon_c^2 \\ \hat{D}_{zz}^{(\pi)} &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_{\pi/2}^{3\pi/2} d\vartheta \frac{\nu + \cos \vartheta}{\pi\nu - 2} \sin^2 \vartheta = \frac{4 - 3\pi\nu}{12 - 6\pi\nu} = 0,53 \end{aligned}$$

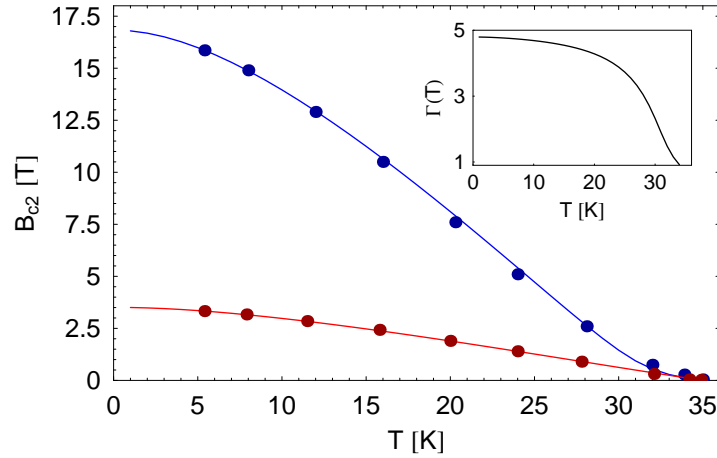


Abbildung 3.19: Das obere kritische Magnetfeld als Funktion der Temperatur im schmutzigen Grenzfall. Die durchgezogenen Linien zeigen Rechnungen für das obere kritische Feld in der a - b -Ebene B_{c2}^{ab} (blau) und für das obere kritische Feld parallel zur c -Achse des Kristalls B_{c2}^c (rot). Die Streuzeiten $\tau_{tr}^{(\alpha,lm)}$ wurden derart angepasst, dass eine möglichst gute Übereinstimmung mit den experimentellen Daten von Lyard et al. [18] (blaue und rote Punkte) erreicht wurde. Die Temperatur ist in Kelvin, die Magnetfeldstärke in Tesla angegeben. Der Inset zeigt das Anisotropieverhältnis $\Gamma = B_{c2}^{ab}/B_{c2}^c$ als Funktion der Temperatur, wie es aus den Rechnungen hervorgeht.

Alle nichtdiagonalen Elemente der beiden Diffusionstensoren sind Null, wie man sich leicht überzeugen kann. Da nur Fälle betrachtet werden sollen, bei denen das Magnetfeld parallel zu einer der drei Hauptachsen des Kristalls angelegt wird, genügt es somit, diese vier unterschiedlichen Diffusionskonstanten zu berechnen. In Abbildung 3.19 sind die Ergebnisse für $B_{c2}(T)$ im schmutzigen Grenzfall gezeigt, wobei hier die experimentellen Ergebnisse eine Anisotropie der Streuzeiten $\tau_{tr}^{(\alpha,l)}$ nahe legen. Aus dem Fit der experimentellen Daten von Lyard et al. [18] wurden die Streuzeiten $\tau_{tr}^{(\alpha,l)}$ und damit die Streuraten $\Gamma_{lm}^{(\alpha)} = \frac{\hat{D}_{lm}^{(\alpha)}}{\tau_{tr}^{(\alpha,lm)}}$ und die Diffusionskonstanten $D_{lm}^{(\alpha)} = \tau_{tr}^{(\alpha,lm)} \left(v_F^{(\alpha)}\right)^2 \hat{D}_{lm}^{(\alpha)}$ folgendermaßen bestimmt:

	$l = x = y, \alpha = \sigma$	$l = z, \alpha = \sigma$	$l = x = y, \alpha = \pi$	$l = z, \alpha = \pi$
$\tau_{tr}^{(\alpha,lm)}$ [s]	$7,27 \cdot 10^{-15}$	$5,32 \cdot 10^{-15}$	$2,53 \cdot 10^{-14}$	$5,28 \cdot 10^{-14}$
$\Gamma_{lm}^{(\alpha)}$ [meV]	45,3	3,27	5,98	6,62
$D_{lm}^{(\alpha)}$ [m ² /s]	$7,0 \cdot 10^{-4}$	$2,7 \cdot 10^{-5}$	$3,9 \cdot 10^{-3}$	$1,8 \cdot 10^{-2}$

wobei die Interbandkopplungsstärke mit $\eta = 0,064$ und die c -Achsen-Dispersion der zylindrischen Fermifläche mit $\epsilon_c = 0,23$ in Analogie zu den Ergebnissen der Bandstrukturrechnungen gewählt wurden. Ein Vergleich mit Diffusionskonstanten, die von Heon-Jung Kim et al. in [42] aus Messungen des oberen kritischen Felds in Aluminium-dotiertem Magnesiumdiborid $\text{Mg}_{1-x}\text{Al}_x\text{B}_2$ extrahiert wurden, zeigt nicht nur eine qualitative, sondern im Falle der Diffusionskonstanten innerhalb der a - b -Ebene auch quantitative Übereinstimmung. Die größere Abweichung bei der Berechnung der beiden anderen Diffusionskonstanten kann auf die Dotierung mit Aluminium zurückgeführt werden, die sich überwiegend in einer Änderung der c -Achsen-Transportgrößen niederschlägt.

Kapitel 4

Der einzelne Vortex als Modell niedriger Magnetfelder

Wenngleich die räumliche Variation des Paarpotentials eines Typ-II-Supraleiters im Vortexzustand über einen weiten Magnetfeldbereich durch ein skaliertes Abrikosovgitter sehr gut beschrieben werden kann, so ist doch für sehr niedrige Magnetfelder nahe des unteren kritischen Felds der isolierte Einzelvortex eine bessere Approximation. Wird der Abstand der einzelnen Flussschläuche so groß, dass das Paarpotential zwischen den Vortices seinen Bulk-Wert annimmt und Strom und Magnetfeld hinreichend klein werden, so kann der Vortex in guter Näherung als isoliert betrachtet und der Einfluss der Flussschläuche untereinander vernachlässigt werden. Die charakteristischen Eigenschaften eines isolierten Vortex sind sowohl für den sauberen als auch für den schmutzigen Grenzfall sowie für beliebige Störstellenkonzentrationen hinlänglich untersucht worden (siehe beispielsweise [43, 44, 45]). Neben der Variation des Paarpotentials ist insbesondere das Auftreten von gebundenen Quasiteilchen-Zuständen am Ort der Flusslinie von besonderem Interesse (siehe [46, 47]). Dabei findet man für einen Supraleiter mit konventioneller bzw. unkonventioneller Paarungssymmetrie eine deutlich unterschiedliche räumliche Variation und Ausdehnung der im Vortexcore gebundenen Zustände sowie voneinander abweichende Ausprägungen des supraleitenden Stroms um das Vortexzentrum, der auf der Länge der Londonschen Eindringtiefe in den Supraleiter hinein abfällt [31, 48]. Auch für einen Zweiband-Supraleiter kann man im Zusammenspiel der zwei unterschiedlichen Paarpotentialamplituden eine Reihe neuer und bisher nicht untersuchter Phänomene erwarten, die im folgenden diskutiert werden sollen. Dabei soll im ersten Abschnitt ein auf zwei Bänder verallgemeinerter Ginzburg-Landau-Ausdruck diskutiert werden, der einen einfachen Variationsansatz zur Beschreibung der Paarpotentialamplituden in der Umgebung des Vortexcores für Temperaturen nahe T_c erlaubt. Im zweiten Abschnitt sollen dann die Ergebnisse einer selbstkonsistenten Rechnung für beliebige Temperaturen vorgestellt werden, wobei insbesondere das Paarpotential und die Zustandsdichte in der Umgebung des Vortexcores betrachtet werden. Im dritten Abschnitt soll dann auf das Schrumpfen des Vortexcores für niedrige Temperaturen eingegangen werden, eine Anomalie, die im sauberen Grenzfall als Kramer-Pesch-Effekt bekannt ist. Im letzten Abschnitt soll schließlich ein “gemischtes” Modell mit einem sauberen, “ballistischen” σ -Band und einem schmutzigen, “diffusiven” π -Band betrachtet werden, wie es erstmals von Eschrig zur Beschreibung von Magnesiumdiborid vorgeschlagen wurde [49].

4.1 Die Verallgemeinerung der Ginzburg-Landau-Theorie

Nahe der kritischen Temperatur können aus dem Freien-Energie-Funktional der quasiklassischen Theorie die Ginzburg-Landau-Gleichungen als Grenzfall abgeleitet werden. Dabei ist jedoch zu berücksichtigen, dass die quasiklassischen Gleichungen in Ordnungen von $\sqrt{1 - \frac{T}{T_c}}$ entwickelt werden, so dass alle Größen, die proportional zur inversen reduzierten Temperatur variieren, in gleichen Ordnungen zusammengefasst werden müssen. Neben der Paarpotentialamplitude $\Delta(T)$ ist hierbei insbesondere der Operator der eichinvarianten Ableitung $\mathcal{D}_\pm^{(\alpha)}$ zu berücksichtigen, der eine Variation auf der Längenskala $\xi_0 \propto \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{T}{T_c}}}$

beschreibt und somit von der gleichen Ordnung ist wie die Paarpotentialamplitude $\Delta(T)$ (siehe [50, 51]). Im folgenden soll skizziert werden, wie man aus der quasiklassischen Theorie ein verallgemeinertes Ginzburg-Landau-Funktional ableiten kann, wobei der Herleitung von Schopohl in [51] gefolgt wird. Bei der folgenden Rechnung soll verwendet werden, dass $\bar{f}^{(\alpha)}(\omega, \vec{k}_F, \vec{r}) = f^{*(\alpha)}(-\omega, \vec{k}_F, \vec{r})$ gilt (siehe [21]), wobei die Funktion mit negativer Frequenz $f^{*(\alpha)}(-\omega, \vec{k}_F, \vec{r})$ abgekürzt werden soll als $f^{*(\alpha)}(-)$. Unter Einführung der Operatoren der eichinvarianten Ableitung

$$\mathcal{D}_-^{(\alpha)} = i\vec{v}_F^{(\alpha)}\vec{\nabla} + \frac{2e}{c}\vec{v}_F^{(\alpha)}\vec{A}(\vec{r}), \quad \text{und} \quad \mathcal{D}_+^{(\alpha)} = -i\vec{v}_F^{(\alpha)}\vec{\nabla} + \frac{2e}{c}\vec{v}_F^{(\alpha)}\vec{A}(\vec{r})$$

können die Eilenberger-Gleichungen (2.3,2.4,2.5) mit $\omega = \epsilon_n$ geschrieben werden als

$$\begin{aligned} (2i\epsilon_n + \mathcal{D}_-^{(\alpha)}) f^{(\alpha)} &= 2i\Delta^{(\alpha)} g^{(\alpha)} \\ (2i\epsilon_n + \mathcal{D}_+^{(\alpha)}) f^{*(\alpha)}(-) &= 2i\Delta^{*(\alpha)} g^{(\alpha)} \end{aligned}$$

In der Umgebung der kritischen Temperatur können nun die Funktionen $g^{(\alpha)}$, $f^{(\alpha)}$ und $f^{*(\alpha)}(-)$ in Ordnungen von $\mathcal{D}_\pm^{(\alpha)} \Delta^\mu$ entwickelt werden (siehe [51]), wobei $j = \nu + \mu$ die Ordnung der Entwicklung angeben soll. Für die anomalen Greenschen Funktionen kann die Entwicklung geschrieben werden als

$$\begin{aligned} f^{(\alpha)} &= f_1^{(\alpha)} + f_2^{(\alpha)} + f_3^{(\alpha)} + \dots \\ f^{*(\alpha)}(-) &= f_1^{*(\alpha)}(-) + f_2^{*(\alpha)}(-) + f_3^{*(\alpha)}(-) + \dots \end{aligned}$$

während für die normale Greensche Funktion aus Symmetriegründen die erste Ordnung verschwindet und man erhält:

$$g^{(\alpha)} = \text{sgn}(\epsilon_n) + g_2^{(\alpha)} + g_3^{(\alpha)} + \dots$$

Setzt man die entwickelten Funktionen in die Eilenberger-Gleichungen ein und sortiert die passenden Ordnungen, so ergeben sich die folgenden Rekursionsbeziehungen für die $f_j^{(\alpha)}$, $f_j^{*(\alpha)}(-)$ und $g_j^{(\alpha)}$:

$$2i\epsilon_n f_j^{(\alpha)} + \mathcal{D}_-^{(\alpha)} f_{j-1}^{(\alpha)} = 2i\Delta^{(\alpha)} g_{j-1}^{(\alpha)} \quad (4.1)$$

$$2i\epsilon_n f_j^{*(\alpha)}(-) + \mathcal{D}_+^{(\alpha)} f_{j-1}^{*(\alpha)}(-) = 2i\Delta^{*(\alpha)} g_{j-1}^{(\alpha)} \quad (4.2)$$

Dabei gilt für die nullte Ordnung

$$f_0^{(\alpha)} = f_0^{*(\alpha)}(-) = 0, \quad g_0^{(\alpha)} = \text{sgn}(\epsilon_n)$$

Eingesetzt in die Normierungsbedingung erhält man:

$$\begin{aligned} & \left(\operatorname{sgn}(\epsilon_n) + g_2^{(\alpha)} + g_3^{(\alpha)} + \dots \right) \left(\operatorname{sgn}(\epsilon_n) + g_2^{(\alpha)} + g_3^{(\alpha)} + \dots \right) \\ & + \left(f_1^{(\alpha)} + f_2^{(\alpha)} + f_3^{(\alpha)} + \dots \right) \left(f_1^{*(\alpha)}(-) + f_2^{*(\alpha)}(-) + f_3^{*(\alpha)}(-) + \dots \right) = 1 \end{aligned}$$

bzw. sortiert nach passenden Ordnungen

$$\begin{aligned} g_2^{(\alpha)} &= -\frac{1}{2} \operatorname{sgn}(\epsilon_n) f_1^{(\alpha)} f_1^{*(\alpha)}(-) \\ g_3^{(\alpha)} &= -\frac{1}{2} \operatorname{sgn}(\epsilon_n) \left(f_1^{(\alpha)} f_2^{*(\alpha)}(-) + f_2^{(\alpha)} f_1^{*(\alpha)}(-) \right) \end{aligned}$$

wobei die nullte Ordnung mit $[\operatorname{sgn}(\epsilon_n)]^2 = 1$ identisch erfüllt ist. Für $j = 1$ können die Ergebnisse für $f_1^{(\alpha)}$ und $f_1^{*(\alpha)}(-)$ direkt angegeben werden, wie man sie durch Einsetzen in die Gleichungen (4.1) und (4.2) erhält:

$$\begin{aligned} 2i\epsilon_n f_1^{(\alpha)} = 2i\Delta^{(\alpha)} g_0^{(\alpha)} &\Rightarrow f_1^{(\alpha)} = \operatorname{sgn}(\epsilon_n) \frac{\Delta^{(\alpha)}}{\epsilon_n} = \frac{\Delta^{(\alpha)}}{|\epsilon_n|} \\ 2i\epsilon_n f_1^{*(\alpha)}(-) = 2i\Delta^{*(\alpha)} g_0^{(\alpha)} &\Rightarrow f_1^{*(\alpha)}(-) = \operatorname{sgn}(\epsilon_n) \frac{\Delta^{*(\alpha)}}{\epsilon_n} = \frac{\Delta^{*(\alpha)}}{|\epsilon_n|} \end{aligned}$$

Gleiches gilt für $j = 2$ und damit für $f_2^{(\alpha)}$ und $f_2^{*(\alpha)}(-)$:

$$\begin{aligned} 2i\epsilon_n f_2^{(\alpha)} + \mathcal{D}_-^{(\alpha)} f_1^{(\alpha)} = 2i\Delta^{(\alpha)} g_1^{(\alpha)} &\Rightarrow f_2^{(\alpha)} = \frac{1}{\epsilon_n} \left(\Delta^{(\alpha)} g_1^{(\alpha)} + \frac{i}{2} \mathcal{D}_-^{(\alpha)} f_1^{(\alpha)} \right) \\ 2i\epsilon_n f_2^{*(\alpha)}(-) + \mathcal{D}_+^{(\alpha)} f_1^{*(\alpha)}(-) = 2i\Delta^{*(\alpha)} g_1^{(\alpha)} &\Rightarrow f_2^{*(\alpha)}(-) = \frac{1}{\epsilon_n} \left(\Delta^{*(\alpha)} g_1^{(\alpha)} + \frac{i}{2} \mathcal{D}_+^{(\alpha)} f_1^{*(\alpha)}(-) \right) \end{aligned}$$

Mit dem Verschwinden von $g_1^{(\alpha)}$ und dem Ergebnis aus der vorangegangenen Überlegung für $f_1^{(\alpha)}$ und $f_1^{*(\alpha)}(-)$ eingesetzt, ergibt sich

$$f_2^{(\alpha)} = i \operatorname{sgn}(\epsilon_n) \mathcal{D}_-^{(\alpha)} \frac{\Delta^{(\alpha)}}{2\epsilon_n^2}, \quad f_2^{*(\alpha)}(-) = i \operatorname{sgn}(\epsilon_n) \mathcal{D}_+^{(\alpha)} \frac{\Delta^{*(\alpha)}}{2\epsilon_n^2}$$

Für $g_2^{(\alpha)}$ erhält man dagegen die explizite Form

$$g_2^{(\alpha)} = -\frac{1}{2} \operatorname{sgn}(\epsilon_n) f_1^{(\alpha)} f_1^{*(\alpha)}(-) = -\operatorname{sgn}(\epsilon_n) \frac{|\Delta^{(\alpha)}|^2}{2\epsilon_n^2}$$

Die Ausdrücke dritter Ordnung $f_3^{(\alpha)}$ und $f_3^{*(\alpha)}(-)$ berechnen sich hingegen als:

$$\begin{aligned} f_3^{(\alpha)} &= -\frac{1}{4|\epsilon_n|^3} \left(2\Delta^{(\alpha)} |\Delta^{(\alpha)}|^2 + \left(\mathcal{D}_-^{(\alpha)} \right)^2 \Delta^{(\alpha)} \right) \\ f_3^{*(\alpha)}(-) &= -\frac{1}{4|\epsilon_n|^3} \left(2\Delta^{*(\alpha)} |\Delta^{(\alpha)}|^2 + \left(\mathcal{D}_+^{(\alpha)} \right)^2 \Delta^{*(\alpha)} \right) \end{aligned}$$

und $g_3^{(\alpha)}$ schreibt sich

$$g_3^{(\alpha)} = -\frac{i}{4|\epsilon_n|^3} \left(\Delta^{(\alpha)} \mathcal{D}_+^{(\alpha)} \Delta^{*(\alpha)} + \Delta^{*(\alpha)} \mathcal{D}_-^{(\alpha)} \Delta^{(\alpha)} \right)$$

4. Der einzelne Vortex als Modell niedriger Magnetfelder

Desweiteren gilt für $f_j^{(\alpha)}$, $f_j^{*(\alpha)}(-)$ mit $j \geq 4$ die Rekursionsbeziehung:

$$f_j^{(\alpha)} = \frac{1}{2i\epsilon_n} \left(2i\Delta^{(\alpha)} g_{j-1}^{(\alpha)} - \mathcal{D}_-^{(\alpha)} f_{j-1}^{(\alpha)} \right), \quad f_j^{*(\alpha)}(-) = \frac{1}{2i\epsilon_n} \left(2i\Delta^{*(\alpha)} g_{j-1}^{(\alpha)} - \mathcal{D}_+^{(\alpha)} f_{j-1}^{*(\alpha)}(-) \right)$$

mit

$$g_j^{(\alpha)} = -\frac{1}{2} \text{sgn}(\epsilon_n) \left[\sum_{2 \leq l \leq j-2} \left(g_{j-l}^{(\alpha)} g_l^{(\alpha)} + f_{j-l}^{(\alpha)} f_l^{*(\alpha)}(-) \right) + f_{j-1}^{(\alpha)} f_1^{*(\alpha)}(-) + f_1^{(\alpha)} f_{j-1}^{*(\alpha)}(-) \right]$$

und daraus folgt

$$f_4^{(\alpha)} = -\frac{i \text{sgn}(\epsilon_n)}{8|\epsilon_n|^4} \left\{ \left(\mathcal{D}_-^{(\alpha)} \right)^3 \Delta^{(\alpha)} + 2\mathcal{D}_-^{(\alpha)} \left(\Delta^{(\alpha)} \left| \Delta^{(\alpha)} \right|^2 \right) \right. \\ \left. + 2 \left(\Delta^{(\alpha)} \right)^2 \left(\mathcal{D}_+^{(\alpha)} \Delta^{*(\alpha)} \right) + 2 \left| \Delta^{(\alpha)} \right|^2 \left(\mathcal{D}_-^{(\alpha)} \Delta^{(\alpha)} \right) \right\}$$

und $f_4^{*(\alpha)}(-)$ entsprechend. Zuletzt soll noch der Term 4. Ordnung $g_4^{(\alpha)}$ angegeben werden:

$$g_4^{(\alpha)} = \frac{\text{sgn}(\epsilon_n)}{8\epsilon_n^4} \left\{ 3 \left| \Delta^{(\alpha)} \right|^4 + \left(\mathcal{D}_-^{(\alpha)} \Delta^{(\alpha)} \right) \left(\mathcal{D}_+^{(\alpha)} \Delta^{*(\alpha)} \right) \right. \\ \left. + \Delta^{(\alpha)} \left(\left(\mathcal{D}_+^{(\alpha)} \right)^2 \Delta^{*(\alpha)} \right) + \Delta^{*(\alpha)} \left(\left(\mathcal{D}_-^{(\alpha)} \right)^2 \Delta^{(\alpha)} \right) \right\}$$

Um nun ein verallgemeinertes Ginzburg-Landau-Funktional abzuleiten, müssen die so entwickelten Terme in einen geeigneten Ausdruck für das Druckfunktional eingesetzt werden. Um die Summation über die Matsubarafrequenzen ϵ_n geschickt durchführen zu können, bietet es sich an, anstelle das im Anhang auf mehrere Bänder verallgemeinerte Druckfunktional von Eilenberger zu verwenden, auf ein Funktional der Freien Energie zurückzugreifen, wie es von Schopohl und Tewordt in [51] durch Kopplungskonstanten-Integration abgeleitet wurde. In seiner Verallgemeinerung auf mehrere Bänder lässt es sich schreiben als (wobei hier darauf hingewiesen sei, dass aufgrund der abweichenden Wahl des Vorzeichens in der Kopplungskonstanten und damit auch in $g^{(\alpha)}$ und $f^{(\alpha)}$ das Vorzeichen in dem Ausdruck für die Freie Energie hier gerade umgekehrt erscheint als in dem Ausdruck, der in [51] angegeben wird):

$$\mathcal{F}_S = \sum_{\alpha} \int d^3r N_0^{(\alpha)} \int_{FS_{\alpha}} \frac{d\Omega_k}{4\pi} \left\{ \pi T \int_0^{1/T} \frac{d\beta}{\beta} \sum_{|\epsilon_n| < \omega_c} \epsilon_n e^{i\epsilon_n 0^+} \left[g^{(\alpha)} - g^{(\alpha)}(-) \right] \right\} \\ + \sum_{\alpha, \alpha'} \int d^3r \int_{FS_{\alpha}} \frac{d\Omega_k}{4\pi} \int_{FS_{\alpha'}} \frac{d\Omega_{k'}}{4\pi} \left[\Delta^{(\alpha)*} (V^{-1})_{\alpha\alpha'} \Delta^{(\alpha')} \right]$$

Nun ist es sinnvoll, nur die Differenz der Freien Energie des supraleitenden Zustands bezüglich des normalleitenden Zustands zu betrachten und durch Subtraktion der entsprechenden Terme – wie in Anhang A.2 beschrieben – die Summation über alle positiven Matsubara-

frequenzen auszudehnen. Dann erhält man

$$\begin{aligned}
 \mathcal{F}_S - \mathcal{F}_N &= \sum_{\alpha} \int d^3r N_0^{(\alpha)} \int_{FS_{\alpha}} \frac{d\Omega_k}{4\pi} \left\{ 2\pi T \int_0^{1/T} \frac{d\beta}{\beta} \sum_{\epsilon_n > 0} \epsilon_n e^{i\epsilon_n 0^+} \right. \\
 &\quad \times \left[g^{(\alpha)} - g^{(\alpha)}(-) - 2\text{sgn}(\epsilon_n) + \text{sgn}(\epsilon_n) \frac{|\Delta^{(\alpha)}|^2}{\epsilon_n^2} \right] \left. \right\} \\
 &\quad + \sum_{\alpha, \alpha'} \int d^3r \int_{FS_{\alpha}} \frac{d\Omega_k}{4\pi} \int_{FS_{\alpha'}} \frac{d\Omega_{k'}}{4\pi} \left[\Delta^{(\alpha)*} \left((V^{-1})_{\alpha\alpha'} - \frac{\delta_{\alpha\alpha'} \delta(\vec{k} - \vec{k}') N_0^{(\alpha)}}{\lambda_+} \right) \Delta^{(\alpha')} \right] \\
 &\quad + \ln \frac{T}{T_c} \sum_{\alpha} \int d^3r \int_{FS_{\alpha}} \frac{d\Omega_k}{4\pi} N_0^{(\alpha)} |\Delta^{(\alpha)}|^2
 \end{aligned}$$

Nun sollen die Terme betrachtet werden, die man bei der Entwicklung von $g^{(\alpha)}$ in Ordnungen von $\sqrt{1 - \frac{T}{T_c}}$ erhalten hat. Hier gilt für die geradzahigen Ordnungen $g_0^{(\alpha)}$, $g_2^{(\alpha)}$ und $g_4^{(\alpha)}$ die Symmetrierelation

$$g_j^{(\alpha)} = -g_j^{(\alpha)}(-)$$

und damit bleiben diese Ordnungen in dem Ausdruck für das Druckfunktional erhalten, während für $j = 3$ jedoch $g_j^{(\alpha)} = g_j^{(\alpha)}(-)$ und sich somit diese Terme kürzen. Eingesetzt in die Freie Energiedifferenz verschwinden außerdem die Terme nullter Ordnung, da hier die Freie Energie des supraleitenden mit der des normalleitenden Zustands zusammenfällt. Desweiteren gilt

$$g_2^{(\alpha)} - g_2^{(\alpha)}(-) + \text{sgn}(\epsilon_n) \frac{|\Delta^{(\alpha)}|^2}{\epsilon_n^2} = 0$$

und daher spielen – abgesehen von den Kopplungstermen und dem Term proportional zu $\ln \frac{T}{T_c}$ – erst die Terme vierter Ordnung eine Rolle. Nun gilt aber gerade $g_4^{(\alpha)} - g_4^{(\alpha)}(-) \propto \frac{\text{sgn}(\epsilon_n)}{4\epsilon_n^4}$ und da der Term $e^{i\epsilon_n 0^+}$ eine Konvergenz der Summe erzwingt, kann die Reihenfolge von $d\beta$ -Integration und ϵ_n -Summation vertauscht werden. Man erhält

$$\int_0^{1/T} \frac{d\beta}{\beta} \frac{1}{|\epsilon_n|^3} = \int_0^{1/T} d\beta \frac{\beta^2}{|(2n+1)\pi|^3} = \frac{\beta^3}{3|(2n+1)\pi|^3} \Big|_{\beta=0}^{\beta=1/T} = \frac{1}{3|\epsilon_n|^3}$$

Desweiteren kann die Summation über die Matsubarafrequenzen ausgeführt werden, und es ergibt sich

$$2\pi T \sum_{0 < \epsilon_n < \infty} \frac{1}{3\epsilon_n^3} = 2\pi T \sum_{0 < \epsilon_n < \infty} \frac{1}{3(2n+1)^3 \pi^3 T^3} = \frac{2}{3\pi^2 T^2} \sum_{0 < \epsilon_n < \infty} \frac{1}{(2n+1)^3} = \frac{2}{3\pi^2 T^2} \frac{7\zeta(3)}{8}$$

Damit kann nun die Freie Energiedifferenz – bis zur vierten Ordnung entwickelt – geschrieben werden als

$$\begin{aligned}
 \mathcal{F}_S - \mathcal{F}_N &= \sum_{\alpha} \int d^3r N_0^{(\alpha)} \int_{FS_{\alpha}} \frac{d\Omega_k}{4\pi} \frac{1}{3\pi^2 T^2} \frac{7\zeta(3)}{16} \left\{ 3 |\Delta^{(\alpha)}|^4 + (\mathcal{D}_-^{(\alpha)} \Delta^{(\alpha)}) (\mathcal{D}_+^{(\alpha)} \Delta^{*(\alpha)}) \right. \\
 &\quad \left. + \Delta^{(\alpha)} \left((\mathcal{D}_+^{(\alpha)})^2 \Delta^{*(\alpha)} \right) + \Delta^{*(\alpha)} \left((\mathcal{D}_-^{(\alpha)})^2 \Delta^{(\alpha)} \right) \right\} \\
 &\quad + \sum_{\alpha, \alpha'} \int d^3r \int_{FS_{\alpha}} \frac{d\Omega_k}{4\pi} \int_{FS_{\alpha'}} \frac{d\Omega_{k'}}{4\pi} \left[\Delta^{(\alpha)*} \left((V^{-1})_{\alpha\alpha'} - \frac{\delta_{\alpha\alpha'} \delta(\vec{k} - \vec{k}') N_0^{(\alpha)}}{\lambda_+} \right) \Delta^{(\alpha')} \right] \\
 &\quad + \ln \frac{T}{T_c} \sum_{\alpha} \int d^3r \int_{FS_{\alpha}} \frac{d\Omega_k}{4\pi} N_0^{(\alpha)} |\Delta^{(\alpha)}|^2
 \end{aligned}$$

4. Der einzelne Vortex als Modell niedriger Magnetfelder

Für einen s -Wellen-Supraleiter kann die Winkelmittelung über die Fermifläche in den zwei letzten Summanden schnell ausgeführt werden, allein die Operatoren $\mathcal{D}_-^{(\alpha)}$ und $\mathcal{D}_+^{(\alpha)}$ im ersten Summanden benötigen eine sorgfältige Betrachtung. Hier erhält man unter Einführung der Komponenten der eichinvarianten Ableitung

$$\tilde{\mathcal{D}}_-^j = i\partial_j + \frac{2e}{c}A_j(\vec{r}), \quad \tilde{\mathcal{D}}_+^j = -i\partial_j + \frac{2e}{c}A_j(\vec{r})$$

beispielsweise den folgenden Fermiflächen-Mittelwert

$$\left\langle \left(\mathcal{D}_- \Delta^{(\alpha)} \right) \left(\mathcal{D}_+ \Delta^{(\alpha)*} \right) \right\rangle_\alpha = \sum_{j,k} \left\langle v_{F,j}^{(\alpha)} v_{F,k}^{(\alpha)} \right\rangle_\alpha \left[\tilde{\mathcal{D}}_-^j \Delta^{(\alpha)} \right] \left[\tilde{\mathcal{D}}_+^k \Delta^{(\alpha)*} \right]$$

Die Winkelintegration kann dabei auf das Produkt der Fermigeschwindigkeitskomponenten übertragen werden, da allein diese eine Impulsabhängigkeit besitzen. Nun gilt aber für die betrachteten Fermiflächen

$$\left\langle v_{F,j}^{(\alpha)} v_{F,k}^{(\alpha)} \right\rangle_\alpha = \left\langle \left(v_{F,j}^{(\alpha)} \right)^2 \right\rangle_\alpha \delta_{jk}$$

solange das Koordinatensystem entlang der Hauptsymmetrieachsen des Kristalls ausgerichtet ist. Damit können nun die folgenden Mittelwerte berechnet werden

$$\begin{aligned} \left\langle \left(\mathcal{D}_- \Delta^{(\alpha)} \right) \left(\mathcal{D}_+ \Delta^{(\alpha)*} \right) \right\rangle_\alpha &= \sum_j \left\langle \left(v_{F,j}^{(\alpha)} \right)^2 \right\rangle_\alpha \left| \tilde{\mathcal{D}}_-^j \Delta^{(\alpha)} \right|^2 \\ \left\langle \Delta^{(\alpha)} \left(\mathcal{D}_+^2 \Delta^{(\alpha)*} \right) \right\rangle_\alpha &= \Delta^{(\alpha)} \sum_j \left\langle \left(v_{F,j}^{(\alpha)} \right)^2 \right\rangle_\alpha \left(\tilde{\mathcal{D}}_+^j \right)^2 \Delta^{(\alpha)*} \\ \left\langle \Delta^{(\alpha)*} \left(\mathcal{D}_-^2 \Delta^{(\alpha)} \right) \right\rangle_\alpha &= \Delta^{(\alpha)*} \sum_j \left\langle \left(v_{F,j}^{(\alpha)} \right)^2 \right\rangle_\alpha \left(\tilde{\mathcal{D}}_-^j \right)^2 \Delta^{(\alpha)} \end{aligned}$$

