Symmetry of the superconducting gap

Bijan Chokoufe Nejad

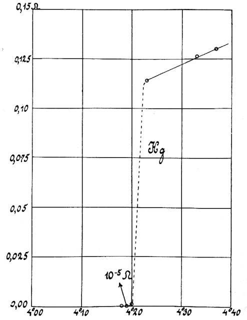
Oberseminar: Fortgeschrittene Themen der Theoretischen Physik

Symmetrien in der Festkörperphysik

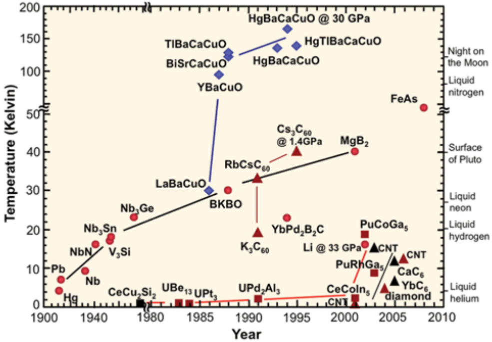
1. August 2012

Motivation

1911 Onnes



Geschichte der Supraleitung

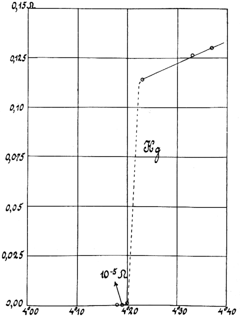


Theoretische und experimentelle Herausforderung.

Supraleitende Materialien: Metalle, ’86 Cuprates, ’08 Pnictides

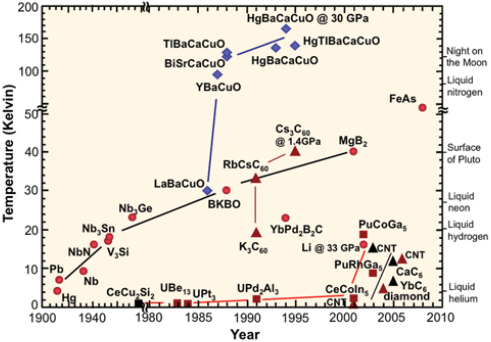
Motivation

1911 Onnes



→

Geschichte der Supraleitung



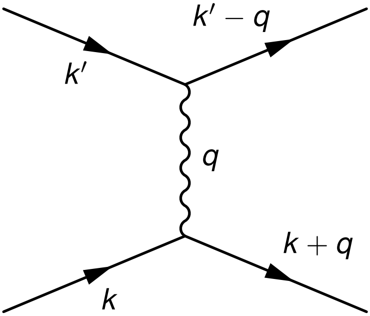
Theoretische und experimentelle Herausforderung.

Supraleitende Materialien: Metalle, ’86 Cuprates, ’08 Pnictides

Inhalt

Konventionelle Supraleiter

Elektron-Phonon Wechselwirkung



Startpunkt: Quantisiertes Phononenfeld

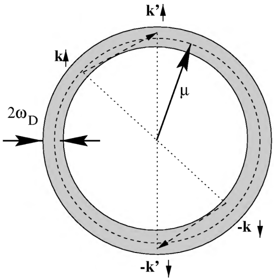
$$\phi(\boldsymbol{x}, t) = \text{const.} \times \sum_{\boldsymbol{k}} \left(a_k^\dagger e^{i(\omega_k t - \boldsymbol{k}\boldsymbol{x})} + a_k e^{-i(\omega_k t - \boldsymbol{k}\boldsymbol{x})} \right)$$

In niedrigster Ordnung kann man mit der 2-Punkts-Greenfunktion

$$iG(x - x') = \left\langle 0 \,\middle|\, T\phi(x)\phi(x') \,\middle|\, 0 \right\rangle$$

eine effektive, attraktive Wechselwirkung für die Elektronen erhalten:

$$\boxed{V_{\text{eff}} = -V_0 \Theta(\omega_D - \omega)}$$



Schale um die Fermikugel, in die gestreut werden kann: $\omega_D \propto M^{-1/2}$
$\rightarrow$ Erklärung des Isotopen-Effekts ($T_c \propto M^{-\alpha}$) einiger Supraleiter.

Im *Cooper-Problem* zweier Elektronen:

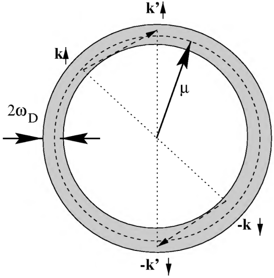
$$\Psi(\boldsymbol{r}_1, \sigma_1, \boldsymbol{r}_2, \sigma_2) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{K}_{\mathrm{cm}}\boldsymbol{R}_{\mathrm{cm}}} \varphi(\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2) \phi^{\mathrm{spin}}_{\sigma_1 \sigma_2}$$

zeigt sich, dass im Grundzustand $\boldsymbol{K}_{\mathrm{cm}} = 0$. Ferner Triplett oder Singulett im Spin möglich. Die meisten Supraleiter sind Spin-Singulett. Mittels $\varphi(\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2) = \sum_{\boldsymbol{k}} \varphi_{\boldsymbol{k}} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}(\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2)}$ und

Über $H\Psi \equiv (H_0 + V_{\mathrm{eff}}) = E\Psi \rightarrow \ldots \rightarrow$

Selbstkonsistenz-Gleichung: $1 = -V_0 \sum_{\boldsymbol{k}} \frac{1}{E - 2\epsilon(\boldsymbol{k})}$

Cooper-Instabilität



Schale um die Fermikugel, in die gestreut werden kann: $\omega_D \propto M^{-1/2}$ $\rightarrow$ Erklärung des Isotopen-Effekts ($T_c \propto M^{-\alpha}$) einiger Supraleiter.

Im *Cooper-Problem* zweier Elektronen:

$$\Psi(\boldsymbol{r}_1, \sigma_1, \boldsymbol{r}_2, \sigma_2) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{K}_{\mathrm{cm}}\boldsymbol{R}_{\mathrm{cm}}} \varphi(\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2) \phi^{\mathrm{spin}}_{\sigma_1\sigma_2}$$

zeigt sich, dass im Grundzustand $\boldsymbol{K}_{\mathrm{cm}} = 0$. Ferner Triplett oder Singulett im Spin möglich. Die meisten Supraleiter sind Spin-Singulett. Mittels $\varphi(\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2) = \sum_{\boldsymbol{k}} \varphi_{\boldsymbol{k}} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}(\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2)}$ und

$$\text{Über} \quad H\Psi \equiv (H_0 + V_{\mathrm{eff}}) = E\Psi \rightarrow \ldots \rightarrow$$

$$\text{Selbstkonsistenz-Gleichung: } 1 = -V_0 \sum_{\boldsymbol{k}} \frac{1}{E - 2\epsilon(\boldsymbol{k})}$$

Im Kontinuumslimes mit der Zustandsdichte $g(\epsilon)$

$$\to 1 = -V_0 \int_0^{\omega_D} \mathrm{d}\epsilon \; g(\epsilon) \frac{1}{E - 2\epsilon}$$

Für schwache Kopplungen existiert immer eine gebundene Lösung:

$$-E \approx 2\omega_D \mathrm{e}^{-2/(V_0 g(\epsilon_F))}$$

Somit ist die gefüllte Fermi-Kugel nicht der Grundzustand: Cooper-Instabilität.