Sortiert man nun die Ordnungen analog zum klassischen Ginzburg-Landau-Funktional, so erhält man:

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_S - \mathcal{F}_N &= \int d^3r \alpha_\sigma \left| \Delta^{(\sigma)} \right|^2 + \alpha_\pi \left| \Delta^{(\pi)} \right|^2 - \gamma \left(\Delta^{(\sigma)*} \Delta^{(\pi)} + \Delta^{(\pi)*} \Delta^{(\sigma)} \right) \\ &+ \frac{1}{2} \beta_\sigma \left| \Delta^{(\sigma)} \right|^4 + \frac{1}{2} \beta_\pi \left| \Delta^{(\pi)} \right|^4 + \frac{1}{3} K_j^{(\sigma)} \left| \tilde{\mathcal{D}}_-^j \Delta^{(\sigma)} \right|^2 + \frac{1}{3} K_j^{(\pi)} \left| \tilde{\mathcal{D}}_-^j \Delta^{(\pi)} \right|^2 \\ &+ \frac{1}{3} K_j^{(\sigma)} \Delta^{(\sigma)} \left(\tilde{\mathcal{D}}_+^j \right)^2 \Delta^{(\sigma)*} + \frac{1}{3} K_j^{(\pi)} \Delta^{(\pi)} \left(\tilde{\mathcal{D}}_+^j \right)^2 \Delta^{(\pi)*} \\ &+ \frac{1}{3} K_j^{(\sigma)} \Delta^{(\sigma)*} \left(\tilde{\mathcal{D}}_-^j \right)^2 \Delta^{(\sigma)} + \frac{1}{3} K_j^{(\pi)} \Delta^{(\pi)*} \left(\tilde{\mathcal{D}}_-^j \right)^2 \Delta^{(\pi)} \end{aligned}$$

mit den Konstanten

$$\alpha_\sigma = -\frac{V_{\pi\pi}}{|V|} + \frac{N_0^{(\sigma)}}{\lambda_+} + N_0^{(\sigma)} \ln \frac{T}{T_c}, \quad \alpha_\pi = -\frac{V_{\sigma\sigma}}{|V|} + \frac{N_0^{(\pi)}}{\lambda_+} + N_0^{(\pi)} \ln \frac{T}{T_c}, \quad \gamma = -\frac{V_{\sigma\pi}}{|V|}$$

wobei $|V| = V_{\sigma\sigma} V_{\pi\pi} - V_{\sigma\pi} V_{\pi\sigma}$ die Determinante der Kopplungsmatrix $V_{\alpha\alpha'}$ bezeichnet, sowie

$$\beta_\alpha = \frac{7\zeta(3)}{8\pi^2 T_c^2} N_0^{(\alpha)}, \quad K_j^{(\alpha)} = \frac{7\zeta(3)}{16\pi^2 T_c^2} N_0^{(\alpha)} \left\langle \left(v_{F,j}^{(\alpha)} \right)^2 \right\rangle_\alpha$$

Unter der Annahme eines Integrationsvolumens, für das sowohl $\vec{n} \cdot \vec{A}(\vec{r})$ als auch $\vec{n} \cdot \vec{\nabla} \Delta(\vec{r})$ auf dem Rand verschwindet – was z.B. bei der Betrachtung eines isolierten Vortex zutrifft

solange die Fläche der Probe senkrecht zum Magnetfeld viel größer ist als λ_L^2 – können die drei Gradiententerme durch partielle Integration noch zusammengefasst werden. Berücksichtigt man außerdem noch ein externes Magnetfeld, so schreibt sich schließlich die Differenz der Freien Energie des supraleitenden Zustands im Magnetfeld zur Freien Energie des normalleitenden Zustands ohne Magnetfeld als

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_S - \mathcal{F}_N^{(0)} &= \int d^3r \alpha_\sigma \left| \Delta^{(\sigma)} \right|^2 + \alpha_\pi \left| \Delta^{(\pi)} \right|^2 - \gamma \left(\Delta^{(\sigma)*} \Delta^{(\pi)} + \Delta^{(\pi)*} \Delta^{(\sigma)} \right) \\ &+ \frac{1}{2} \beta_\sigma \left| \Delta^{(\sigma)} \right|^4 + \frac{1}{2} \beta_\pi \left| \Delta^{(\pi)} \right|^4 + K_j^{(\sigma)} \left| \tilde{\mathcal{D}}_-^j \Delta^{(\sigma)} \right|^2 + K_j^{(\pi)} \left| \tilde{\mathcal{D}}_-^j \Delta^{(\pi)} \right|^2 \\ &+ \frac{1}{8\pi} \left| \text{rot} \vec{A}(\vec{r}) \right|^2 \end{aligned} \quad (4.3)$$

Dieser Ausdruck kann im wesentlichen als Summe der “klassischen” Beiträge der zwei Bänder betrachtet werden, ergänzt durch einen Josephson-Term, der für $\gamma \neq 0$ eine Kopplung der zwei Bänder bewirkt. Dieser Ausdruck stimmt mit den Ergebnissen von Zhitomirsky und Dao überein, wie sie in [52] veröffentlicht wurden. Die oben skizzierte Herleitung des Multiband-Ginzburg-Landau-Funktional aus den quasiklassischen Gleichungen hat gegenüber der Herleitung durch eine Verallgemeinerung des “klassischen” Ginzburg-Landau-Funktional auf mehrere Bänder den Vorteil, dass ohne größeren Aufwand auch Terme höherer Ordnung korrekt mitberücksichtigt werden können und so der Gültigkeitsbereich des Funktional mühelos erweitert werden kann. Das so erhaltene Ginzburg-Landau-Funktional kann nun beispielsweise dazu verwendet werden, mit einem einfachen Variationsansatz die Coregröße eines Vortex in einem Multiband-Supraleiter nahe der kritischen Temperatur abzuschätzen, wie es in Abschnitt 4.3 kurz skizziert werden soll. Andererseits können durch Variation des Funktional nach $\Delta^{(\alpha)*}$ bzw. nach $\vec{A}(\vec{r})$ Differentialgleichungen zur Bestimmung von $\Delta^{(\alpha)}$ und $\vec{j}(\vec{r})$ abgeleitet werden.

4.2 Selbstkonsistente Berechnung des Paarpotentials und die lokale Zustandsdichte

Zur selbstkonsistenten Berechnung des Paarpotentials in der Umgebung einer Vortexlinie muss die Gapgleichung numerisch iterativ gelöst werden. Insbesondere muss die anomale Greensche Funktion $f^{(\alpha)}(\vec{r}, \vec{k}, i\epsilon_n)$ als Funktion des Ortes, des Impulses und der Matsubarafrequenzen berechnet werden. Besonders geeignet für eine numerisch stabile Implementierung der Eilenberger-Gleichungen im sauberen Grenzfall hat sich dabei die Riccati-Parametrisierung des quasiklassischen Propagators erwiesen, wie sie in Abschnitt 2.3 skizziert wurde. Gleichmaßen kann auch die Zustandsdichte durch eine analytische Fortsetzung des quasiklassischen Propagators auf die reelle Achse durch den Übergang von den imaginären Matsubarafrequenzen auf die reelle Energie $i\epsilon_n \rightarrow E + i\delta$ berechnet werden. Auch hier sind die Riccati-Gleichungen durch ihre numerische Stabilität von großem Nutzen. Im schmutzigen Grenzfall muss hingegen der Usadel-Propagator mit der winkelgemittelten normalen Greenschen Funktion $g^{(\alpha,0)}(\vec{r}, i\epsilon_n)$ und der winkelgemittelten anomalen Greenschen Funktion $f^{(\alpha,0)}(\vec{r}, i\epsilon_n)$ berechnet werden. Hierfür bietet sich ein numerisches Relaxationsverfahren an, wie es in Anhang C skizziert wird. Im folgenden Unterabschnitt soll nun kurz das Verfahren zur selbstkonsistenten Bestimmung des Paarpotentials für eine gegebene Temperatur zuerst am Beispiel eines Einband-Supraleiters im sauberen Grenzfall unter Berücksichtigung der Magnetfeld- und Stromverteilung skizziert werden, um dann auf die iterative Lösung der Multiband-Gapgleichung überzugehen. Im zweiten Unterabschnitt soll dann die lokale Zustandsdichte eines Einband-Supraleiters mit der eines Zweiband-Supraleiters am

4. Der einzelne Vortex als Modell niedriger Magnetfelder

Beispiel von Magnesiumdiborid verglichen werden. Dabei beschränken sich die Betrachtungen auf ein Magnetfeld, das parallel zur Hauptsymmetrieachse des Kristalls angelegt wird, da für ein Magnetfeld in a - b -Ebenen Richtung des Kristalls keine Rotationssymmetrie des Paarpotentials in der Umgebung des Vortexcores mehr gegeben ist. In diesem Fall muss die numerische Berechnungen nicht mehr nur eindimensional entlang einer radialen Linie, sondern auf einem zweidimensionalen Gitter durchgeführt werden, was bedeutend aufwändiger ist.

4.2.1 Die Berechnung des Paarpotentials

Um die verschiedenen physikalischen Größen in der Umgebung einer Vortexlinie korrekt zu berechnen, müssen die Selbstkonsistenzbedingungen, die aus der Stationaritätsforderung des Funktionals der Freien Energie hervorgehen, gleichzeitig erfüllt sein, d.h. sowohl das Paarpotential als auch der quasiklassische Strom müssen gemeinsam iterativ berechnet werden. Für eine numerisch stabile Lösung mit Hilfe der Riccati-Parametrisierung genügt es, mit einer endlichen, wenngleich großen Cut-Off-Frequenz ω_c und einer endlichen, wenngleich kleinen Wechselwirkungskonstanten V zu rechnen und den "weak-coupling-limes" somit noch nicht vollständig auszuführen. Damit schreiben sich die Selbstkonsistenzbedingungen für einen Einband-Supraleiter als

$$\Delta(\vec{r}) = N_0 V \cdot 2\pi T \sum_{0 < \epsilon_n < \omega_c} \left\langle \frac{2a(x)}{1 + a(x)b(x)} \right\rangle_{FS}$$

und

$$\vec{j}(\vec{r}) = -2ieN_0 2\pi T \sum_{0 < \epsilon_n < \omega_c} \left\langle \vec{v}_F(\vec{k}_F) \frac{1 - a(x)b(x)}{1 + a(x)b(x)} \right\rangle_{FS}$$

wobei die Wechselwirkungskonstante über $\frac{1}{N_0 V} = \ln \frac{2\omega_c \epsilon^\gamma}{\pi T_c}$ mit der Cut-Off-Frequenz und der kritischen Temperatur zusammenhängt und $a(x)$ und $b(x)$ aus den Riccati-Gleichungen (2.11) und (2.12) als Funktionen von Ort, Impuls und Matsubarafrequenz berechnet werden müssen. Da in die quasiklassischen Gleichungen neben dem Paarpotential jedoch nicht die Stromverteilung sondern das Vektorpotential eingeht, muss bei jedem Iterationsschritt noch das Vektorpotential unter Berücksichtigung der korrekten Randbedingungen aus der Stromverteilung berechnet werden. Aus den Maxwell-Gleichungen erhält man in der Eichung $\text{div} \vec{A} = 0$ die Beziehung

$$\vec{j}(\vec{r}) = \frac{c}{4\pi} \text{rot rot} \vec{A}(\vec{r}) = -\frac{c}{4\pi} \Delta \vec{A}(\vec{r})$$

Die Randbedingungen für $\vec{A}(\vec{r})$ ergeben sich für den isolierten Vortex aus den folgenden Überlegungen: Einerseits muss der in der Umgebung des Vortex eingeschlossene Fluss gerade ein Flussquant Φ_0 betragen, andererseits muss die eichinvariante Differenz des Phasengradienten des Paarpotentials und des Vektorpotentials $\vec{\nabla} \phi - \frac{2e}{c} \vec{A}$ auf der Länge λ_L abgeschirmt sein und damit im Unendlichen verschwinden:

$$\int_{\mathbb{R}^2} \vec{B}(\vec{r}) d\vec{A} = \Phi_0, \quad \lim_{|\vec{r}| \rightarrow \infty} \left[\vec{\nabla} \phi(\vec{r}) - \frac{2e}{c} \vec{A}(\vec{r}) \right] = 0 \quad (4.4)$$

Da im folgenden nur Supraleiter mit einer isotropen Paarwechselwirkung betrachtet werden sollen, müssen alle messbaren physikalischen Größen wie Strom und Magnetfeld sowie der Betrag des Paarpotentials Rotationssymmetrie bezüglich des Vortexzentrums aufweisen und dürfen nur eine radiale Abhängigkeit besitzen. In diesem Fall ist es sinnvoll, Zylinderkoordinaten zur Berechnung dieser Größen einzuführen. Damit kann man Strom und Magnetfeld

schreiben als

$$\vec{j}(\vec{r}) = \frac{c}{4\pi} \text{rot} \vec{B}(\vec{r}) = -\frac{c}{4\pi} \partial_r B_z(r) \hat{e}_\varphi, \quad \vec{B}(\vec{r}) = \frac{1}{r} \partial_r [r A_\varphi(r)] \hat{e}_z$$

und der in einer Kreisfläche mit Radius r um den Vortex eingeschlossene Fluss berechnet sich zu

$$\Phi(r) = 2\pi \int_0^r dr' r' B_z(r') = 2\pi r A_\varphi(r)$$

Durch die einfache Abhängigkeit zwischen $\Phi(r)$ und $A_\varphi(r)$ in dieser Geometrie und die sofort einsichtigen Randbedingungen für den magnetischen Fluss eignet sich diese Größe insbesondere als Bindeglied zwischen Strom und Vektorpotential während des Iterationsprozesses. Eingesetzt in $j_\varphi(r) = -\frac{c}{4\pi} \partial_r B_z(r)$ erhält man die folgende Differentialgleichung für $\Phi(r)$ wobei der quasiklassisch berechnete Strom aus der vorangegangenen Iteration als Quellterm auf der rechten Seite der Gleichung eingeht

$$\frac{1}{2\pi r^2} \partial_r \Phi(r) - \frac{1}{2\pi r} \partial_r^2 \Phi(r) = \frac{4\pi}{c} j_\varphi(r)$$

Ergänzt wird diese Differentialgleichung durch die Randbedingungen

$$\lim_{r \rightarrow 0} \Phi(r) = 0 \quad \text{und} \quad \lim_{r \rightarrow \infty} \Phi(r) = \Phi_0$$

Mit diesen Vorgaben ist $\Phi(r)$ eindeutig bestimmt und die zwei Randbedingungen aus Gleichung (4.4) sind automatisch erfüllt. Um die Konvergenz zu beschleunigen, kann weiterhin verwendet werden, dass das Magnetfeld $B_z(r)$ für große Radien $r \rightarrow \infty$ verschwindet. Da dies jedoch im Allgemeinen nicht in jeder Iteration gewährleistet werden kann, soll die Stromverteilung durch das Einführen eines Streckungsfaktors $k^{(i)}$ in jeder Iteration i als $\tilde{j}(r) = j(k^{(i)}r)$ so modifiziert werden, dass das Magnetfeld in großer Entfernung vom Vortexzentrum auf Null abfällt (siehe [53]). Natürlich muss für eine wachsende Konvergenz der Lösung der Streckungsfaktor gegen eins tendieren: $\lim_{i \rightarrow \infty} k^{(i)} = 1$. Um nun eine numerische Rechnung durchführen zu können, muss für alle Größen eine geeignete dimensionslose Form unter Einführung grundlegender charakteristischer Parameter gefunden werden. Der normierte quasiklassische Strom kann mit der reduzierten Temperatur $\hat{T} = \frac{T}{T_c}$ folgendermaßen geschrieben werden

$$\hat{j} = \frac{\vec{j}}{e N_0 v_F T_c} = 4\pi \hat{T} \sum_{0 < \epsilon_n < \omega_c} \left\langle \frac{\hat{v}_F}{i} \frac{1 - a(x)b(x)}{1 + a(x)b(x)} \right\rangle_{FS}$$

Für Magnetfeld, Vektorpotential und magnetischen Fluss liegt damit die folgende dimensionslose Formulierung nahe:

$$\hat{\vec{B}} = \frac{\vec{B}}{\frac{4\pi}{c} e N_0 v_F T_c \xi_0}, \quad \hat{\vec{A}} = \frac{\vec{A}}{\frac{4\pi}{c} e N_0 v_F T_c \xi_0^2}, \quad \hat{\Phi} = \frac{\Phi}{\frac{4\pi}{c} e N_0 v_F T_c \xi_0^3}$$

Dabei hängt das normierte Vektorpotential über

$$\hat{j} = -\hat{\Delta} \hat{\vec{A}}$$

mit dem dimensionslosen Strom zusammen, wobei der normierte Laplaceoperator $\hat{\Delta}$ die zweiten Ableitungen nach den dimensionslosen Ortskoordinaten $\hat{x}_i = \frac{x_i}{\xi_0}$ enthält. Betrachtet man nun die modifizierten Matsubarafrequenzen aus Gleichung (2.13), so erkennt man, dass das Vektorpotential hier nur eine Korrektur in der Ordnung $\frac{1}{\kappa^2}$ darstellt

$$i\hat{\epsilon}_n = i\hat{\epsilon}_n + \frac{1}{\kappa^2} \hat{v}_F \cdot \hat{\vec{A}}$$

4. Der einzelne Vortex als Modell niedriger Magnetfelder

wobei der Ginzburg-Landau-Parameter $\kappa = \frac{\lambda_L}{\xi_0}$ das Verhältnis zwischen der Londonschen Eindringtiefe λ_L und der Kohärenzlänge ξ_0 bezeichnet:

$$\kappa^2 = \frac{c^2}{4\pi N_0 v_F^2 e^2 \xi_0^2} = \frac{\lambda_L^2}{\xi_0^2}$$

Dabei wurde die Londonsche Eindringtiefe als $\lambda_L = c/\sqrt{4\pi N_0 v_F^2 e^2}$ eingeführt. Für die so definierten dimensionslosen Größen kann nun die Differentialgleichung zur Bestimmung des magnetischen Flusses und damit des Vektorpotentials geschrieben werden als

$$\frac{1}{\hat{r}^2} \partial_{\hat{r}} \hat{\Phi}(\hat{r}) - \frac{1}{\hat{r}} \partial_{\hat{r}}^2 \hat{\Phi}(\hat{r}) = 2\pi \hat{j}_\varphi(\hat{r})$$

wobei sich die Randbedingungen mit $\xi_0 = \frac{v_F}{\Delta_0}$ ergeben als

$$\hat{\Phi}(\hat{r} = 0) = 0, \quad \lim_{\hat{r} \rightarrow \infty} \hat{\Phi}(\hat{r}) = \pi \kappa^2 \frac{\Delta_0}{T_c}$$

In Abbildung 4.1 sind die Ergebnisse dieses Iterationsprozesses für verschiedene Temperaturen dargestellt. Der Ginzburg-Landau-Parameter wurde zu $\kappa = 10$ gewählt, was zu einer deutlichen Trennung der zwei charakteristischen Längenskalen ξ_0 und λ_L führt. Als Startkonfiguration wurde jeweils ein Paarpotential der Form $\hat{\Delta}(\hat{r}) = \frac{\Delta_0}{T_c} \tanh\left(\frac{\xi_0}{\hat{r}}\right) e^{i\varphi}$ und ein Vektorpotential als $\hat{A}(\hat{r}) = -\frac{1}{2}\kappa \frac{\Delta_0}{T_c} K\left[\frac{\hat{r}}{\kappa}\right]$ vorgegeben, wie es sich mit dem vollständigen elliptischen Integral erster Art $K(x)$ in den oben eingeführten normierten Größen als Lösung der London-Gleichungen ergibt. Durch den großen Wert von $\kappa = 10$, der in den Hochtemperatur-Supraleitern sogar noch eine Größenordnung höher liegen kann, ist der Einfluss des Vektorpotentials auf die Berechnung der Gapamplitude, der allein durch die Korrektur der Matsubarafrequenzen in die Riccati-Gleichungen eingeht, nur gering. Deutlich zu erkennen sind in Abbildung 4.1 die zwei unterschiedlichen Längenskalen beim Vergleich von Paarpotential und Magnetfeld: Während das Paarpotential in etwa auf der Längenskala der Kohärenzlänge ξ_0 variiert, wird das Magnetfeld auf der weitaus größeren Längenskala λ_L abgeschirmt. Dabei wächst λ_L mit wachsender Temperatur und divergiert für $T \rightarrow T_c$. Die Abnahme des Maximalwertes von $B(r)$ bei $r = 0$ für wachsende Temperatur impliziert zusammen mit $\Phi(r \rightarrow \infty) = \Phi_0$, dass sich der Abfall von $B(r)$ auf einer wachsenden Längenskala abspielen muss, die Kurvenschar von $B(r)$ für verschiedene Temperaturen schneidet sich infolgedessen außerhalb des in der Abbildung dargestellten Bereichs. Der Verlauf des quasiklassischen Stroms hingegen weist beide Längenskalen auf: Er erreicht sein Maximum auf der Skala der Kohärenzlänge ξ_0 während er für große Abstände vom Vortexzentrum in der Größenordnung von λ_L abfällt. Ebenso wie beim Magnetfeld "schmiert" auch der Peak der Stromverteilung mit wachsender Temperatur zusehends aus. Die lokale Zustandsdichte $N(E)$ ist schließlich eine Größe, die für hohe Werte von κ allein von dem Verlauf des Paarpotentials abhängt und damit nur im Bereich von ξ_0 deutlich variiert.

Für einen Multiband-Supraleiter können die Selbstkonsistenzgleichungen zur Berechnung von Paarpotential und Strom grundsätzlich nach dem gleichen Schema berechnet werden wie im Einband-Supraleiter. Interessiert man sich jedoch nur für den Verlauf des Paarpotentials, bzw. der Zustandsdichte für ein Material mit $\kappa \gg 1$, so kann auf die selbstkonsistente Berechnung des Stroms verzichtet werden, da dieser über das Vektorpotential nur kleine Korrekturen der Ordnung $\frac{1}{\kappa^2}$ beisteuert. In diesem Fall muss allein die Multiband-Gapgleichung iterativ gelöst werden. Diese schreibt sich für eine endliche Cut-Off-Frequenz im sauberen Grenzfall als

$$\Delta^{(\alpha)}(\vec{r}) = \sum_{\alpha'} \lambda_{\alpha\alpha'} 2\pi T \sum_{0 < \epsilon_n < \omega_c} \left\langle f^{(\alpha')} \left(\epsilon_n, \vec{k}_F, \vec{r} \right) \right\rangle_{FS_{\alpha'}} \quad (4.5)$$

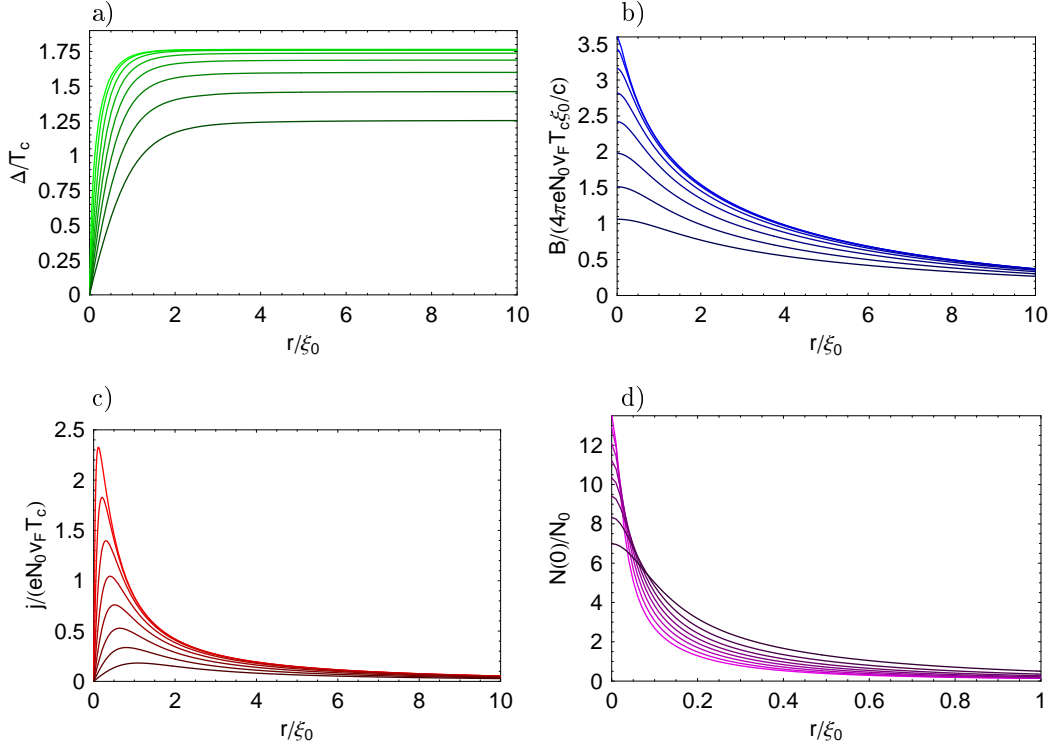


Abbildung 4.1: Die charakteristischen Größen zur Beschreibung eines isolierten Vortex bei $r = 0$, berechnet für einen konventionellen Einband-Supraleiter mit zylindrischer Fermifläche und Magnetfeld in c -Achsen-Richtung im sauberen Grenzfall: Das Paarpotential $\Delta(r)/T_c$ (a), das Magnetfeld $\hat{B}(r)$ (b), der quasiklassische Strom $\hat{j}(r)$ (c) und die lokale Quasiteilchenzustandsdichte bei Energie Null $N(0)/N_0$ (d). Dabei wurden verschiedene Temperaturen von $T = 0, 1T_c$ bis $T = 0, 8T_c$ in Schritten von $0, 1T_c$ gewählt (abnehmende Helligkeit). Da alle hier betrachteten Größen rotationssymmetrisch bezüglich des Vortexzentrums sind, genügt es, ihre radiale Abhängigkeit zu zeigen.

wobei die Kopplungsmatrix $\lambda_{\alpha\alpha'}$ passend zur Cut-Off-Frequenz ω_c so gewählt werden muss, dass für den größeren Eigenwert λ_+ gilt

$$\frac{1}{\lambda_+} = \ln \frac{2\omega_c e^\gamma}{\pi T_c}$$

Ebenso kann auch die Gapgleichung im schmutzigen Grenzfall berechnet werden. Hier muss der Fermiflächenmittelwert der anomalen Greenschen Funktion $\langle f^{(\alpha)}(\epsilon_n, \vec{k}_F, \vec{r}) \rangle_{FS_\alpha}$ durch die impulsgemittelte Greensche Funktion des Usadel-Propagators $f^{(\alpha,0)}(\epsilon_n, \vec{r})$ ersetzt werden, wobei in Anhang C die hier verwendete Relaxationsmethode kurz skizziert, sowie die konkrete numerische Implementierung für einen isolierten Vortex angegeben wird. Dabei ist zu berücksichtigen, dass die charakteristische Längenskala im schmutzigen Grenzfall nicht mehr durch die Kohärenzlänge v_F/Δ_0 wie im sauberen Grenzfall gegeben ist, sondern durch eine von der Diffusionskonstanten vorgegebene Größe

$$\xi = \sqrt{\frac{\mathcal{D}}{2\pi T_c}}$$

4. Der einzelne Vortex als Modell niedriger Magnetfelder

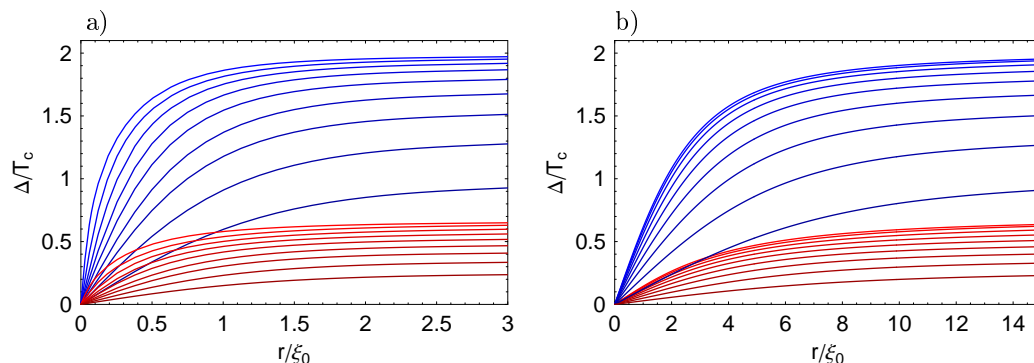


Abbildung 4.2: Die Paarpotentialamplituden im σ -Band (blau) und im π -Band (rot) eines isolierten Vortex in MgB_2 als Funktion des Abstandes vom Vortexzentrum im sauberen Grenzfall (a) und im schmutzigen Grenzfall (b) für $T = 0, 1T_c$ bis $T = 0, 9T_c$. Man erkennt, dass die Vortexcoregröße im σ - wie im π -Band sowohl im sauberen als auch im schmutzigen Grenzfall für sinkende Temperaturen schrumpft, wobei die Verkleinerung der Vortexcoregröße im schmutzigen Grenzfall ab etwa $0,5T_c$ eine deutliche Sättigung erreicht.

Für die in diesem Kapitel durchgeführten Rechnungen wurde die Kopplungsmatrix aus den folgenden charakteristischen Parametern bestimmt (siehe Anhang B): $c_0 = 3$, $c_1 = 4$, $\zeta = 0,7$ und $\omega_c = 20\pi T_c$.

4.2.2 Die Berechnung der Zustandsdichte

Ist das Paarpotential in der Umgebung eines Vortex selbstkonsistent bestimmt worden, so kann eine weitere physikalisch bedeutende Größe berechnet werden: Die lokale Quasiteilchen-Zustandsdichte. Die Zustandsdichte ist die im Experiment am einfachsten zugängliche lokale Größe, die beispielsweise aus dem differentiellen Tunnelwiderstand berechnet wird, der mit einer hohen Genauigkeit und einer guten räumlichen Auflösung gemessen werden kann. Mit der Methode der “scanning tunneling spectroscopy” (STS) ist eine direkte Abbildung der Vortices möglich, wobei die erhöhte Zustandsdichte für $E = 0$ im Vortexcore den Abbildungskontrast liefert (siehe [54, 55]). Neben der direkten zweidimensionalen Abbildung der Vortices bzw. des Vortexgitters durch die Messung und Abbildung von $N(E = 0)$ erhält man weiteren Aufschluss über den Charakter der Supraleitung, insbesondere der Störstellenkonzentration, wenn man das gesamte Spektrum $N(E)$ an verschiedenen Abständen vom Vortexzentrum betrachtet. Einer der grundlegenden Unterschiede zwischen einem Supraleiter mit sehr schwacher Verunreinigung (siehe Abbildung 4.3 a), hier berechnet im sauberen Grenzfall mit einem kleinen effektiven Streuparameter δ , und einem Supraleiter mit sehr hoher Störstellenkonzentration (siehe Abbildung 4.3 b), berechnet im schmutzigen Grenzfall aus dem analytisch fortgesetzten Usadel-Propagator, ist die Anwesenheit bzw. Abwesenheit von gebundenen Zuständen bei $E = 0$ im Vortexcore. Während im sauberen Grenzfall aufgrund der Streuung der Quasiteilchen am Phasensprung im Vortexzentrum gebundene Zustände mit einem Maximum bei Energie Null auftreten, wobei die Höhe des Maximums empfindlich von der Größe des effektiven Streuparameters δ sowie der räumlichen Variation der Paarpotentialamplitude $\Delta(r)$ abhängt, ist das Quasiteilchenspektrum im Vortexzentrum für den schmutzigen Grenzfall flach, vergleichbar mit dem Spektrum im normalleitenden Zustand. Dass dieses sehr unterschiedliche Verhalten direkt auf die Zerstörung der Kohärenz durch die starke Störstellenstreuung zurückzuführen ist, kann im Grenzfall $r \rightarrow 0$ einfach veranschaulicht werden. Wenn man im sauberen Grenzfall vereinfachend von einer konstanten

Paarpotentialamplitude ausgeht (d.h. bei Betrachtung eines so genannten Phasenvortex), so behalten die Riccati-Parameter $a(x)$ und $b(x)$ des Eilenberger-Propagators für eine beliebige Trajektorie durch den Mittelpunkt der Flusslinie bis zum Vortexzentrum selbst ihre Anfangswerte bei (siehe Gleichungen (2.14) und (2.15)), da die Phase der Paarpotentialamplitude sich entlang einer solchen Trajektorie nicht ändert. Damit berechnet sich das Produkt $a(0)b(0)$ im Vortexzentrum als

$$\begin{aligned} a(0)b(0) &= a(-\infty)b(+\infty) = \frac{\Delta(-\infty)}{\delta + \sqrt{\delta^2 + |\Delta(-\infty)|^2}} \frac{\Delta^\dagger(+\infty)}{\delta + \sqrt{\delta^2 + |\Delta(+\infty)|^2}} \\ &= -\frac{|\Delta|^2}{2\delta \left(\delta + \sqrt{\delta^2 + |\Delta|^2} \right) + |\Delta|^2} \end{aligned}$$

wobei das negative Vorzeichen durch die auf der einlaufenden Trajektorie bezüglich der auslaufenden Trajektorie um π gedrehte Phase zustande kommt. Da dieses Produkt für jede Trajektorie durch das Vortexzentrum den gleichen Wert ergibt, kann die Zustandsdichte für $E = 0$ berechnet werden als

$$N(E = 0) = N_0 \operatorname{Re} \left[\frac{1 - ab}{1 + ab} \right] = N_0 \operatorname{Re} \left[\frac{\sqrt{\delta^2 + |\Delta|^2}}{\delta} \right]$$

Es ist unschwer zu erkennen, dass die Zustandsdichte für $E = 0$ im Vortexzentrum für $\delta \rightarrow 0$ divergiert. Für einen realen Vortex, bei dem die Paarpotentialamplitude im Vortexzentrum verschwindet, schwächt sich der “zero-energy-peak” in der Zustandsdichte etwas ab, weil $a(x)$ und $b(x)$ dann im Vortexzentrum nicht mehr ihre Bulk-Werte besitzen. Da diese Änderung von $a(x)$ und $b(x)$ aber nur langsam – auf der Längenskala der Kohärenzlänge ξ_0 – vonstatten geht, und das Produkt von $a(0)$ und $b(0)$ sein negatives Vorzeichen beibehält, bleibt der Peak jedoch weiterhin bestehen. Ganz anders sieht es dagegen im schmutzigen Grenzfall aus. Hier kann aufgrund der starken Störstellenstreuung keine langreichweitige Kohärenz der Quasiteilchen aufrechterhalten werden, wie sie für die Entstehung von gebundenen Zuständen notwendig ist. Betrachtet man dafür die Usadel-Gleichung in der analogen Parametrisierung (C.1), so erhält man nach Multiplikation mit r^2 :

$$2\omega ar^2 - \mathcal{D} \left\{ r\partial_r (r\partial_r a) - r^2 \frac{2a(\partial_r a)^2}{1+a^2} - \frac{a(1-a^2)}{1+a^2} \right\} = r^2 (1-a^2) \tilde{\Delta}(r)$$

Im Vortexzentrum für $r \rightarrow 0$ ergibt sich daraus für a :

$$a(1-a^2) = 0$$

mit den zwei Lösungen $a = 0$ und $a = 1$. Eine Entwicklung in erster Ordnung in r zeigt, dass im Grenzfall $r \rightarrow 0$ der Parameter a den Wert $a(r = 0) = 0$ annimmt. In diesem Fall erhält man das Spektrum

$$N(E) = N_0 \operatorname{Re} \left[\frac{1 - a^2}{1 + a^2} \right] = N_0$$

d.h. für alle Energien ergibt sich die konstante Zustandsdichte des normalleitenden Zustands. Dieser sehr charakteristische Unterschied zwischen dem sauberen und dem schmutzigen Grenzfall ist in Abbildung 4.3 für einen Einband-Supraleiter mit konventioneller Paarungssymmetrie und zylindrischer Fermifläche visualisiert. Hier sind die Spektren für verschiedene Abstände vom Vortexzentrum voneinander aufgereiht, wobei die hinterste Kurve jeweils

4. Der einzelne Vortex als Modell niedriger Magnetfelder

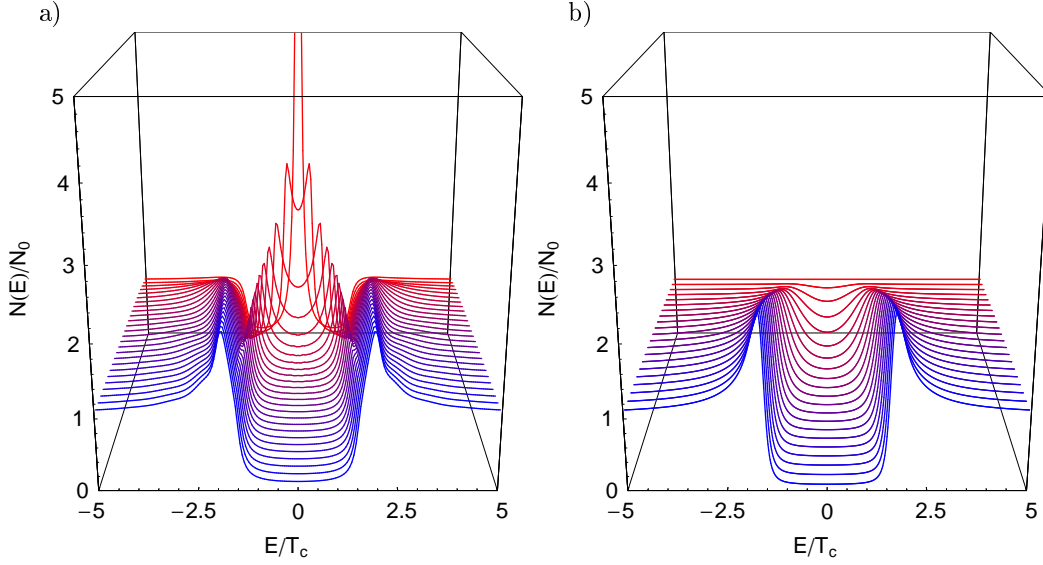


Abbildung 4.3: Die Zustandsdichte $N(E)/N_0$ in der Umgebung eines Vortex in einem s -Wellen-Supraleiter mit zylindrischer Fermifläche. Die für $T = 0,5T_c$ selbstkonsistent bestimmten Paarpotentialamplituden wurden der Berechnung der Spektren zugrunde gelegt. Im sauberen Grenzfall (a) sind die Spektren von $r = 0$ bis $r = 5\xi_0$ im Abstand von $0,2\xi_0$ gezeigt, das hinterste Spektrum zeigt deutlich die gebundenen Zustände im Vortexzentrum, während man im Vordergrund schon fast die Form des Bulk-Spektrums für Quasiteilchen mit endlicher Lebenszeit ($\delta = 0,1T_c$) erkennt. Im schmutzigen Grenzfall (b) hingegen findet man einen normalleitenden Vortexcore mit flachem Spektrum vor, hier sind die Zustandsdichten von $r = 0$ bis $r = 10\xi_0$ in Abständen von $0,5\xi_0$ gezeigt.

das Spektrum im Vortexzentrum darstellt. Bezeichnend für die Zustandsdichte im sauberen Grenzfall ist die Aufspaltung des “zero-energy-peaks” bei wachsendem Abstand vom Vortexzentrum, der durch den Einfluss der Kreisströme um das Vortexzentrum erklärt werden kann. Da die Ergebnisse von Eskildsen et al. in [54] aufgrund der Messung des c -Achsen-Tunnelstroms nun hauptsächlich die Zustandsdichte des π -Bandes von Magnesiumdiborid widerspiegeln – die Elektronen der σ -Bänder bewegen sich vorwiegend zweidimensional, senkrecht zur c -Achse des Kristalls – können sie theoretisch durch ein effektives Einband-Modell beschrieben werden. Ein Vergleich der Messergebnisse mit Abbildung 4.3 b) zeigt, dass aufgrund des Fehlens jeglicher gebundener Zustände im Vortexzentrum die Störstellenstreuung innerhalb des π -Bandes als ausreichend stark angenommen werden kann, um durch eine Rechnung im schmutzigen Grenzfall sehr gut beschrieben zu werden.

Für Magnesiumdiborid ist nun neben dem Spektrum für ein effektives Einband-Modell natürlich auch die Berechnung der lokalen Zustandsdichte in einem Zweiband-Modell unter Berücksichtigung der korrekten Paarpotentialamplituden in den zwei Bändern von Interesse. Dabei können die beiden Anteile der Zustandsdichte für die zwei Bänder völlig getrennt voneinander berechnet werden, da die zwischen den Bändern vermittelnde Interband-Streuung vernachlässigt werden kann und die Interband-Paarung nur bei der anfänglichen Berechnung der Paarpotentialamplituden eine Rolle spielt. Bei der Summation der zwei Anteile der Zustandsdichte gilt es hingegen zu berücksichtigen, dass eine Gewichtung gemäß den Anteilen der normalleitenden Zustandsdichten im σ - und im π -Band erfolgen muss. In Abbildung 4.4 ist die radiale Abhängigkeit der Zustandsdichte bei Energie Null $N(E = 0)$ im sauberen

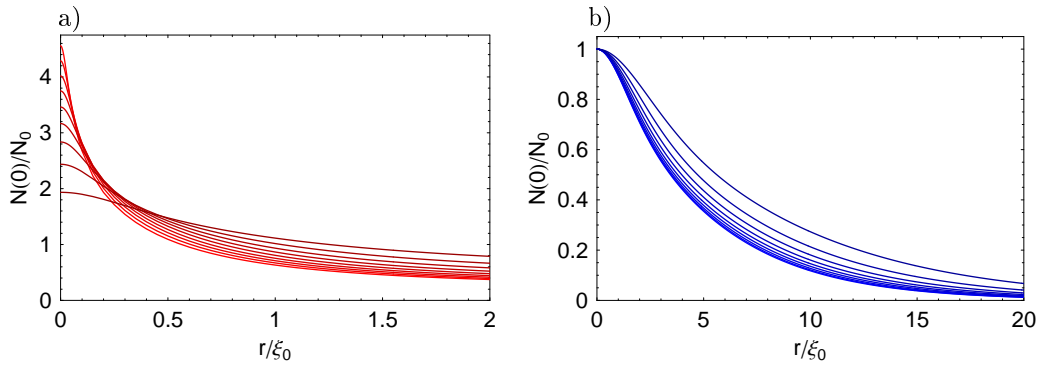


Abbildung 4.4: Die Zustandsdichte $N(0)/N_0$ in Magnesiumdiborid als Funktion des Abstands vom Vortexzentrum für verschiedene Temperaturen, berechnet für den sauberen Grenzfall mit einem effektiven Streuparameter $\delta = 0, 2T_c$ (**a**) und für den schmutzigen Grenzfall (**b**). In beiden Fällen beobachtet man eine Verbreiterung des Peaks für wachsende Temperaturen, was auf die Vergrößerung des Vortexcores zurückgeht.

und im schmutzigen Grenzfall für verschiedene Temperaturen einander gegenübergestellt. Während im sauberen Grenzfall die deutliche Reduktion des Peaks im Vortexzentrum und die wachsende Ausdehnung der Vortexcoreregion bei steigender Temperatur eine Unterscheidung der verschiedenen Temperaturen leicht möglich macht, ist im schmutzigen Grenzfall nur ein schwacher Effekt bei Temperaturen nahe T_c zu erkennen. Dies hängt direkt mit der für niedrige Temperaturen beobachtbaren Konstanz der Vortexcoregröße ξ_v im schmutzigen Grenzfall zusammen, die im nächsten Abschnitt ausführlicher diskutiert werden soll.

Vergleicht man nicht nur die Zustandsdichte bei $E = 0$, sondern die gesamte spektrale Verteilung der Zustände in der Umgebung der Fermikante für verschiedene Abstände vom Vortexzentrum, so findet man im sauberen Grenzfall für mittlere Abstände vom Vortexzentrum eine kompliziertere Struktur, die sich aus der Überlagerung der durch den Quasiteilchenstrom aufgespaltenen gebundenen Zustände im σ - und im π -Band ergibt (siehe Abbildung 4.5). Dabei muss berücksichtigt werden, dass die halbtorusförmige Struktur der Fermifläche im π -Band zu sehr flachen Gapkanten mit nur schwach ausgeprägten Peaks führt, wie sie schon in Abschnitt 3.2.1 diskutiert wurden. Im schmutzigen Grenzfall ergibt sich für wachsenden Abstand vom Vortexzentrum ein stetiger Übergang von einem normalleitenden Spektrum bei $r = 0$ zu einem klassischen Zweiband-Bulk-Spektrum für große Entfernungen vom Vortexzentrum.

4. Der einzelne Vortex als Modell niedriger Magnetfelder

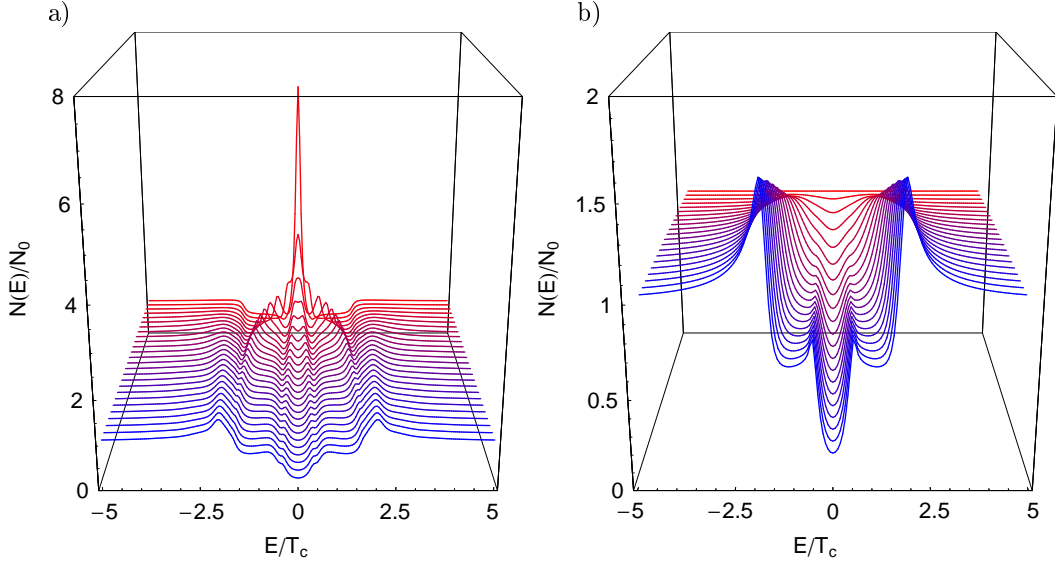


Abbildung 4.5: Das Spektrum für verschiedene Abstände vom Vortexzentrum berechnet für einen Zweiband-Supraleiter am Beispiel von Magnesiumdiborid. Gezeigt sind die Spektren für den sauberen Grenzfall von $r = 0$ bis $r = 5\xi_0$ in Schritten von $0,2\xi_0$ (a) und für den schmutzigen Grenzfall von $r = 0$ bis $r = 10\xi_0$ in Schritten von $0,5\xi_0$ (b), wobei das Verhältnis der Diffusionskonstanten wie in den anderen Rechnungen zu $\mathcal{D}_{xx}^{(\sigma)}/\mathcal{D}_{xx}^{(\pi)} = 0,2$ gewählt wurde.

4.3 Der Kramer-Pesch-Effekt im sauberen Grenzfall

Betrachtet man die inverse Steigung im Vortexzentrum als ein Maß für die Ausdehnung des Vortexcores, so erkennt man, dass diese Größe im sauberen Grenzfall für kleine Temperaturen linear mit der Temperatur verschwindet (siehe Abbildung 4.6 a). Dieser Effekt wird in der Literatur nach den Autoren von [43] als Kramer-Pesch-Effekt bezeichnet (siehe dazu auch [56, 57, 58]). Die im folgenden als ξ_v bezeichnete Länge unterscheidet sich mit ihrer linearen Temperaturabhängigkeit von den übrigen charakteristischen Längen im Supraleiter, insbesondere der Kohärenzlänge ξ_0 und der Londonschen Eindringtiefe λ_L , die alle für kleine Temperaturen eine Sättigung aufweisen. Eine detaillierte Studie zum Einfluss einer reduzierten Lebenszeit der Quasiteilchen auf diesen Effekt, wie sie beispielsweise unter der Wirkung von Störstellen auftreten kann, findet sich in [59]. Die Autoren können zeigen, dass die Einführung von Störstellenstreuung zu einem vorzeitigen Abbruch des linearen Bereichs bei kleinen Temperaturen und zu einem Übergang in eine Sättigung führt. Mit sinkender freier Weglänge wächst der Sättigungswert, bis die Kurve im Grenzfall eines schmutzigen Supraleiters eine Form annimmt, wie sie in Abbildung 4.6 b) gezeigt ist. Da der Kramer-Pesch-Effekt im schmutzigen Grenzfall nicht zu beobachten ist, liegt es nahe, ihn mit den gebundenen Zuständen im Vortexcore in Verbindung zu bringen, wie im folgenden kurz skizziert werden soll (siehe dazu [60]). Für eine Trajektorie durch das Vortexzentrum findet man den gebundenen Zustand bei der Quasiteilchenenergie $E_B = 0$. Betrachtet man Trajektorien durch die Vortexcoreregion mit endlichem Impact-Parameter y , worunter man den senkrechten Abstand der Trajektorie vom Vortexzentrum versteht, so findet man den gebundenen Zustand bei einer Energie, die in etwa proportional zum Impact-Parameter ist: $E_B \propto \Delta_0 y / \xi_0$. Für kleine Temperaturen von der Größenordnung dieser Energie $T \propto E_B$ be-

ginnt der gebundene Zustand eine entscheidende Rolle bei der Berechnung der Gapgleichung im Abstand des zugehörigen Impact-Parameters $r \propto \xi_1 = T\xi_0/\Delta_0$ zu spielen und führt zu einem starken Anstieg des Paarpotentials. Damit skaliert die räumliche Variation des Paarpotentials für kleine Temperaturen auf einer neuen Längenskala ξ_1 , die proportional zur Temperatur ist und mit dieser verschwindet. Für die Vortexcoregröße ξ_v soll im folgenden eine Definition verwendet werden, wie sie von Hayashi in [59] vorgeschlagen wurde:

$$\xi_v^{-1} = \left. \frac{\partial \Delta(r, T)}{\partial r} \right|_{r=0} \frac{1}{\Delta_0(T)}$$

Für endliche Temperaturen kann diese Größe nun aus der Gapgleichung berechnet werden, wie sie für den Multiband-Fall in Gleichung (4.5) angegeben ist. Für einen Einband-Supraleiter erhält man die entsprechende Gleichung, indem man die Kopplungsmatrix $\lambda_{\alpha\alpha'}$ durch die Wechselwirkungskonstante N_0V ersetzt und die Summation über die zwei Bänder streicht. Zur Berechnung der Steigung im Grenzfall verschwindender Temperatur $T \rightarrow 0$ kann die Summation über die Matsubarafrequenzen durch eine Integration über eine kontinuierliche Variable ϵ ersetzt werden, da der Abstand zwischen den einzelnen Matsubarafrequenzen verschwindet:

$$2\pi T \sum_{0 < \epsilon_n < \omega_c} \dots \rightarrow \int_0^{\omega_c} d\epsilon \dots$$

Dabei begrenzt die Anzahl der radialen Gitterpunkte, auf denen das Paarpotential numerisch berechnet wird, die maximale Steigung, die im Vortexzentrum erreicht werden kann. Daher ist es natürlich auch für $T \rightarrow 0$ unmöglich, die zu erwartende Divergenz der Steigung numerisch zu belegen. Abhilfe kann bis zu einem gewissen Grad eine Interpolation der berechneten Paarpotentialamplitude schaffen, die eine Auswertung der Steigung bei einem Abstand vom Vortexzentrum erlaubt, der kleiner ist als der minimale Gitterabstand des radialen Punktgitters. Trotz der numerischen Begrenzungen ist in Abbildung 4.6 a) der lineare Abfall der Vortexcoregröße sehr gut zu erkennen, der sich bis zu einer verschwindenden Temperatur $T = 0$ nahezu konstant fortsetzt.

Die gleiche Rechnung kann auch für den Zweiband-Supraleiter am Beispiel von Magnesiumdiborid durchgeführt werden (vgl. Abbildung 4.7). Auch hier beobachtet man im sauberen Grenzfall einen ausgeprägten Kramer-Pesch-Effekt, der sich in beiden Bändern bemerkbar macht. Da die Berechnung der Vortexcoregröße für niedrige Temperaturen numerisch sehr aufwändig wird, ist es hier einfacher, mit Hilfe einer analytischen Approximation, wie sie in [61, 62] vorgestellt wird, den Bereich kleiner Temperaturen bis hin zu $T \rightarrow 0$ näher zu untersuchen. Man erkennt dabei in beiden Bändern eine Abknicken des linearen Verlaufs der Coregröße hin zu dem Wert bei $T = 0$, was von den numerischen Rechnungen bestätigt wird. Von Interesse ist weiterhin das Verhältnis der zwei Vortexcoregrößen im σ - und im π -Band, das für Temperaturen nahe der kritischen Temperatur gegen eins geht, d.h. die Paarpotentialamplituden gleichen sich für große Temperaturen sehr stark an. Für $T \rightarrow 0$ zeigt sich hingegen ein starker Anstieg dieses Verhältnisses, das auf zwei grundsätzlich unterschiedliche Steigungen von $\xi_v^{(\sigma)}(T)$ und $\xi_v^{(\pi)}(T)$ für $T \rightarrow 0$ hindeutet. Auch im Zweiband-Modell zeigt sich im schmutzigen Grenzfall natürlich kein Kramer-Pesch-Effekt, hier hängt das Verhältnis der zwei Paarpotentialamplituden sehr stark von dem Verhältnis der zwei Kohärenzlängen im σ - und im π -Band ab, das über das Verhältnis der zwei Diffusionskonstanten $\mathcal{D}^{(\sigma)}/\mathcal{D}^{(\pi)}$ festgelegt ist.

In der Nähe der kritischen Temperatur kann ein Vergleich der so ermittelten Coregröße mit den Ergebnissen aus einem Variationsmodell unter Verwendung der verallgemeinerten Ginzburg-Landau-Theorie aus Abschnitt 4.1 gezogen werden. Hierfür soll unter Vernachlässigung des Vektorpotentials $\vec{A} = 0$ die räumliche Variation des Paarpotentials im Band α in

4. Der einzelne Vortex als Modell niedriger Magnetfelder

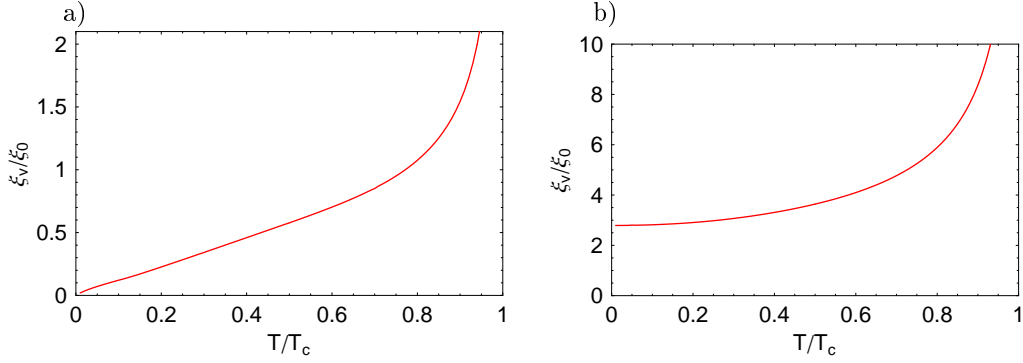


Abbildung 4.6: Der Kramer-Pesch-Effekt in einem s -Wellen-Supraleiter mit einer zylindrischen Fermifläche und verschwindender Störstellenkonzentration **(a)**. Deutlich zu erkennen ist die lineare Abnahme der Vortexcoregröße, definiert als die inverse Steigung der Paarpotentialamplitude im Vortexzentrum, für kleine Temperaturen. Zum Vergleich sind die entsprechenden Ergebnisse in einem schmutzigen Supraleiter gezeigt, in dem die Vortexcoregröße für kleine Temperaturen in eine Sättigung übergeht **(b)**. Die unterschiedliche Größenordnung von ξ_v/ξ_0 in **(a)** und in **(b)** resultiert aus der völlig unterschiedlichen Definition von ξ_0 im sauberen und im schmutzigen Grenzfall.

der folgenden Form angesetzt werden:

$$\Delta^{(\alpha)}(\vec{r}) = \Delta_0^{(\alpha)} \tanh \frac{|\vec{r}|}{\xi_v^{(\alpha)}} e^{i \arg \vec{r}}$$

Dabei sollen die Variationsparameter $\xi_v^{(\sigma)}$ und $\xi_v^{(\pi)}$ so bestimmt werden, dass sich ein Minimum des Ginzburg-Landau-Funktional in Gleichung (4.3) ergibt. Dafür kann unter Verwendung der Rotationssymmetrie und mit $f_S - f_N^{(0)} = \frac{\mathcal{F}_S - \mathcal{F}_N^{(0)}}{L^3}$ geschrieben werden:

$$\begin{aligned} f_S - f_N^{(0)} &= \frac{2}{L^2} \int_0^L dr r \left\{ \alpha_\sigma \left| \Delta_0^{(\sigma)} \right|^2 \tanh^2 \frac{r}{\xi_v^{(\sigma)}} + \alpha_\pi \left| \Delta_0^{(\pi)} \right|^2 \tanh^2 \frac{r}{\xi_v^{(\pi)}} \right. \\ &\quad - \gamma \left(\Delta_0^{(\sigma)*} \Delta_0^{(\pi)} + \Delta_0^{(\pi)*} \Delta_0^{(\sigma)} \right) \tanh \frac{r}{\xi_v^{(\sigma)}} \tanh \frac{r}{\xi_v^{(\pi)}} \\ &\quad + \frac{1}{2} \beta_\sigma \left| \Delta_0^{(\sigma)} \right|^4 \tanh^4 \frac{r}{\xi_v^{(\sigma)}} + \frac{1}{2} \beta_\pi \left| \Delta_0^{(\pi)} \right|^4 \tanh^4 \frac{r}{\xi_v^{(\pi)}} \\ &\quad + K_{x,y}^{(\sigma)} \left| \Delta_0^{(\sigma)} \right|^2 \left(\frac{1}{\xi_v^{(\sigma)2} \cosh^4 \frac{r}{\xi_v^{(\sigma)}}} + \frac{1}{r^2} \tanh^2 \frac{r}{\xi_v^{(\sigma)}} \right) \\ &\quad \left. + K_{x,y}^{(\pi)} \left| \Delta_0^{(\pi)} \right|^2 \left(\frac{1}{\xi_v^{(\pi)2} \cosh^4 \frac{r}{\xi_v^{(\pi)}}} + \frac{1}{r^2} \tanh^2 \frac{r}{\xi_v^{(\pi)}} \right) \right\} \end{aligned}$$

Nun findet man ein Extremum der Freien Energie unter Variation der Parameter $\xi_v^{(\sigma)}$ und $\xi_v^{(\pi)}$ indem man die folgenden gekoppelten Gleichungen löst

$$\frac{\partial (f_S - f_N^{(0)})}{\partial \xi_v^{(\sigma)}} = 0, \quad \frac{\partial (f_S - f_N^{(0)})}{\partial \xi_v^{(\pi)}} = 0$$

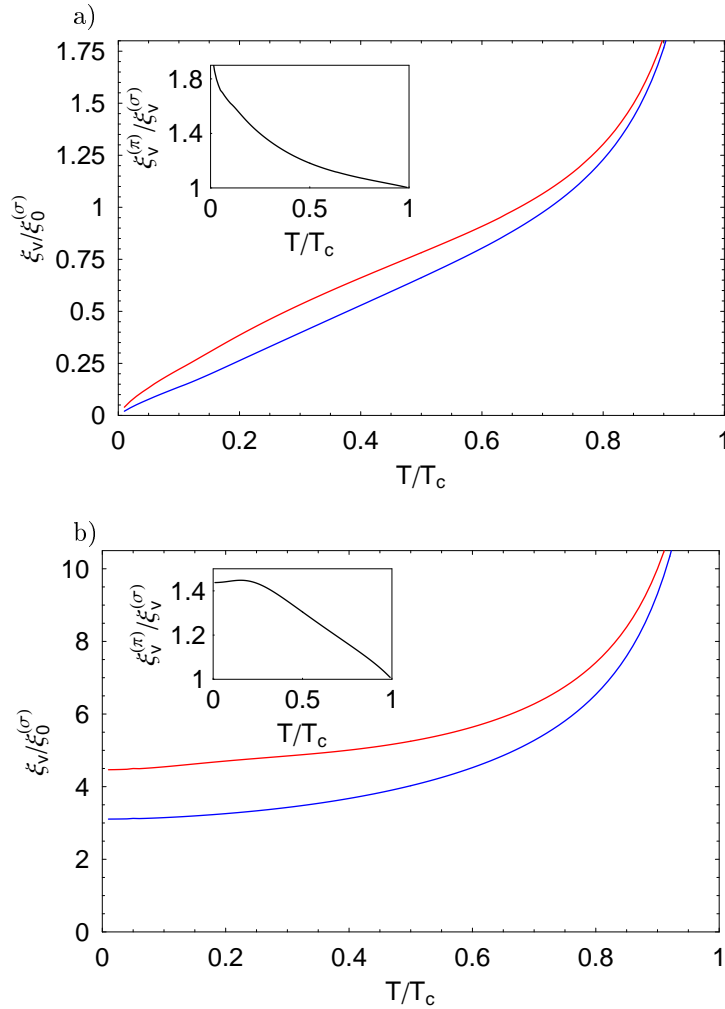


Abbildung 4.7: **a)** Der Kramer-Pesch-Effekt für einen Multiband-Supraleiter im sauberen Grenzfall. Man findet für kleine Temperaturen sowohl für das σ -Band (blau) als auch das π -Band (rot) eine nahezu lineare Abnahme der Vortexcoregröße mit sinkender Temperatur. Die numerisch aufwändige Analyse für sehr kleine Temperaturen $T < 0.1T_c$ zeigt hingegen noch zusätzlich ein deutliches Abknicken der Kurven in Richtung Ursprung für $T \rightarrow 0$, was auch durch eine analytische Approximation bestätigt wird (siehe [61, 62]). **b)** Zum Vergleich sind die entsprechenden Ergebnisse im schmutzigen Grenzfall für $\mathcal{D}_{xx}^{(\sigma)}/\mathcal{D}_{xx}^{(\pi)} = 0,2$ gezeigt. Ebenso wie im Falle eines Einband-Supraleiters findet man hier in beiden Bändern eine Sättigung der Vortexcoregröße bei sinkender Temperatur.

4. Der einzelne Vortex als Modell niedriger Magnetfelder

Schließlich muss man nur noch im Ginzburg-Landau-Funktional überprüfen, ob es sich auch um das gesuchte Minimum handelt. Die Ergebnisse dieser Rechnungen sind in Abbildung 4.8 a) zusammengestellt. Deutlich zu erkennen ist die Divergenz für $T \rightarrow T_c$ und man findet auch qualitativ eine gute Übereinstimmung mit der selbstkonsistent berechneten Vortexcoregröße. Vergleicht man jedoch explizit die Werte für $T = 0,8T_c$ und $T = 0,9T_c$, so findet man eine Abweichung von etwa 20% (bei $T = 0,8T_c$) und etwa 10% (bei $T = 0,9T_c$), die einerseits auf die Wahl des Variationsmodells und andererseits auf die sehr eingeschränkte Gültigkeit der Ginzburg-Landau-Entwicklung in Ordnungen von $\sqrt{1 - T/T_c}$ auf die nächste Umgebung der kritischen Temperatur zurückzuführen ist.

Die einfache numerische Handhabung des Ginzburg-Landau-Funktionals erlaubt es auch, ein weiteres, physikalisch denkbare Modell zu überprüfen, das von einer energetischen Bevorzugung eines spontan aufgespaltenen Vortexcores mit einer geringen räumlichen Trennung δy der Vortexzentren im σ - und im π -Band ausgeht. Eine ähnliche Situation, in der die Rotationssymmetrie bezüglich der Vortexachse gebrochen ist, wurde als Lösung der Ginzburg-Landau-Gleichungen in der B -Phase von superfluidem ^3He gefunden [63]. Zur Berechnung der Ginzburg-Landau Freien Energie soll der oben eingeführte Variationsansatz mit $y_{\pm} = y \pm \delta y/2$ folgendermaßen modifiziert werden

$$\begin{aligned}\Delta^{(\sigma)}(x, y) &= \Delta_0^{(\sigma)} \tanh \frac{\sqrt{x^2 + y_-^2}}{\xi_v^{(\sigma)}} \frac{x + iy_-}{|x + iy_-|} \\ \Delta^{(\pi)}(x, y) &= \Delta_0^{(\pi)} \tanh \frac{\sqrt{x^2 + y_+^2}}{\xi_v^{(\pi)}} \frac{x + iy_+}{|x + iy_+|}\end{aligned}$$

Dabei ist nun eine einfache Darstellung in Zylinderkoordinaten nicht mehr möglich und es muss ein zweidimensionales Integral zur Berechnung der Freien Energiedichte ausgeführt werden:

$$f_S - f_N^{(0)} = \frac{1}{L^2} \int_{-L/2}^{L/2} dx \int_{-L/2}^{L/2} dy \dots$$

Während alle Summanden, die diagonal im Bandindex sind, durch die Verrückung der Vortexzentren nicht betroffen sind, d.h. unabhängig von δy immer den gleichen Beitrag zur Freien Energie liefern, bedarf es für den gemischten Term einer näheren Betrachtung. Hier entsteht aus der Verschiebung der Phasen der Paarpotentiale ein veränderter Beitrag zur Freien Energiedichte:

$$\Delta^{(\sigma)*} \Delta^{(\pi)} \propto \frac{(x - iy_-)(x + iy_+)}{|x + iy_-| |x + iy_+|} = \frac{x^2 + y^2 + ix\delta y - \frac{\delta y^2}{4}}{|x + iy_-| |x + iy_+|}$$

wobei verwendet wurde, dass $y_+ - y_- = \delta y$ und $y_+ y_- = y^2 - \frac{\delta y^2}{4}$ gilt. Damit berechnet sich der gemischte Term in der Ginzburg-Landau-Entwicklung der Freien Energiedichte proportional zu:

$$\Delta^{(\sigma)*} \Delta^{(\pi)} + \Delta^{(\pi)*} \Delta^{(\sigma)} = 2\text{Re} \left[\Delta^{(\sigma)*} \Delta^{(\pi)} \right] \propto \frac{2x^2 + 2y^2 - \frac{\delta y^2}{2}}{\sqrt{(x^2 + y_-^2)(x^2 + y_+^2)}}$$

Variiert man den modifizierten Ausdruck der Freien Energiedichte nun um $\xi_v^{(\sigma)}$, $\xi_v^{(\pi)}$ und δy so erkennt man jedoch, dass ein globales Minimum der Freien Energie nur bei einem Zusammenfallen der zwei Vortexzentren zu finden ist, was zumindest in der Umgebung der kritischen Temperatur das Szenario zweier räumlich getrennter Vortexzentren unwahrscheinlich macht (siehe Abbildung 4.8 b).