Der Grundzustand sollte solche Cooper-Paare enthalten: Paarerzeugung $P_{\boldsymbol{k}}^\dagger = c_{\boldsymbol{k}\uparrow}^\dagger c_{-\boldsymbol{k}\downarrow}^\dagger$

Cooper-Instabilität

$1 = -V_0 \sum_{\boldsymbol{k}} \frac{1}{E - 2\epsilon(\boldsymbol{k})}$

Im Kontinuumslimes mit der Zustandsdichte $g(\epsilon)$

$$\to 1 = -V_0 \int_0^{\omega_D} \mathrm{d}\epsilon \, g(\epsilon) \frac{1}{E - 2\epsilon}$$

Für schwache Kopplungen existiert immer eine gebundene Lösung:

$$-E \approx 2\omega_D \mathrm{e}^{-2/(V_0 g(\epsilon_F))}$$

Somit ist die gefüllte Fermi-Kugel nicht der Grundzustand: Cooper-Instabilität.

Der Grundzustand sollte solche Cooper-Paare enthalten: Paarerzeugung $P^\dagger_{\boldsymbol{k}} = c^\dagger_{\boldsymbol{k}\uparrow} c^\dagger_{-\boldsymbol{k}\downarrow}$

Mean-field Theorie

In zweiter Quantisierung lautet das Vielteilchen-Problem

$$H = \sum_{\boldsymbol{k}\sigma} \epsilon_{\boldsymbol{k}} n_{\boldsymbol{k}\sigma} - V_0 \sum_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'} P^\dagger_{\boldsymbol{k}'} P_{\boldsymbol{k}}$$

Angenommen, die Paarerzeugung/-vernichtung erlangt einen endlichen Erwartungswert:

$$\Delta = V_0 \sum_{\boldsymbol{k}} \langle \Omega_S | P_{\boldsymbol{k}} | \Omega_S \rangle$$

$$\bar{\Delta} = V_0 \sum_{\boldsymbol{k}} \left\langle \Omega_S \middle| P^\dagger_{\boldsymbol{k}} \middle| \Omega_S \right\rangle$$

Damit wird Δ zum Ordnungsparameter und der GZ $|\Omega_s\rangle$ kann keine eindeutige Teilchenanzahl haben.

Mean-field Theorie

In zweiter Quantisierung lautet das Vielteilchen-Problem

$$H = \sum_{\boldsymbol{k}\sigma} \epsilon_{\boldsymbol{k}} n_{\boldsymbol{k}\sigma} - V_0 \sum_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'} P^\dagger_{\boldsymbol{k}'} P_{\boldsymbol{k}}$$

Angenommen, die Paarerzeugung/-vernichtung erlangt einen endlichen Erwartungswert:

$$\Delta = V_0 \sum_{\boldsymbol{k}} \langle \Omega_S \,|\, P_{\boldsymbol{k}} \,| \Omega_S \rangle$$

$$\bar{\Delta} = V_0 \sum_{\boldsymbol{k}} \left\langle \Omega_S \,\middle|\, P^\dagger_{\boldsymbol{k}} \,\middle| \Omega_S \right\rangle$$

Damit wird Δ zum Ordnungsparameter und der GZ $|\Omega_s\rangle$ kann keine eindeutige Teilchenanzahl haben.

Eine Entwicklung um diesen Mean-field-Wert

$$\sum_{\boldsymbol{k}} P_{\boldsymbol{k}} = \frac{\Delta}{V_0} + \underbrace{\left(\sum_{\boldsymbol{k}} P_k - \frac{\Delta}{V_0}\right)}_{\text{klein}}$$

gibt in linearer Ordnung in $P_{\boldsymbol{k}}$ und unter Berücksichtigung des chemischen Potentials ($\xi_{\boldsymbol{k}} = \epsilon_{\boldsymbol{k}} - \mu$)

$$H - \mu N \approx \sum_{\boldsymbol{k}} \left[\xi_k (n_{\boldsymbol{k}\uparrow} + n_{\boldsymbol{k}\downarrow}) - \left(\bar{\Delta} P_{\boldsymbol{k}} + \Delta P^\dagger_{\boldsymbol{k}}\right)\right] - \frac{|\Delta|^2}{V_0}\,.$$

Dies ist der Bogoliubov-de Gennes (oder Gor'kov) Hamiltonian.
In Nambu Spinor Darstellung:

$$\Psi^\dagger_{\boldsymbol{k}} = \left(c^\dagger_{\boldsymbol{k}\uparrow}, c_{-\boldsymbol{k}\downarrow}\right), \quad \Psi_{\boldsymbol{k}} = \begin{pmatrix} c_{\boldsymbol{k}\uparrow} \\ c^\dagger_{-\boldsymbol{k}\downarrow} \end{pmatrix}$$

Eine Entwicklung um diesen Mean-field-Wert

$$\sum_{\boldsymbol{k}} P_{\boldsymbol{k}} = \frac{\Delta}{V_0} + \underbrace{\left(\sum_{\boldsymbol{k}} P_k - \frac{\Delta}{V_0} \right)}_{\text{klein}}$$

gibt in linearer Ordnung in $P_{\boldsymbol{k}}$ und unter Berücksichtigung des chemischen Potentials ($\xi_{\boldsymbol{k}} = \epsilon_{\boldsymbol{k}} - \mu$)

$$H - \mu N \approx \sum_{\boldsymbol{k}} \left[\xi_k (n_{\boldsymbol{k}\uparrow} + n_{\boldsymbol{k}\downarrow}) - \left(\bar{\Delta} P_{\boldsymbol{k}} + \Delta P^\dagger_{\boldsymbol{k}} \right) \right] - \frac{|\Delta|^2}{V_0} \,.$$