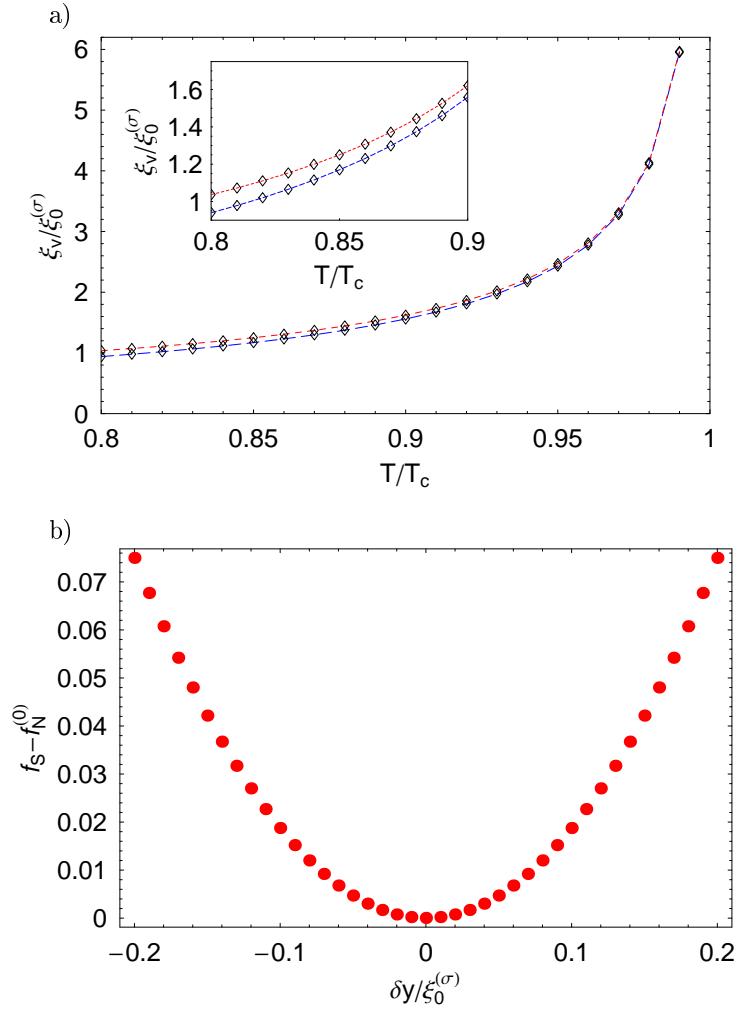


Abbildung 4.8: Die Variationsparameter $\xi_v^{(\sigma)}$ und $\xi_v^{(\pi)}$ bestimmt durch Minimierung des verallgemeinerten Ginzburg-Landau-Funktional in der Umgebung von T_c (a). Im Vergleich zur selbstkonsistenten Berechnung des Paarpotentials ermöglicht es der Variationsansatz, die Divergenz nahe T_c ohne größeren numerischen Aufwand zu bestimmen. Der Inset zeigt den Bereich zwischen $T = 0,8T_c$ und $T = 0,9T_c$ vergrößert, hier kann man den Verlauf von $\xi_v^{(\sigma)}$ (blau) und $\xi_v^{(\pi)}$ (rot) deutlicher unterscheiden. Außerdem gezeigt ist die Freie Energiedichte in beliebigen Einheiten, berechnet für $T = 0,8T_c$ unter Annahme einer kleinen Verrückung δy zwischen den Vortexzentren im σ - und im π -Band (b). Es ist deutlich zu erkennen, dass ein Minimum der Freien Energiedichte bei einem Zusammenfallen der Vortexzentren in den zwei Bändern ($\delta y = 0$) erreicht wird.

4.4 Induzierter Kramer-Pesch-Effekt in einem schmutzigen π -Band

Wie schon in Abschnitt 4.2 erwähnt weisen die experimentellen Ergebnisse auf eine hohe Störstellenkonzentration im π -Band von Magnesiumdiborid hin. Weitgehend unbekannt ist jedoch, wie stark die Verunreinigung des σ -Bandes in den bisher untersuchten Proben ist. Mazin et al. haben in [12] darauf hingewiesen, dass aufgrund von häufig auftretenden Fehlstellen im Magnesium-Untergitter, die hauptsächlich die dreidimensional propagierenden Elektronen aus den p_z -Orbitalen betreffen, die Streurrate im π -Band mit großer Wahrscheinlichkeit höher sein wird als die Streurrate im σ -Band. Dies legt es nahe, neben der Betrachtung des schmutzigen Grenzfall für beide Bänder ein Modell zu entwerfen, bei dem von einem sauberen σ -Band und einem stark verunreinigten π -Band ausgegangen wird (siehe [49, 64]). Von Interesse ist nun außerdem, ob und wenn ja wie sich in einem solchen Modell die Kopplung der Paarpotentialamplituden in den zwei Bändern auf die räumliche Variation derselben für kleine Temperaturen auswirkt. Die numerischen Rechnungen, die für drei unterschiedliche Verhältnisse der Kohärenzlängen im sauberen und im schmutzigen Band $\nu_\xi = \xi_\sigma/\xi_\pi$ durchgeführt wurden, zeigen, dass der Kramer-Pesch-Effekt gleichermaßen in beiden Bändern auftritt (siehe Abbildung 4.9). Man kann damit von einem im schmutzigen π -Band induzierten Kramer-Pesch-Effekt sprechen. Während die Vortexcoregröße im sauberen σ -Band in allen drei betrachteten Fällen einen weitgehend linearen Abfall für $T < 0,6T_c$ aufweist, zeigt sich für die Vortexcoregröße des π -Bandes ein deutlich anderes Bild. Hier findet man einen Verlauf von $\xi_v^{(\pi)}(T)$, der sich erst für kleine Temperaturen als näherungsweise linear beschreiben lässt. Inwieweit sich die Paarpotentialamplituden von σ - und π -Band unabhängig voneinander entwickeln, kann an der Temperaturabhängigkeit des Verhältnisses $\xi_v^{(\pi)}/\xi_v^{(\sigma)}$ abgelesen werden, das für $\nu_\xi = 5$ für wachsende Temperaturen rasch abfällt (vgl. Abbildung 4.9 a), während es für $\nu_\xi = 0,2$ nahezu linear verläuft (vgl. Abbildung 4.9 c).

Betrachtet man das Quasiteilchenspektrum im Vortexzentrum, so findet man eine gewichtete Überlagerung aus der normalleitenden Zustandsdichte des schmutzigen π -Bandes und dem gebundenen Andreev-Zustand im sauberen σ -Band (Abbildung 4.10). Diese Überlagerung ähnelt in der näheren Umgebung des Vortexzentrums einem um den Beitrag des flachen Spektrums im π -Band angehobenen Einband-Spektrum im sauberen Grenzfall. Erst in größerer Entfernung vom Vortexzentrum tritt ein deutliches Zweiband-Spektrum mit zwei ausgeprägten Gapkanten in Erscheinung, das in das gewöhnliche Zweiband-Bulk-Spektrum übergeht. Bedenkt man nun, dass das Vorhandensein eines gebundenen Zustands in der Umgebung des Vortexzentrums als "Ursache" für den Kramer-Pesch-Effekt gesehen werden kann, so ist auch verständlich, warum in einem gemischten Modell, in dem ein gebundener Zustand bei einer Energie proportional zum Abstand vom Vortexzentrum auftritt, immer ein ausgeprägter Kramer-Pesch-Effekt beobachtbar sein wird. Die vorliegenden Ergebnisse lassen somit die Hoffnung zu, einen solchen Effekt auch für eine hohe Streurrate im π -Band experimentell in Magnesiumdiborid nachzuweisen, ohne dass die Quasiteilchen im σ -Band direkt gemessen werden müssen.

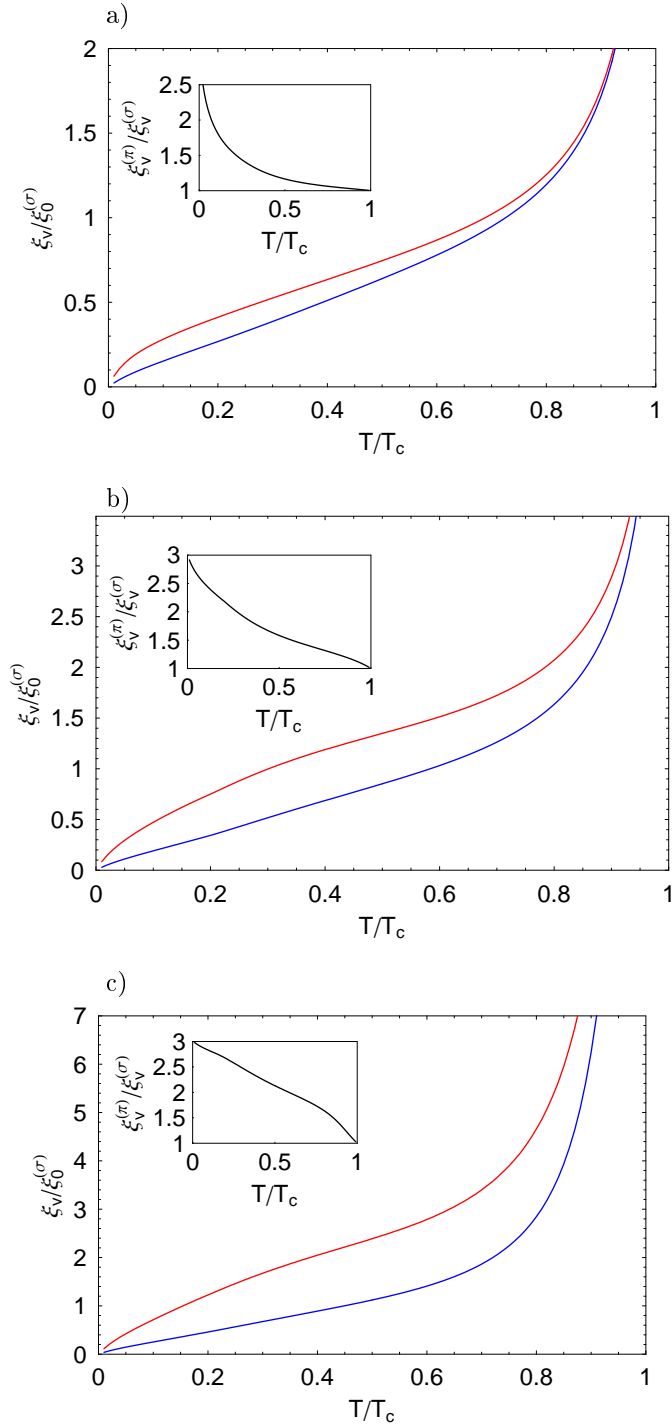


Abbildung 4.9: Der induzierte Kramer-Pesch-Effekt in einem schmutzigen π -Band für drei unterschiedliche Werte von $\nu_\xi = \xi_0^{(\sigma)}/\xi_0^{(\pi)}$. Dargestellt sind die Vortexcoregrößen im sauberen σ -Band (blau) und im schmutzigen π -Band (rot). In **(a)** wurde die Rechnung für $\nu_\xi = 5$, in **(b)** für $\nu_\xi = 1$ und in **(c)** für $\nu_\xi = 0,2$ durchgeführt. Der Inset zeigt jeweils das Verhältnis von $\xi_V^{(\pi)}/\xi_V^{(\sigma)}$ für die verschiedenen Parametersätze.

4. Der einzelne Vortex als Modell niedriger Magnetfelder

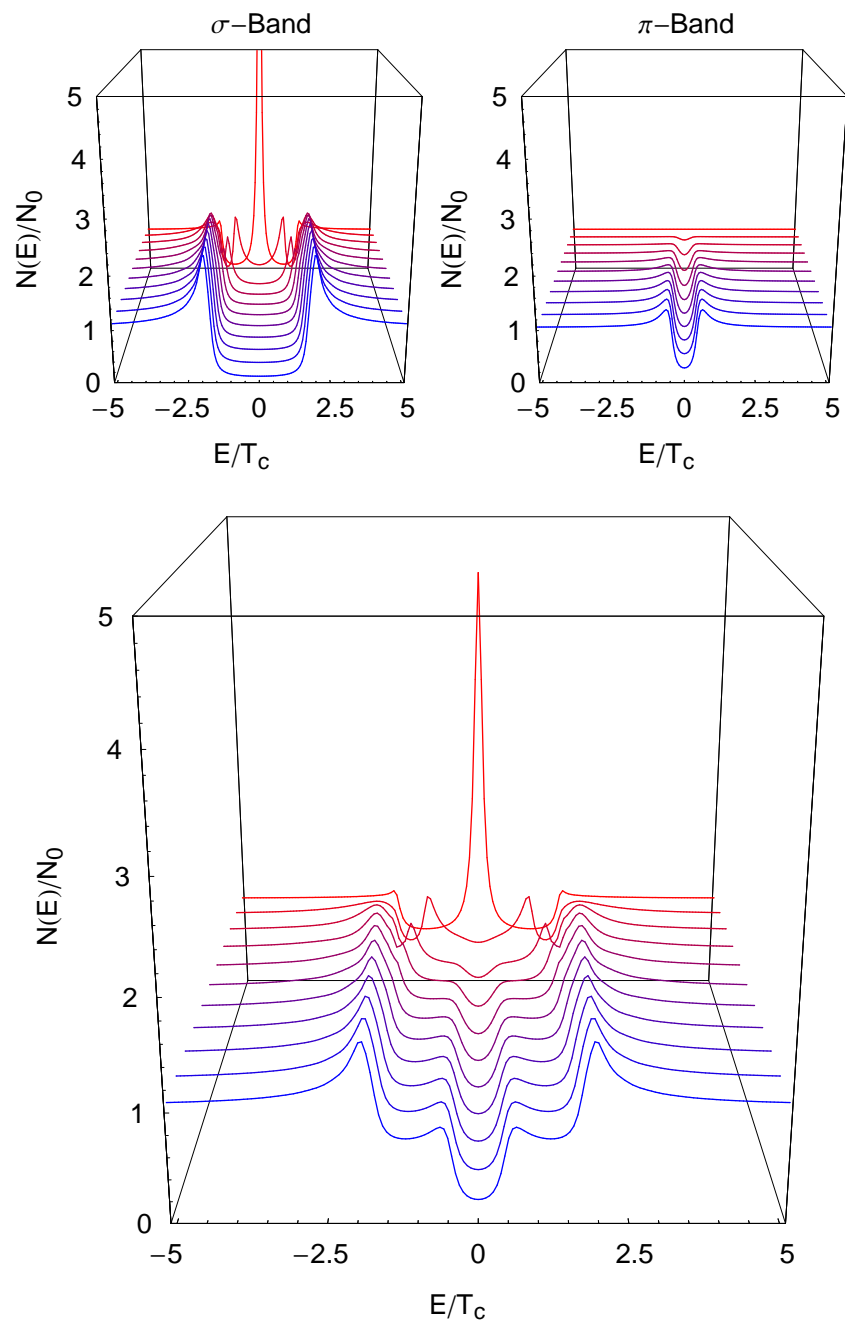


Abbildung 4.10: Das Quasiteilchenspektrum für verschiedene Abstände vom Vortexzentrum, berechnet für ein gemischtes Modell mit einem sauberen σ -Band und einem stark verunreinigten π -Band für ein Verhältnis der Kohärenzlängen von $\nu_\xi = 1$ und eine Temperatur $T = 0,5T_c$. Während die beiden oberen Abbildungen die Beiträge der einzelnen Bänder zeigen, ist in der unteren Abbildung die gesamte Zustandsdichte für den Zweiband-Supraleiter als gewichtete Summe der beiden Einzelbeiträge gezeigt.

Kapitel 5

Vortices und Grenzflächen in d -Wellen-Supraleitern

Trotz des wieder auflebenden Interesses an den konventionellen Supraleitern, das die Entdeckung von Magnesiumdiborid zur Folge hatte, konzentriert sich das Forschungsgebiet der Tieftemperaturphysik auch heute noch zu einem großen Teil auf die experimentelle wie theoretische Beschreibung der Hochtemperatur-Supraleiter, insbesondere der Kuprate. Diese geschichteten Systeme, die im undotierten Zustand antiferromagnetische Eigenschaften besitzen und nur durch die gezielte Dotierung von Sauerstoff oder geeigneten Substituenten einen supraleitenden Phasenübergang aufweisen, werden im allgemeinen als Supraleiter mit unkonventioneller Paarungssymmetrie betrachtet. Dabei unterscheidet man elektronen- bzw. lochdotierte Systeme, in denen zusätzliche negative bzw. positive Ladungsträger eingebracht werden. Für die experimentell sehr ausführlich untersuchten lochdotierten Hochtemperatur-Supraleiter wird im allgemeinen von einer d -Wellen-Symmetrie des Ordnungsparameters ausgegangen, d.h. es existieren Bewegungsrichtungen, für die die Quasiteilchen kein bzw. nur ein reduziertes Gap vorfinden. Im Gegensatz zu einer anisotropen s -Wellen-Symmetrie findet zusätzlich an jeder Knotenrichtung auf der Fermifläche ein Vorzeichenwechsel des Paarpotentials statt. Die Existenz von Knotenrichtungen auf der Fermifläche führt zu einem linearen Anstieg des winkelgemittelten Quasiteilchenspektrums für kleine Energien. Neben dieser Eigenschaft, die auch von einer stark anisotropen s -Wellen-Symmetrie des Ordnungsparameters herrühren könnte, findet man bei den unkonventionellen Supraleitern weitere Charakteristika, die allein der d -Wellen-Natur des Ordnungsparameters zuzuschreiben sind: An reflektierenden Oberflächen bzw. Grenzflächen innerhalb des Supraleiters bilden sich gebundene Zustände an der Fermikante aus, die sich allein durch die Andreev-Streuung der Quasiteilchen am Vorzeichenwechsel des Paarpotentials entlang einer gespiegelten Trajektorie erklären lassen (siehe dazu [65]). Im folgenden Abschnitt soll kurz der Unterschied zwischen konventioneller und unkonventioneller Paarungssymmetrie skizziert werden. Insbesondere soll die lokale Zustandsdichte für einen einzelnen Vortex bzw. ein Vortextgitter verglichen sowie auf die Entstehung von gebundenen Andreev-Zuständen an Oberflächen eingegangen werden. Im zweiten Abschnitt soll dann der Einfluss eines einzelnen gepinnten Vortex auf die Quasiteilchenzustandsdichte an der Oberfläche diskutiert werden.

5.1 Konventionelle und unkonventionelle Paarungssymmetrie

Die experimentelle Bestätigung der d -Wellen-Natur des Paarpotentials für die lochdotierten Hochtemperatur-Supraleiter – zumindest an Ober- bzw. internen Grenzflächen der Proben – kann zum gegenwärtigen Zeitpunkt als nahezu lückenlos angesehen werden. Damit verdient die Betrachtung der experimentell beobachtbaren physikalischen Eigenschaften, die die Supraleiter mit unkonventioneller Paarungssymmetrie von den Supraleitern mit konventioneller Paarungssymmetrie unterscheidet, besondere Beachtung. In der theoretischen Beschreibung erhält das Paarpotential für eine unkonventionelle Paarungssymmetrie neben der orts- und temperaturabhängigen Funktion $\Delta(\vec{r}, T)$ nun noch einen impulsabhängigen Faktor $\chi(\vec{k})$

$$\Delta(\vec{r}, \vec{k}, T) = \Delta(\vec{r}, T)\chi(\vec{k})$$

Im Fall einer zylindrischen Fermifläche, wie sie für die geschichteten Kuprate mit einer nahezu zweidimensionalen Supraleitung innerhalb der Kupferoxidebenen in guter Näherung vorliegt, sowie unter der Annahme einer $d_{x^2-y^2}$ -Symmetrie der Paarwellenfunktion kann diese Winkelfunktion geschrieben werden als $\chi(\vec{k}) = \cos(2\varphi)$. Dabei parametrisiert der Winkel φ den Vektor \vec{k} auf der Fermifläche. Ist man nun an der Berechnung lokaler Größen für einen räumlich inhomogenen Supraleiter mit einer unkonventionellen Paarungssymmetrie interessiert, so bietet es sich an, im sauberen Grenzfall auf die numerisch stabile Parametrisierung für die Riccati-Amplituden a und b aus Abschnitt 2.3 zurückzugreifen, wie sie schon für die Berechnung lokaler Größen im Zweiband-Fall herangezogen wurden. Im Unterschied zur konventionellen Paarungssymmetrie mit einem auf der gesamten Fermifläche konstanten Gap erhält man für unkonventionelle Supraleiter eine Winkelabhängigkeit der Quasiteilchen-Zustandsdichte. Dabei können Quasiteilchen mit einem Impuls parallel zur Knotenrichtung des Gaps schon für verschwindende Energie angeregt werden, während für die Anregung von Quasiteilchen parallel zur Richtung maximaler Gapamplitude eine endliche Energie erforderlich ist. Die Integration dieser unterschiedlichen Quasiteilchenspektren über die Fermifläche führt im Bulk mit $\Delta(\vec{r}, \vec{k}, T) = \Delta_0 \cos(2\varphi)$ auf:

$$N_s(E) = \frac{N_0}{2\pi} \int_0^{2\pi} \text{Re} \left[\frac{|E|}{\sqrt{E^2 - \Delta_0^2 \cos^2(\varphi)}} \right] d\varphi = N_0 \text{Re} \left[\frac{2}{\pi} K(\Delta_0^2/E^2) \right]$$

wobei $K(x)$ das vollständige elliptische Integral 1. Art bezeichnet. In Abbildung 5.1 c) und d) ist der V-förmige Verlauf des Quasiteilchenspektrums im Bulk als blaue Kurve im Vordergrund zu erkennen. Zu beachten ist dabei der lineare Anstieg für kleine Anregungsenergien im Vergleich zum deutlich ausgeprägten Gap im Falle konventioneller Paarungssymmetrie. Dass in beiden Fällen das spektrale Gewicht im Ursprung nicht zu Null verschwindet, ist auf die Annahme einer endlichen Lebensdauer der Quasiteilchen mit $\epsilon_n \rightarrow -iE + \delta$ und $\delta > 0$ zurückzuführen. In der Umgebung von Inhomogenitäten wie beispielsweise einem Vortex oder einem ganzen Vortextgitter findet man jedoch erhebliche Abweichungen des Spektrums von der Zustandsdichte im homogenen Supraleiter. In Abbildung 5.1 ist das Spektrum an verschiedenen Abständen vom Zentrum eines ‘‘Phasenvortex’’ gezeigt (siehe auch [24]). Im Vergleich zu einem selbstkonsistent berechneten Vortex wird bei einem Phasenvortex die räumliche Variation der Paarpotentialamplitude vernachlässigt und nur die Streuung an der Phase des Ordnungsparameters zur Berechnung der gebundenen Zustände herangezogen. Diese Approximation, die mit dem Verzicht auf eine langwierige selbstkonsistente Berechnung der Paarpotentialamplitude die Lösung für eine Vielzahl von Problemstellungen überhaupt erst realisierbar macht, ist für kleine Temperaturen sicher gerechtfertigt, da hier die Coregröße des Vortex verschwindet. Man erkennt sowohl für s -Welle als auch für d -Welle das

Aufspalten der gebundenen Zustände durch die supraleitenden Kreisströme um das Vortexzentrum, die auf der Längenskala der Londonschen Eindringtiefe in den Supraleiter hinein abfallen. Dabei findet man für den d -Wellen-Supraleiter eine deutlich unterschiedliche Verteilung des spektralen Gewichts für die Richtung parallel zur Knotenlinie der d -Welle – mit nur einem gebundenen Zustand oberhalb und unterhalb der Fermikante – und für die Richtung parallel zur Orientierung maximaler Gapamplitude – mit jeweils zwei gebundenen Zuständen (vgl. Abbildung 5.1 b).

In Abbildung 5.2 sind die Zustandsdichten bei $E = 0$ für einen einzelnen Phasenvortex für konventionelle Paarungssymmetrie (links) und unkonventionelle Paarungssymmetrie (rechts) einander gegenübergestellt, wie sie beispielsweise in Tunnel-Spektroskopie-Experimenten (STM) oder anderen abbildenden Verfahren gemessen werden können. Deutlich zu erkennen ist in der rechten Abbildung die Kopplung von Impuls- und Ortsraum, die in der Vierfachsymmetrie der gebundenen Zustände zum Ausdruck kommt. Im Vergleich zu den entsprechenden Ergebnissen von Schopohl und Maki in [31] wurde hier mit einem relativ großen effektiven Streuparameter $\delta = 0,1\Delta_0$ gerechnet, der die scharfe Richtungsabhängigkeit der gebundenen Zustände etwas verwischt. Von Interesse ist auch die lokale Zustandsdichte, wie sie für hohe Magnetfelder im Vortexzustand berechnet werden kann. Hier kann nahe B_{c2} für das Paarpotential die Abrikosov-Lösung unter der Annahme eines konstanten Magnetfelds mit einem passenden Vektorpotential angesetzt werden und die Riccati-Gleichungen für $E = 0$ gelöst werden. Für einen s -Wellen-Supraleiter weist die Zustandsdichte für $E = 0$ die dem Vortextgitter eigene hexagonale Symmetrie auf, mit Linien geringen spektralen Gewichtes zwischen den Vortices. Für einen d -Wellen-Vortex findet man eine Überlagerung der hexagonalen Symmetrie des Flussliniengitters mit der Vierfachsymmetrie der Paarungswechselwirkung, wobei die Linien geringen spektralen Gewichtes zwischen den Vortices bestehen bleiben.

Abgesehen von den Flusslinien, die die Translationsinvarianz der supraleitenden Phase brechen, beobachtet man auch in der Umgebung von Grenzflächen, wie sie an der Oberfläche der supraleitenden Probe, an Versetzungsebenen des Kristallgitters, an Korngrenzen oder an artifiziellen Kontakten auftreten, diverse interessante Phänomene. Neben Effekten, die direkt mit dem Grenzübergang zwischen zwei supraleitenden Phasen, bzw. zwischen supraleitender und normalleitender Phase zusammenhängen, wie z.B. dem Josephson- oder dem Proximity-Effekt bei endlicher Barrierentransparenz, finden sich bei unkonventionellen Supraleitern auch an ideal reflektierenden Oberflächen ohne Transparenz Hinweise, die Rückschlüsse auf die Symmetrie der Paarungswechselwirkung erlauben. Liegt die Grenzfläche gerade so, dass ihr Normalenvektor parallel zur Knotenrichtung der d -Welle gerichtet ist (für die in Hochtemperatur-Supraleitern angenommene $d_{x^2-y^2}$ -Symmetrie der Paarwellenfunktion entspricht das der (110)-Richtung des Kristalls), so findet man entlang der Grenzfläche einen starken Anstieg des spektralen Gewichtes für Energie Null, wobei die räumliche Ausdehnung dieses gebundenen Andreev-Zustands in der Größenordnung der Kohärenzlänge liegt [66, 67, 68]. Variiert der Winkel zwischen Grenzfläche und Kristallachse, so reduziert sich die Höhe des gebundenen Zustands bei $E = 0$, bis er für eine ideal reflektierende (100)-Grenzfläche ganz verschwindet. Dieses Verhalten kann mit Hilfe der Riccati-Parametrisierung leicht verstanden werden und soll im folgenden kurz skizziert werden. Während die Quasiteilchen – und damit auch die ihre Bewegungsbahnen beschreibenden Trajektorien – an einer idealen spiegelnden Oberfläche ein klassisches Reflexionsverhalten aufweisen, wie es aus der Strahlenoptik bekannt ist, genügen die Riccati-Amplituden auf den ein- und auslaufenden Trajektorien einer einfachen Stetigkeitsbedingung, die für verschwindende Transparenz aus den Randbedingungen von Shelankov (siehe [69]) hervorgeht:

$$a_{out} = a_{in}, \quad b_{in} = b_{out}$$

Vernachlässigt man vorerst die räumliche Variation der Paarpotentialamplitude, so kann

5. Vortices und Grenzflächen in d -Wellen-Supraleitern

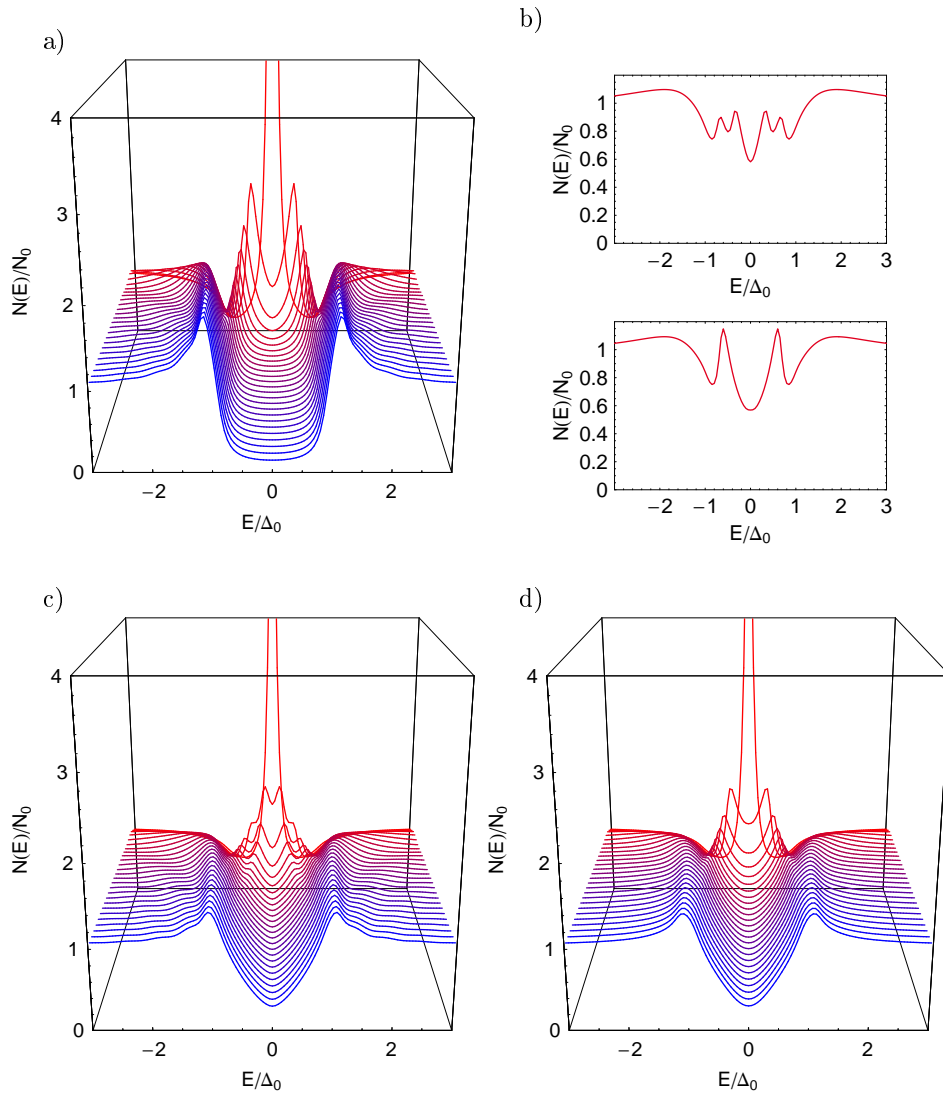


Abbildung 5.1: Das Quasiteilchenspektrum in der Umgebung eines Phasenvortex ($|\Delta(\vec{r})| = 1$) für einen Supraleiter mit (a) konventioneller Paarungssymmetrie (s -Welle) und für einen Supraleiter mit (b,c und d) unkonventioneller Paarungssymmetrie (d -Welle). Dabei wurde das Spektrum in (a,c und d) für verschiedene Abstände vom Vortexzentrum in Schritten von $0,2\xi_0$ berechnet, wobei die radiale Richtung im Ortsraum in (c) parallel zur Richtung maximaler Paarpotentialamplitude und in (d) parallel zur Knotenrichtung der Paarpotentialamplitude der d -Welle gewählt wurde (was in der rechten oberen Figur von Abbildung 5.2 einem waagrechten Strahl bzw. einem diagonal gerichteten Strahl mit Ursprung im Vortexzentrum entspricht). In Figur (b) sind die d -Wellen-Spektren für einen Abstand von $r = 0,6\xi_0$ in Richtung maximaler Gapamplitude (oben) und in Knotenrichtung (unten) verglichen. Man erkennt in Knotenrichtung die Aufspaltung des gebundenen Zustands unter dem Einfluss der Kreisströme in zwei chirale Äste oberhalb und unterhalb der Fermikante, wohingegen in Richtung maximaler Gapamplitude eine starke Unterdrückung der gebundenen Zustände und ein mehrfaches Aufspalten beobachtet werden kann (vgl. [24]).

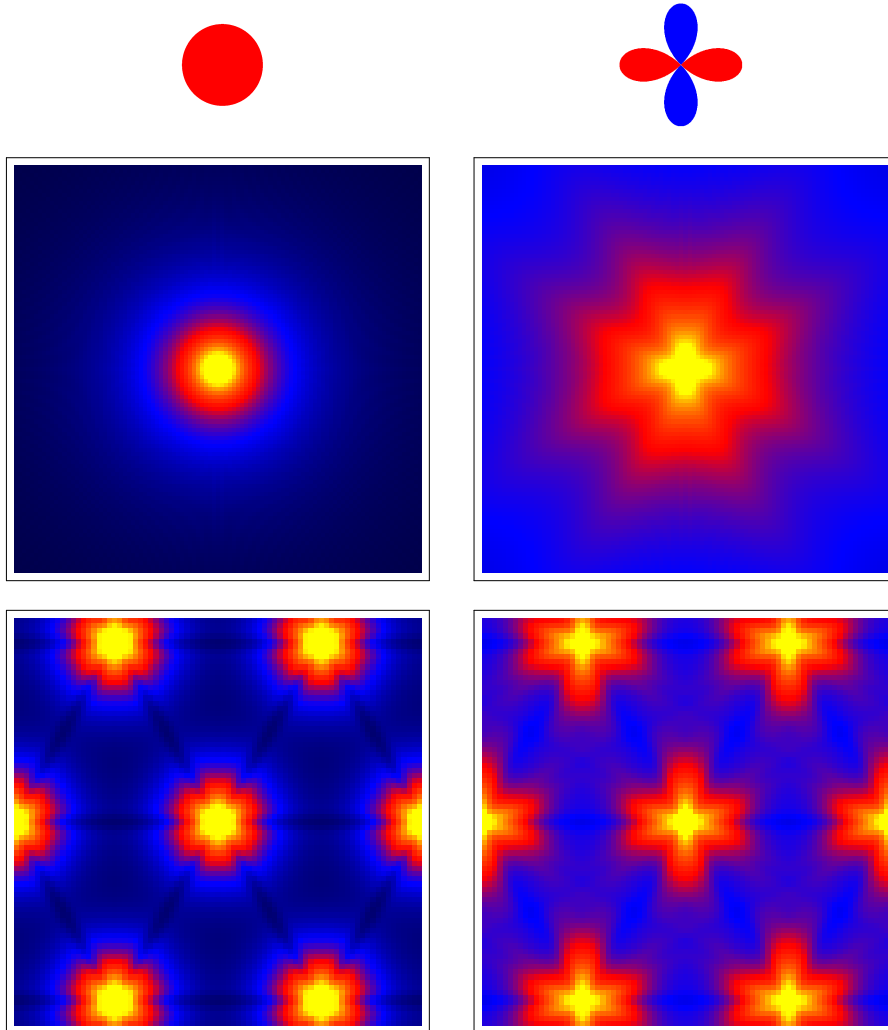


Abbildung 5.2: Die lokale Zustandsdichte im Vortexzustand (Die Farbverläufe indizieren Zustandsdichten von $N(0)/N_0 = 0$ (schwarz) bis $N(0)/N_0 \geq 2$ (gelb)). Die obere Reihe zeigt die normierte lokale Zustandsdichte $N(E = 0)/N_0$ für einen isolierten Phasenvortex, die untere Reihe zeigt die gleiche Größe im Abrikosov-Vortexgitter. Links wurde die Zustandsdichte für einen Supraleiter mit konventioneller Paarungssymmetrie berechnet (s -Welle), rechts für einen Supraleiter mit unkonventioneller Paarungssymmetrie (d -Welle). Für alle Rechnungen wurde ein effektiver Streuparameter von $\delta = 0,1\Delta_0$ verwendet. Deutlich zu erkennen ist die Vierfachsymmetrie der gebundenen Andreev-Zustände in der Umgebung des Vortexcores für den einzelnen d -Wellen-Vortex (rechts oben), die durch die Kopplung von Impuls- und Ortsraum in den quasiklassischen Gleichungen auf die Vierfachsymmetrie des Ordnungsparameters zurückgeht. Dabei dehnen sich die gebundenen Zustände parallel zur Knotenrichtung der d -Welle (in diesem Bild diagonal) aus. Im Abrikosov-Vortexzustand führt die Überlagerung der Vierfachsymmetrie des Ordnungsparameters und die hexagonale Anordnung der Vortices im Gitter zu einer komplizierteren Ausprägung der gebundenen Zustände.

5. Vortices und Grenzflächen in d -Wellen-Supraleitern

die Spiegelung der Quasiteilchen an einer (110)-Oberfläche als ein abrupter Vorzeichenwechsel der Paarpotentialamplitude gesehen werden, an dem die Quasiteilchen eine Andreev-Reflexion erfahren. Das bedeutet insbesondere, dass einlaufende Quasiteilchenanregungen mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit retroreflektiert werden, d.h. auf der gleichen Trajektorie zurück laufen wobei gleichzeitig eine Konversion von einer teilchenartigen in eine lochar-tige Anregung bzw. umgekehrt stattfindet. Die Interferenz des einlaufenden Quasiteilchens mit dem auslaufenden, konvertierten Quasiteilchen führt – wie schon beim Phasenvortex – zu einem gebundenen Zustand bei der Energie Null. Für einen Punkt \vec{r} auf der Oberfläche gilt für eine Trajektorie mit dem Winkel φ , die an der Grenzfläche gespiegelt wird (siehe Skizze 5.3 a)

$$a_{out}(\varphi) = a_{in}(\varphi) = \frac{\Delta_0 \sin(2\varphi)}{\epsilon_n + \sqrt{\epsilon_n^2 + \Delta_0^2 \sin^2(2\varphi)}}$$

und

$$b_{in}(\varphi) = b_{out}(\varphi) = \frac{\Delta_0 \sin(2(\pi - \varphi))}{\epsilon_n + \sqrt{\epsilon_n^2 + \Delta_0^2 \sin^2(2(\pi - \varphi))}}$$

wobei hier der Trajektorienwinkel φ bezüglich des Normalenvektors der Grenzfläche gemessen wurde, um den Vorzeichenwechsel der Paarpotentialamplitude in der ungeraden Sinusfunktion transparent zu machen. Damit unterscheidet sich das Produkt $a_{out}(\varphi)b_{in}(\varphi)$ an der Grenzfläche von dem entsprechenden Bulk-Wert nur gerade um ein Vorzeichen:

$$a_{out}(\varphi)b_{in}(\varphi) = \frac{-\Delta_0^2 \sin^2(2\varphi)}{2\epsilon_n^2 + 2\epsilon_n \sqrt{\epsilon_n^2 + \Delta_0^2 \sin^2(2\varphi)} + \Delta_0^2 \sin^2(2\varphi)} = -a_{bulk}(\varphi)b_{bulk}(\varphi)$$

Nun berechnet sich das Diagonalelement des quasiklassischen Propagators an der Grenzfläche aus

$$\frac{1 - a_{out}(\varphi)b_{in}(\varphi)}{1 + a_{out}(\varphi)b_{in}(\varphi)} = \frac{2\epsilon_n^2 + 2\epsilon_n \sqrt{\epsilon_n^2 + \Delta_0^2 \sin^2(2\varphi)} + 2\Delta_0^2 \sin^2(2\varphi)}{2\epsilon_n^2 + 2\epsilon_n \sqrt{\epsilon_n^2 + \Delta_0^2 \sin^2(2\varphi)}} = \frac{\sqrt{\epsilon_n^2 + \Delta_0^2 \sin^2(2\varphi)}}{\epsilon_n}$$

und die Winkelmittelung führt auf ein elliptisches Integral zweiter Art $E(k)$:

$$\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \frac{1 - a_{out}(\varphi)b_{in}(\varphi)}{1 + a_{out}(\varphi)b_{in}(\varphi)} d\varphi = \frac{2}{\pi} E(-\Delta_0^2/\epsilon_n^2)$$

Durch analytische Fortsetzung der Matsubarafrequenzen erhält man daraus die Zustandsdichte an der Grenzfläche zu

$$N_s(E) = N_0 \text{Re} \left[\frac{2}{\pi} E(-\Delta_0^2/(-iE + \delta)^2) \right]$$

Das Quasiteilchenspektrum direkt an der Grenzfläche ist in Abbildung 5.3 b) im oberen Teilbild gezeigt. Die Form des Spektrums ist ähnlich der Form des Spektrums im Zentrum eines isolierten Phasenvortex. Für die Energie $E = 0$ divergiert die Zustandsdichte und wird nur durch die Annahme einer endlichen Streurrate δ begrenzt. Für wachsenden Abstand von der Grenzfläche sinkt das Gewicht des “zero-energy-peaks”, bis bei einer Entfernung von etwa $5\xi_0$ (unteres Teilbild) wieder das Bulk-Spektrum des d -Wellen-Supraleiters erkennbar wird. Dabei ist anzumerken, dass im Gegensatz zum Phasenvortex und unter Vernachlässigung von Abschirmströmen an der Oberfläche natürlich kein Aufspalten des “zero-energy-peaks” zu beobachten ist.

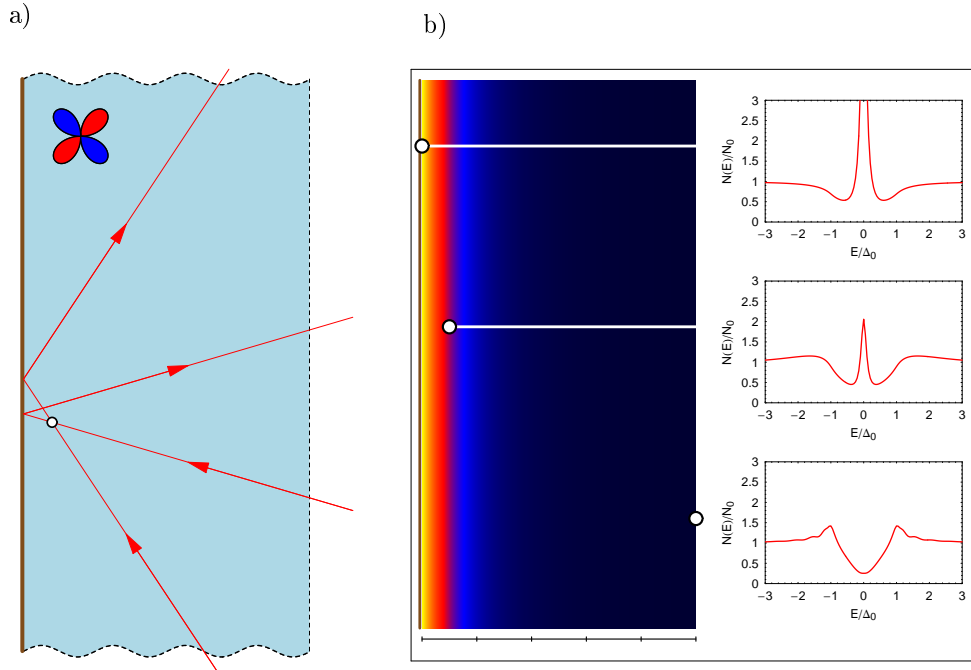


Abbildung 5.3: Skizze zur Reflexion der Quasiteilchentrajektorien an einer spiegelnden Grenzfläche (a) und die zugehörige lokale Zustandsdichte bei $E = 0$ für unkonventionelle Paarungssymmetrie ($d_{x^2-y^2}$ -Welle) und eine (110)-Grenzflächenorientierung (b). Die Farben von gelb über rot bis blau indizieren hierbei abnehmende Werte von $N(E = 0)$. An ausgewählten Punkten direkt an der Grenzfläche, im Abstand von $0,5\xi_0$ und im Abstand von $5\xi_0$ ist zudem das gesamte Quasiteilchenspektrum gezeigt. Für alle Rechnungen wurde ein effektiver Streuparameter von $\delta = 0,1\Delta_0$ angenommen.

Für facettierte Oberflächengeometrien muss zur Berechnung der Riccati-Amplituden die Quasiteilchen-Trajektorie mit Hilfe eines “ray-tracing”-Verfahrens zurückverfolgt bzw. vorausgerechnet werden. Hier können aufgrund multipler Reflexionen unter wiederholter Veränderung der Paarpotentialamplituden verschiedene interessante Phänomene beobachtet werden (siehe [70]). Neben einer makroskopisch facettierten Oberfläche kann durch ein kohärentes bzw. inkohärentes “Mischen” verschiedener Quasiteilchen-Trajektorien an der Grenzfläche eine Oberfläche mit intrinsischer Rauigkeit modelliert werden. Im Falle einer völlig ungeordneten Streuung an der Oberfläche findet man dabei ungeachtet der Lage der Grenzfläche immer einen gebundenen Zustand, selbst für eine (100)- oder (010)-Orientierung. Im folgenden Abschnitt ist die lokale Quasiteilchen-Zustandsdichte für eine mikroskopisch raue sowie eine makroskopisch facettierte Grenzfläche berechnet, insbesondere soll in diesem Abschnitt jedoch der Einfluss, den ein isolierter Phasenvortex auf die Zustände an der Grenzfläche hat, diskutiert werden.

5.2 Der Vortex-Schatten-Effekt

Es gibt verschiedene physikalische Gründe, warum das Aussehen des experimentell beobachteten gebundenen Andreev-Zustands an der Grenzfläche eines Supraleiters nicht dem im letzten Abschnitt beschriebenen Bild entspricht. Die unter dem Einfluss eines äußeren Magnetfelds an der Oberfläche des Supraleiters auftretenden Abschirmströme führen beispielsweise zu einer deutlichen Reduktion des gebundenen Zustands bei der Energie Null, wobei das spektrale Gewicht zu höheren Energien hin verschoben wird (siehe [71]). Dieses Aufspalten des “zero-bias conductance peak” wurde experimentell verschiedentlich beobachtet [72, 73, 74]. Auch die Wechselwirkung mit lokalisierten Zuständen an der Oberfläche oder mit Verunreinigungen kann zu einer Veränderung der an der Grenzfläche beobachteten Andreev-Zustände führen. Ein weiterer interessanter Aspekt ist der Einfluss, den ein einzelner Vortex mit dem ihn umgebenden Strömungsfeld auf die Zustände an der Grenzfläche ausübt. Im folgenden soll in einer Modellrechnung ein isolierter Phasenvortex vor einer spiegelnden Grenzfläche betrachtet werden, wobei der Einfluss von Oberflächenströmen vernachlässigt wird. Diese Modellannahme ist für Grenzflächen im Inneren eines Supraleiters (Versetzungsebenen, Korngrenzen, usw.) sowie für Vortices, die nach dem Abschalten des magnetischen Felds aufgrund von Haftkräften (“pinning”) an Fehlstellen im Inneren des Supraleiters zurückbleiben, gerechtfertigt. Um die Zustandsdichte in der Umgebung eines Vortex vor einer Oberfläche berechnen zu können, muss zuerst das Paarpotential im Einflussgebiet von Vortex und Grenzfläche bestimmt werden. Dabei muss berücksichtigt werden, dass unter der Voraussetzung verschwindender Transparenz der Grenzfläche die Phase des Paarpotentials bestimmte Randbedingungen erfüllen muss. Insbesondere gilt unter Verwendung der Proportionalität zwischen dem quasiklassischem Strom und dem Gradienten der Phase $\vec{j} \propto \vec{\nabla}\phi$ an der Grenzfläche ∂S die Bedingung

$$\hat{n} \cdot \vec{\nabla}\phi(\vec{r}) \Big|_{\vec{r} \in \partial S} = 0$$

wobei \hat{n} den Normalenvektor der Oberfläche bezeichnet. Für den Fall eines einzelnen Vortex vor einer vollständig reflektierenden Oberfläche kann die Phasenverteilung in der Umgebung von Vortex und Grenzfläche unter Einführung eines virtuellen “Spiegelvortex” mit umgekehrter Vortizität auf der gegenüberliegenden Seite der Grenzfläche sehr einfach konstruiert werden [75]. Dieser “Trick” findet seine Analogie in der Elektrostatik, in der die Feldverteilung einer einzelnen Ladung vor einer leitenden Platte unter Einführung einer virtuellen Spiegelladung mit umgekehrtem Vorzeichen hinter der Platte berechnet wird. Damit kann die räumliche Variation des Paarpotentials für einen Vortex am Ort \vec{r}_V geschrieben werden als

$$\Delta(\vec{r}) = \Delta_0 f(\vec{r} - \vec{r}_V) e^{i\phi(\vec{r})}$$

Dabei bezeichnet Δ_0 die temperaturabhängige Bulk-Amplitude des Paarpotentials und $f(\vec{r} - \vec{r}_V)$ beschreibt eine im Allgemeinen selbstkonsistent zu berechnende räumliche Variation des Betrags – mit $f(\vec{r}) = 1$ in einem räumlich homogenen Supraleiter. Die Phase $\phi(\vec{r})$ des Paarpotentials lässt sich schreiben als

$$\phi(\vec{r}) = \arg(\vec{r} - \vec{r}_V) - \arg(\vec{r} - \vec{r}_V^*)$$

wobei die Position des “Spiegelvortex” als $\vec{r}_V^* = \vec{r}_V - 2\hat{n}(\hat{n} \cdot \vec{r}_V)$ berechnet werden kann – insofern der Ursprung des Koordinatensystems auf der Grenzfläche am Mittelpunkt zwischen Vortex und “Spiegelvortex” gewählt wurde. Ergänzt wird das Paarpotential schließlich noch von der impulsabhängigen Symmetriefunktion der Paarungswechselwirkung $\chi(\vec{k})$. In Abbildung 5.4 a) ist die Ortsabhängigkeit der Phase für die oben beschriebene Anordnung gezeigt. Dabei wurde der geschlossene Farbkreis zur Kodierung der 2π -periodischen Phasenfunktion zu Grunde gelegt. Im folgenden soll unter Verzicht auf eine selbstkonsistente

Berechnung der räumlichen Variation der Paarpotentialamplitude ein Phasenvortex als Modell angenommen werden, d.h. $f(\vec{r} - \vec{r}_V) = 1$. Ein Vergleich mit einer Rechnung, bei der die Paarpotentialamplitude in der Umgebung des Vortex und der Grenzfläche moduliert wird, zeigt gewisse quantitative Abweichungen, die grundlegenden qualitativen Ergebnisse werden davon jedoch nicht beeinflusst. Berechnet man nun die lokale Zustandsdichte für $E = 0$ in der Umgebung von Vortex und Grenzfläche, so findet man eine lokale Unterdrückung der niederenergetischen Zustände in einer schattenförmigen Region zwischen Vortex und Grenzfläche (siehe Abbildung 5.4 c) und [76]). Insbesondere die gebundenen Andreev-Zustände an der Grenzfläche sind davon stark betroffen. Eine detaillierte Analyse der lokalen Zustandsdichte an der Oberfläche zeigt, dass sich der Schattenbereich für wachsenden Abstand zwischen Vortex und Grenzfläche verbreitert und dabei abflacht (Abbildung 5.4 b). Dabei bleibt eine Unterdrückung des spektralen Gewichtes bei $E = 0$ jedoch bis hin zu einem Abstand von $x_V = 10\xi_0$ erkennbar.

Zum Verständnis dieses Effekts ist es hilfreich, das gesamte Spektrum der Quasiteilchen näher zu betrachten. In Abbildung 5.5 sind in a) die Spektren zwischen Vortex und Grenzfläche und in b) entlang der Grenzfläche gezeigt. Dabei wurde ein Koordinatensystem gewählt, dessen Ursprung am Lotpunkt des Vortex auf der Grenzfläche liegt und dessen y -Achse mit der Grenzfläche zusammenfällt. Man erkennt, dass in der gesamten Region zwischen Vortex und Grenzfläche der gebundene Zustand von der Energie $E = 0$ hin zu höheren Energien verschoben wird. Betrachtet man dabei das Spektrum an der Grenzfläche für große Abstände vom Fußpunkt des Vortex bei $y = 0$, so scheint die Aufspaltung auf die Spitze des Peaks des gebundenen Zustands beschränkt, während bei sinkenden Abständen der gesamte gebundene Zustand zu höheren Energien wandert, wobei ein kleiner Peak bei der Energie $E = 0$ verbleibt (vgl. Abbildung 5.5 b). Entfernt man sich hingegen von der Grenzfläche und untersucht die Region zwischen Vortex und Grenzfläche genauer, so ergibt sich ein komplizierteres Bild, bei dem sich die Einflüsse des gebundenen Zustands an der Grenzfläche und die des gebundenen Zustands im Vortexzentrum überlagern (siehe Abbildung 5.5 a). Beide Peaks werden hier durch das starke Strömungsfeld zwischen Vortex und Grenzfläche aufgespalten, d.h. die gebundenen Zustände werden zu höheren Energien hin verschoben. Dieses Verhalten kann als Doppler-Verschiebung des Spektrums unter dem Einfluss des Phasengradienten qualitativ gut verstanden werden, während für eine quantitative Analyse eine detaillierte Rechnung nötig ist. Dieses Aufspalten des “zero-energy-peaks” in der Zustandsdichte unter dem Einfluss eines Vortex ist vergleichbar mit den Ergebnissen von Fogelström et al., die eine Aufspaltung des gebundenen Zustands unter dem Einfluss eines konstanten Stromes an der Oberfläche beschrieben haben [71]. Dabei wurden von den Autoren sowohl magnetische Abschirmströme als auch aufgrund von subdominanten Paarungswchselwirkungen an der Oberfläche spontan induzierte Ströme diskutiert. Im Gegensatz dazu ist der Vortex-Schatten-Effekt lokal auf die Umgebung der Flusslinie beschränkt und tritt auch an magnetfeldfreien inneren Grenzflächen wie z.B. Korngrenzen oder Versetzungslinien auf, an denen keine konstanten Ströme entlang der Grenzfläche fließen. Zudem kann unter der Annahme von Haftkräften, durch die einzelne Flusslinien auch nach einem Abschalten des äußeren Magnetfelds in der supraleitenden Probe verbleiben können, eine endliche Aufspaltung des gebundenen Andreev-Zustands an der Oberfläche und damit eine Aufspaltung des “zero-bias conductance peaks” δ_{ZBCP} im Nullfeld verstanden werden, wie er von Dagan und Deutscher beobachtet wurde [74].

Eine genaue Analyse zeigt, dass der Vortex-Schatten-Effekt auch für raue oder makroskopisch facettierte Oberflächen auftritt, wobei in letzterem Fall die Einflüsse von gewinkelten Oberflächenstrukturen mit zu berücksichtigen sind, die ebenso zu einer Unterdrückung der gebundenen Zustände an der Oberfläche führen können. Eine ausführliche Diskussion dieser Effekte findet sich in [70] und [77]. In Abbildung 5.6 a) ist die lokale Zustandsdichte bei $E = 0$ für eine polygonale Oberfläche mit und ohne Vortex gezeigt. Dabei muss man

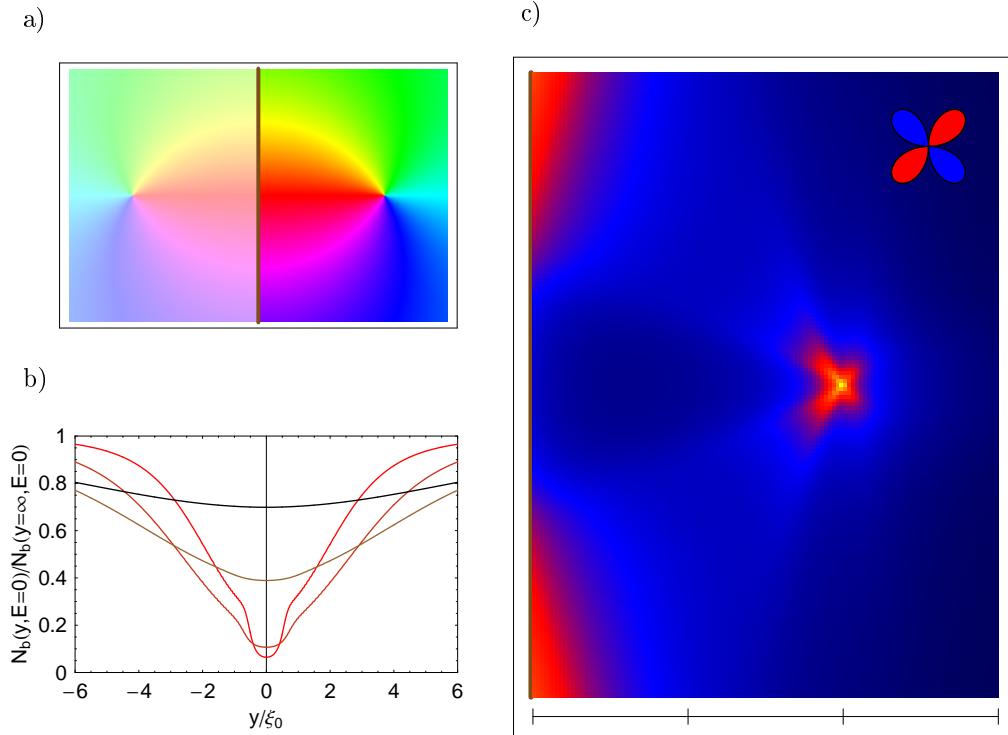


Abbildung 5.4: Der Vortex-Schatten-Effekt zwischen einem Phasenvortex und einer spiegelnden (110)-Grenzfläche in einem $d_{x^2-y^2}$ -Wellen-Supraleiter. Die Phasenverteilung mit den korrekten Randbedingungen an der Oberfläche ergibt sich für den relevanten rechten Halbraum durch Einführung eines "Spiegelvortex" im linken Halbraum (a). Berechnet man mit dieser Phasenverteilung die lokale Zustandsdichte für $E = 0$ entlang der Grenzfläche $N_b(y, E = 0)$, so findet man eine deutliche Unterdrückung der gebundenen Zustände am Fußpunkt des Vortex, die besonders ausgeprägt ist, wenn der Abstand des Vortex von der Grenzfläche klein ist, jedoch bis hin zu Abständen von $x_V = 10\xi_0$ sichtbar bleibt (b). Die Kurven entsprechen von rot nach schwarz Abständen zwischen Vortex und Grenzfläche von $1\xi_0$, $2\xi_0$, $5\xi_0$ und $10\xi_0$. Diese Unterdrückung der lokalen Zustandsdichte für $E = 0$ erstreckt sich vom Zentrum des Vortex in einem schattenförmigen Bereich bis hin zur Grenzfläche (c). Der Abstand des Vortex von der Oberfläche beträgt hier $x_V = 2\xi_0$, der Maßstab unter der Abbildung zeigt Unterteilungen für Vielfache der Kohärenzlänge ξ_0 . Dabei variieren die Farben von gelb (hohe Zustandsdichte) über rot bis blau (niedrige Zustandsdichte). Alle Rechnungen wurden für einen effektiven Streuparameter von $\delta = 0, 1\Delta_0$ durchgeführt.

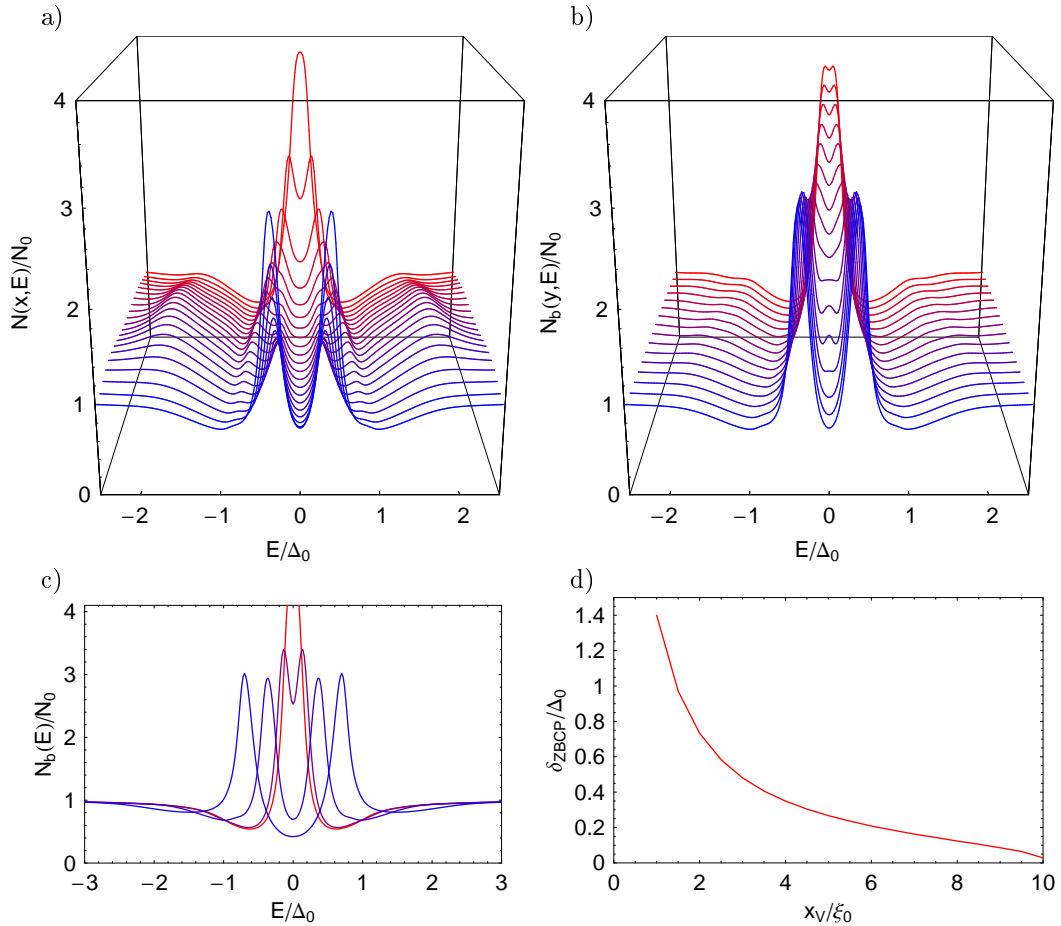


Abbildung 5.5: Das lokale Quasiteilchenspektrum zwischen dem Vortex (rot, hinten) und dem Lotpunkt des Vortex auf der Grenzfläche (blau, vorne), berechnet für einen Vortexabstand von der Oberfläche von $x_V = 2\xi_0$ im Abstand von $0,1\xi_0$ (a). Desweiteren ist die lokale Zustandsdichte entlang der Oberfläche im Schattenbereich des Vortex gezeigt (b). Die Spektren beginnen im Abstand $y = 3\xi_0$ vom Lotpunkt des Vortex (rot, hinten) bis hin zum Lotpunkt bei $y = 0$ (blau, vorne). Der Abstand zweier Kurven beträgt $0,2\xi_0$. Außerdem gezeigt sind die Quasiteilchenspektren für vier verschiedene Abstände des Vortex von der Grenzfläche (c). Die Abstände wurden als $x_V = 10\xi_0$ (rot) über $x_V = 5\xi_0$, $x_V = 2\xi_0$ bis zu $x_V = 1\xi_0$ (blau) gewählt. Für wachsende Vortexabstände erkennt man, dass die Aufspaltung δ_{ZBCP} des gebundenen Zustands – gemessen als Abstand der Maxima im Quasiteilchenspektrum – von etwa $\delta_{ZBCP}(x_V = 1\xi_0) \approx 1,4\Delta_0$ auf $\delta_{ZBCP}(x_V = 10\xi_0) \approx 0,028\Delta_0$ sinkt (d).