Dies ist der Bogoliubov-de Gennes (oder Gor'kov) Hamiltonian.
In Nambu Spinor Darstellung:

$$\Psi^\dagger_{\boldsymbol{k}} = \left(c^\dagger_{\boldsymbol{k}\uparrow}, c_{-\boldsymbol{k}\downarrow} \right) , \quad \Psi_{\boldsymbol{k}} = \begin{pmatrix} c_{\boldsymbol{k}\uparrow} \\ c^\dagger_{-\boldsymbol{k}\downarrow} \end{pmatrix}$$

Mean-field Lösung

$$H - \mu N = \sum_{\boldsymbol{k}} \Psi_{\boldsymbol{k}}^{\dagger} \begin{pmatrix} \xi_{\boldsymbol{k}} & -\Delta \\ -\bar{\Delta} & -\xi_{\boldsymbol{k}} \end{pmatrix} \Psi_{\boldsymbol{k}} + \sum_{\boldsymbol{k}} \xi_{\boldsymbol{k}} - \frac{|\Delta|^2}{V_0}$$

Wir diagonalisieren mittels unitärer Transformation:

$$\begin{pmatrix} \alpha_{\boldsymbol{k}\uparrow} \\ \alpha_{-\boldsymbol{k}\downarrow}^{\dagger} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\theta_{\boldsymbol{k}} & \sin\theta_{\boldsymbol{k}} \\ \sin\theta_{\boldsymbol{k}} & -\cos\theta_{\boldsymbol{k}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{\boldsymbol{k}\uparrow} \\ c_{-\boldsymbol{k}\downarrow}^{\dagger} \end{pmatrix} \equiv U_{\boldsymbol{k}} \Psi_{\boldsymbol{k}},$$

setzen $\cos(2\theta_{\boldsymbol{k}}) = \xi_{\boldsymbol{k}}/E_{\boldsymbol{k}}, \sin(2\theta_{k}) = -\Delta/E_{\boldsymbol{k}}$ und erhalten:

$$H - \mu N = \sum_{\boldsymbol{k}\sigma} E_{\boldsymbol{k}} \alpha_{\boldsymbol{k}\sigma}^{\dagger} \alpha_{\boldsymbol{k}\sigma} + \text{const.}$$

mit $\quad E_{\boldsymbol{k}} = \sqrt{\Delta^2 + \xi_{\boldsymbol{k}}^2}$

Mean-field Lösung

$$H - \mu N = \sum_{\boldsymbol{k}} \Psi^\dagger_{\boldsymbol{k}} \begin{pmatrix} \xi_{\boldsymbol{k}} & -\Delta \\ -\bar{\Delta} & -\xi_{\boldsymbol{k}} \end{pmatrix} \Psi_{\boldsymbol{k}} + \sum_{\boldsymbol{k}} \xi_{\boldsymbol{k}} - \frac{|\Delta|^2}{V_0}$$

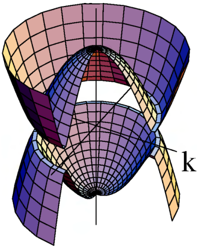
Wir diagonalisieren mittels unitärer Transformation:

$$\begin{pmatrix} \alpha_{\boldsymbol{k}\uparrow} \\ \alpha^\dagger_{-\boldsymbol{k}\downarrow} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\theta_{\boldsymbol{k}} & \sin\theta_{\boldsymbol{k}} \\ \sin\theta_{\boldsymbol{k}} & -\cos\theta_{\boldsymbol{k}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{\boldsymbol{k}\uparrow} \\ c^\dagger_{-\boldsymbol{k}\downarrow} \end{pmatrix} \equiv U_{\boldsymbol{k}} \Psi_{\boldsymbol{k}},$$

setzen $\cos(2\theta_{\boldsymbol{k}}) = \xi_{\boldsymbol{k}}/E_{\boldsymbol{k}}, \sin(2\theta_k) = -\Delta/E_{\boldsymbol{k}}$ und erhalten:

$$H - \mu N = \sum_{\boldsymbol{k}\sigma} E_{\boldsymbol{k}} \alpha^\dagger_{\boldsymbol{k}\sigma} \alpha_{\boldsymbol{k}\sigma} + \text{const.}$$

mit $\quad E_{\boldsymbol{k}} = \sqrt{\Delta^2 + \xi^2_{\boldsymbol{k}}}$



Die Quasiteilchen, die durch $\alpha^\dagger_{\boldsymbol{k}\sigma}$ erzeugt werden, haben eine Gap Δ, was elementare Anregungen bei niedrigen Temp. erschwert.

Für den GZ muss für alle $\boldsymbol{k}, \sigma$ gelten: $\alpha_{\boldsymbol{k}\sigma} |\Omega_s\rangle = 0$, was wegen $[\alpha_a, \alpha_b]_+ = 0$ genau erfüllt wird, wenn

$$
\begin{aligned}
\rightarrow |\Omega_s\rangle &\equiv \prod_{\boldsymbol{k}} \alpha_{\boldsymbol{k}\uparrow}\alpha_{-\boldsymbol{k}\downarrow} |0\rangle \\
&= \prod_{\boldsymbol{k}} \left(\cos\theta_{\boldsymbol{k}} c_{\boldsymbol{k}\uparrow} + \sin\theta_{\boldsymbol{k}} c^\dagger_{-\boldsymbol{k}\downarrow}\right)\left(\sin\theta_{\boldsymbol{k}} c^\dagger_{\boldsymbol{k}\uparrow} - \cos\theta_{\boldsymbol{k}} c_{-\boldsymbol{k}\downarrow}\right) |0\rangle \\
&\propto \prod_{\boldsymbol{k}} \left(\cos\theta_{\boldsymbol{k}} - \sin\theta_{\boldsymbol{k}} P^\dagger_{\boldsymbol{k}}\right) |0\rangle
\end{aligned}
$$

wobei $|0\rangle$ das Vakuum darstellt. Somit haben wir auf natürliche Weise die BCS Wellenfunktion erhalten.
Für $\Delta \rightarrow 0$ geht $|\Omega_s\rangle \rightarrow |0\rangle$.

BCS Wellenfunktion

Die Quasiteilchen, die durch $\alpha^\dagger_{\boldsymbol{k}\sigma}$ erzeugt werden, haben eine Gap Δ, was elementare Anregungen bei niedrigen Temp. erschwert.