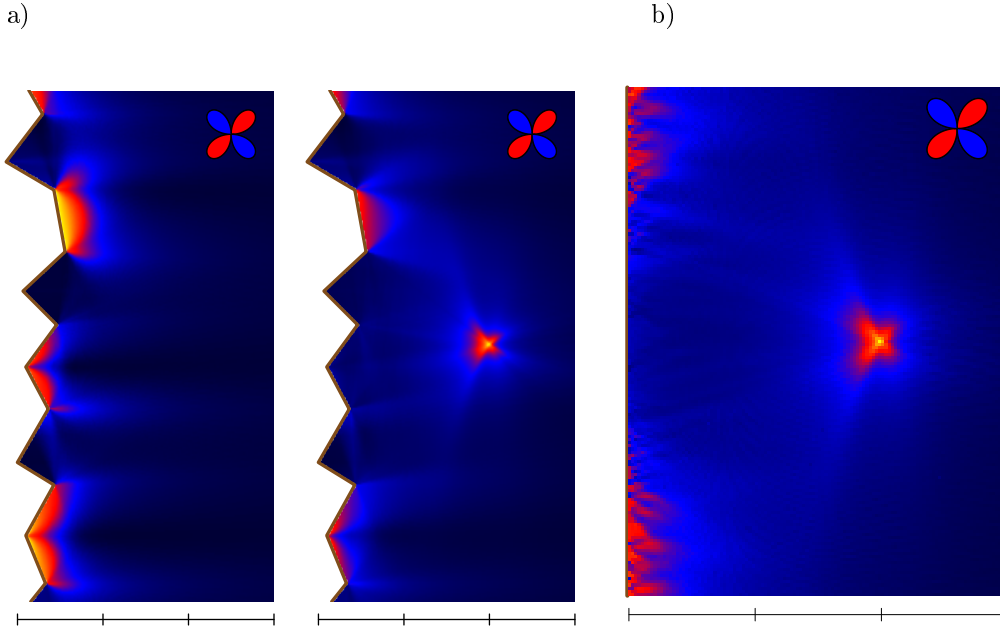


Abbildung 5.6: Der Vortex-Schatten-Effekt auf die Quasiteilchen-Zustandsdichte bei Energie Null $N(E = 0)$ an einer makroskopisch facettierten (a) und an einer mikroskopisch rauen Oberfläche (b). Für beide Abbildungen wurde eine Grenzfläche gewählt, deren grundsätzliche Orientierung parallel zur (110)-Richtung des Kristalls verläuft. In beiden Fällen ist im Einflussgebiet des Vortex eine deutliche Unterdrückung der gebundenen Zustände bei $E = 0$ zu erkennen.

für die Berechnung der Zustandsdichte entlang einer makroskopisch facettierten Oberfläche beachten, dass man die Phasenverteilung eines einzelnen Vortex unter Berücksichtigung der korrekten Randbedingungen nun nicht mehr einfach durch einen “Spiegelvortex” konstruieren kann. Da die Phase im Inneren des Supraleiters – abgesehen vom Ort des Vortex – die Laplace-Gleichung erfüllen muss und an der Oberfläche von Neumannschen Randbedingungen genügt, bietet es sich an, die Phasenverteilung des Paarpotentials mittels einer konformen Abbildung von der bekannten Lösung auf einem einfachen Gebiet auf das betrachtete polygonal umrandete Gebiet zu transformieren. Während die konforme Abbildung für einfache keilförmige Gebiete noch analytisch zu berechnen ist, müssen die Abbildungsfunktionen für kompliziertere polygonal umrandete Gebiete, wie in dem hier betrachteten Fall einer facettierten Oberfläche, numerisch bestimmt werden. Zur Berechnung der Phasenverteilung mit den korrekten Randbedingungen wurde in dem vorliegenden Fall die Methode der Schwarz-Christoffel-Abbildungen in einer numerischen Implementierung von Driscoll verwendet (siehe [78, 79]). Desweiteren muss der Trajektorienverlauf an jedem Ort \vec{r} und für jede Richtung \vec{k} mit Hilfe eines “ray-tracing”-Verfahrens berechnet werden. Die Ergebnisse der lokalen Zustandsdichte für $E = 0$ für eine solche facettierte Oberfläche mit und ohne gepinnten Vortex ist in Abbildung 5.6 a) gezeigt. Dabei sind die einzelnen Facetten in der Größenordnung einer Kohärenzlänge ξ_0 gewählt, während der Vortex einen Abstand von $2\xi_0$ besitzt. Ein Vergleich der beiden Ergebnisse mit und ohne Vortex lässt sowohl den Effekt gewinkelter Oberflächenstrukturen auf eine Unterdrückung der gebundenen Zustände bei $E = 0$ erkennen (man beachte die dunklen, nahezu rechtwinkligen Ecken im linken Teilbild) als auch die Aufspaltung der gebundenen Zustände in der Umgebung des vor der Oberfläche

gepinnten Vortex (die im rechten Teilbild zu einem Verschwinden der gebundenen Zustände bei $E = 0$ in der Reichweite des Vortex führt).

Eine andere Möglichkeit, eine mikroskopisch raue Oberfläche im Modell zu simulieren, besteht darin, mikroskopisch kleine Spiegelstücke – mit einem zufälligen Verkippungswinkel zwischen $-\pi/4$ und $\pi/4$ bezüglich der Grenzflächenrichtung – entlang der Oberfläche anzuordnen, wobei eine Gauß-Verteilung der Winkel verwendet wurde. Dabei wurde die Ausdehnung der Spiegelstücke in den Supraleiter hinein vernachlässigt und es wurde nur der Reflexionswinkel der auf sie auftreffenden Trajektorien gemäß ihrer Orientierung berechnet. An einer solchen Oberfläche, die damit eine Form von intrinsischer Streuung besitzt, findet man für alle Orientierungen gebundene Zustände, da einige Reflexionswinkel immer einen Phasensprung auf der Trajektorie mit sich bringen. Auch im Falle einer solchen intrinsisch rauhen Oberfläche wirft ein in der Nähe der Oberfläche gepinnter Vortex einen “Schatten” auf die lokale Zustandsdichte für $E = 0$, der sich vom Vortexzentrum hin zur Oberfläche ausdehnt (vgl. Abbildung 5.6 b). Das ist verständlich, da der gebundene Zustand an der Oberfläche für alle Verkippungswinkel in der Umgebung von $E = 0$ auftritt und durch ein starkes Strömungsfeld immer zu höheren Energien hin verschoben wird. Damit zeigt sich, dass der Vortex-Schatten-Effekt ein grundsätzliches Phänomen und für jede Art von Oberfläche zu beobachten ist und nicht nur auf die – in der Realität natürlich nicht existierenden – ideal reflektierenden Grenzflächen beschränkt ist. Auch für Grenzflächen mit einer geringen Barrierentransparenz, für die der über die Grenzfläche fließende Strom in guter Näherung in erster Ordnung der Transparenz berechnet werden kann, wird der Vortex-Schatten-Effekt eine große Rolle spielen. Da der Barrierenstrom nur eine kleine Korrektur zu dem starken Strömungsfeld zwischen Vortex und Grenzfläche hinzufügt, wird die Aufspaltung des “zero-energy-peaks” nahezu unverändert bestehen bleiben und sich damit direkt auf die Berechnung des über die Barriere fließenden Tunnelstromes auswirken, in den allein die Zustandsdichten in nullter Ordnung der Transparenz eingehen.

Kapitel 6

Zusammenfassung und Ausblick

Die Entdeckung der supraleitenden Eigenschaften von Magnesiumdiborid hatte weitreichende Konsequenzen. Sie hat zum einen die lange Zeit im Schatten der Hochtemperatur-Supraleiter stehenden konventionellen Supraleiter wieder zurück ins Zentrum des Interesses gerückt. Zum anderen hat es sich gezeigt, dass im internationalen Zusammenspiel von experimenteller, theoretischer und nicht zuletzt angewandter Forschung mit den heute zur Verfügung stehenden Mitteln in relativ kurzer Zeit ein umfassendes und überaus detailliertes Bild der physikalischen Eigenschaften dieses neuartigen supraleitenden Materials entstehen konnte. Schon wenige Monate nach der Entdeckung der supraleitenden Eigenschaften im Januar 2001 standen Proben in hervorragender Qualität zur experimentellen Untersuchung bereit, unter anderem einkristalline Proben, Drähte und Dünnschichtproben auf unterschiedlichsten Substraten (man beachte dazu den Review-Artikel von Buzea und Yamashita von August 2001 [3]). Bandstrukturechnungen enthüllten die Fermiflächenstruktur und zeigten Bänder mit zwei- und dreidimensionaler Topologie [4], und der experimentelle Nachweis des Isotopeneffekts korrespondierte zu den Eliashberg-Rechnungen, die eine starke Kopplung der Phononen im Untergitter des Bors an die Ladungsträger zeigten und damit die von Gitterschwingungen vermittelte Paarungswechselwirkung plausibel machten [5, 8]. Ebenso wurde die experimentell gefundene Diskrepanz der Paarpotentialamplituden mit Hilfe der unterschiedlichen Paarungsstärken auf den verschiedenen Fermiflächen interpretiert. Schon drei Jahre nach der Entdeckung seiner supraleitenden Eigenschaften war Magnesiumdiborid als einer der seltenen Fälle eines ausgeprägten Zweiband-Supraleiters in die Literatur eingegangen und seine grundlegenden Eigenschaften theoretisch umfassend erklärt und experimentell nachgewiesen (siehe dazu den Review-Artikel von T. Dahm [2]).

Dennoch bleibt MgB_2 bis heute sowohl für die theoretische als auch die experimentelle und angewandte Forschung ein interessantes Untersuchungsobjekt. Mit einer Kohärenzlänge von einigen wenigen Nanometern und einer Londonschen Eindringtiefe von knapp 100 Nanometern gehört Magnesiumdiborid zu den Typ-II-Supraleitern. Hochauflösende Experimente geben dabei einen Eindruck von der Struktur des Flussliniengitters, das sich beim Anlegen eines ausreichend starken magnetischen Felds ergibt [54]. Die vorliegende Arbeit widmete sich hauptsächlich der theoretischen Beschreibung des Vortextzustands von Magnesiumdiborid, insbesondere unter Berücksichtigung des Einflusses der unterschiedlichen Fermiflächentopologien. Dafür wurde verwendet, dass die kompliziert erscheinende Fermiflächenstruktur durch einfache geometrische Strukturen approximiert werden kann [19]. Berechnet man nun unter Berücksichtigung der korrekten Fermiflächentopologie die gemittelte Quasiteilchen-Zustandsdichte im Vortextzustand, so erkennt man, dass die Spektren für unterschiedliche Fermiflächen und abhängig von der Richtung des angelegten magnetischen Felds charakteristische Merkmale aufweisen, die mit Hilfe einer Gewichtsfunktion, die die Eigenschaften

6. Zusammenfassung und Ausblick

der Fermifläche widerspiegelt, klassifiziert werden können. Dabei wurde gezeigt, dass unter Verwendung geeigneter Parameter, wie der aus Bandstrukturrechnungen bekannten Kopplungsmatrix sowie den zugehörigen Fermigeschwindigkeiten, die Magnetfeldabhängigkeit der Paarpotentialamplituden sowie die gemittelte Quasiteilchen-Zustandsdichte für den Vortexzustand von Magnesiumdiborid einfach bestimmt werden kann. Dabei wurde für ein Magnetfeld, das entlang der c -Achse des Kristalls angelegt wird, eine starke Abflachung der Peaks an den Gapkanten im Spektrum des π -Bandes gefunden, die auf die dreidimensionale, torusförmige Topologie des Bandes zurückgeführt werden konnte und das rasche Verschwinden der experimentell beobachtbaren Gapstruktur des π -Bandes erklärt. Ein Vergleich der Zustandsdichte bei $E = 0$ als Funktion des angelegten Magnetfelds zeigte, dass eine recht gute Übereinstimmung mit den experimentellen Ergebnissen von Bouquet et al. gefunden werden kann, wenn man eine stärkere Interbandkopplungsstärke als die von den Bandstrukturrechnungen vorgeschlagene voraussetzt. Die verwendete höhere Interbandkopplungsstärke erhält man ebenso, wenn man die Ergebnisse der Berechnung der Anisotropie des oberen kritischen Magnetfelds im sauberen Grenzfall an die experimentell bestimmten Werte fittet [19]. Eine mögliche Erklärung kann dahingehend gefunden werden, dass sich die in den Rechnungen a priori vernachlässigte Interband-Streuung über eine scheinbar erhöhte Interbandkopplungsstärke bemerkbar macht.

Neben der Betrachtung des Vortexzustands in der Näherung hoher Magnetfelder befasste sich diese Arbeit auch mit dem isolierten Abrikosov-Vortex als einem Modell niedriger Magnetfelder. Dabei wurden zuerst am Beispiel eines konventionellen Einband-Supraleiters grundlegende Unterschiede zwischen einer Betrachtung des isolierten Vortex im schmutzigen und im sauberen Grenzfall aufgezeigt. Der Einfluss der Störstellenkonzentration macht sich dabei insbesondere in der lokalen Quasiteilchen-Zustandsdichte in der Umgebung des Vortexzentrums bemerkbar. Während im sauberen Grenzfall ein gebundener Zustand bei $E = 0$ die lokale Zustandsdichte im Vortexzentrum charakterisiert, findet man im schmutzigen Grenzfall aufgrund der fehlenden Kohärenz der Quasiteilchen eine flache, normalleitende Zustandsdichte. Daneben beobachtet man im sauberen Grenzfall mit sinkender Temperatur eine nahezu lineare Abnahme der Vortexcoregröße, die auf den Einfluss der gebundenen Quasiteilchen-Zustände im Vortexcore zurückzuführen ist. Dieser Effekt ist als Kramer-Pesch-Effekt bekannt [43] und verschwindet mit zunehmender Störstellenstreuung. Nach den grundlegenden Betrachtungen im Einband-Fall wurde in dieser Arbeit auch der Fall eines Zweiband-Supraleiters mit passenden Parametern für Magnesiumdiborid diskutiert. Hier findet man im sauberen Grenzfall in beiden Bändern einen deutlichen Kramer-Pesch-Effekt sowie gebundene Zustände im Vortexcore. Ebenso verschwindet der Effekt wie erwartet unter der Annahme einer hohen Störstellenstreuung in den beiden Bändern und man erhält in diesem Fall auch für $T = 0$ eine endliche Vortexcoregröße sowie eine flache, normalleitende Zustandsdichte im Vortexzentrum. Da in den STM-Messungen, die hauptsächlich die dreidimensional propagierenden Ladungsträger des π -Bandes nachweisen, eine normalleitende lokale Zustandsdichte im Vortexzentrum gefunden wurde [54] – was auf eine hohe Streurate der Ladungsträger im π -Band hindeutet – die Störstellenstreuung im σ -Band jedoch als geringer eingeschätzt wird, lag es nahe, auch ein “gemischtes Modell” in Betracht zu ziehen, bei dem von einem ballistischen Transport im σ -Band und einem diffusiven Transport im π -Band ausgegangen wird. Ein solches Modell wurde erstmals von Eschrig vorgeschlagen [49]. Hier findet man auch im schmutzigen π -Band einen aus dem σ -Band induzierten Kramer-Pesch-Effekt. Dies sollte es möglich machen, den Kramer-Pesch-Effekt in dem experimentell einfacher zugänglichen π -Band nachzuweisen, insofern die Störstellenstreuung im σ -Band die Näherung des sauberen Grenzfalles rechtfertigt.

Schließlich wurde im letzten Kapitel der Arbeit der Blick auf das Zusammenspiel von Grenzflächen-Phänomenen und Flusslinien in unkonventionellen Supraleitern geworfen. Im Gegensatz zu Supraleitern mit einer konventionellen Paarungssymmetrie treten in Supralei-

tern mit einer unkonventionellen Paarungssymmetrie, d.h. einer Paarungssymmetrie für die die Amplitude des Paarpotentials ihr Vorzeichen auf verschiedenen Abschnitten der Fermifläche ändert, an bestimmten Grenzflächen gebundene Zustände im Quasiteilchenspektrum auf, die auch als gebundene Andreev-Zustände bezeichnet werden. Für die in den lochdotierten Kupraten angenommene $d_{x^2-y^2}$ -Wellen-Paarungssymmetrie findet man eine maximale Ausprägung dieser gebundenen Zustände an (110)-Grenzflächen, die sowohl im Inneren des Supraleiters als Korngrenzen oder Kristalldefekte als auch an der Oberfläche der Probe auftreten können. Die Entstehung dieser gebundenen Zustände kann analog zu den gebundenen Zuständen im Zentrum eines Vortex durch die multiple Streuung der Quasiteilchen an einem raschen Wechsel des Paarpotentials verstanden werden. In der Gegenwart von Strömen erfahren die gebundenen Zustände dabei eine Doppler-Aufspaltung, die zu einer Unterdrückung der lokalen Zustandsdichte für $E = 0$ führt. Der Einfluss von konstanten Abschirmströmen, die sich entlang der Oberfläche einer supraleitenden Probe im Magnetfeld ausbilden, wurde dabei schon früher diskutiert [71]. In der vorliegenden Arbeit wurde nun untersucht, welchen Einfluss die lokale Stromverteilung eines Vortex vor einer Grenzfläche auf das Quasiteilchenspektrum an der Oberfläche besitzt. Dabei wurde die lokale Quasiteilchen-Zustandsdichte für $E = 0$ in der Umgebung eines Vortex und einer idealen (110)-Grenzfläche berechnet. Hier findet man in einer schattenförmigen Region zwischen Vortex und Grenzfläche eine starke Unterdrückung der lokalen Zustandsdichte für $E = 0$, die sich auch für größere Entfernungen zwischen Vortex und Grenzfläche noch bemerkbar macht. Diese Unterdrückung der gebundenen Andreev-Zustände an der Oberfläche zeigte sich dabei auch gegenüber einer Berücksichtigung von mikroskopischer oder makroskopischer Facettierung der Oberfläche stabil. Die Beobachtung dieses Vortex-Schatten-Effekts als Folge des Einflusses einer Flusslinie liefert dabei einen möglichen Ansatz zur Erklärung der beobachteten Anomalien des "zero-bias-conductance-peak-splittings", d.h. der Aufspaltung des gebundenen Zustands an der Oberfläche [74]. Die Aufspaltung der gebundenen Zustände durchläuft als Funktion des angelegten magnetischen Felds eine Hysteresekurve und zeigt auch im Nullfeld einen endlichen Wert, was durch das aufgrund von Haftkräften mögliche Verbleiben von Vortices in der supraleitenden Probe – auch bei abgeschaltetem magnetischem Feld – erklärt werden kann. Obwohl die Zahl der Publikationen, die die supraleitenden Eigenschaften von Magnesiumdiborid zum Thema haben, enorm ist und viele der grundlegenden Eigenschaften gut verstanden und theoretisch erklärt sind, bleibt dieses unscheinbare Material wahrscheinlich auch in den nächsten Jahren für die Forschung relevant. Neben der ausgeprägten Zweiband-Supraleitung ist ein weiterer Grund sicherlich, dass MgB_2 auch für die Anwendung interessante Materialeigenschaften besitzt – unter anderem eine sehr hohe Stromdichte in Dünnschichtproben und eine für einen "konventionellen" Supraleiter früher unerreichbar erscheinende kritische Temperatur. Eine weitere Erhöhung der kritischen Stromstärke durch den gezielten Einsatz von Pinningzentren, die Suche nach verwandten Systemen mit einer hohen Sprungtemperatur oder der praktische Einsatz in supraleitenden Bauelementen und die daraus resultierende Frage nach Tunnelmechanismen in Mehrband-Systemen sind denkbare Forschungsrichtungen und werden hoffentlich auch in den kommenden Jahren noch das Interesse an dieser supraleitenden Verbindung wachhalten.

Anhang A

Ableitung des Druckfunktionals für mehrere Bänder

In den folgenden drei Abschnitten dieses Anhangs soll das Druckfunktional der quasiklassischen Theorie, das eine Schlüsselfunktion in der Herleitung aller relevanter Gleichungen besitzt, für eine konventionelle Paarungswchselwirkung mit mehreren an der Supraleitung beteiligten Energiebändern aus den Ausdrücken von Eilenberger für den Einband-Fall abgeleitet werden [21]. Dabei sollen im ersten Abschnitt die grundlegenden Begriffe anhand eines Einband-Supraleiters eingeführt werden. Im zweiten und dritten Abschnitt werden dann Druckfunktional, Gapgleichung und quasiklassischer Strom für einen Multiband-Supraleiter verallgemeinert.

A.1 Druckfunktional, Gapgleichung und quasiklassischer Strom

Um einen Ausdruck für die Freie Energie des elektronischen Systems eines konventionellen Supraleiters (s -Welle) zu erhalten, wollen wir das folgende Funktional betrachten:

$$\begin{aligned} \Omega = & \int d^3r \left\{ \frac{(\vec{\nabla} \times \vec{A}(\vec{r}) - \vec{B}_{ext}(\vec{r}))^2}{8\pi} + V^{-1} |\Delta(\vec{r})|^2 \right\} \\ & - \int d^3r \left\{ N_0 2\pi T \sum_{0 < \epsilon_n < \omega_c} \int_{FS} d^2k_F \rho(\vec{k}_F) I(\epsilon_n, \vec{k}_F, \vec{r}) \right\} \end{aligned}$$

Dabei bezeichnet $\vec{A}(\vec{r})$ das Vektorpotential in einer geeigneten Eichung und $\vec{B}_{ext}(\vec{r})$ stellt ein extern angelegtes Magnetfeld dar. Mit $I(\omega, \vec{k}_F, \vec{r})$ soll weiterhin die folgende Funktion abgekürzt werden (siehe [21]) :

$$\begin{aligned} I(\omega, \vec{k}_F, \vec{r}) = & \Delta^* f + \Delta \bar{f} + 2\omega(g-1) + g\bar{v}_F \left(\frac{1}{2} \vec{\nabla} \ln \frac{f}{\bar{f}} - i \frac{2e}{c} \vec{A} \right) \\ & + \frac{1}{2} \int_{FS} d^2q_F \rho(\vec{q}_F) \mathcal{W}(\vec{k}_F, \vec{q}_F) \\ & \cdot \left[\frac{1}{2} f(\vec{k}_F) \bar{f}(\vec{q}_F) + \frac{1}{2} \bar{f}(\vec{k}_F) f(\vec{q}_F) + g(\vec{k}_F) g(\vec{q}_F) - 1 \right] \end{aligned}$$

A. Ableitung des Druckfunktionals für mehrere Bänder

wobei $\mathcal{W}(\vec{k}_F, \vec{q}_F)$ die Streuwahrscheinlichkeit von einem Zustand \vec{q}_F in einen Zustand \vec{k}_F auf der Fermifläche bezeichnet. Nun können wir das Druckfunktional Ω unter Verwendung der folgenden Identität

$$2\pi T \sum_{0 < \epsilon_n < \omega_c} \frac{1}{\epsilon_n} \approx \frac{1}{N_0 V} - \ln \frac{T}{T_c}$$

umschreiben zu dem Ausdruck, den Eilenberger in [21] vorschlägt:

$$\begin{aligned} \Omega = & \int d^3 r \left\{ \frac{(\vec{\nabla} \times \vec{A}(\vec{r}) - \vec{B}_{ext}(\vec{r}))^2}{8\pi} + N_0 |\Delta(\vec{r})|^2 \ln \frac{T}{T_c} \right\} \\ & + \int d^3 r \left\{ N_0 2\pi T \sum_{0 < \epsilon_n < \infty} \left[\frac{|\Delta(\vec{r})|^2}{\epsilon_n} - \int_{FS} d^2 k_F \rho(\vec{k}_F) I(\epsilon_n, \vec{k}_F, \vec{r}) \right] \right\} \end{aligned}$$

Da die Summe über die Matsubarafrequenzen schnell konvergiert, konnten wir die obere Summationsgrenze ins Unendliche fortsetzen. Nun ist Ω im Allgemeinen ein Funktional der vier unabhängigen Größen \bar{f} , f , Δ^* und \vec{A} . Die Variation dieses Funktionals nach \bar{f} und f führt einerseits auf die in Abschnitt 2.1.1 angegebenen Eilenberger-Gleichungen, andererseits führt eine weitere Variation nach Δ^* und \vec{A} auf Selbstkonsistenzbedingungen für das Paarpotential $\Delta(\vec{r})$ und den quasiklassischen Strom $\vec{j}(\vec{r}) = \frac{1}{4\pi} \text{rot rot } \vec{A}(\vec{r})$. Eine Variation des Funktionals nach Δ^* ergibt die folgende Gleichung

$$\frac{\delta \Omega}{\delta \Delta^*} = \int d^3 r \left\{ N_0 \Delta(\vec{r}) \ln \frac{T}{T_c} + N_0 2\pi T \sum_{0 < \epsilon_n < \infty} \left[\frac{\Delta(\vec{r})}{\epsilon_n} - \int_{FS} d^2 k_F \rho(\vec{k}_F) f(\epsilon_n, \vec{k}_F, \vec{r}) \right] \right\}$$

und aus der Stationaritätsbedingung $\frac{\delta \Omega}{\delta \Delta^*} = 0$ erhalten wir somit eine Selbstkonsistenzbedingung für das Paarpotential:

$$N_0 \Delta(\vec{r}) \ln \frac{T}{T_c} + N_0 2\pi T \sum_{0 < \epsilon_n < \infty} \left[\frac{\Delta(\vec{r})}{\epsilon_n} - \int_{FS} d^2 k_F \rho(\vec{k}_F) f(\epsilon_n, \vec{k}_F, \vec{r}) \right] = 0$$

Diese Gleichung ist – aufgelöst nach dem ersten Summanden als Gapgleichung bekannt – die Grundlage zur Berechnung des Paarpotentials. Die Variation nach \vec{A} führt hingegen auf

$$\begin{aligned} \frac{\delta \Omega}{\delta \vec{A}} = & \int d^3 r \left\{ \frac{\vec{\nabla} \times (\vec{\nabla} \times \vec{A}(\vec{r}) - \vec{B}_{ext}(\vec{r}))}{4\pi} \right\} \\ & + \int d^3 r \left\{ \frac{2ie}{c} N_0 2\pi T \sum_{0 < \epsilon_n < \infty} \int_{FS} d^2 k_F \rho(\vec{k}_F) \vec{v}_F(\vec{k}_F) g(\epsilon_n, \vec{k}_F, \vec{r}) \right\} \end{aligned}$$

und die Stationaritätsbedingung bezüglich einer Variation nach \vec{A} in der Form $\frac{\delta \Omega}{\delta \vec{A}} = 0$ erlaubt die Berechnung des quasiklassischen Stromes

$$\vec{j}(\vec{r}) = \frac{c}{4\pi} \text{rot} \left(\text{rot } \vec{A}(\vec{r}) - \vec{B}_{ext}(\vec{r}) \right) = -2ie N_0 2\pi T \sum_{0 < \epsilon_n < \infty} \int_{FS} d^2 k_F \rho(\vec{k}_F) \vec{v}_F(\vec{k}_F) g(\epsilon_n, \vec{k}_F, \vec{r})$$

der für eine selbstkonsistente Lösung von inhomogenen Problemen mit berücksichtigt werden muss. Setzen wir in Ω die selbstkonsistent bestimmten Lösungen von f und \bar{f} sowie Δ und \vec{A} ein, so gibt das Funktional gerade die Differenz von der Freien Energie des supraleitenden und der Freien Energie des normalleitenden Zustands im thermodynamischen Gleichgewicht an.

A.2 Druckfunktional eines Multiband-Supraleiters

Versuchen wir nun, ein Druckfunktional mit den in Abschnitt A.1 angegebenen Eigenschaften für einen Multiband-Supraleiter zu finden, so müssen wir beachten, dass hier die skalare Wechselwirkung V des klassischen Supraleiters durch eine Wechselwirkungsmatrix $V_{\alpha,\alpha'}$ ersetzt werden muss. Dabei soll sich die Herleitung auf ein System *ohne* Interband-Streuung beschränken – bei der Erweiterung auf ein System *mit* Interband-Streuung werden die zwei Streuwahrscheinlichkeiten $\mathcal{W}^{(\sigma)}$ und $\mathcal{W}^{(\pi)}$ durch eine Streumatrix $\mathcal{W}^{(\alpha,\alpha')}(\vec{k}_F^{(\alpha)}, \vec{q}_F^{(\alpha')})$ ersetzt. Unter Einführung der Wechselwirkungsmatrix $V_{\alpha\alpha'}$ können wir schreiben

$$\begin{aligned} \Omega &= \int d^3r \left\{ \frac{(\vec{\nabla} \times \vec{A}(\vec{r}) - \vec{B}_{ext}(\vec{r}))^2}{8\pi} + \sum_{\alpha,\alpha'} \Delta^{*(\alpha)}(\vec{r}) (V^{-1})_{\alpha\alpha'} \Delta^{(\alpha')}(\vec{r}) \right\} \\ &\quad - \int d^3r \left\{ \sum_{\alpha} N_0^{(\alpha)} 2\pi T \sum_{0 < \epsilon_n < \omega_c} \int_{FS_{\alpha}} d^2k_F \rho^{(\alpha)}(\vec{k}_F) I^{(\alpha)}(\epsilon_n, \vec{k}_F, \vec{r}) \right\} \end{aligned}$$

wobei $(V^{-1})_{\alpha\alpha'}$ die inverse Wechselwirkungsmatrix bezeichnet, die folgendermaßen definiert ist $\sum_{\alpha''} (V^{-1})_{\alpha'\alpha''} V_{\alpha''\alpha} = \delta_{\alpha\alpha'}$. Die Funktion $I^{(\alpha)}(\epsilon_n, \vec{k}_F, \vec{r})$ kann unter Vernachlässigung von Interband-Streuung analog zum Einband-Fall geschrieben werden als

$$\begin{aligned} I^{(\alpha)}(\omega, \vec{k}_F, \vec{r}) &= \Delta^{(\alpha)*} f^{(\alpha)} + \Delta^{(\alpha)} \bar{f}^{(\alpha)} + 2\omega (g^{(\alpha)} - 1) + g^{(\alpha)} \bar{v}_F^{(\alpha)} \left(\frac{1}{2} \vec{\nabla} \ln \frac{f^{(\alpha)}}{\bar{f}^{(\alpha)}} - i \frac{2e}{c} \vec{A} \right) \\ &\quad + \frac{1}{2} \int_{FS_{\alpha}} d^2q_F \rho^{(\alpha)}(\vec{q}_F) \mathcal{W}^{(\alpha)}(\vec{k}_F, \vec{q}_F) \\ &\quad \cdot \left[\frac{1}{2} f^{(\alpha)}(\vec{k}_F) \bar{f}^{(\alpha)}(\vec{q}_F) + \frac{1}{2} \bar{f}^{(\alpha)}(\vec{k}_F) f^{(\alpha)}(\vec{q}_F) + g^{(\alpha)}(\vec{k}_F) g^{(\alpha)}(\vec{q}_F) - 1 \right] \end{aligned}$$

Um nun die Abschneidefrequenz aus dem Ausdruck zu entfernen, verwenden wir die Identität

$$\begin{aligned} 2\pi T \sum_{0 < \epsilon_n < \omega_c} N_0^{(\alpha)} \frac{|\Delta^{(\alpha)}(\vec{r})|^2}{\epsilon_n} &= N_0^{(\alpha)} \sum_{\alpha'} \Delta^{*(\alpha)}(\vec{r}) \delta_{\alpha\alpha'} \Delta^{(\alpha')}(\vec{r}) \left(\gamma + \ln \frac{2\omega_c}{\pi T} \right) \\ &= N_0^{(\alpha)} \sum_{\alpha'} \Delta^{*(\alpha)}(\vec{r}) \delta_{\alpha\alpha'} \Delta^{(\alpha')}(\vec{r}) \left(\frac{1}{\lambda_+} - \ln \frac{T}{T_c} \right) \end{aligned}$$

wobei wir mit λ_+ den größten Eigenwert der Kopplungsmatrix $\lambda_{\alpha\alpha'} = N_0^{(\alpha')} V_{\alpha\alpha'}$ bezeichnen, der die kritische Temperatur des supraleitenden Phasenübergangs festlegt (siehe [19]). Durch Addition der linken und Subtraktion der rechten Seite der obigen Gleichung zu dem Druckfunktional erhält man eine schnell konvergierende Summe und kann die Summation wieder über alle positiven Matsubarafrequenzen ausführen:

$$\begin{aligned} \Omega &= \int d^3r \left\{ \frac{(\vec{\nabla} \times \vec{A}(\vec{r}) - \vec{B}_{ext}(\vec{r}))^2}{8\pi} \right\} \\ &\quad + \int d^3r \left\{ \sum_{\alpha,\alpha'} \Delta^{*(\alpha)}(\vec{r}) \left[(V^{-1})_{\alpha\alpha'} - N_0^{(\alpha)} \left(\frac{1}{\lambda_+} - \ln \frac{T}{T_c} \right) \delta_{\alpha\alpha'} \right] \Delta^{(\alpha')}(\vec{r}) \right\} \quad (\text{A.1}) \\ &\quad + \int d^3r \left\{ \sum_{\alpha} N_0^{(\alpha)} 2\pi T \sum_{0 < \epsilon_n < \infty} \left[\frac{1}{\epsilon_n} |\Delta^{(\alpha)}(\vec{r})|^2 - \int_{FS_{\alpha}} d^2k_F \rho^{(\alpha)}(\vec{k}_F) I^{(\alpha)}(\epsilon_n, \vec{k}_F, \vec{r}) \right] \right\} \end{aligned}$$

A. Ableitung des Druckfunktionals für mehrere Bänder

Während sich bei der Variation nach dem Vektorpotential \vec{A} keine grundlegende Veränderung gegenüber dem Einband-Fall ergibt, d.h. der Strom bleibt diagonal im Bandindex, muss bei der Variation nach $\Delta^{*(\alpha)}$ die Kopplung der zwei Bänder berücksichtigt werden.