Für den GZ muss für alle $\boldsymbol{k}, \sigma$ gelten: $\alpha_{\boldsymbol{k}\sigma} |\Omega_s\rangle = 0$, was wegen $[\alpha_a, \alpha_b]_+ = 0$ genau erfüllt wird, wenn

$$
\begin{aligned}
\rightarrow |\Omega_s\rangle &\equiv \prod_{\boldsymbol{k}} \alpha_{\boldsymbol{k}\uparrow}\alpha_{-\boldsymbol{k}\downarrow} |0\rangle \\
&= \prod_{\boldsymbol{k}} \left(\cos\theta_{\boldsymbol{k}} c_{\boldsymbol{k}\uparrow} + \sin\theta_{\boldsymbol{k}} c^\dagger_{-\boldsymbol{k}\downarrow}\right) \left(\sin\theta_{\boldsymbol{k}} c^\dagger_{\boldsymbol{k}\uparrow} - \cos\theta_{\boldsymbol{k}} c_{-\boldsymbol{k}\downarrow}\right) |0\rangle \\
&\propto \prod_{\boldsymbol{k}} \left(\cos\theta_{\boldsymbol{k}} - \sin\theta_{\boldsymbol{k}} P^\dagger_{\boldsymbol{k}}\right) |0\rangle
\end{aligned}
$$

wobei $|0\rangle$ das Vakuum darstellt. Somit haben wir auf natürliche Weise die BCS Wellenfunktion erhalten.
Für $\Delta \rightarrow 0$ geht $|\Omega_s\rangle \rightarrow |0\rangle$.

Nun können wir selbstkonsistent Δ bestimmen:

$$\Delta = V_0 \sum_{\boldsymbol{k}} \langle \Omega_S \,|\, P_{\boldsymbol{k}} \,| \Omega_S \rangle = -V_0 \sum_{\boldsymbol{k}} \sin\theta_{\boldsymbol{k}} \cos\theta_{\boldsymbol{k}}$$
$$= \frac{V_0}{2} \sum_{\boldsymbol{k}} \frac{\Delta}{\sqrt{\Delta^2 + \xi_{\boldsymbol{k}}^2}} = \frac{V_0 \Delta}{2} \int_{-\omega_D}^{\omega_D} \frac{g(E)\mathrm{d}E}{\sqrt{\Delta^2 + E^2}}$$

unter Annahme einer konstanten Zustandsdichte

$$\Delta \approx \Delta V_0 g(E_f) \sinh^{-1}(\omega_D/\Delta)$$
$$\Rightarrow \Delta = \frac{\omega_D}{\sinh(1/V_0 g(E_f))} \approx 2\omega_D e^{-1/(V_0 g(E_f))}$$

Analog zur Bindungsenergie eines Cooper-Paares.

Gap Gleichung

$\sin(2\theta_k) = -\Delta/E_{\boldsymbol{k}}$

Nun können wir selbstkonsistent Δ bestimmen:

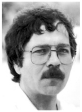
$$\Delta = V_0 \sum_{\boldsymbol{k}} \langle \Omega_S \,|\, P_{\boldsymbol{k}} \,|\Omega_S\rangle = -V_0 \sum_{\boldsymbol{k}} \sin\theta_{\boldsymbol{k}} \cos\theta_{\boldsymbol{k}}$$
$$= \frac{V_0}{2} \sum_{\boldsymbol{k}} \frac{\Delta}{\sqrt{\Delta^2 + \xi_{\boldsymbol{k}}^2}} = \frac{V_0 \Delta}{2} \int_{-\omega_D}^{\omega_D} \frac{g(E)\mathrm{d}E}{\sqrt{\Delta^2 + E^2}}$$

unter Annahme einer konstanten Zustandsdichte

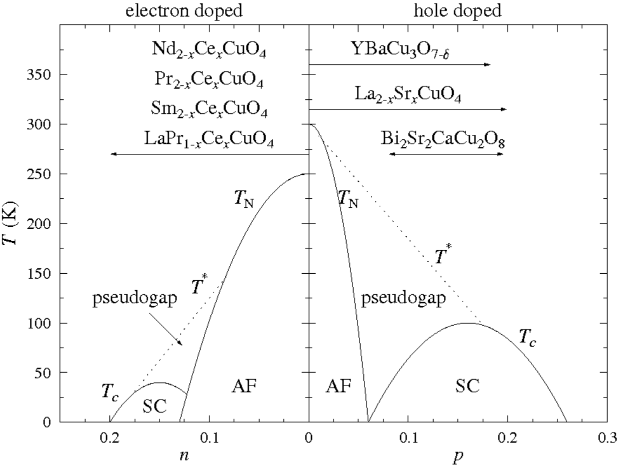
$$\Delta \approx \Delta V_0 g(E_f) \sinh^{-1}(\omega_D/\Delta)$$
$$\Rightarrow \Delta = \frac{\omega_D}{\sinh(1/V_0 g(E_f))} \approx 2\omega_D e^{-1/(V_0 g(E_f))}$$

Analog zur Bindungsenergie eines Cooper-Paares.

High-T_c Supraleiter: Cuprates

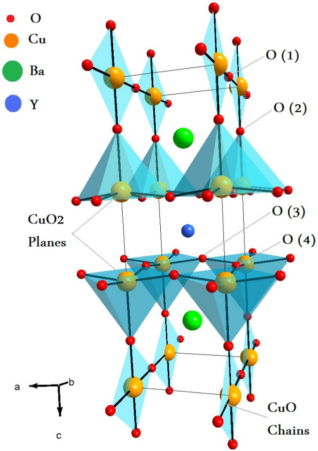



Entdeckung 1986: Bednorz & Müller in Ba-La-Cu-O



Bislang unklar, welche Wechselwirkung dominiert.

Mögliche Wechselwirkungen



Annahme: Pairing findet in der CuO_2-Ebene statt.

Kann durch Hubbard-Modell beschrieben werden:

$$H = -\sum_{\langle ij \rangle s} t \left(c^\dagger_{is} c_{js} + c^\dagger_{js} c_{is} \right) + \sum_i U n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}$$

$$= \text{hopping} \qquad + \quad \text{onsite repulsion}$$

Interlayer hopping ist hier nur schwache Kopplung.

Mögliche Wechselwirkungen

- Elektron-Phonon-WW
- Charge-Transfer Modelle
- Antiferromagnetische Modelle
- Stark korrelierte semion gauge Modelle
- Interlayer hopping als pairing Mechanismus
- Anyonic pairing
- ...

Schon bei s-wave Supraleitern musste der mikroskopische Ursprung des Ordnungsparameters nicht bekannt sein.

Δ entspricht der Anregungsenergie für Eigenzustände in der SC Phase -> messbar.

Die onsite repulsion U macht ein konstantes Δ unmöglich. Berücksichtigung der möglichen $\boldsymbol{k}$-Abhängigkeit:

$$\Delta \to \Delta_{\boldsymbol{k}}, \quad \Delta_{\boldsymbol{k}} = -\frac{1}{2}\sum_{\boldsymbol{k}'} V_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'}\frac{\Delta_{\boldsymbol{k}'}}{E_{\boldsymbol{k}'}}$$

Symmetrie der Wellenfunktion erzwingt im Spin-Singulett

$$\Delta_{\boldsymbol{k}} = \Delta_{-\boldsymbol{k}}$$

($\Delta_{\boldsymbol{k}} = \varphi_{\boldsymbol{k}} E_{\boldsymbol{k}}$ und $\varphi(\boldsymbol{x}_1 - \boldsymbol{x}_2)$ ist Relativkoord.-Wellenfkt.)

Verwende Gruppentheorie, um mögliche $\boldsymbol{k}$-Abhängigkeiten zu ermitteln.

Where we stand

Schon bei *s*-wave Supraleitern musste der mikroskopische Ursprung des Ordnungsparameters nicht bekannt sein.

Δ entspricht der Anregungsenergie für Eigenzustände in der SC Phase -> messbar.

Die onsite repulsion U macht ein konstantes Δ unmöglich. Berücksichtigung der möglichen $\boldsymbol{k}$-Abhängigkeit:

$$\Delta \to \Delta_{\boldsymbol{k}}, \quad \Delta_{\boldsymbol{k}} = -\frac{1}{2} \sum_{\boldsymbol{k}'} V_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'} \frac{\Delta_{\boldsymbol{k}'}}{E_{\boldsymbol{k}'}}$$

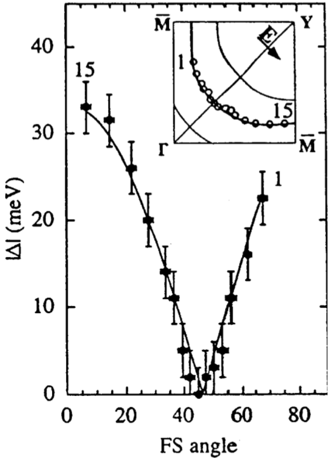
Symmetrie der Wellenfunktion erzwingt im Spin-Singulett

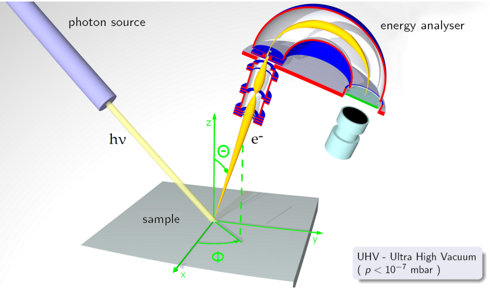
$$\Delta_{\boldsymbol{k}} = \Delta_{-\boldsymbol{k}}$$

($\Delta_{\boldsymbol{k}} = \varphi_{\boldsymbol{k}} E_{\boldsymbol{k}}$ und $\varphi(\boldsymbol{x}_1 - \boldsymbol{x}_2)$ ist Relativkoord.-Wellenfkt.)

Verwende Gruppentheorie, um mögliche $\boldsymbol{k}$-Abhängigkeiten zu ermitteln.

Angle Resolved PhotoEmission Spectroscopy





ARPES Messung von $Bi_2Sr_2CaCu_2O_{8+x}$. Inset zeigt Position im $\boldsymbol{k}$-Raum.

Fit mit $|\Delta_{\boldsymbol{k}}| \propto \cos k_x - \cos k_y$ (*d*-wave).

Symmetrie des Gaps

Zuvor hatten wir: $V_{\text{eff}} = -V_0 \Theta(\omega_D - \omega)$. Hier wurde die Frequenzabhängigkeit und die Coulomb-WW vernachlässigt. Eigentlich:

$$V_{\text{eff}} = \frac{-2\,|g_q|^2\,\omega_q}{\omega_m^2 + \omega_q^2} + \frac{4\pi e^2}{q^2 + \kappa_s^2} \quad q: \text{Impulsübertrag},$$

κ_s^{-1} : Thomas-Fermi-Abschirmlänge

Wobei die abgeschirmte, repulsive Coulomb-WW die Phonon-WW überwiegen kann. Allerdings:

$$\mathrm{Re}\,\langle V_{\text{eff}}(t)\rangle_q = \mathrm{Re}\int \frac{\mathrm{d}\omega}{2\pi} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t} \langle V_{\text{eff}}(\mathrm{i}\omega_m \to \omega + \mathrm{i}\delta)\rangle_q$$

$$= \left\langle |g_q|^2 \sin\omega_q t \right\rangle_q + \left\langle \frac{4\pi e^2}{q^2 + \kappa_s^2} \right\rangle_q \delta(t)$$

$\rightarrow$ Die El-Ph-WW ist retardiert durch das langsamere Gitter.

Elektron-Phonon: revisited

Zuvor hatten wir: $V_{\text{eff}} = -V_0 \Theta(\omega_D - \omega)$. Hier wurde die Frequenzabhängigkeit und die Coulomb-WW vernachlässigt. Eigentlich:

$$V_{\text{eff}} = \frac{-2\,|g_q|^2\,\omega_q}{\omega_m^2 + \omega_q^2} + \frac{4\pi e^2}{q^2 + \kappa_s^2} \quad q : \text{Impulsübertrag},$$

κ_s^{-1} : Thomas-Fermi-Abschirmlänge

Wobei die abgeschirmte, repulsive Coulomb-WW die Phonon-WW überwiegen kann. Allerdings:

$$\begin{aligned}\mathrm{Re}\,\langle V_{\text{eff}}(t)\rangle_q &= \mathrm{Re}\int \frac{\mathrm{d}\omega}{2\pi} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}\,\langle V_{\text{eff}}(\mathrm{i}\omega_m \to \omega + \mathrm{i}\delta)\rangle_q \\ &= \left\langle |g_q|^2 \sin \omega_q t \right\rangle_q + \left\langle \frac{4\pi e^2}{q^2 + \kappa_s^2} \right\rangle_q \delta(t)\end{aligned}$$

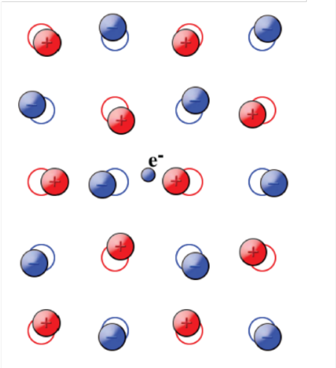
$\rightarrow$ Die El-Ph-WW ist retardiert durch das langsamere Gitter.