A.3 Gapgleichung und quasiklassischer Strom für einen Multiband-Supraleiter

Um die Gapgleichung für einen Multiband-Supraleiter abzuleiten, gehen wir von dem im vorangegangenen Abschnitt abgeleiteten Ausdruck für das Druckfunktional aus und variieren ihn nach $\Delta^{*(\alpha)}$. Wir erhalten:

$$\begin{aligned} \frac{\delta\Omega}{\delta\Delta^{*(\alpha)}} &= \int d^3r \left\{ \sum_{\alpha'} \left[(V^{-1})_{\alpha\alpha'} - N_0^{(\alpha)} \left(\frac{1}{\lambda_+} - \ln \frac{T}{T_c} \right) \delta_{\alpha\alpha'} \right] \Delta^{(\alpha')}(\vec{r}) \right\} \\ &+ \int d^3r \left\{ N_0^{(\alpha)} 2\pi T \sum_{0 < \epsilon_n < \infty} \left[\frac{1}{\epsilon_n} \Delta^{(\alpha)}(\vec{r}) - \int_{FS_\alpha} d^2k_F \rho^{(\alpha)}(\vec{k}_F) f^{(\alpha)}(\epsilon_n, \vec{k}_F, \vec{r}) \right] \right\} \end{aligned}$$

Die Stationaritätsbedingung verlangt nun für jedes Band α das Verschwinden der Variation $\frac{\delta\Omega}{\delta\Delta^{*(\alpha)}} = 0$ und somit

$$\begin{aligned} &\sum_{\alpha'} (V^{-1})_{\alpha\alpha'} \Delta^{(\alpha')}(\vec{r}) - N_0^{(\alpha)} \left(\frac{1}{\lambda_+} - \ln \frac{T}{T_c} \right) \Delta^{(\alpha)}(\vec{r}) \\ &= N_0^{(\alpha)} 2\pi T \sum_{0 < \epsilon_n < \infty} \left[\int_{FS_\alpha} d^2k_F \rho^{(\alpha)}(\vec{k}_F) f^{(\alpha)}(\epsilon_n, \vec{k}_F, \vec{r}) - \frac{1}{\epsilon_n} \Delta^{(\alpha)}(\vec{r}) \right] \end{aligned}$$

Multiplizieren wir nun beide Seiten mit dem Wechselwirkungsmatrixelement $V_{\alpha''\alpha}$ und summieren wir beide Seiten der Gleichung über den Bandindex α , so erhalten wir

$$\begin{aligned} &\sum_{\alpha'\alpha} V_{\alpha''\alpha} (V^{-1})_{\alpha\alpha'} \Delta^{(\alpha')}(\vec{r}) - \sum_{\alpha} V_{\alpha''\alpha} N_0^{(\alpha)} \left(\frac{1}{\lambda_+} - \ln \frac{T}{T_c} \right) \Delta^{(\alpha)}(\vec{r}) \\ &= \sum_{\alpha} V_{\alpha''\alpha} N_0^{(\alpha)} 2\pi T \sum_{0 < \epsilon_n < \infty} \left[\int_{FS_\alpha} d^2k_F \rho^{(\alpha)}(\vec{k}_F) f^{(\alpha)}(\epsilon_n, \vec{k}_F, \vec{r}) - \frac{1}{\epsilon_n} \Delta^{(\alpha)}(\vec{r}) \right] \end{aligned}$$

Unter Verwendung von $\sum_{\alpha} V_{\alpha''\alpha} (V^{-1})_{\alpha\alpha'} = \delta_{\alpha''\alpha'}$ und $\lambda_{\alpha\alpha'} = N_0^{(\alpha')} V_{\alpha\alpha'}$ kann man schließlich die Gapgleichung für ein Multiband-System formulieren als:

$$\begin{aligned} &\Delta^{(\alpha'')}(\vec{r}) - \sum_{\alpha} \lambda_{\alpha''\alpha} \left(\frac{1}{\lambda_+} - \ln \frac{T}{T_c} \right) \Delta^{(\alpha)}(\vec{r}) \\ &= \sum_{\alpha} \lambda_{\alpha''\alpha} 2\pi T \sum_{0 < \epsilon_n < \infty} \left[\int_{FS_\alpha} d^2k_F \rho^{(\alpha)}(\vec{k}_F) f^{(\alpha)}(\epsilon_n, \vec{k}_F, \vec{r}) - \frac{1}{\epsilon_n} \Delta^{(\alpha)}(\vec{r}) \right] \end{aligned}$$

Der quasiklassische Strom schreibt sich hingegen einfach als

$$\vec{j}(\vec{r}) = -2ie \sum_{\alpha} N_0^{(\alpha)} 2\pi T \sum_{0 < \epsilon_n < \infty} \int_{FS_\alpha} d^2k_F \rho^{(\alpha)}(\vec{k}_F) \vec{v}_F^{(\alpha)}(\vec{k}_F) g^{(\alpha)}(\epsilon_n, \vec{k}_F, \vec{r})$$

d.h. die Gesamtstromdichte wird summiert über die Stromdichten, die von den verschiedenen Ladungsträgern in den unterschiedlichen Bändern getragen werden.

Anhang B

Die Kopplungsmatrix $\lambda_{\alpha\alpha'}$ für den Multiband-Supraleiter

Die Kopplungsmatrix $\lambda_{\alpha\alpha'}$ spielt eine entscheidende Rolle bei der theoretischen Beschreibung eines Multiband-Supraleiters. Dabei können die Einträge sowohl aus Bandstrukturrechnungen bestimmt werden, als auch aus experimentell zugänglichen Größen wie dem Verhältnis der Paarpotentialamplituden bei $T = T_c$ und $T = 0$ sowie dem Verhältnis der Zustandsdichten im normalleitenden Zustand. Dabei ist zu berücksichtigen, dass bei der Anwendung einer “weak-coupling“-Theorie, d.h. einer Theorie, die von einer kleiner Wechselwirkungsstärke und einer hohen Cut-Off-Frequenz ausgeht, dieser Grenzprozess auch bei der Bestimmung der Einträge der Kopplungsmatrix korrekt durchgeführt wird [80]. Im folgenden soll kurz skizziert werden, wie die vier Einträge der 2×2 -Kopplungsmatrix $\lambda_{\alpha\alpha'}$ mit dem Paarpotential bei $T = 0$ und $T = T_c$, sowie den normalleitenden Zustandsdichten in den beiden Bändern zusammenhängen. Dafür wollen wir von der folgenden Zweiband-Gapgleichung für einen räumlich homogenen s -Wellen-Supraleiter ausgehen:

$$\Delta^{(\alpha)} = \sum_{\alpha'} \lambda_{\alpha\alpha'} 2\pi T \sum_{0 < \epsilon_n < \omega_c} \frac{\Delta^{(\alpha')}}{\sqrt{\epsilon_n^2 + (\Delta^{(\alpha')})^2}}$$

In der Umgebung der kritischen Temperatur können wir die Paarpotentialamplituden $\Delta^{(\alpha)}$ quadratisch vernachlässigen und die linearisierte Gapgleichung somit schreiben als

$$\Delta^{(\alpha)} = \sum_{\alpha'} \lambda_{\alpha\alpha'} 2\pi T_c \sum_{0 < \epsilon_n < \omega_c} \frac{\Delta^{(\alpha')}}{\epsilon_n}$$

Führt man nun die Summation über die Matsubarafrequenzen aus, so erhält man im Grenzfall einer hohen Cut-Off-Frequenz $\omega_c \gg 2\pi T_c$ und mit der Näherung $\psi(x) \approx \ln(x)$ für $x \gg 1$ den Ausdruck

$$\Delta^{(\alpha)} = \sum_{\alpha'} \lambda_{\alpha\alpha'} \Delta^{(\alpha')} \left[\gamma + \ln 4 + \ln \left(\frac{\omega_c}{2\pi T_c} \right) \right]$$

mit der Eulerschen Konstanten $\gamma \approx 0,577$. Bringen wir nun den Logarithmus auf die linke Seite so erkennen wir, dass die linearisierte Gapgleichung ein Eigenwertproblem definiert mit

$$\ln^{-1} \left(\frac{2\omega_c e^\gamma}{\pi T_c} \right) \Delta^{(\alpha)} = \sum_{\alpha'} \lambda_{\alpha\alpha'} \Delta^{(\alpha')}$$

B. Die Kopplungsmatrix $\lambda_{\alpha\alpha'}$ für den Multiband-Supraleiter

Die Kopplungsmatrix $\lambda_{\alpha\alpha'}$ besitzt dabei zwei Eigenwerte und wir können somit schreiben

$$\lambda_{\pm} = \frac{\lambda_{\sigma\sigma} + \lambda_{\pi\pi}}{2} \pm \sqrt{\frac{(\lambda_{\sigma\sigma} - \lambda_{\pi\pi})^2}{4} + \lambda_{\sigma\pi}\lambda_{\pi\sigma}} = \ln^{-1} \left(\frac{2\omega_c e^{\gamma}}{\pi T_c^{\pm}} \right)$$

Dabei korrespondieren die beiden Eigenwerte λ_+ und λ_- zu zwei unterschiedlichen kritischen Temperaturen T^+ und T^- , die die zwei möglichen supraleitenden Phasenübergänge charakterisieren. Da der Phasenübergang mit der höheren kritischen Temperatur T^+ früher stattfindet, unterdrückt er den zweiten Phasenübergang, der damit nicht beobachtet wird. Damit können wir die kritische Temperatur schreiben als

$$T_c = \frac{2\omega_c e^{\gamma}}{\pi} e^{-1/\lambda_+} \quad (\text{B.1})$$

und das Verhältnis der Paarpotentialamplituden bei T_c berechnet sich nun aus dem Eigenvektor zu λ_+ als

$$c_1 = \frac{\Delta^{(\sigma)}(T_c)}{\Delta^{(\pi)}(T_c)} = \frac{\lambda_{\sigma\pi}}{\lambda_+ - \lambda_{\sigma\sigma}} = \frac{\lambda_+ - \lambda_{\pi\pi}}{\lambda_{\pi\sigma}} \quad (\text{B.2})$$

Ebenso kann aus der Gapgleichung das Verhältnis der Gapamplituden bei $T = 0$ als Funktion der Kopplungsparameter bestimmt werden. Dafür wollen wir die Gapgleichung mit $\beta = T^{-1}$ in integraler Form schreiben als

$$\Delta^{(\alpha)} = \sum_{\alpha'} \lambda_{\alpha\alpha'} \Delta^{(\alpha')} \int_0^{\omega_c} \frac{d\epsilon}{\sqrt{\epsilon^2 + (\Delta^{(\alpha')})^2}} \tanh \left(\frac{1}{2} \beta \sqrt{\epsilon^2 + (\Delta^{(\alpha')})^2} \right)$$

wobei $\Delta^{(\alpha')}$ für kleine Temperaturen konstant wird und mit $T \rightarrow 0$ das Argument des tanh divergiert und somit gilt

$$\tanh \left(\frac{1}{2} \beta \sqrt{\epsilon^2 + (\Delta^{(\alpha')})^2} \right) \rightarrow 1$$

Damit kann das Integral ausgeführt werden und die Gapgleichung nimmt für $T \rightarrow 0$ die folgende Form an

$$\Delta^{(\alpha)} = \sum_{\alpha'} \lambda_{\alpha\alpha'} \Delta^{(\alpha')} \ln \left(\frac{\omega_c + \sqrt{\omega_c^2 + (\Delta^{(\alpha')})^2}}{\Delta^{(\alpha')}} \right)$$

Für $\omega_c \gg \Delta^{(\alpha')}$ können wir weiterhin in der Summe unter der Wurzel den quadratischen Term von $\Delta^{(\alpha')}$ gegenüber dem quadratischen Term von ω_c vernachlässigen und erhalten nun die Gapgleichung als

$$\Delta^{(\alpha)} = \sum_{\alpha'} \lambda_{\alpha\alpha'} \Delta^{(\alpha')} \ln \frac{2\omega_c}{\Delta^{(\alpha')}}$$

Unter Einführung des Gapverhältnisses bei $T = 0$ als $c_0 = \frac{\Delta^{(\sigma)}(0)}{\Delta^{(\pi)}(0)}$ können wir das gekoppelte Gleichungssystem in der folgenden Form notieren

$$\begin{aligned} \Delta^{(\sigma)}(0) &= \lambda_{\sigma\sigma} \Delta^{(\sigma)}(0) \ln \left(\frac{2\omega_c}{\Delta^{(\sigma)}(0)} \right) + \lambda_{\sigma\pi} \frac{\Delta^{(\sigma)}(0)}{c_0} \left[\ln \left(\frac{2\omega_c}{\Delta^{(\sigma)}(0)} \right) + \ln c_0 \right] \\ \Delta^{(\pi)}(0) &= \lambda_{\pi\sigma} c_0 \Delta^{(\pi)}(0) \ln \left(\frac{2\omega_c}{\Delta^{(\sigma)}(0)} \right) + \lambda_{\pi\pi} \Delta^{(\pi)}(0) \left[\ln \left(\frac{2\omega_c}{\Delta^{(\sigma)}(0)} \right) + \ln c_0 \right] \end{aligned}$$

Division der ersten Gleichung durch $\Delta^{(\sigma)}(0)$ und der zweiten Gleichung durch $\Delta^{(\pi)}(0)$ sowie Auflösen der beiden Gleichungen nach $\ln\left(\frac{2\omega_c}{\Delta^{(\sigma)}(0)}\right)$ und Gleichsetzen der daraus resultierenden Ausdrücke führt schließlich auf

$$\left(1 - \frac{\lambda_{\sigma\pi}}{c_0} \ln c_0\right) (\lambda_{\pi\sigma} c_0 + \lambda_{\pi\pi}) = (1 - \lambda_{\pi\pi} \ln c_0) \left(\lambda_{\sigma\sigma} + \frac{\lambda_{\sigma\pi}}{c_0}\right)$$

bzw. unter Zusammenfassung aller Ausdrücke mit $\ln c_0$:

$$(\lambda_{\sigma\sigma} \lambda_{\pi\pi} - \lambda_{\sigma\pi} \lambda_{\pi\sigma}) \ln c_0 + \lambda_{\pi\sigma} c_0 - \frac{\lambda_{\sigma\pi}}{c_0} = \lambda_{\sigma\sigma} - \lambda_{\pi\pi} \quad (\text{B.3})$$

Weiterhin ist bekannt, dass das Verhältnis der normalleitenden Zustandsdichten $\zeta = N_0^{(\sigma)}/N_0^{(\pi)}$ in das Verhältnis der Außerdiagonalelemente der Kopplungsmatrix eingeht, da zwischen der Kopplungsmatrix $\lambda_{\alpha\alpha'}$ und der symmetrischen Paarungsstärke $V_{\alpha\alpha'}$ der Zusammenhang besteht:

$$\lambda_{\alpha\alpha'} = N_0^{(\alpha')} V_{\alpha\alpha'}$$

und damit gilt

$$\zeta = \frac{\lambda_{\pi\sigma}}{\lambda_{\sigma\pi}} \quad (\text{B.4})$$

Nun besteht über Gleichung (B.1) ein direkter Zusammenhang zwischen der kritischen Temperatur T_c und dem größeren Eigenwert λ_+ . Ist dieser erst einmal bekannt, können weiterhin über die Gleichungen (B.2), (B.3) und (B.4) alle vier Elemente der Kopplungsmatrix exakt bestimmt werden. Schreibt man beispielsweise für $\lambda_{\sigma\pi}$

$$\lambda_{\sigma\pi} = \frac{\lambda_+^2 c_1 c_0 \ln c_0}{\lambda_+ (1 + c_1^2 \zeta) c_0 \ln c_0 + (c_1 - c_0)(1 + c_0 c_1 \zeta)}$$

so können alle weiteren Einträge einfach berechnet werden als

$$\lambda_{\pi\sigma} = \zeta \lambda_{\sigma\pi}, \quad \lambda_{\sigma\sigma} = \lambda_+ - \frac{\lambda_{\sigma\pi}}{c_0}, \quad \lambda_{\pi\pi} = \lambda_+ - c_1 \zeta \lambda_{\sigma\pi}$$

Zum Schluss wollen wir noch den Zusammenhang der hier eingeführten Größen c_0 , c_1 und ζ mit dem Kopplungsstärkeparameter η angeben, wie er in [19] definiert wurde:

$$\eta = \frac{\lambda_{\pi\pi} - \lambda_-}{\lambda_+ - \lambda_-} = \frac{1}{1 + c_1^2 \zeta}$$

Wir erkennen also, dass für ein gegebenes Verhältnis der zwei normalleitenden Zustandsdichten in den beiden Bändern ζ der Interbandkopplungsparameter η allein aus dem Verhältnis der Paarpotentialamplituden bei T_c berechnet werden kann, während das Verhältnis der Paarpotentialamplituden bei $T = 0$, hier mit c_0 bezeichnet, darin nicht eingeht.

Anhang C

Die numerische Implementierung der Usadel-Gleichung

Die numerische Berechnung der Usadel-Gleichung stellt an sich kein schwieriges Problem dar. Sie ist eine Diffusionsgleichung und im Fall eines isotropen Diffusionstensors kann eine solche Parametrisierung gefunden werden, dass eine partielle Differentialgleichung 2. Ordnung zu lösen ist. Allein die Art der Randwerte, die bei der Lösung der Usadel-Gleichung in der Umgebung eines einzelnen Vortex oder bei einer kreisförmigen Approximation einer Vortextgitterzelle von der physikalischen Problemstellung vorgegeben sind, stellen eine gewisse Schwierigkeit dar. Anstelle eines Anfangswertproblems, bei dem beispielsweise Funktionswert und Ableitung der zu lösenden Funktion an dem einen Rand vorgegeben sind und das durch einfache Integration über das Lösungsintervall berechnet werden kann, führen die bei der Usadel-Gleichung an beiden Rändern vorgegeben Anfangsbedingungen auf ein Randwertproblem, das eine durchdachtere Lösungsmethode erfordert. Die standardmäßig für Randwertaufgaben verwendete "Schießmethode", bei der iterativ Anfangswertpaare an einem Intervallrand so lange verbessert werden, bis bei einem Lösungsversuch die korrekte Randbedingung am anderen Intervallende "getroffen" wird, führt aufgrund extremer Instabilität hier nicht zum Ziel. Dagegen kann ein Relaxationsverfahren, bei dem mit einem beliebigen Lösungsvektor gestartet und dieser in mehreren Iterationen in Richtung der korrekten Lösung relaxiert wird, sehr schnell zur richtigen Lösung führen. Dieses Verfahren soll in den folgenden Abschnitten kurz skizziert werden, da es eine sehr effiziente und schnelle Berechnung der Usadel-Gleichung in der Umgebung eines isolierten Vortex oder auch für eine kreisförmig approximierten Vortextgitterzelle erlaubt.

C.1 Die Parametrisierung des Usadel-Propagators für konkrete Beispiele

Um die Usadel-Gleichung numerisch berechnen zu können, müssen wir zuerst geeignete Parametrisierungen der normalen und anomalen Greenschen Funktionen $g^{(\alpha,0)}$ und $f^{(\alpha,0)}$ finden. Dafür wollen wir im folgenden die Usadel-Gleichung für einen isotropen Diffusionstensor $D_{lm}^{(\alpha)} = D^{(\alpha)}\delta_{lm}$ in der Notation von Usadel betrachten:

$$2\omega f^{(\alpha,0)} - \mathcal{D}^{(\alpha)} \sum_l \left(\partial_l - i \frac{2e}{c} A_l \right) \left[\frac{f^{(\alpha,0)}}{2g^{(\alpha,0)}} \partial_l |f^{(\alpha,0)}|^2 + g^{(\alpha,0)} \left(\partial_l - i \frac{2e}{c} A_l \right) f^{(\alpha,0)} \right] = 2\Delta^{(\alpha)} g^{(\alpha,0)}$$

C. Die numerische Implementierung der Usadel-Gleichung

wobei $f^{(\alpha,0)}$ und $g^{(\alpha,0)}$ über die Normierungsbedingung verknüpft sind

$$\left|f^{(\alpha,0)}\right|^2 + \left(g^{(\alpha,0)}\right)^2 = 1$$

Schreiben wir nun die Gleichung unter Trennung von Betrag und Phase der anomalen Greenschen Funktion

$$\begin{aligned} f^{(\alpha,0)} &= \tilde{f}^{(\alpha,0)} e^{i\varphi^{(\alpha)}}, \quad \tilde{f}^{(\alpha,0)} \in \mathbb{R} \\ \Delta^{(\alpha)} &= \tilde{\Delta}^{(\alpha)} e^{i\varphi^{(\alpha)}}, \quad \tilde{\Delta}^{(\alpha)} \in \mathbb{C} \end{aligned}$$

und mit der Definition von $\frac{2e}{c}\tilde{A}_l^{(\alpha)} = \frac{2e}{c}A_l - \partial_l\varphi^{(\alpha)}$ um in eine Differentialgleichung für die reelle Greensche Funktion $\tilde{f}^{(\alpha,0)}$ so erhalten wir:

$$2\omega\tilde{f}^{(\alpha,0)} - \mathcal{D}^{(\alpha)} \sum_l \left(\partial_l - i\frac{2e}{c}\tilde{A}_l^{(\alpha)} \right) \left[\frac{\tilde{f}^{(\alpha,0)}}{2g^{(\alpha,0)}} \partial_l \left| \tilde{f}^{(\alpha,0)} \right|^2 + g^{(\alpha,0)} \left(\partial_l - i\frac{2e}{c}\tilde{A}_l^{(\alpha)} \right) \tilde{f}^{(\alpha,0)} \right] = 2\tilde{\Delta}^{(\alpha)} g^{(\alpha,0)}$$

Da $\tilde{f}^{(\alpha,0)}$ und $g^{(\alpha,0)}$ über die Normierungsbedingung direkt verknüpft sind

$$\left(\tilde{f}^{(\alpha,0)}\right)^2 + \left(g^{(\alpha,0)}\right)^2 = 1$$

können sie durch nur eine einzige reelle Funktion so parametrisiert werden, dass die Normierungsbedingung automatisch erfüllt ist. Im folgenden soll – einer Idee von [81] und [82] folgend – in Analogie zur Riccati-Parametrisierung die Funktion $a^{(\alpha)}(\vec{r}, \omega)$ so gewählt werden, dass für $\text{Re}[\omega] > 0$ gilt

$$g^{(\alpha,0)} = \frac{1 - (a^{(\alpha)})^2}{1 + (a^{(\alpha)})^2}, \quad \tilde{f}^{(\alpha,0)} = \frac{2a^{(\alpha)}}{1 + (a^{(\alpha)})^2}$$

Eingesetzt in die Usadel-Gleichung ergibt sich eine Differentialgleichung für die Funktion $a^{(\alpha)}(\vec{r}, \omega)$, die sich im allgemeinen schreiben lässt als

$$\begin{aligned} 2\omega a^{(\alpha)} - \mathcal{D}^{(\alpha)} \left\{ \begin{array}{l} \vec{\nabla}^2 a^{(\alpha)} - \frac{2a^{(\alpha)}(\vec{\nabla} a^{(\alpha)})^2}{1+(a^{(\alpha)})^2} - i\frac{2e}{c} \left(\vec{\nabla} \vec{A}^{(\alpha)} \right) \frac{a^{(\alpha)}(1-(a^{(\alpha)})^2)}{1+(a^{(\alpha)})^2} \\ -i\frac{2e}{c} \frac{2(1-(a^{(\alpha)})^2)^2}{(1+(a^{(\alpha)})^2)^2} \vec{A} \cdot \vec{\nabla} a^{(\alpha)} - \left(\frac{2e}{c} \vec{A}^{(\alpha)} \right)^2 \frac{a^{(\alpha)}(1-(a^{(\alpha)})^2)}{1+(a^{(\alpha)})^2} \end{array} \right\} \\ = \tilde{\Delta}^{(\alpha)} - \tilde{\Delta}^{(\alpha)} (a^{(\alpha)})^2 \end{aligned} \quad (\text{C.1})$$

Für den Fall eines isolierten s -Wellen-Vortex in einem starken Typ-II-Supraleiter können wir diesen Ausdruck weiter vereinfachen. Aufgrund der Rotationssymmetrie des Problems kann die Gleichung zuerst einmal auf Zylinderkoordinaten transformiert werden. Zudem kann für $\kappa \gg 1$ der Einfluss des Vektorpotentials vernachlässigt werden und die Phase φ der anomalen Greenschen Funktion fällt in der Umgebung des Vortex mit der Phase des Paarpotentials zusammen, die wiederum gerade dem Polarwinkel ϕ der Zylinderkoordinaten entspricht:

$$\frac{2e}{c} \vec{A}^{(\alpha)} = \frac{2e}{c} \vec{A} - \vec{\nabla} \phi \approx -\vec{\nabla} \phi, \quad \Delta^{(\alpha)}(\vec{r}) = \tilde{\Delta}^{(\alpha)}(r) e^{i\phi}$$

Damit vereinfacht sich Gleichung (C.1) bedeutend, denn für den dritten und vierten Summanden in der geschweiften Klammer gilt

$$\frac{2e}{c} \vec{\nabla} \vec{A}^{(\alpha)} = -\Delta \phi = 0, \quad \frac{2e}{c} \vec{A}^{(\alpha)} \cdot \vec{\nabla} a^{(\alpha)} = \vec{\nabla} \phi \cdot \vec{\nabla} a^{(\alpha)} = \vec{\nabla} \phi \cdot \vec{\nabla} a^{(\alpha)}(r) = 0$$

Der letzte Term in der geschweiften Klammer hingegen lässt sich vereinfachen zu

$$\left(\frac{2e}{c}\vec{A}^{(\alpha)}\right)^2 = \left(\vec{\nabla}\phi\right)^2 = \frac{1}{r^2}$$

und mit den Ausdrücken für den Gradienten und den Laplace-Operator in Zylinderkoordinaten können wir die Usadel-Gleichung in der gewählten Parametrisierung schreiben als

$$\begin{aligned} & 2\omega a^{(\alpha)} - \mathcal{D}^{(\alpha)} \left\{ \frac{1}{r} \partial_r \left(r \partial_r a^{(\alpha)} \right) - \frac{2a^{(\alpha)} \left(\partial_r a^{(\alpha)} \right)^2}{1 + \left(a^{(\alpha)} \right)^2} - \frac{1}{r^2} \frac{a^{(\alpha)} \left(1 - \left(a^{(\alpha)} \right)^2 \right)}{1 + \left(a^{(\alpha)} \right)^2} \right\} \\ & = \left(1 - \left(a^{(\alpha)} \right)^2 \right) \tilde{\Delta}^{(\alpha)}(r) \end{aligned} \quad (\text{C.2})$$

Nun kann in einem letzten Schritt die Gleichung durch $2\pi T_c$ dividiert werden und unter Einführung normierter Längen $\hat{r} = r/\xi^{(\sigma)}$ mit der σ -Band Kohärenzlänge $\xi^{(\sigma)} = \sqrt{\frac{\mathcal{D}^{(\sigma)}}{2\pi T_c}}$ und mit den normierten Energien $\hat{\omega} = \omega/\pi T_c$, bzw. $\hat{\Delta} = \tilde{\Delta}/\pi T_c$ in eine dimensionslose Form gebracht werden:

$$\begin{aligned} & \hat{\omega} a^{(\alpha)} - \zeta^{(\alpha)} \left\{ \frac{1}{\hat{r}} \partial_{\hat{r}} \left(\hat{r} \partial_{\hat{r}} a^{(\alpha)} \right) - \frac{2a^{(\alpha)} \left(\partial_{\hat{r}} a^{(\alpha)} \right)^2}{1 + \left(a^{(\alpha)} \right)^2} - \frac{1}{\hat{r}^2} \frac{a^{(\alpha)} \left(1 - \left(a^{(\alpha)} \right)^2 \right)}{1 + \left(a^{(\alpha)} \right)^2} \right\} \\ & = \left(1 - \left(a^{(\alpha)} \right)^2 \right) \frac{\hat{\Delta}(\hat{r})}{2} \end{aligned}$$

wobei $\zeta^{(\sigma)} = 1$ und $\zeta^{(\pi)} = \frac{\mathcal{D}^{(\pi)}}{\mathcal{D}^{(\sigma)}}$ gilt. Schließlich können wir noch eine Verbindung zu der in [83, 84] angegebenen θ -Parametrisierung des Usadel-Propagators herstellen, indem wir die folgende Ersetzung vornehmen (im folgenden sollen der Übersichtlichkeit halber die normierten Größen wieder ohne Hut dargestellt werden, gemeint sind jedoch ab hier immer die dimensionslosen Größen)

$$a^{(\alpha)}(r, \omega) = \tan \frac{\theta^{(\alpha)}(r, \omega)}{2}$$

In diesem Fall ergeben sich die normale und anomale Greensche Funktion als

$$g^{(\alpha,0)}(r, \omega) = \cos \theta^{(\alpha)}(r, \omega) \quad \text{und} \quad \tilde{f}^{(\alpha,0)}(r, \omega) = \sin \theta^{(\alpha)}(r, \omega)$$

und die Usadel-Gleichung nimmt die folgende Form an

$$\begin{aligned} & \zeta^{(\alpha)} \left[\partial_r^2 \theta^{(\alpha)}(r, \omega) + \frac{1}{r} \partial_r \theta^{(\alpha)}(r, \omega) - \frac{1}{r^2} \cos \theta^{(\alpha)}(r, \omega) \sin \theta^{(\alpha)}(r, \omega) \right] \\ & + \tilde{\Delta}^{(\alpha)}(r) \cos \theta^{(\alpha)}(r, \omega) - \omega \sin \theta^{(\alpha)}(r, \omega) = 0 \end{aligned}$$

Zur Berechnung der Paarpotentialamplitude können wir sie noch durch die Gapgleichung ergänzen

$$\tilde{\Delta}^{(\alpha)}(r) = \sum_{\alpha'} \lambda_{\alpha, \alpha'} 2\pi T \sum_{0 < \epsilon_n < \omega_c} \sin \theta^{(\alpha')}(r, \epsilon_n)$$

Weiterhin müssen wir die Randbedingungen der Differentialgleichung angeben, die sich für den isolierten Vortex aus den folgenden Überlegungen ergeben: Während die anomale Greensche Funktion im Vortexzentrum ($r = 0$) zusammen mit der Paarpotentialamplitude identisch verschwindet, nehmen sowohl $g^{(\alpha,0)}(r, \omega)$ als auch $\tilde{f}^{(\alpha,0)}(r, \omega)$ in einem großen Abstand vom Vortexzentrum ihren jeweiligen Bulk-Wert an:

$$\theta^{(\alpha)}(r = 0, \omega) = 0, \quad \theta^{(\alpha)}(r \rightarrow \infty, \omega) = \arctan \frac{\Delta_0^{(\alpha)}}{\omega}$$

C. Die numerische Implementierung der Usadel-Gleichung

Für den Fall eines hexagonalen Vortextgitters in einem starken Typ-II-Supraleiter bei nicht zu hohen Magnetfeldern kann die Paarpotentialamplitude durch eine einfache kreisförmige Näherung der einzelnen Vortices im Gitter approximiert werden. In diesem Fall muss jedoch auch für große Werte von κ das Vektorpotential mitberücksichtigt werden, da nun das Magnetfeld nahezu konstant in den Supraleiter eindringt. Dabei können wir für ein konstantes Magnetfeld $\vec{B} = B_0 \hat{e}_z$ das Vektorpotential in Zylinderkoordinaten ansetzen als

$$\vec{A} = \frac{1}{2} B_0 r \hat{e}_\phi = \frac{\Phi_0}{2\pi r_S^2} r \hat{e}_\phi$$

wobei das Magnetfeld über die Flussquantisierungsbedingung $\pi r_S^2 B_0 = \Phi_0$ mit dem Radius der approximativ kreisförmigen Vortextgitterzelle r_S verknüpft ist. Damit ergibt sich das normierte eichinvariante Vektorpotential als $\frac{2e\xi}{c} \vec{A}^{(\alpha)} = \left(\frac{r}{r_S} - \frac{1}{r}\right) \hat{e}_\phi$ und der Vortex am Ursprung des Koordinatensystems kann unter Vernachlässigung des Einflusses der umliegenden Flussschläuche durch die folgende dimensionslose Gleichung beschrieben werden (siehe [83, 84])

$$\zeta^{(\alpha)} \left[\partial_r^2 \theta^{(\alpha)}(r, \omega) + \frac{1}{r} \partial_r \theta^{(\alpha)}(r, \omega) - \left(\frac{1}{r} - \frac{r}{r_S^2}\right)^2 \cos \theta^{(\alpha)}(r, \omega) \sin \theta^{(\alpha)}(r, \omega) \right] + \tilde{\Delta}^{(\alpha)}(r) \cos \theta^{(\alpha)}(r, \omega) - \omega \sin \theta^{(\alpha)}(r, \omega) = 0$$

Ergänzt wird diese Gleichung durch die folgenden Randbedingungen

$$\theta^{(\alpha)}(r = 0, \omega) = 0, \quad \partial_r \theta^{(\alpha)}(r = r_S, \omega) = 0$$

Während die Randbedingung im Vortexzentrum sofort einsichtig ist, bedarf die zweite Bedingung am Rand der Gitterzelle einer kurzen Erläuterung. Da das Paarpotential zwischen den Vortices ein Maximum annehmen soll, muss die radiale Ableitung von $\tilde{\Delta}^{(\alpha)}(r)$ hier verschwinden. Eingesetzt in die Gapgleichung ergibt sich daraus die Bedingung, dass das Produkt $\cos \theta^{(\alpha)}(r, \epsilon_n) \partial_r \theta^{(\alpha)}(r, \epsilon_n)$ für $r = r_S$ und alle ϵ_n Null ergeben muss, mit der Einschränkung, dass $\theta^{(\alpha)}(r, \epsilon_n) \in [0, \pi/2]$, da sowohl $g^{(\alpha,0)}(r, \epsilon_n)$ als auch $\tilde{f}^{(\alpha,0)}(r, \epsilon_n)$ auf der imaginären Achse positive Funktionen sind. Diese Bedingung wird durch die oben angegebene Randbedingung bei $r = r_S$ erfüllt.