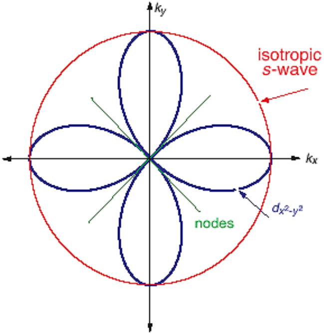
Elektron-Phonon: revisited

s-wave
Zeitliche Korrelation

d-wave
Räumliche Korrelation

Vermeidung der Coulomb-WW



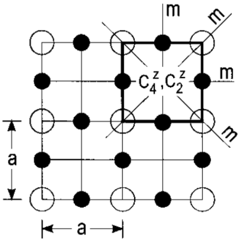


Punktgruppe C_4

Beschränken wir uns auf die 2D CuO_2 Ebene haben wir die C_4 Punktgruppe (4 zählige Drehachse).

Ein möglicher Satz an Basisfunktionen, kompatibel mit $\Delta_{\boldsymbol{k}} = \Delta_{-\boldsymbol{k}}$, ist:

$$w^{s^+}_{\boldsymbol{r};\boldsymbol{k}} = \cos k_x x \;\cos k_y y + \cos k_x y \;\cos k_y x$$
$$w^{s^-}_{\boldsymbol{r};\boldsymbol{k}} = -\sin k_x x \;\sin k_y y + \sin k_x y \;\sin k_y x$$
$$w^{d^+}_{\boldsymbol{r};\boldsymbol{k}} = \cos k_x x \;\cos k_y y - \cos k_x y \;\cos k_y x$$
$$w^{d^-}_{\boldsymbol{r};\boldsymbol{k}} = -\sin k_x x \;\sin k_y y - \sin k_x y \;\sin k_y x$$



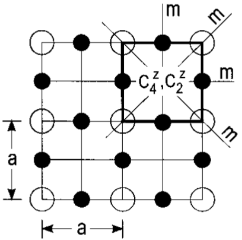
Im Allgemeinen kann $\Delta_{\boldsymbol{k}}$ eine Linearkombination der $w^{\eta}_{\boldsymbol{r};\boldsymbol{k}}$ sein. Wenn $E_{\boldsymbol{k}}$ invariant unter den Punktgruppentransformationen ist, muss allerdings gelten

$$\forall g \in C_4 : |\Delta_{\boldsymbol{k}}| = \left|\Delta_{\mathcal{D}(g)\boldsymbol{k}}\right|$$

Beschränken wir uns auf die 2D CuO_2 Ebene haben wir die C_4 Punktgruppe (4 zählige Drehachse).

Ein möglicher Satz an Basisfunktionen, kompatibel mit $\Delta_{\boldsymbol{k}} = \Delta_{-\boldsymbol{k}}$, ist:

$$
\begin{aligned}
w^{s+}_{\boldsymbol{r};\boldsymbol{k}} &= \cos k_x x \ \cos k_y y + \cos k_x y \ \cos k_y x \\
w^{s-}_{\boldsymbol{r};\boldsymbol{k}} &= -\sin k_x x \ \sin k_y y + \sin k_x y \ \sin k_y x \\
w^{d+}_{\boldsymbol{r};\boldsymbol{k}} &= \cos k_x x \ \cos k_y y - \cos k_x y \ \cos k_y x \\
w^{d-}_{\boldsymbol{r};\boldsymbol{k}} &= -\sin k_x x \ \sin k_y y - \sin k_x y \ \sin k_y x
\end{aligned}
$$



Im Allgemeinen kann $\Delta_{\boldsymbol{k}}$ eine Linearkombination der $w^{\eta}_{\boldsymbol{r};\boldsymbol{k}}$ sein. Wenn $E_{\boldsymbol{k}}$ invariant unter den Punktgruppentransformationen ist, muss allerdings gelten

$$\forall g \in C_4 : |\Delta_{\boldsymbol{k}}| = \left|\Delta_{\mathcal{D}(g)\boldsymbol{k}}\right|$$

Entwicklung in Basisfunktionen

Damit ist

$$\Delta_{\boldsymbol{k}} = \Delta_{\boldsymbol{r}}^{\mu} w_{\boldsymbol{r}}^{\mu}(\boldsymbol{k}) \quad \text{oder} \quad \Delta_{\boldsymbol{k}} = \Delta_{\boldsymbol{r}}^{\eta} w_{\boldsymbol{r}}^{\eta}(\boldsymbol{k}) + \mathrm{i}\Delta_{\boldsymbol{r}}^{\zeta} w_{\boldsymbol{r}}^{\zeta}(\boldsymbol{k}), \quad \eta \neq \zeta$$

Die komplexe Kombination erfüllt auch $|\Delta_{\boldsymbol{k}}| = \left|\Delta_{\mathcal{D}(g)\boldsymbol{k}}\right|$.
Wird *mixed* genannt und bricht die Zeitumkehrsymmetrie.

Setzen wir eine *pure* Gap in die Gap Gleichung ein:

$$\Delta_{\boldsymbol{r}}^{\mu} w_{\boldsymbol{r}}^{\mu}(\boldsymbol{k}) = -\sum_{\boldsymbol{k}'} \frac{V_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'}}{2E_{\boldsymbol{k}'}} \Delta_{\boldsymbol{r}}^{\mu} w_{\boldsymbol{r}}^{\mu}(\boldsymbol{k}')$$

Mit $V_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'} = V_{\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}'}$ und Orthogonalitätsbedingungen für die $w_{\boldsymbol{r}}^{\mu}(\boldsymbol{k})$ erhält man:

$$\Delta_{\boldsymbol{r}}^{\mu} = -\frac{1}{\lambda_{\boldsymbol{r}}} \hat{V}(\boldsymbol{r}) \sum_{\boldsymbol{k}'} \Delta_{\boldsymbol{r}}^{\mu} \left[w_{\boldsymbol{r}}^{\mu}(\boldsymbol{k}')\right]^2 \frac{1}{\sqrt{\xi_{\boldsymbol{k}'}^2 + \Delta_{\boldsymbol{r}}^{\mu 2} w_{\boldsymbol{r}}^{\mu}(\boldsymbol{k}')^2}}$$

Entwicklung in Basisfunktionen

Damit ist

$$\Delta_{\boldsymbol{k}} = \Delta_{\boldsymbol{r}}^{\mu} w_{\boldsymbol{r}}^{\mu}(\boldsymbol{k}) \quad \text{oder} \quad \Delta_{\boldsymbol{k}} = \Delta_{\boldsymbol{r}}^{\eta} w_{\boldsymbol{r}}^{\eta}(\boldsymbol{k}) + \mathrm{i}\Delta_{\boldsymbol{r}}^{\zeta} w_{\boldsymbol{r}}^{\zeta}(\boldsymbol{k}), \quad \eta \neq \zeta$$

Die komplexe Kombination erfüllt auch $|\Delta_{\boldsymbol{k}}| = \left|\Delta_{\mathcal{D}(g)\boldsymbol{k}}\right|$.
Wird *mixed* genannt und bricht die Zeitumkehrsymmetrie.

Setzen wir eine *pure* Gap in die Gap Gleichung ein:

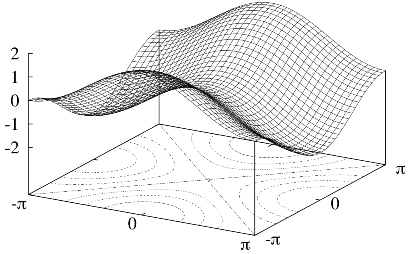
$$\Delta_{\boldsymbol{r}}^{\mu} w_{\boldsymbol{r}}^{\mu}(\boldsymbol{k}) = -\sum_{\boldsymbol{k}'} \frac{V_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'}}{2E_{\boldsymbol{k}'}} \Delta_{\boldsymbol{r}}^{\mu} w_{\boldsymbol{r}}^{\mu}(\boldsymbol{k}')$$

Mit $V_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'} = V_{\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}'}$ und Orthogonalitätsbedingungen für die $w_{\boldsymbol{r}}^{\mu}(\boldsymbol{k})$ erhält man:

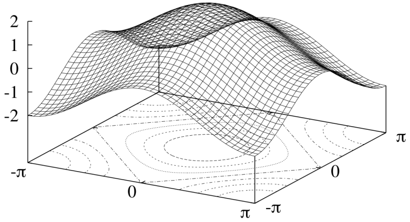
$$\Delta_{\boldsymbol{r}}^{\mu} = -\frac{1}{\lambda_{\boldsymbol{r}}} \hat{V}(\boldsymbol{r}) \sum_{\boldsymbol{k}'} \Delta_{\boldsymbol{r}}^{\mu} \left[w_{\boldsymbol{r}}^{\mu}(\boldsymbol{k}')\right]^2 \frac{1}{\sqrt{\xi_{\boldsymbol{k}'}^2 + \Delta_{\boldsymbol{r}}^{\mu\,2} w_{\boldsymbol{r}}^{\mu}(\boldsymbol{k}')^2}}$$

Symmetrien der Basisfunktionen

Wir erwarten attraktives $\hat{V}(\boldsymbol{r})$ für nearest- und next-nearest-neighbor.
Für NN $r = (\pm 1, 0); (0, \pm 1) \equiv 1$ sind die Basisfunktionen:



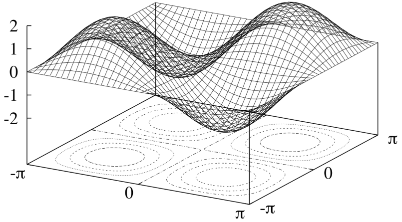
$d_{x^2-y^2}$: $w_1^{d^+}(\boldsymbol{k}) =$
$\cos k_x - cosk_y$



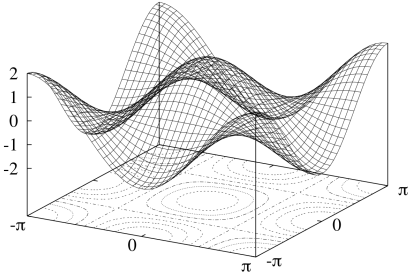
$s_{x^2+y^2}$: $w_1^{s^+}(\boldsymbol{k}) =$
$\cos k_x + cosk_y$

Symmetrien der Basisfunktionen

Für NNN $r = (\pm 1, \pm 1) \equiv 2$ sind die Basisfunktionen:



$d_{xy} : w_2^{d^-}(\boldsymbol{k}) = 2 \sin k_x \sin k_y$

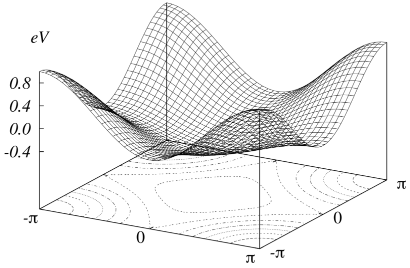


$s_{xy} : w_2^{s^+}(\boldsymbol{k}) = \cos k_x \cos k_y$

Zustandsdichte

In einem tight-binding Modell ist die Einteilchen-Dispersion

$$\xi_{\boldsymbol{k}} = -2t(\cos k_x + \cos k_y) + 4t' \cos k_x \cos k_y$$



Die Zustandsdichte

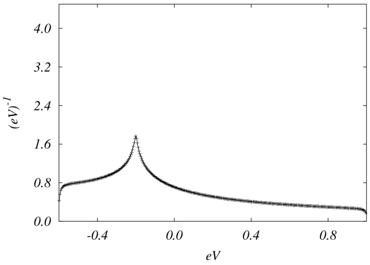
$$g_0(E) = \sum_{\boldsymbol{k}} \delta(E - E_{\boldsymbol{k}})$$

besitzt Van-Hove-Singularitäten, wenn der Gradient von $E_{\boldsymbol{k}}$ verschwindet, da

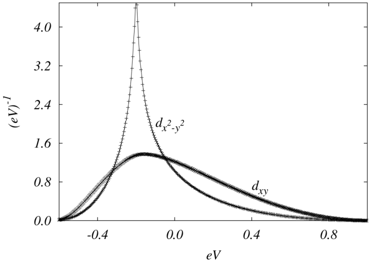
$$g_0(E) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{E=\text{const.}} \mathrm{d}k \frac{1}{|\nabla_{\boldsymbol{k}} E|}$$

Projizierte Zustandsdichte

$\Delta_{\boldsymbol{r}}^{\mu} = -\frac{1}{\lambda_{\boldsymbol{r}}} \hat{V}(\boldsymbol{r}) \sum_{\boldsymbol{k}'} [w_{\boldsymbol{r}}^{\mu}(\boldsymbol{k}')]^2 \frac{\Delta_{\boldsymbol{r}}^{\mu}}{E_{\boldsymbol{k}}}$



$g_0(E)$. Peak bei $E = -200\,\text{meV}$



$g_{\boldsymbol{r}}^{\mu}(E)$

Wir brauchen eigentlich eine projizierte Zustandsdichte:

$$g_{\boldsymbol{r}}^{\mu}(E) = \sum_{\boldsymbol{k}} [w_{\boldsymbol{r}}^{\mu}(\boldsymbol{k})]^2 \, \delta(E - E_{\boldsymbol{k}})$$

somit können wir schreiben:

$$\Delta_{\boldsymbol{r}}^{\mu} = -\frac{1}{\lambda_{\boldsymbol{r}}} \hat{V}(\boldsymbol{r}) \int \mathrm{d}E \, g_{\boldsymbol{r}}^{\mu}(E) \frac{\Delta_{\boldsymbol{r}}^{\mu}}{E}$$

Conclusion/Outlook

- Auch High-T_c Supraleitung ist ein Resultat von Cooper-Paaren $\rightarrow$ Lässt sich mit einer Gap beschreiben

- $\Delta_{\boldsymbol{k}}$ kann man in den Basisfunktionen der Punktgruppensymmetrie des Gitters entwickeln.