C.2 Das Relaxationsverfahren zur Lösung eines Randwertproblems

Die Relaxationsmethode ist eine Möglichkeit, ein System gekoppelter Differentialgleichungen erster Ordnung, bzw. Differentialgleichungen höherer Ordnung – die immer auf ein System gekoppelter Differentialgleichungen erster Ordnung zurückzuführen sind – mit Randbedingungen an den zwei Intervallgrenzen zu lösen. Im folgenden soll in groben Zügen skizziert werden, wie dieses Verfahren numerisch umgesetzt werden kann, wobei wir hier der Beschreibung in den Numerical Recipes (siehe [85]) folgen wollen. Die Grundidee des Verfahrens ist es, die Differentialgleichung erster Ordnung der Form

$$\frac{dy}{dx} = g(x, y)$$

durch eine algebraische Gleichung der Art

$$E_k(y) \equiv y_k - y_{k-1} - (x_k - x_{k-1}) g \left[\frac{1}{2} (x_k + x_{k-1}), \frac{1}{2} (y_k + y_{k-1}) \right] = 0$$

zu ersetzen, den Vektor \vec{E} für eine kleine Korrektur $y + \Delta y$ zu entwickeln und aus der Bedingung $E(y + \Delta y) = 0$ den Korrekturvektor Δy zu berechnen. Dieses Verfahren relaxiert für hinreichend glatte Funktionen und einen gut gewählten Startvektor von y sehr schnell gegen das gesuchte Ergebnis. Nun soll das Verfahren jedoch näher erläutert werden. Ausgehend von dem System von Differentialgleichungen erster Ordnung für die Funktionen $y_i(x)$

$$\frac{dy_i(x)}{dx} = g_i(x, y_1, y_2, \dots, y_N)$$

ergänzt durch die Randbedingungen bei x_1

$$B_{1,j}(x_1, y_1, y_2, \dots, y_N) = 0, \quad j = 1, \dots, n_1$$

und die Randbedingungen bei x_M

$$C_{M,k}(x_M, y_1, y_2, \dots, y_N) = 0, \quad k = 1, \dots, n_2$$

wobei die Summe der Randbedingungen $n_1 + n_2$ gerade der Anzahl der Differentialgleichungen $n_1 + n_2 = N$ entsprechen muss, können nun auf einem M -dimensionalen Gitter die folgenden algebraischen Relationen abgeleitet werden

$$0 = \vec{E}_k \equiv \vec{y}_k - \vec{y}_{k-1} - (x_k - x_{k-1}) \vec{g}_k(x_k, x_{k-1}, \vec{y}_k, \vec{y}_{k-1}), \quad k = 2, 3, \dots, M$$

wobei gilt

$$\vec{y}_k = \begin{pmatrix} y_1(x_k) \\ y_2(x_k) \\ \vdots \\ y_N(x_k) \end{pmatrix}$$

Die obige Beziehung liefert $(M - 1) \cdot N$ Gleichungen für die $M \cdot N$ Unbekannten $y_{j,k}$ ($j = 1, \dots, N$ und $k = 1, \dots, M$), d.h. für die N unbekanntenen Lösungsfunktionen an den M Gitterpunkten. Die fehlenden N Gleichungen werden von den Randbedingungen geliefert und man erhält am Startpunkt des Intervalls

$$0 = \vec{E}_1 \equiv \vec{B}(x_1, \vec{y}_1)$$

und am Endpunkt

$$0 = \vec{E}_{M+1} \equiv \vec{C}(x_M, \vec{y}_M)$$

Die Vektoren \vec{E}_1 und \vec{B} haben dabei nur n_1 von Null verschiedene Einträge entsprechend den n_1 Randbedingungen am Punkt x_1 . Dabei ist es sinnvoll diese Einträge an das Ende der Vektoren zu schreiben, wie wir später sehen werden, d.h. $E_{j,1} \neq 0$ für $j = n_2 + 1, \dots, N$. Die Vektoren \vec{E}_{M+1} und \vec{C} haben dagegen n_2 von Null verschiedene Einträge, die am Anfang des Vektors belassen werden sollen: $E_{j,M+1} \neq 0$ für $j = 1, \dots, n_2$. Erfüllt \vec{y} das System von Differentialgleichungen, so gilt $\vec{E}_k(\vec{y}_k, \vec{y}_{k-1}) = 0$. Bis dieses Ziel erreicht ist, müssen Korrekturen $\Delta \vec{y}$ von \vec{y} gesucht werden, die diese Bedingung besser erfüllen. Dafür kann geschrieben werden

$$\vec{E}_k(\vec{y}_k + \Delta \vec{y}_k, \vec{y}_{k-1} + \Delta \vec{y}_{k-1}) \approx \vec{E}_k(\vec{y}_k, \vec{y}_{k-1}) + \sum_{n=1}^N \frac{\partial \vec{E}_k}{\partial y_{n,k-1}} \Delta y_{n,k-1} + \sum_{n=1}^N \frac{\partial \vec{E}_k}{\partial y_{n,k}} \Delta y_{n,k}$$

Nun ist die Forderung, dass dieser verbesserte Vektor $\vec{y} + \Delta \vec{y}$ die Differentialgleichung erfüllt, und es folgt daraus die Bedingung

$$\vec{E}_k(\vec{y}_k + \Delta \vec{y}_k, \vec{y}_{k-1} + \Delta \vec{y}_{k-1}) = 0$$

C. Die numerische Implementierung der Usadel-Gleichung

Damit kann die obige Gleichung umgeschrieben werden zu

$$-E_{j,k} = \sum_{n=1}^N S_{j,n} \Delta y_{n,k-1} + \sum_{n=N+1}^{2N} S_{j,n} \Delta y_{n-N,k}, \quad j = 1, 2, \dots, N$$

wobei die folgenden $N \times 2N$ -Matrizen für jeden Punkt k definiert sind als

$$S_{j,n} = \frac{\partial E_{j,k}}{\partial y_{n,k-1}}, \quad S_{j,n+N} = \frac{\partial E_{j,k}}{\partial y_{n,k}}, \quad n = 1, 2, \dots, N$$

Für eine gewöhnliche Differentialgleichung zweiter Ordnung mit zwei Randbedingungen ergeben sich beispielsweise zwei DGLen erster Ordnung, d.h. die $S_{j,n}$ sind 2×4 -Matrizen an den M Gitterpunkten. Für die Randbedingungen erhält man bei x_1 :

$$-E_{j,1} = \sum_{n=1}^N S_{j,n} \Delta y_{n,1}, \quad j = n_2 + 1, n_2 + 2, \dots, N$$

wobei hier die Matrix $S_{j,n}$ gegeben ist als

$$S_{j,n} = \frac{\partial E_{j,1}}{\partial y_{n,1}}, \quad n = 1, 2, \dots, N$$

und man erhält bei x_2 :

$$-E_{j,M+1} = \sum_{n=1}^N S_{j,n} \Delta y_{n,M}, \quad j = 1, 2, \dots, n_2$$

mit der Matrix

$$S_{j,n} = \frac{\partial E_{j,M+1}}{\partial y_{n,M}}, \quad n = 1, 2, \dots, N$$

Damit ist ein Satz von Gleichungen aufgestellt, die für die Korrekturen $\Delta \vec{y}$ gelöst werden müssen, wobei die Iterationen solange fortgesetzt werden, bis die Vektoren \vec{E}_k hinreichend klein sind. Im nächsten Abschnitt soll gezeigt werden, wie mit den hier eingeführten Methoden die Usadel-Gleichung schnell und präzise unter Verwendung der korrekten Randbedingungen für einen isolierten Vortex und ein Vortexgitter gelöst werden kann.

C.3 Die numerische Lösung der Usadel-Gleichung

Im folgenden soll mit den im vorangegangenen Abschnitt eingeführten Bezeichnungen die numerische Implementierung der Usadel-Gleichung für den isolierten Vortex angegeben werden. Um aus der Differentialgleichung zweiter Ordnung für $\theta^{(\alpha)}(r, \omega)$ ein System zweier gekoppelter Differentialgleichungen erster Ordnung zu machen, können – hier exemplarisch für $\theta^{(\sigma)}(r, \omega)$ vorgeführt – die Funktion und ihre Ableitung als $\theta_1(r)$ und $\theta_2(r)$ definiert werden:

$$\begin{aligned} \frac{d\theta_1(r)}{dr} &= \theta_2(r) \\ \frac{d\theta_2(r)}{dr} &= -\frac{1}{r}\theta_2(r) + \frac{1}{r^2} \cos \theta_1(r) \sin \theta_1(r) - \Delta(r) \cos \theta_1(r) + \omega \sin \theta_1(r) \end{aligned}$$

mit den Randbedingungen für den isolierten Vortex, formuliert als Randbedingungen für $\theta_1(r)$:

$$\theta_1(0) = 0, \quad \theta_1(\infty) = \arctan\left(\frac{\Delta_0(T)}{\omega}\right)$$

Damit kann nun der Vektor \vec{E}_k für $k = 2, 3, \dots, M$ aufgestellt werden und man erhält für ein äquidistantes Gitter mit Gitterabstand $x_k - x_{k-1} = h$ den Ausdruck

$$\begin{pmatrix} E_{1,k} \\ E_{2,k} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \theta_{1,k} \\ \theta_{2,k} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \theta_{1,k-1} \\ \theta_{2,k-1} \end{pmatrix} - h \cdot \left(-\frac{\theta_{2,k} + \theta_{2,k-1}}{r_k + r_{k-1}} + \begin{pmatrix} \frac{4}{(r_k + r_{k-1})^2} \cos \frac{\theta_{1,k} + \theta_{1,k-1}}{2} \sin \frac{\theta_{1,k} + \theta_{1,k-1}}{2} \\ -\frac{\Delta(r_k) + \Delta(r_{k-1})}{2} \cos \frac{\theta_{1,k} + \theta_{1,k-1}}{2} + \omega \sin \frac{\theta_{1,k} + \theta_{1,k-1}}{2} \end{pmatrix} \right)$$

während für die Ränder des Gitters gilt

$$\begin{pmatrix} 0 \\ E_{2,1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ \theta_{1,1} - 0 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} E_{1,M+1} \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \theta_{1,M} - \arctan \frac{\Delta_0}{\omega} \\ 0 \end{pmatrix}$$

In diesem Fall lauten die $S_{j,n}$ für die inneren Punkte des Gitters $k = 2, 3, \dots, M$

$$\begin{aligned} S_{11}^{(k)} &= \frac{\partial E_{1,k}}{\partial \theta_{1,k-1}} = -1 & S_{12}^{(k)} &= \frac{\partial E_{1,k}}{\partial \theta_{2,k-1}} = -\frac{h}{2} \\ S_{13}^{(k)} &= \frac{\partial E_{1,k}}{\partial \theta_{1,k}} = 1 & S_{14}^{(k)} &= \frac{\partial E_{1,k}}{\partial \theta_{2,k}} = -\frac{h}{2} \end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned} S_{21}^{(k)} &= \frac{\partial E_{2,k}}{\partial \theta_{1,k-1}} = -\frac{4h}{(r_k + r_{k-1})^2} \left[-\frac{1}{2} \sin^2 \frac{\theta_{1,k} + \theta_{1,k-1}}{2} + \frac{1}{2} \cos^2 \frac{\theta_{1,k} + \theta_{1,k-1}}{2} \right] \\ &\quad - \frac{h}{4} [\Delta(r_k) + \Delta(r_{k-1})] \sin \frac{\theta_{1,k} + \theta_{1,k-1}}{2} - \frac{h}{2} \omega \cos \frac{\theta_{1,k} + \theta_{1,k-1}}{2} \\ S_{22}^{(k)} &= \frac{\partial E_{2,k}}{\partial \theta_{2,k-1}} = -1 + \frac{h}{r_k + r_{k-1}} \\ S_{23}^{(k)} &= \frac{\partial E_{2,k}}{\partial \theta_{1,k}} = -\frac{4h}{(r_k + r_{k-1})^2} \left[-\frac{1}{2} \sin^2 \frac{\theta_{1,k} + \theta_{1,k-1}}{2} + \frac{1}{2} \cos^2 \frac{\theta_{1,k} + \theta_{1,k-1}}{2} \right] \\ &\quad - \frac{h}{4} [\Delta(r_k) + \Delta(r_{k-1})] \sin \frac{\theta_{1,k} + \theta_{1,k-1}}{2} - \frac{h}{2} \omega \cos \frac{\theta_{1,k} + \theta_{1,k-1}}{2} \\ S_{24}^{(k)} &= \frac{\partial E_{2,k}}{\partial \theta_{2,k}} = 1 + \frac{h}{r_k + r_{k-1}} \end{aligned}$$

während sich aus der Randbedingung bei r_1 die folgenden Gleichungen ergeben:

$$\begin{aligned} S_{23}^{(1)} &= \frac{\partial E_{2,1}}{\partial \theta_{1,1}} = 1 \\ S_{24}^{(1)} &= \frac{\partial E_{2,1}}{\partial \theta_{2,1}} = 0 \end{aligned}$$

und bei r_M :

$$\begin{aligned} S_{11}^{(M+1)} &= \frac{\partial E_{1,M+1}}{\partial \theta_{1,M}} = 1 \\ S_{12}^{(M+1)} &= \frac{\partial E_{1,M+1}}{\partial \theta_{2,M}} = 0 \end{aligned}$$

Damit kann man nun die folgende Matrix-Gleichung zur Ermittlung der $\Delta y_{n,k}$ aufstellen, wobei die erste und letzte Zeile der Matrix, die nur Nullen enthält, weggelassen wurde (damit

C. Die numerische Implementierung der Usadel-Gleichung

erklärt sich auch die Anordnung der Randbedingungen im Vektor \vec{E}_1 und im Vektor \vec{E}_{M+1})

$$\begin{pmatrix} S_{2,3}^{(1)} & S_{2,4}^{(1)} & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ S_{1,1}^{(2)} & S_{1,2}^{(2)} & S_{1,3}^{(2)} & S_{1,4}^{(2)} & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ S_{2,1}^{(2)} & S_{2,2}^{(2)} & S_{2,3}^{(2)} & S_{2,4}^{(2)} & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & S_{1,1}^{(3)} & S_{1,2}^{(3)} & S_{1,3}^{(3)} & S_{1,4}^{(3)} & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & S_{2,1}^{(3)} & S_{2,2}^{(3)} & S_{2,3}^{(3)} & S_{2,4}^{(3)} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & S_{1,1}^{(M+1)} & S_{1,2}^{(M+1)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta y_{1,1} \\ \Delta y_{2,1} \\ \Delta y_{1,2} \\ \Delta y_{2,2} \\ \Delta y_{1,3} \\ \vdots \\ \Delta y_{2,M} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -E_{2,1}^{(1)} \\ -E_{1,2}^{(2)} \\ -E_{2,2}^{(2)} \\ -E_{1,2}^{(3)} \\ -E_{2,2}^{(3)} \\ \vdots \\ -E_{1,1}^{(M+1)} \end{pmatrix}$$

Dieses Gleichungssystem lässt sich sehr schnell und effizient nach den $\Delta y_{n,k}$ auflösen, da die Matrix $S_{jm}^{(k)}$ nur in der nächsten Umgebung der Hauptdiagonalen von Null verschiedene Einträge besitzt. Bei einer geeigneten Wahl eines Startvektors \vec{y} konvergiert das Verfahren nach wenigen (ein bis vier) Iterationen auf eine Genauigkeit von $\max_{jk} [|E_{jk}|] < 10^{-15}$. Bei der Lösung der Gapgleichung bietet es sich an, bei der höchsten Matsubarafrequenz $\epsilon_n \lesssim \omega_c$ zu starten und hier den Vektor $\theta^{(\alpha,0)}(r)$ durch $\theta^{(\alpha,0)}(r) \approx \sin \frac{\bar{\Delta}^{(\alpha)}(r)}{\epsilon_n}$ als Startwert zu approximieren und für die folgende Berechnung immer das Ergebnis bei der vorangegangenen Matsubarafrequenz als Startwert zu verwenden. Es ist anzumerken, dass für die Fortsetzung auf die reelle Achse durch $\omega \rightarrow -iE + \delta$ sowohl $\tilde{f}^{(\alpha,0)}$ und $g^{(\alpha,0)}$ als auch $\theta^{(\alpha)}(r, \omega)$ komplexwertige Funktionen sind, die eben vorgestellte numerische Methode nichts desto trotz problemlos angewendet werden kann.

Literaturverzeichnis

- [1] J. Nagamatsu, N. Nakagawa, T. Muranaka, Y. Zenitani, and J. Akimitsu, *Nature (London)* **410**, 63 (2001).
- [2] T. Dahm, *Superconductivity of Magnesium Diboride: Theoretical Aspects*, A.V. Narlikar (Ed.) “Frontiers in Superconducting Materials”, Springer Verlag, Berlin (2005).
- [3] C. Buzea and T. Yamashita, *Supercond. Sci. Technol.* **14**, R115-R146 (2001).
- [4] J. Kortus, I. I. Mazin, K. D. Belashchenko, V. P. Antropov, and L. L. Boyer, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 4656 (2001).
- [5] Y. Kong, O. V. Dolgov, O. Jepsen, and O. K. Andersen, *Phys. Rev. B* **64**, 020501(R) (2001).
- [6] K.-P. Bohnen, R. Heid, and B. Renker, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 5771 (2001).
- [7] A. Y. Liu, I. I. Mazin, and J. Kortus, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 087005 (2001).
- [8] H. J. Choi, D. Roundy, H. Sun, M. L. Cohen, and S. G. Louie, *Nature (London)* **418**, 758 (2002); H. J. Choi, D. Roundy, H. Sun, M. L. Cohen, and S. G. Louie, *Phys. Rev. B* **66**, 020513(R) (2002).
- [9] N. Schopohl and K. Scharnberg, *Solid State Comm.* **22**, 371 (1977); N. Schopohl, *Theorie der Zweibandsupraleiter*, Diplomarbeit, Universität Hamburg (1977).
- [10] B. B. Jin, T. Dahm, C. Iniotakis, A. I. Gubin, Eun-Mi Choi, Hyun Jung Kim, Sung-Ik Lee, W. N. Kang, S. F. Wang, Y. L. Zhou, A. V. Pogrebnyakov, J. M. Redwing, X. X. Xi, and N. Klein, *Supercond. Sci. Technol.* **18**(1), L1-L4 (2005).
- [11] P. W. Anderson, in “Proceedings of the 8th Conference on Low Temperature Physics”, (Toronto: University of Toronto Press, 1961); P. W. Anderson, *J. Phys. Chem. Solids* **11**, 26 (1959).
- [12] I. I. Mazin, O. K. Andersen, O. Jepsen, O. V. Dolgov, J. Kortus, A. A. Golubov, A. B. Kuz’menko, and D. van der Marel, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 107002 (2002).
- [13] G. Binnig, A. Baratoff, H. E. Hoenig, and J. G. Bednorz, *Phys. Rev. Lett.* **45**, 1352 (1980).
- [14] H. Suhl, B. T. Matthias, and L. R. Walker, *Phys. Rev. Lett.* **3**, 552 (1959).
- [15] P. Szabó, P. Samuely, J. Kacmarcik, T. Klein, J. Marcus, D. Fruchart, S. Miraglia, C. Marcenat, A. G. M. Jansen, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 137005 (2001).
- [16] S. Tsuda, T. Yokoya, T. Kiss, Y. Takano, H. Kito, H. Ihara, and S. Shin, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 177006 (2001).

LITERATURVERZEICHNIS

- [17] F. Bouquet, R. A. Fisher, N. E. Phillips, D. G. Hinks, and J. D. Jorgensen, Phys. Rev. Lett. **87**, 047001 (2001).
- [18] L. Lyard, P. Samuley, P. Szabo, T. Klein, C. Marcenat, L. Paulius, K. H. P. Kim, C. U. Jung, H.-S. Lee, B. Kang, S. Choi, S.-I. Lee, J. Marcus, S. Blanchard, A. G. M. Jansen, U. Welp, G. Karapetrov, and W. K. Kwok, Phys. Rev. B **66**, 180502(R) (2002).
- [19] T. Dahm and N. Schopohl, Phys. Rev. Lett. **91**, 017001 (2003).
- [20] L. P. Gorkov, Zh. Eksp. Teor. Fiz. **34**, 735 (1958); Sov. Phys. JETP **7**, 505 (1958).
- [21] G. Eilenberger, Z. Phys. **214**, 195 (1968).
- [22] A. I. Larkin and Yu. N. Ovchinnikov, Zh. Eksp. Fiz. **55**, 2262 (1968); Sov. Phys. JETP **28**, 1200 (1969).
- [23] A. A. Abrikosov, Zh. Eksp. Teor. Fiz. **32**, 1442 (1957); Sov. Phys. JETP **5**, 1174 (1957).
- [24] T. Dahm, S. Graser, C. Iniotakis, and N. Schopohl, Phys. Rev. B **66**, 144515 (2002).
- [25] N. Schopohl, *Excitation Spectrum of Conventional and Unconventional Pairing Symmetry Superconductors Averaged over Unit Cell of Vortex Lattice*, nicht veröffentlicht (2001).
- [26] S. Graser, *Zustandsdichte und Kernspinrelaxationsrate im Vortexzustand von unkonventionellen Supraleitern*, Diplomarbeit, Universität Tübingen (2002).
- [27] U. Brandt, W. Pesch, and L. Tewordt, Z. Physik **201**, 209 (1967).
- [28] W. Pesch, Z. Physik B **21**, 263 (1975).
- [29] S. Graser, T. Dahm, and N. Schopohl, Phys. Rev. B **69**, 014511 (2004).
- [30] N. Schopohl, in *Quasiclassical Theory of Superconductivity*, Proceedings of the Workshop on “Quasiclassical Methods of Superconductivity”, Verditz, Austria, 1996, edited by D. Rainer and J. A. Sauls (1998).
- [31] N. Schopohl and K. Maki, Phys. Rev. B **52**, 490 (1995).
- [32] K. Usadel, Phys. Rev. Lett. **25**, 507 (1970).
- [33] N. Schopohl, *The Upper Critical Field $B_{c2}(T)$ in the Dirty Limit*, nicht veröffentlicht (2003).
- [34] A. Gurevich, Phys. Rev. B **67**, 184515 (2003).
- [35] M. D. Johannes, I. I. Mazin, and C. A. Howells, cond-mat/0510390 (2006).
- [36] I. Eremin, D. Manske, C. Joas, and K. H. Bennemann, Europhys. Lett. **58** (6), 871 (2002).
- [37] J. Ruvalds, C. T. Rieck, S. Tewari, and J. Thoma, Phys. Rev. B **51**, 3797 (1995).
- [38] F. Bouquet, Y. Wang, I. Sheikin, T. Plackowski, and A. Junod, Phys. Rev. Lett. **89**, 257001 (2002).
- [39] T. Dahm, S. Graser, and N. Schopohl, Physica C **408-410**, 336 (2004).

-
- [40] M. Angst, R. Puzniak, A. Wisniewski, J. Jun, S. M. Kazakov, J. Karpinski, J. Roos, and H. Keller, Phys. Rev. Lett. **88**, 167004 (2002).
- [41] A. A. Golubov and A. E. Koshelev, Phys. Rev. **B 68**, 104503 (2003).
- [42] Heon-Jung Kim, Hyun-Sook Lee, Byeongwon Kang, Woon-Ha Yim, Younghun Jo, Myung-Hwa Jung, and Sung-Ik Lee, cond-mat/0512242 (2005).
- [43] L. Kramer and W. Pesch, Z. Phys. **269**, 59 (1974).
- [44] R. Watts-Tobin, L. Kramer, and W. Pesch, J. Low Temp. Phys. **17**, 71 (1974)
- [45] U. Klein, Phys. Rev. **B 41**, 4819 (1990).
- [46] C. Caroli, P. G. de Gennes, and J. Matricon, Phys. Lett. **9**, 307 (1964).
- [47] J. Bardeen, R. Kümmel, A. E. Jacobs, and L. Tewordt, Phys. Rev. **187**, 556 (1969).
- [48] D. Rainer, J. A. Sauls, and D. Waxman, Phys. Rev. **B 54**, 10094 (1996).
- [49] M. Eschrig, Vortrag bei der Frühjahrstagung der Deutschen Physikalischen Gesellschaft, Berlin (2005).
- [50] G. Eilenberger, Z. Phys. **182**, 427 (1965).
- [51] N. Schopohl and L. Tewordt, J. Low Temp. Phys. **41**, 305 (1980).
- [52] M. E. Zhitomirsky and V.-H. Dao, Phys. Rev. **B 69**, 054508 (2004).
- [53] R. Laiho, E. Lähderanta, M. Safonchik, and K. B. Traito, Phys. Rev. **B 71**, 024521 (2005).
- [54] M. R. Eskildsen, M. Kugler, S. Tanaka, J. Jun, S. M. Kazakov, J. Karpinski, and Ø. Fischer, Phys. Rev. Lett. **89**, 187003 (2002).
- [55] M. R. Eskildsen, M. Kugler, G. Levy, S. Tanaka, J. Jun, S. M. Kazakov, J. Karpinski, and Ø. Fischer, Physica **C 385**, 169 (2003).
- [56] F. Gygi and M. Schlüter, Phys. Rev. **B 43**, 7609 (1991).
- [57] G. E. Volovik, Zh. Eksp. Teor. Fiz. **58**, 444 (1993); JETP Lett. **58**, 455 (1993).
- [58] M. Ichioka, N. Hayashi, N. Enomoto, and K. Machida, Phys. Rev. **B 53**, 15316 (1996).
- [59] N. Hayashi, Y. Kato, and M. Sigrist, J. Low Temp. Phys. **139**, 79 (2005).
- [60] Y. Kato and N. Hayashi, J. Phys. Soc. Jpn. **70**, 3368 (2001).
- [61] A. Gumann, S. Graser, T. Dahm, and N. Schopohl, Phys. Rev. **B 73**, 104506 (2006).
- [62] A. Gumann, *Quasiteilchenspektrum in der Umgebung eines Abrikosov-Vortex in einem Zwei-Band-Supraleiter*, Diplomarbeit, Universität Tübingen (2006).
- [63] E. V. Thuneberg, Phys. Rev. Lett. **56**, 359 (1986).
- [64] K. Tanaka, D. F. Agterberg, J. Kopu, and M. Eschrig, cond-mat/0512118 (2005).
- [65] C. C. Tsuei and J. R. Kirtley, Rev. Mod. Phys. **72**, 969 (2000).
- [66] C.-R. Hu, Phys. Rev. Lett. **72**, 1526 (1994).

LITERATURVERZEICHNIS

- [67] Y. Tanaka and S. Kashiwaya, Phys. Rev. Lett. **74**, 3451 (1995).
- [68] L. J. Buchholtz, M. Palumbo, D. Rainer and J. A. Sauls, J. Low Temp. Phys. **101**, 1099 (1995).
- [69] A. Shelankov and M. Ozana, Phys. Rev. B **61**, 7077 (2000).
- [70] C. Iniotakis, S. Graser, T. Dahm, and N. Schopohl, Phys. Rev. B **71**, 214508 (2005).
- [71] M. Fogelström, D. Rainer, and J. A. Sauls, Phys. Rev. Lett. **79**, 281 (1997).
- [72] M. Covington, M. Aprili, E. Paraoanu, L. H. Greene, F. Xu, J. Zhu, and C. A. Mirkin, Phys. Rev. Lett **79**, 277 (1997).
- [73] M. Aprili, E. Badica, and L. H. Greene, Phys. Rev. Lett. **83**, 4630 (1999).
- [74] Y. Dagan and G. Deutscher, Phys. Rev. Lett. **87**, 177004 (2001).
- [75] O. V. Dolgov and N. Schopohl, Phys. Rev. B **61**, 12389 (2000).
- [76] S. Graser, C. Iniotakis, T. Dahm, and N. Schopohl, Phys. Rev. Lett. **93**, 247001 (2004).
- [77] C. Iniotakis, *Gebundene Andreev-Zustände in d-Wellen-Supraleitern: Einfluß von Grenzflächengeometrie und Vortices*, Dissertation, Universität Tübingen (2006).
- [78] T. A. Driscoll and L. N. Trefethen, *Schwarz-Christoffel Mapping* (Cambridge University Press, 2002).
- [79] T. A. Driscoll, ACM Trans. Math. Softw. **22** (2), 168 (1996); Algorithm 756.
- [80] C. Iniotakis, unveröffentlicht.
- [81] M. Eschrig, J. Kopu, A. Konstandin, J. C. Cuevas, M. Fogelström, and G. Schön, *Advances in Solid State Physics*, Vol. **44**, pp. 533-546, Springer Verlag, Heidelberg (2004).
- [82] M. G. Vavilov and A. I. Larkin, Phys. Rev. B **67**, 115335 (2003).
- [83] A. A. Golubov and U. Hartmann, Phys. Rev. Lett. **72**, 3602 (1994).
- [84] A. E. Koshelev and A. A. Golubov, Phys. Rev. Lett. **90**, 177002 (2003).
- [85] William H. Press, Brian P. Flannery, Saul A. Teukolsky, William T. Vetterling, *Numerical Recipes in C: The Art of Scientific Computing*, Cambridge University Press, 2 edition (1992); auch online erhältlich unter: "www.library.cornell.edu/nr/cbookcpdf.html".

Danksagung

Ich danke Herrn Professor Dr. Nils Schopohl für die hervorragende Betreuung meiner Dissertation, für zahlreiche Anregungen und Diskussionen, sowie seine vielfältigen Bemühungen, mir die unterschiedlichen Facetten der theoretischen Physik aufzuzeigen und mir neue Blickwinkel zu eröffnen.

Ich danke Herrn Privatdozent Dr. Thomas Dahm für die uneingeschränkte Unterstützung, die ich von ihm während meiner Dissertation erhalten habe, für die ausgezeichneten fachlichen Ratschläge und Diskussionen, sowie für die unendliche Geduld, mit der er sich immer meinen kleinen und großen Problemen angenommen hat.

Ganz besonderem Dank bin ich Herrn Dr. Christian Iniotakis verpflichtet, der mich seit Beginn meines Studiums durch Höhen und Tiefen begleitet hat, der mir durch zahllose Gespräche geholfen hat, meinen Horizont zu erweitern und der mir immer mit Rat und Tat zur Seite stand.

Der gesamten Arbeitsgruppe danke ich für die außergewöhnlich gute Arbeitsatmosphäre, sowie für die vielen Ratschläge und Diskussionen. Zudem danke ich allen meinen akademischen Lehrern für die physikalische und mathematische Ausbildung, die es mir erst ermöglicht hat, meine Dissertation zu einem guten Ende zu bringen.

Schließlich gebührt mein außerordentlicher Dank meiner Verlobten Anne-Lise Péco, die mich während meines Studiums und meiner Promotion immer vorbehaltlos unterstützt hat, die auch in den schwierigsten Zeiten immer zu mir gehalten und die alle meine Launen klaglos ertragen hat.