- Temperaturabhängigkeit lässt sich leicht einbauen, indem man Fermiverteilung für die Quasiteilchen, erzeugt von $\alpha^\dagger_{\boldsymbol{k}}$, annimmt

$$\rightarrow \Delta_{\boldsymbol{k}} = -\frac{1}{2} \sum_{\boldsymbol{k}'} V_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'} \frac{\Delta_{\boldsymbol{k}'}}{E_{\boldsymbol{k}'}} \tanh \frac{\beta E_{\boldsymbol{k}'}}{2}$$

Durch Nullsetzen von Δ lässt sich T_c berechnen.

Conclusion/Outlook

- Auch High-T_c Supraleitung ist ein Resultat von Cooper-Paaren $\rightarrow$ Lässt sich mit einer Gap beschreiben

- $\Delta_{\boldsymbol{k}}$ kann man in den Basisfunktionen der Punktgruppensymmetrie des Gitters entwickeln.

- Temperaturabhängigkeit lässt sich leicht einbauen, indem man Fermiverteilung für die Quasiteilchen, erzeugt von $\alpha^\dagger_{\boldsymbol{k}}$, annimmt

$$\rightarrow \Delta_{\boldsymbol{k}} = -\frac{1}{2} \sum_{\boldsymbol{k}'} V_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'} \frac{\Delta_{\boldsymbol{k}'}}{E_{\boldsymbol{k}'}} \tanh \frac{\beta E_{\boldsymbol{k}'}}{2}$$

Durch Nullsetzen von Δ lässt sich T_c berechnen.

Conclusion/Outlook

- Bei der komplexen Kombination erhält man zwei Gap-Gleichungen:

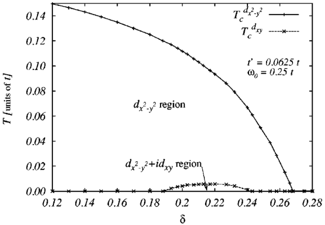
$$\Delta_1^\eta = -\frac{1}{\lambda_1}\hat{V}(1)\sum_{\boldsymbol{k}'}\Delta_1^\eta\left[w_1^\eta(\boldsymbol{k}')\right]^2\frac{\tanh\frac{\beta E_{\boldsymbol{k}'}}{2}}{E_{\boldsymbol{k}'}}$$

$$\Delta_2^\zeta = -\frac{1}{\lambda_2}\hat{V}(2)\sum_{\boldsymbol{k}'}\Delta_2^\zeta\left[w_2^\zeta(\boldsymbol{k}')\right]^2\frac{\tanh\frac{\beta E_{\boldsymbol{k}'}}{2}}{E_{\boldsymbol{k}'}}$$

$$\text{mit}\quad E_{\boldsymbol{k}} = \sqrt{\xi_{\boldsymbol{k}}^2 + (\Delta_1^\eta w_1^\eta(\boldsymbol{k}))^2 + (\Delta_2^\zeta w_2^\zeta(\boldsymbol{k}))^2}$$

d.h. Gaps beeinflussen sich nur über $E_{\boldsymbol{k}}$.

Zweites Pairing als BCS Kopplung zwischen den Quasiteilchen des primären.



Literature

A. Altland & B. Simons
Condensed Matter Field Theory.

J. Annett
Superconductivity, Superfluids, and Condensates

G. Sangiovanni et al.
Doping-driven transition to a time-reversal breaking state in the phase diagram of the cuprates
Phys. Rev. B 67, **174507** (2003)

C. Tsuei and J. Kirtley
Pairing symmetry in cuprate superconductors
Rev. Mod. Phys. 72, **969–1016** (2000)

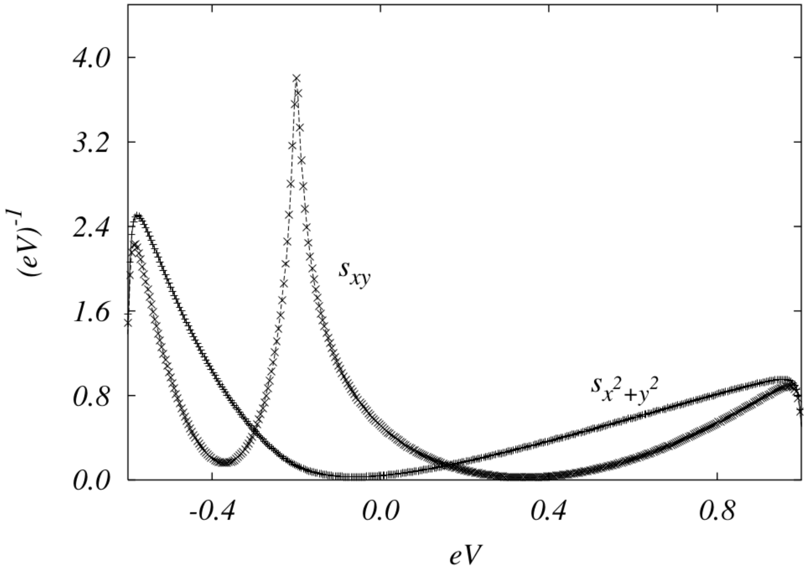
Literature

F. Wenger and S. Östlund
d-wave pairing in tetragonal superconductors
Phys. Rev. B 47, **5977-5983** (1993)

D. Scalapino
The case for $d_{x^2-y^2}$ pairing in the cuprate superconductor
Physics Reports, vol. 250, no. 6, **329-365** (1995)

H. Ding et al.
Angle-resolved photoemission spectroscopy study of the superconducting gap anisotropy in $Bi_2Sr_2CaCu_2O_{8+x}$
Phys. Rev. B 54, **R9678–R9681** (1996)

Projizierte Zustandsdichte



Kritische Temperatur T_c